

# Estudo de processos difusivos aplicados à ecologia matemática

---

Larissa Macul Moreno

23 de Junho de 2019

**RESUMO:** O propósito deste trabalho é simular computacionalmente o efeito de processos difusivos em problemas de ecologia matemática, discretizando a equação diferencial parcial de difusão-advecção-reação através do método numérico de Diferenças Finitas.

## 1 INTRODUÇÃO

É possível definir um processo difusivo como a tendência de um grupo de partículas, inicialmente concentradas em um ponto no espaço, de se dispersar ao longo do tempo, gradualmente ocupando uma área maior em torno do ponto inicial.

O foco deste projeto é estudar processos difusivos através de Equações Diferenciais Parciais com variação temporal e encontrar suas soluções numéricas utilizando o Método das Diferenças Finitas. A Equação de Difusão, uma equação diferencial parcial parabólica, é dada pela relação 1.1:

$$\frac{du}{dt} = \alpha \Delta u \quad (1.1)$$

onde  $\Delta = \nabla^2 = \frac{\delta^2}{\delta x^2} + \frac{\delta^2}{\delta y^2}$  é o operador diferencial Lagrangeano,  $\alpha$  é o coeficiente de difusibilidade e  $u$  é a função que descreve algum processo difusivo a ser estudado.

Nos problemas a serem estudados, aplicaremos procesos difusivos à dispersão de poluentes no meio aquático e para isso ainda consideraremos um termo advectivo, um termo de reação

e um coeficiente de decaimento. Assim, a equação utilizada de difusão-advecção-reação tem a forma geral:

$$\frac{du}{dt} - \alpha \Delta u + V \cdot \nabla u + \mu u = f \quad (1.2)$$

em que  $u$  é uma medição de contaminação,  $\alpha$  é a difusibilidade do contaminante,  $V$  o vetor representativo de uma direção advectiva predominante,  $\mu$  é o decaimento do contaminante e  $f$  representa as fontes poluentes.

Usaremos o Método de Diferenças Finitas para encontrar a solução numérica das equações diferenciais. Este método consiste em realizar uma aproximação dos termos de derivadas pela expansão da série de Taylor associada à função. Seja  $f : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  uma função  $n$  vezes diferenciável. Então, nos pontos  $x + \Delta x$  e  $x - \Delta x$ , podemos escrever  $f$  como

$$f(x + \Delta x) = f(x) + f'(x)(\Delta x) + \frac{f''(x)(\Delta x)^2}{2} + \frac{f'''(x)(\Delta x)^3}{6} + \dots + \frac{f^{(n)}(x)(\Delta x)^n}{n!} + O((\Delta x)^{n+1}) \quad (1.3)$$

$$f(x - \Delta x) = f(x) - f'(x)(\Delta x) + \frac{f''(x)(\Delta x)^2}{2} - \frac{f'''(x)(\Delta x)^3}{6} + \dots \pm \frac{f^{(n)}(x)(\Delta x)^n}{n!} + O((\Delta x)^{n+1}) \quad (1.4)$$

onde  $O(\Delta x^k)$  é uma notação de erro proporcional ao fator  $\Delta x^k$  de aproximação.

Considerando uma expansão de terceira ordem, somando 1.3 e 1.4 temos que:

$$f(x + \Delta x) + f(x - \Delta x) = 2f(x) + 2 \frac{f''(x)(\Delta x)^2}{2} + O((\Delta x)^4)$$

assim, podemos escrever a segunda derivada de  $f(x)$  como:

$$f''(x) = \frac{f(x + \Delta x) - 2f(x) + f(x - \Delta x)}{(\Delta x)^2} + O((\Delta x)^2) \quad (1.5)$$

Agora, subtraindo 1.3 e 1.4 considerando também uma expansão de terceira ordem:

$$f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x) = 2f'(x)(\Delta x) + O((\Delta x)^3)$$

então, podemos escrever a derivada de  $f$  como:

$$f'(x) = \frac{f(x + \Delta x) - f(x - \Delta x)}{2(\Delta x)} + O((\Delta x)^2) \quad (1.6)$$

