Biomatemática ***27 (1)*** *2017, 149–162* ***ISSN 1679-365X***
Uma Publicação do Grupo de Biomatemática IMECC – UNICAMP

Simulações computacionais de impacto ambiental com difusibilidade variável

Danuza B. Equer[1], João F. C. A. Meyer[2],
DMA, IMECC – UNICAMP, 13.083-970, Campinas/SP.

Resumo.O objetivo deste trabalho é considerar o coeficiente de difusibilidade variável espacialmente na Equação Diferencial Parcial de Difusão-Advecção-Reação, devido à vegetação aquática e terrestre presente nas margens de uma parte específica do rio Doce, que passa pela cidade de Colatina. Utilizando para a discretização Diferenças Finitas Centradas e Crank-Nicolson. Sendo o objetivo secundário, criar um instrumental que sirva de apoio ao estabelecimento de políticas públicas de contenção de impacto, seja no trecho do Rio Doce estudado, seja em outras regiões de características de circulação mais baixa.

Palavras-chave*: Equação de Difusão-Advecção-Reação. Diferenças finitas. Coeficiente de difusão variável. Impacto ambiental.*

1. Introdução

Neste trabalho, pretendemos dar sequência a uma série de esforços de modelagem matemática da presença evolutiva de poluentes em meios aquáticos explorando possibilidades de aproximação numérica para a solução da Equação Diferencial Parcial de Difusão-Advecção-Reação, considerando o coeficiente de difusibilidade do poluente variável espacialmente.

Como aplicação, optamos por analisar o caso de uma parte específica do rio Doce, aquela que passa pela cidade Colatina no estado do Espírito Santo. O rio Doce, que foi recentemente atingido pelo rompimento da barragem de rejeitos de mineração controlada pela empresa brasileira Samarco. No dia 5 de novembro de 2015, vazou um volume de aproximadamente 32 milhões de m^3

[1]danuzabermond@gmail.com
[2]joni@ime.unicamp.br

de rejeitos provenientes da atividade minerária, atingindo um rio próximo às operações da Samarco (Gualaxo do Norte), percorreu o seu leito, desaguou no Rio Doce e chegou ao mar em 22 de novembro de 2015.

Figura 1: Rio Doce antes da chegada da lama de rejeitos. Fonte: Vitoria (2015).

Figura 2: Rio Doce após a chegada da lama de rejeitos. Fonte: Mantovani/G1 (2016).

O domínio Ω foi escolhido como descrito na Figura 3, por não estar em

uma parte tão curva e com um comprimento maior entre as margens do rio.

Figura 3: Domínio Aproximado.

2. O modelo

De acordo com Murray (2013) e Edelstein-Keshet (1988) representamos o problema de dispersão da concentração de poluentes com o modelo clássico de Difusão-Advecção-Reação:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - div(\alpha \nabla c) + \nabla c V + \sigma c = f, \tag{2.1}$$

com adequadas condições iniciais e de contorno, onde $c(x, y, t)$ representa a função de concentração de poluentes na variável espacial $(x, y) \in \Omega \in \mathbb{R}^2$, no tempo $t \in I$, com $I = (0, T]$, α representa o coeficiente de difusão efetiva, que depende de y devido às vegetações nas margens, σ o coeficiente de decaimento, f a fonte e $V = (u, v)$ a velocidade, sendo u e v as componentes horizontal e vertical da velocidade respectivamente.

A variação de difusibilidade α refere-se à dispersão do material impactante e, no caso do rio Doce na região de Colatina, a vegetação aquática e terrestre localizada imediatamente junto às margens do rio, indica a possibilidade de se ter um $\alpha(y)$ variável espacialmente e constante no tempo, portanto, qualitativamente descrita como indicado na Figura 4:

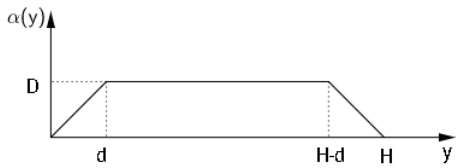

Figura 4: Difusibilidade.