Para as funções estudadas a seguir, consideraremos os resultados encontrados válidos para derivadas parciais também. Então, seja  $c : \mathbb{R}^2 \times \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}$  uma função duas vezes diferenciável, vou aproximar suas derivadas de primeira e segunda ordem nas variáveis espaciais usando as relações 1.6 e 1.5 encontradas:

$$\frac{\partial c}{\partial x}(x, y, t) \approx \frac{c(x + \Delta x, y, t) - c(x - \Delta x, y, t)}{2\Delta x} \quad (1.7)$$

$$\frac{\partial c}{\partial y}(x, y, t) \approx \frac{c(x, y + \Delta y, t) - c(x, y - \Delta y, t)}{2\Delta y} \quad (1.8)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial x^2}(x, y, t) \approx \frac{c(x + \Delta x, y, t) - 2c(x, y, t) + c(x - \Delta x, y, t)}{(\Delta x)^2} \quad (1.9)$$

$$\frac{\partial^2 c}{\partial y^2}(x, y, t) \approx \frac{c(x, y + \Delta y, t) - 2c(x, y, t) + c(x, y - \Delta y, t)}{(\Delta y)^2} \quad (1.10)$$

Já para variações temporais, usaremos o Método de Crank-Nicolson [5]. Assim, para a função  $c = c(x, y, t)$  podemos aproximar seguinte equação diferencial em uma dimensão

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) = F\left(c, x, t, \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right)$$

como:

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, t) \approx \frac{c(x, t + \Delta t) - c(x, t)}{\Delta t} = \frac{1}{2} \left[ F\left(c, y, t + \Delta t, \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right) + F\left(c, x, t, \frac{\partial c}{\partial x}, \frac{\partial^2 c}{\partial x^2}\right) \right] \quad (1.11)$$

Utilizando os Métodos de Diferenças Finitas e Crank-Nicholson, será possível realizar uma discretização das equações diferenciais estudadas, possibilitando assim, sua solução numérica por solução de um sistema linear associado ao problema discretizado. A seguir, apresentaremos dois modelos estudados e uma aplicação.

## 2 MODELO: DISPERSÃO DE POLUENTES EM UMA COLUNA DE ÁGUA

A seguir, apresentaremos o primeiro modelo estudado. Queremos descrever a variação temporal da concentração de poluentes em uma coluna de água. Para isso, vamos construir um cenário fictício de aplicação, consrtuir o modelo matemático a partir da equação de difusão-advecção-reação para uma dimensão e encontrar sua solução numérica utilizando as aproximações descritas na Seção anterior.

Suponha que um lago receba poluição através da chuva de nuvens formadas por fumaça e rejeitos poluentes de fábricas nas redondezas. Vamos considerar que o lagoa em questão apresenta formato circular e profundidade uniforme em toda a área, como mostrado na figura 2.1. Vamos considerar também toda a chuva que a lagoa recebe, cai suavemente em uma direção perpendicular à superfície da água.

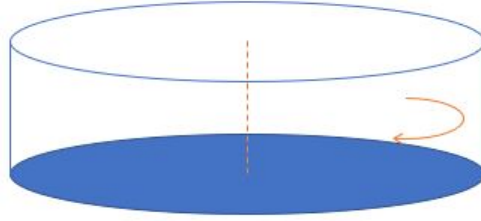


Figura 2.1: Representação de um lago de formato circular. Em destaque, sua simetria radial e coluna de água a ser estudada.

Assim, consideramos em nosso modelo que existe uma simetria radial em toda a lagoa e estamos interessados em calcular o efeito difusivo de poluentes provenientes da chuva em sua superfície.

Para a modelagem do problema em questão, vamos considerar a Equação de difusão-advecção-reação parabólica em uma dimensão:

$$\frac{\partial c}{\partial t}(z, t) - \alpha \frac{\partial^2 c}{\partial z^2}(z, t) + v \frac{\partial c}{\partial z}(z, t) + \mu c(z, t) = f(z, t), \quad (2.1)$$

$$(z) \in \Omega = [0, H] \quad \text{e} \quad t \in \Psi = (0, T]$$

em que  $c = c(z, t)$  é a concentração de poluentes em uma determinada profundidade  $z$  da lagoa e no instante de tempo  $t$ ,  $\alpha$  é o coeficiente de difusibilidade,  $v$  é a direção predominante do movimento do poluente,  $\mu$  é o decaimento do poluente,  $f = f(z, t)$  é a função que representa a poluição vinda da chuva,  $\Omega$  é o domínio espacial,  $H$  é a altura da lagoa,  $\Psi$  é o domínio temporal e  $T$  é o tempo final de simulação.

Além disso, em nosso modelo vamos considerar que a poluição é zero no instante inicial  $c(z, 0) = 0$  e em princípio que na fronteira superior (superfície da lagoa) a poluição não evapora ( $\frac{\partial c}{\partial z}(h, t) = 0$ ), condição de contorno de Von Neumann e que na fronteira inferior (fundo da lagoa) a poluição não é absorvida ( $c(0, t) = 0$ ), condição de contorno de Dirichlet homogêneo.

Para realizar a discretização, o domínio espacial será particionado em  $n$  subintervalos  $I_i = [z_{i-1}, z_i]$ , com  $z_0 = 0$ ,  $z_1 = (\Delta z)$ , ...,  $z_n = H$  e  $(\Delta z) = H/(n)$ , assim  $\Omega = I_1 \cup I_2 \cup \dots \cup I_n$ , como mostrado na figura 2.2 e o domínio temporal será particionado em  $k$  subintervalos  $J_j = [t_{j-1}, t_j]$ , com  $t_0 = 0$ ,  $t_1 = (\Delta t)$ , ...,  $t_k = T$  e  $(\Delta t) = T/(k)$ , assim  $\Psi = J_1 \cup J_2 \cup \dots \cup J_k$ . Então, vamos denotar a concentração nos pontos nodais  $z_i$  e  $t_j$  como  $c(z_i, t_j) = c_i^t$ .

Então, desejamos discretizar a equação diferencial de difusão-advecção-reação nos pontos nodais das partições do domínio para cada instante de tempo:

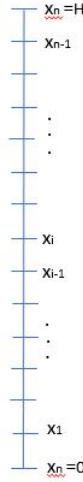


Figura 2.2: Representação da discretização do espaço da coluna de água.

$$\frac{\partial c_i^j}{\partial t} - \alpha \frac{\partial^2 c_i^j}{\partial z^2} + v \frac{\partial c_i^j}{\partial z} + \mu c_i^t = f_i^j \quad (2.2)$$

Usando o Método de Diferenças Finitas e as equações de aproximação no espaço temos que:

$$\frac{\partial c_i^j}{\partial t} - \alpha \left( \frac{c_{i+1}^t - 2c_i^t + c_{i-1}^t}{(\Delta z)^2} \right) + v \left( \frac{c_{i+1}^j - c_{i-1}^j}{2(\Delta z)} \right) + \mu c_i^t = f_i^j$$

Agora, usando o Método de Crank-Nicolson e a equação de aproximação no tempo temos que:

$$\frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t} - \alpha \left( \frac{(c_{i+1}^j + c_{i+1}^{j+1}) - 2(c_i^j + c_i^{j+1}) + (c_{i-1}^j + c_{i-1}^{j+1})}{2(\Delta z)^2} \right) + v \left( \frac{(c_{i+1}^j + c_{i+1}^{j+1}) - (c_{i-1}^j + c_{i-1}^{j+1})}{4(\Delta z)} \right) + \frac{\mu}{2} \mu (c_i^j + c_i^{j+1}) = f_i^j$$