Analiticamente, podemos interpretar esse comportamento aproximado da seguinte forma:

$$\alpha(y) = \begin{cases} D, & d < y < H - d, \\ \frac{D}{d}y, & 0 \leq y \leq d, \\ -\frac{D}{d}y + \frac{D}{d}H, & H - d \leq y \leq H. \end{cases} \tag{2.2}$$

Descrito desta forma, o coeficiente de difusão será constante no interior do domínio e variável apenas nas margens, isto é, em $0 \leq y \leq d$ e $H - d \leq y \leq H$.

Desenvolvendo a equação 2.1 (ver: Equer, 2017, p.23), precisamos considerar o perfil de Poiseuille para a velocidade, que é um perfil de velocidade parabólico e variável proporcionalmente de acordo com as regiões do domínio, sendo a componente vertical v sempre nula. E, pelo fato do coeficiente de difusão ser variável espacialmente em relação a y (como descrito na Figura 4), o termo $\frac{\partial \alpha(y)}{\partial y}\frac{\partial c}{\partial y}$ não se anula na equação do modelo. Assim, 2.1 torna-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} - \alpha(y)\Delta c - \frac{\partial \alpha(y)}{\partial y}\frac{\partial c}{\partial y} + u\frac{\partial c}{\partial x} + \sigma c = f. \tag{2.3}$$

3. Discretização

Acrescentamos ao domínio Ω uma malha regular e para a discretização espacial e temporal, utilizamos os métodos de Diferenças Finitas Centradas e de Crank-Nicolson, respectivamente.

Encontramos então as aproximações para a primeira e segunda derivada em relação a x e y e substituímos na equação do modelo, obtendo (ver: Equer, 2017, p.28):

$$c_{i_e}^{k+1}\left(-\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle x)^2}-\frac{u\triangle t}{4\triangle x}\right)+c_{i_b}^{k+1}\left(-\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle y)^2}+\frac{\partial\alpha(y)}{\partial y}\frac{\triangle t}{4\triangle y}\right)+$$

$$c_{i}^{k+1}\left(1+\frac{\alpha(y)\triangle t}{(\triangle x)^2}+\frac{\alpha(y)\triangle t}{(\triangle y)^2}+\sigma\frac{\triangle t}{2}\right)+c_{i_d}^{k+1}\left(-\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle x)^2}+\frac{u\triangle t}{4\triangle x}\right)+$$

$$c_{i_c}^{k+1}\left(-\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle y)^2}-\frac{\partial\alpha(y)}{\partial y}\frac{\triangle t}{4\triangle y}\right)=$$

$$c_{i_e}^{k}\left(\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle x)^2}+\frac{u\triangle t}{4\triangle x}\right)+c_{i_b}^{k}\left(\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle y)^2}-\frac{\partial\alpha(y)}{\partial y}\frac{\triangle t}{4\triangle y}\right)+$$

$$c_{i}^{k}\left(1-\frac{\alpha(y)\triangle t}{(\triangle x)^2}-\frac{\alpha(y)\triangle t}{(\triangle y)^2}-\sigma\frac{\triangle t}{2}\right)+c_{i_d}^{k}\left(\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle x)^2}-\frac{u\triangle t}{4\triangle x}\right)+$$

$$c_{i_c}^{k}\left(\frac{\alpha(y)\triangle t}{2(\triangle y)^2}+\frac{\partial\alpha(y)}{\partial y}\frac{\triangle t}{4\triangle y}\right)+f_i^{k+\frac{1}{2}}\triangle t. \tag{3.4}$$

em que i_e, i_b, i_d e i_c são os índices dos nós da malha respectivamente à esquerda, abaixo, à direita e acima do nó (x_i, y_i) de índice i e $\triangle x$ e $\triangle y$ são os espaçamentos da malha em x e y, respectivamente e $\triangle t$ o espaçamento correspondente a malha temporal.

Como essa equação corresponde a cada nó i da malha, resolvemos nn equações, em que nn é o número total de nós da malha.

Nas fronteiras, isto é, nas margens do rio, existem os casos especiais, pois pode não existir alguns dos pontos acima, abaixo, à direita ou esquerda, por ter a presença de vegetação, o que causa mudança na equação discretizada 3.4 nesses pontos pertencentes as fronteiras. Sendo assim, dadas as condições na margens do rio, adotamos a condição genérica de Robin, que é obtida da combinação linear das condições de Dirichlet e Neumann, obtida pela combinação linear dos valores da função c e os valores de sua derivada na fronteira. Então, teremos, conforme o tipo de margem a condição de fronteira de Robin em sua forma homogênea:

$$-\alpha\frac{\partial c}{\partial\eta}=kc, \quad (x,y)\in\partial\Omega \ \text{ e } \ t\in I, \tag{3.5}$$

sendo η o vetor unitário externo normal e k o coeficiente de proporcionalidade da perda de poluente.