Reajustando os termos, temos:

$$\begin{aligned} c_{i-1}^{j+1} \left( -\frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta z)^2} - \frac{v \Delta t}{4\Delta z} \right) + c_i^{j+1} \left( 1 + \frac{\alpha \Delta t}{\Delta z^2} + \frac{\mu \Delta t}{2} \right) + c_{i+1}^{j+1} \left( -\frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta z)^2} + \frac{v \Delta t}{4\Delta z} \right) = \\ c_{i-1}^j \left( +\frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta z)^2} + \frac{v \Delta t}{4\Delta z} \right) + c_i^j \left( 1 - \frac{\alpha \Delta t}{\Delta z^2} - \frac{\mu \Delta t}{2} \right) + c_{i+1}^j \left( +\frac{\alpha \Delta t}{2(\Delta z)^2} - \frac{v \Delta t}{4\Delta z} \right) + f_i^j \end{aligned} \quad (2.3)$$

Como o valor inicial é conhecido, o procedimento será calcular as novas concentrações de poluentes para cada passo de tempo. Essas concentrações podem ser calculadas através da solução de um sistema linear, já que cada incógnita gera uma equação discretizada. Assim, para cada passo de tempo, temos o sistema linear:

$$Ac^{j+1} = Bc^k + f \quad (2.4)$$

Podemos observar por 2.3 que cada equação do sistema linear tem apenas três termos, resultando em um sistema linear com matrizes tridiagonais e esparsas. A solução dos sistemas lineares será feita utilizando o *software Matlab* e sua função *mldivide* que resolve um sistema linear da forma  $Ax = b$  identificando suas propriedades e otimizando o tempo de solução.

Para as simulações computacionais realizadas, foram considerados que os coeficientes  $\alpha$ ,  $\nu$ ,  $\mu$  são constantes para todo o tempo e que a fonte de poluição  $f$  é constante para todo o tempo e concentrada no ponto de fronteira, simulando assim a chuva na superfície da coluna de água. As figuras 2.3 e 2.4 representam a solução de duas situações de difusão.

Nas duas figuras podemos observar o processo difusivo de espalhamento de poluentes provindos da superfície da coluna de água. Na figura 2.3 observamos a tendência do poluente de flutuar no meio aquático, devido ao coeficiente advectivo  $\nu$ . Já na figura 2.4 observamos a tendência do poluente de afundar no meio aquático, devido ao coeficiente advectivo  $\nu$  de sinal oposto.

### 3 MODELO: DISPERSÃO DE POLUENTES EM UMA LAGOA RETANGULAR

Agora, queremos descrever a variação temporal da concentração de poluentes em um domínio de duas dimensões. Para isso, novamente vamos construir um cenário de motivação e um modelo matemático que utiliza a equação diferencial parcial de difusão-advectação-reação para duas dimensões e encontrar sua solução numérica utilizando o Método de Diferenças Finitas e Crank-Nicolson.

Suponha que uma lagoa agora receba poluição através de escoamentos de rejeitos poluentes de fábricas e bairros domiciliares em suas margens. Vamos considerar que o lagoa em questão apresenta formato retangular, de comprimento  $H$  e largura  $L$ , e profundidade uniforme em toda a área, como mostrado na figura 3.1.

Assim, consideramos em nosso modelo a concentração de poluentes na profundidade da lagoa é uniforme e estamos interessados em calcular o efeito difusivo de espalhamento de poluentes provindos de escoamentos em sua margem.

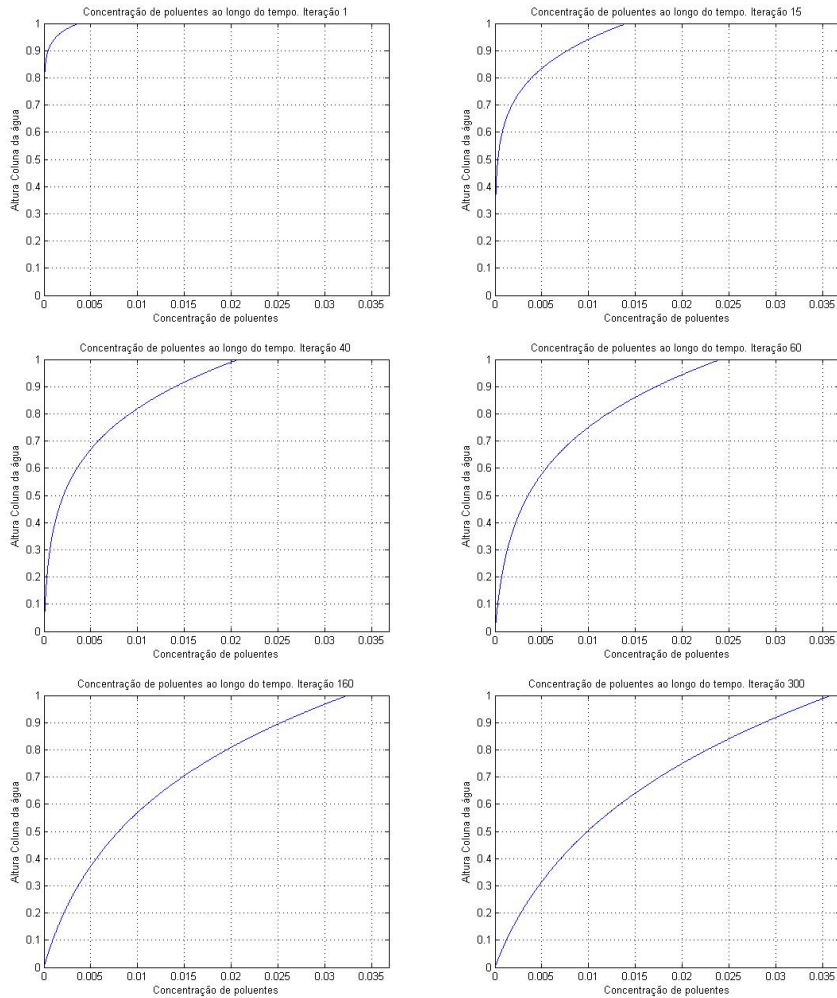


Figura 2.3: Variação de concentração de poluentes, ao longo do tempo, na coluna de água. Coeficientes usados:  $\alpha = 0.0125$ ,  $\nu = 0.03$ ,  $\mu = -0.021$ ,  $f = 1$ ,  $H = 1$ ,  $T = 100$ .