4. Simulações

Para as simulações foi criado um algoritmo (ver: Equer, 2017, p.69) em ambiente MATLAB 7.10, com os valores adequados para o problema baseados nas pesquisas de Krindges (2006), Prestes (2011), Wolmuth (2009), Guaca (2015) e Vieira (2016).

Como não temos valores precisos para α, realizamos ensaios variando o valor de α (Tabela 1).

Todos os parâmetros foram utilizados de modo a garantir uma visualização qualitativa dos resultados com vistas a verificar se o algoritmo correspondia ao impacto sofrido pelo rio.

E os valores fixos para todas as simulações foram o decaimento σ, a condição de contorno à esquerda (por onde chega a poluição), a inicial, a velocidade u, fontes de poluição e o coeficiente de perda de poluentes das margens (k da condição de fronteira de Robin).

Na Figura 5 mostramos a localização dos nós e fontes de poluição que vamos acompanhar em todas as simulações. A marcação com X representa a localização dos nós (36, 68, 526 e 1239) e as bolinhas das fontes (215 e 1255).

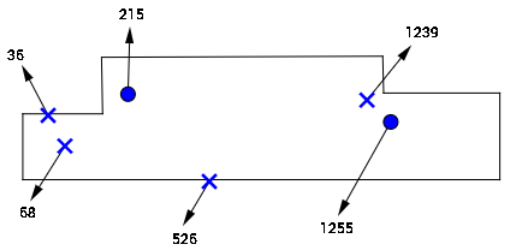

Figura 5: Localização dos nós e fontes de poluição.

As fontes de poluição foram calculadas utilizando o valor f vezes o tamanho do subintervalo no tempo Δt. A diferença entre as duas fontes é que a localizada no nó 215 é duas vezes maior que a localizada no nó 1255.Consideramos cenários com e sem fontes de poluição, pois ainda está sendo desenvolvido um sistema de tratamento de esgoto em Colatina.

Para ser feita a variação do coeficiente de difusão, primeiro atribuímos o mesmo valor de α (valor de D mostrado na Figura 4) em todos os nós do domínio, que são os valores dados na Tabela 1. Então corrigimos esses valores

nas margens do domínio, fazendo α igual a zero em todos os nós das fronteiras e variável em um nó abaixo ou acima com o valor $\frac{\alpha}{2}$.

A tabela abaixo mostra a organização das simulações e seus valores para a difusão.

Tabela 1: Descrição do valor do coeficiente de difusão e fontes.

Simulações	Difusibilidade α	fontes
1	0.02	com fontes
2	0.005	com fontes
3	0.02	sem fontes
4	0.005	sem fontes

4.1 Simulações com fontes de poluição

Primeiro, vamos observar cenários com fontes de poluição, que estão localizados como descrito na Figura 5.

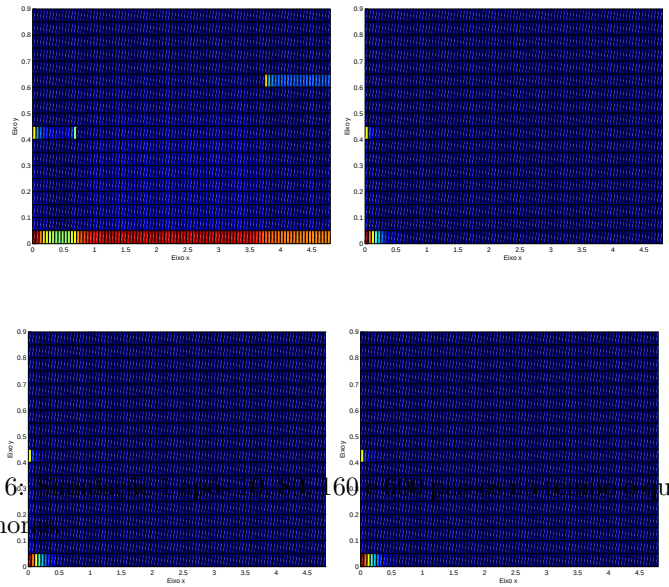

Figura 6: Simulações com fontes após 40, 80, 160 e 240 iterações temporais, que corresponde a 120 horas.

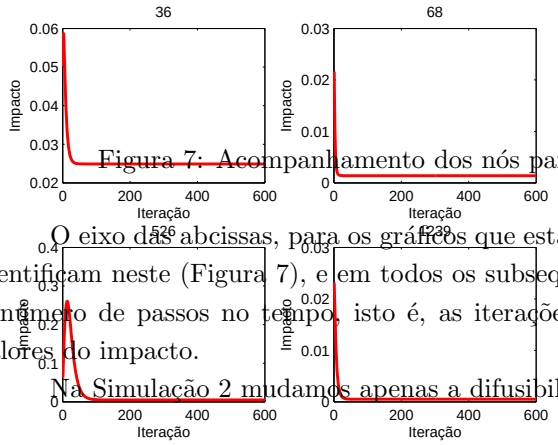

Figura 7: Acompanhamento dos nós para a Simulação 1.

O eixo das abcissas, para os gráficos que estão acompanhando os pontos identificam neste (Figura 7), e em todos os subsequentes (Figuras 9, 11 e 13), o número de passos no tempo, isto é, as iterações, mantendo na vertical os valores do impacto.

Na Simulação 2 mudamos apenas a difusibilidade α de 0.02 para 0.005.

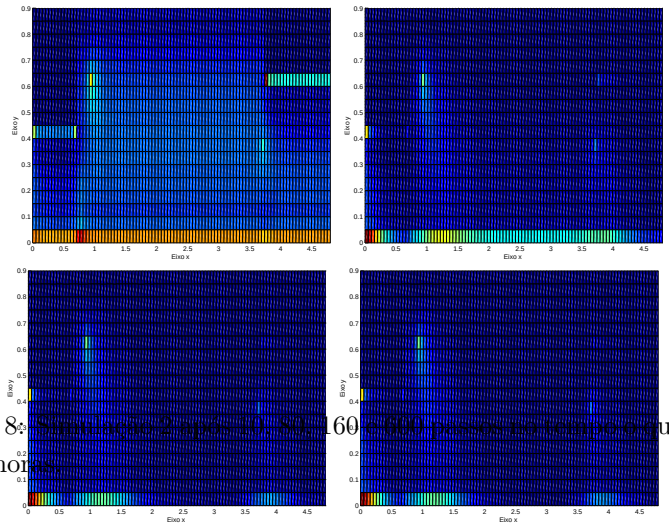

Figura 8: Simulação 2 após 40, 80, 160 e 240 iterações temporais, que corresponde a 120 horas.

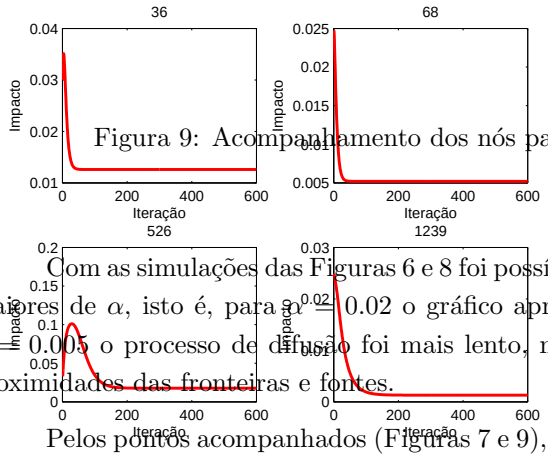

Figura 9: Acompanhamento dos nós para a Simulação 2.

Com as simulações das Figuras 6 e 8 foi possível perceber que para valores maiores de α, isto é, para $\alpha = 0.02$ o gráfico apresenta maior difusão e para $\alpha = 0.005$ o processo de difusão foi mais lento, mostrando regiões claras nas proximidades das fronteiras e fontes.

Pelos pontos acompanhados (Figuras 7 e 9), observa-se que a poluição do rio Doce permanece na região de Colatina, mesmo com a difusão mais rápida com valores maiores de α, estabilizando mais rapidamente após os primeiros passos de tempo.