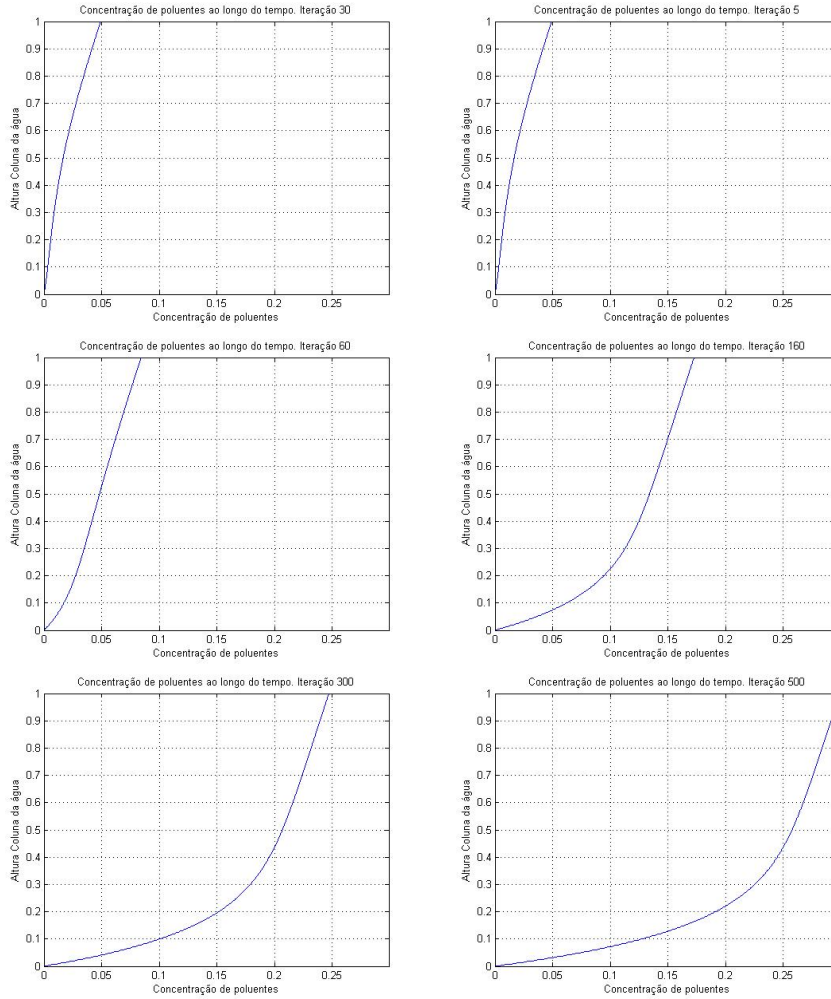


Figura 2.4: Variação de concentração de poluentes, ao longo do tempo, na coluna de água. Coeficientes usados:  $\alpha = 0.0125$ ,  $\nu = -0.09$ ,  $\mu = 0.021$ ,  $f = 1$ ,  $H = 1$ ,  $T = 100$ .

Para se obter o modelo matemático que aproxime a situação de concentração de poluentes na lagoa em questão recorreremos à Equação clássica de difusão-advecção-reação (Equação 3.1) de modo a se obterem resultados para a variação temporal da mencionada concentração de poluentes considerando duas dimensões como um domínio de fronteira suficientemente regular.

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, y, t) - \alpha \Delta c(x, y, t) + \nabla c(x, y, t) \cdot V + \mu c(x, y, t) = f(x, y, t), \quad (3.1)$$

$$(x, y) \in \Omega = [0, L] \times [0, H] \subset \mathbb{R}^2 \quad \text{e} \quad t \in \psi = (0, T)$$

em que  $c = c(x, y, t)$  é contaminação,  $\alpha$  a difusibilidade do contaminante,  $V$  o vetor representativo do vento predominante,  $\mu$  é o decaimento do contaminante,  $f = f(x, y, t)$  representa





Figura 3.1: Representação de lagoa com formato retangular. Em destaque, uma fonte soltando poluentes.

as fontes poluentes,  $\Omega$  é o domínio espacial,  $J$  é o domínio temporal e  $T$  é o tempo final de simulação.

Além disso, vamos considerar que a poluição no instante inicial  $t = 0$  é nula para todo o domínio espacial ( $c(x, y, 0) = 0$ ). Vamos considerar também que a poluição não é absorvida pelas margens da lagoa utilizando a condição de fronteira de Von Neumann ( $\frac{\partial c}{\partial \eta}(x, y, t) = 0$ , se  $(x, y) \in \partial\Omega$ ).

Novamente, vamos realizar a discretização do problema para encontrar sua solução numérica. Para isso, primeiramente o intervalo  $[0, L]$  será particionado em  $nx + 1$  subintervalos  $I_i = [x_{i-1}, x_i]$  de tamanho  $(\Delta x) = L/(nx + 1)$ , com  $x_0 = 0$ ,  $x_1 = (\Delta x)$ , ...,  $x_n = L - (\Delta x)$ ,  $x_{n+1} = L$ . O intervalo  $[0, H]$  será particionado em  $ny + 1$  subintervalos  $J_i = [y_{i-1}, y_i]$  de tamanho  $(\Delta y) = H/(ny + 1)$ , com  $x_0 = 0$ ,  $y_1 = (\Delta y)$ , ...,  $y_n = H - (\Delta y)$ ,  $y_{n+1} = H$ , assim, sendo  $I = I_1 \cup I_2 \cup \dots \cup I_n I_{n+1}$  e  $J = J_1 \cup J_2 \cup \dots \cup J_n J_{n+1}$ , então o domínio espacial pode ser escrito como  $\Omega = I \times J$ . A discretização do domínio temporal se dá da mesma maneira que em ma dimensão.

Essa discretização espacial se dá como é mostrado na figura 3.2. Estamos interessados em calcular a concentração de poluentes para cada ponto que equivale a um par cartesiano de pontos nodais, a cada instante de tempo. Então escolhemos realizar uma ordenação destes pontos, ordenando colunas verticais de pontos em sequência. Então, vamos denotar os pontos como:

$$c(x_i, y_j, t_k) = c_{i*ny+j}^k$$

Assim, estamos interessados em resolver a equação de difusão 3.1 para cada ponto no espaço e para cada tempo:

$$\frac{\partial c_i^k}{\partial t} - \alpha \Delta c_i^k + \nabla c_i^k \cdot V + \mu c_i^k = f_i^k$$

Assim, temos que:

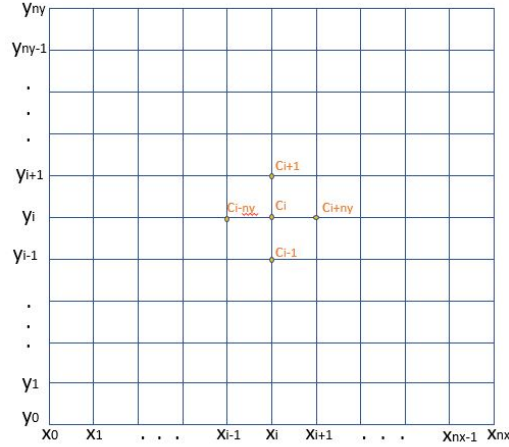


Figura 3.2: Representação da discretização em duas dimensões e seus pontos nodais.

$$\frac{\partial c_i^k}{\partial t} - \alpha \left( \frac{\partial^2 c_i^k}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 c_i^k}{\partial y^2} \right) + \left( \frac{\partial c_i^k}{\partial x}, \frac{\partial c_i^k}{\partial y} \right) \cdot V + \mu c_i^k = f_i^k$$

Utilizando as aproximações do Método de Diferenças Finitas, para um instante no tempo  $t = t_k$  é possível escrever 3.1 como:

$$\frac{\partial c_i^j}{\partial t} - \alpha \left( \frac{c_{i+ny}^t - 2c_i^t + c_{i-ny}^t}{\Delta x^2} + \frac{c_{i+1}^t - 2c_i^t + c_{i-1}^t}{\Delta y^2} \right) + v \left( \frac{c_{i+ny}^j - c_{i-ny}^j}{2\Delta x} \right) + w \left( \frac{c_{i+1}^j - c_{i-1}^j}{2\Delta y} \right) + \mu c_i^t = f_i^j$$

Agora, utilizando o Método de Crank-Nicolson para aproximar a derivada parcial no tempo temos que, para todo passo de tempo e todo ponto do espaço discretizado:

$$\frac{c_i^{j+1} - c_i^j}{\Delta t} - \alpha \left( \frac{(c_{i+ny}^{t+1} + c_{i+ny}^t) - 2(c_i^{t+1} + c_i^t) + (c_{i-ny}^{t+1} + c_{i-ny}^t)}{2\Delta x^2} + \frac{(c_{i+1}^{t+1} + c_{i+1}^t) - 2(c_i^{t+1} + c_i^t) + (c_{i-1}^{t+1} + c_{i-1}^t)}{2\Delta y^2} \right) + v \left( \frac{(c_{i+ny}^{j+1} + c_{i+ny}^j) - (c_{i-ny}^j + c_{i-ny}^{j+1})}{4\Delta x} \right) + w \left( \frac{(c_{i+1}^{j+1} + c_{i+1}^j) - (c_{i-1}^j + c_{i-1}^{j+1})}{4\Delta y} \right) + \frac{\mu}{2} (c_i^{t+1} + c_i^t) = f_i^j$$