Foi possível perceber também em todas imagens que acompanhamos os pontos, que no nó 526 (Figura 5), a concentração de poluição torna-se estável depois de mais passos no tempo em relação aos outros nós que foram acompanhados.

4.2 Simulações sem fontes de poluição

Agora, nas simulações 3 e 4 estudamos os mesmos casos, apenas com a ausência das fontes de poluição, primeiro para $\alpha = 0.02$.

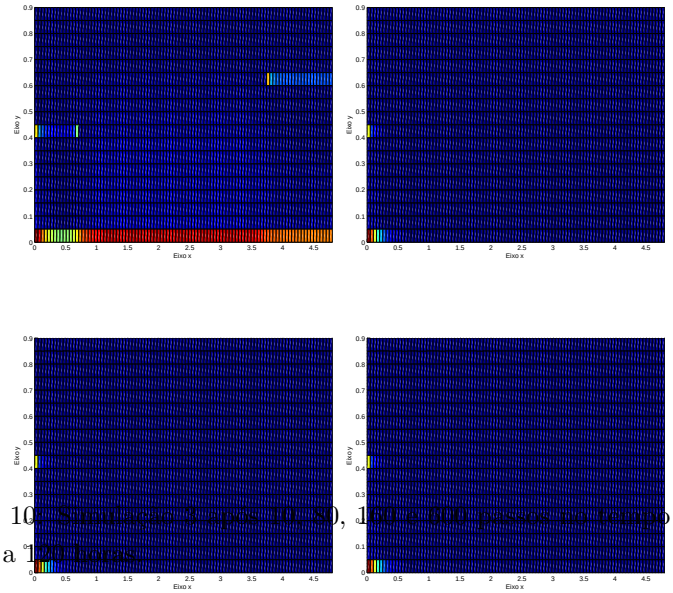

Figura 10: Simulação 3 (pos 10, 80), 1500 e 4000 pessoas respectivo o que corresponde a 1% e 3% doença.

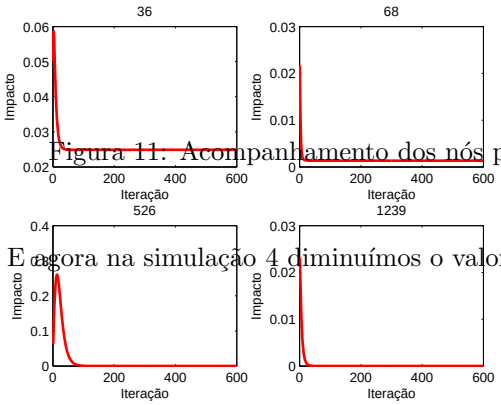

Figura 11: Acompanhamento dos nós para a Simulação 3.

E agora na simulação 4 diminuímos o valor de α.

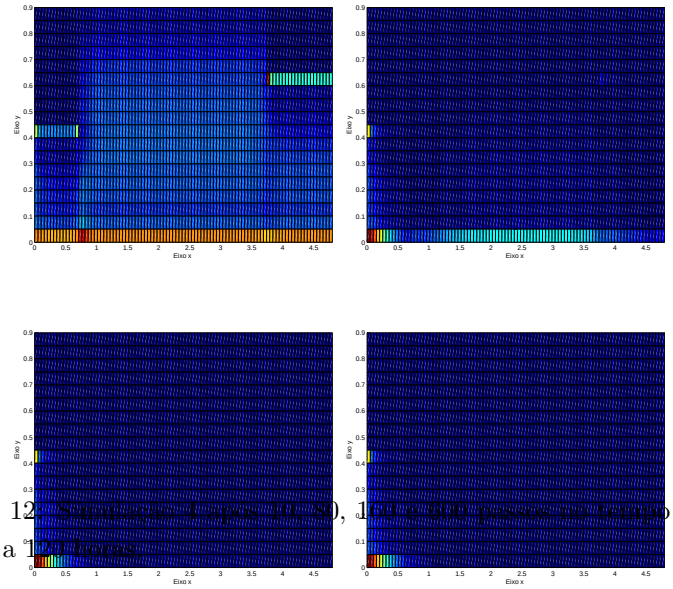

Figura 12: Simulação 4 após difusão, 1 iteração, 2 iterações e 10 iterações, o que corresponde a 1, 20, 40 e 200 horas.

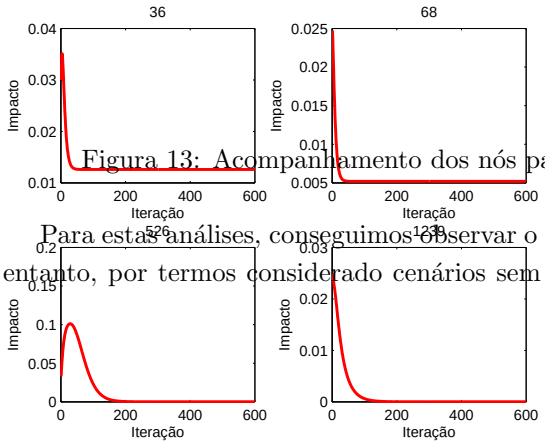

Figura 13: Acompanhamento dos nós para a Simulação 4.

Para estas análises, conseguimos observar o mesmo em relação à difusão, no entanto, por termos considerado cenários sem fontes de poluição, a maior

concentração de poluentes encontrou-se presente nas fronteiras.

O que estas últimas simulações indicam qualitativamente, é que mesmo que a municipalidade de Colatina elimine fontes poluentes em quantidade significativa, ainda haverá por bom período de tempo a presença do impacto.

5. Conclusões

A modelagem proposta foi capaz de descrever o que está acontecendo na região de Colatina e portando, pode e deve servir para se avaliarem ações de contenção, ao alcance da municipalidade. Inclusive, a Prefeitura vem trabalhando no sentido de eliminar algumas das principais fontes o que significa que a poluição proveniente do acidente a montante se manterá por algum tempo sendo assim, uma herança do estouro da barragem da Samarco em Mariana - MG.

Os resultados das simulações dos diferentes cenários foram compatíveis com o comportamento esperado já que foi inspirado por um fenômeno de difusão, sob determinadas condições de fronteira e parâmetros. E a variabilidade da difusão contribui para uma modelagem mais verossímil, ou seja, o aspecto inovador de variar a difusibilidade, pode render frutos relevantes.

Agradecimentos

Ao CNPq, pelo apoio financeiro.

Referências

Edelstein-Keshet, L. (1988). *Mathematical Models in Biology.* Classics in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics (SIAM), Philadelphia, PA/USA.

Equer, D. B. (2017). Modelagem, aproximação e simulações computacionais de impacto ambiental: um estudo de caso. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.

Guaca, D. C. (2015). Impacto ambiental em meios aquáticos: modelagem, aproximação e simulação de um estudo na Baía de Buenaventura-Colômbia. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.

Krindges, A. (2006). *Modelagem e simulação computacional de um problema tridimencional de difusão-advecção com o uso de Navier Stokes.* Tese de Doutorado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.

Mantovani/G1, F. (2016). http://g1.globo.com/espirito-santo/desastre-ambiental-no-rio-doce/noticia/2016/10/samarco-e-condenada-pagar-r-70-mil-em-indenizacoes-em-colatina.html. Acesso 26 de jan de 2017.

Murray, J. (2013). *Mathematical Biology.* Biomathematics. Springer Berlin Heidelberg.

Prestes, M. F. B. (2011). Dispersão de material impactante em meio aquático: modelo matemático, aproximação numérica e simulação computacional: Lagoa do Taquaral. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.

Vieira, A. C. (2016). Estudo sobre a Mudança da Qualidade da Água de um Rio e Possibilidades de Tratamento: Abordagem Utilizando Equações de Difusão-Advecção. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.

Vitoria, F. (2015). http://www.folhavitoria.com.br/geral/noticia/2015/11/governo-federal-oferece-apoio-ao-es-para-enfrentar-chegada-dos-rejeitos-de-mineracao.html. Acesso 20 de fevereiro de 2017.

Wolmuth, L. D. (2009). Modelagem e simulações do comportamento evolutivo de poluentes em corpos aquáticos de grande extensão: o caso da represa do rio Manso. Dissertação de Mestrado, IMECC–UNICAMP, Campinas/SP.