Reajustando os termos, encontramos a equação:

$$\begin{aligned}
& c_{i-nnny}^{t+1} \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{v\Delta t}{4\Delta x} \right) + c_{i-1}^{t+1} \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{w\Delta t}{4\Delta y} \right) + c_i^{t+1} \left( 1 + \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{\mu\Delta t}{2} \right) + \\
& \quad + c_{i+1}^{t+1} \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{w\Delta t}{4\Delta y} \right) + c_{i+nnny}^{t+1} \left( -\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{v\Delta t}{4\Delta x} \right) = \\
& c_{i-nnny}^t \left( +\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{v\Delta t}{4\Delta x} \right) + c_{i-1}^t \left( +\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{w\Delta t}{4\Delta y} \right) + c_i^t \left( 1 - \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{\mu\Delta t}{2} \right) + \\
& \quad + c_{i+1}^t \left( +\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{w\Delta t}{4\Delta y} \right) + c_{i+nnny}^t \left( +\frac{\alpha\Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{v\Delta t}{4\Delta x} \right) + f_i^t
\end{aligned} \tag{3.2}$$

Como o valor inicial é conhecido, o procedimento é o mesmo do modelo anterior. Para cada partição no tempo, as concentrações de poluentes nos pontos de partição do espaço serão calculadas através da solução do sistema linear resultante. Novamente, temos um sistema linear da forma:

$$Ac^{t+1} = Bc^t + f$$

Note que as dimensões desse sistema linear são de ordem  $nnny$  vezes maior que o problema unidimensional e que as matrizes desse sistema linear continuam sendo esparsas, mas agora contém cinco diagonais preenchidas. A simulação desse problema também foi obtida utilizando o *software Matlab* e sua função *mldivide*.

Para as simulações, foi considerado que os coeficientes  $\alpha$ ,  $v$ ,  $w$  e  $\mu$  são constantes para todo o tempo e que a função  $f$  é constante para todo o tempo e representa fontes pontuais de poluição espalhadas pela margem em posição escolhidas. As figuras 3.3 e 3.4 representam os resultados obtidos para valores de constantes e posições de fontes de poluição diferentes.

Nas duas figuras podemos observar o processo difusivo de espalhamento de poluentes em duas dimensões. A figura 3.3 apresenta uma única fonte de poluente em uma posição inferior à esquerda e uma direção de vento advectivo predominante tal que seu espalhamento seja bem evidente para o resto do domínio espacial. Já a figura 3.4 apresenta duas fontes de poluente distintas localizadas na região superior à direita e um vento advectivo na direção contrária.

A obtenção deste algoritmo robusto que simula a dispersão de poluentes em duas dimensões com a possibilidades de escolher a posição de fontes de poluentes é a motivação da aplicação descrita na próxima seção.

- Adicionar figura represa mais fontes de poluentes
- adicionar figura ordenação dos pontos

## 4 APLICAÇÃO: ESTUDO DE DISPERSÃO DE POLUENTES NA REPRESA DE SALTO GRANDE

Nesta aplicação, queremos simular computacionalmente o efeito de dispersão de poluentes em ambientes aquáticos, discretizando a equação diferencial de difusão-advectação-reação. Este estudo será aplicado na represa de Salto Grande e sua atual crise causada pelo despejo impróprio de resíduos industriais e de bairros residenciais próximos

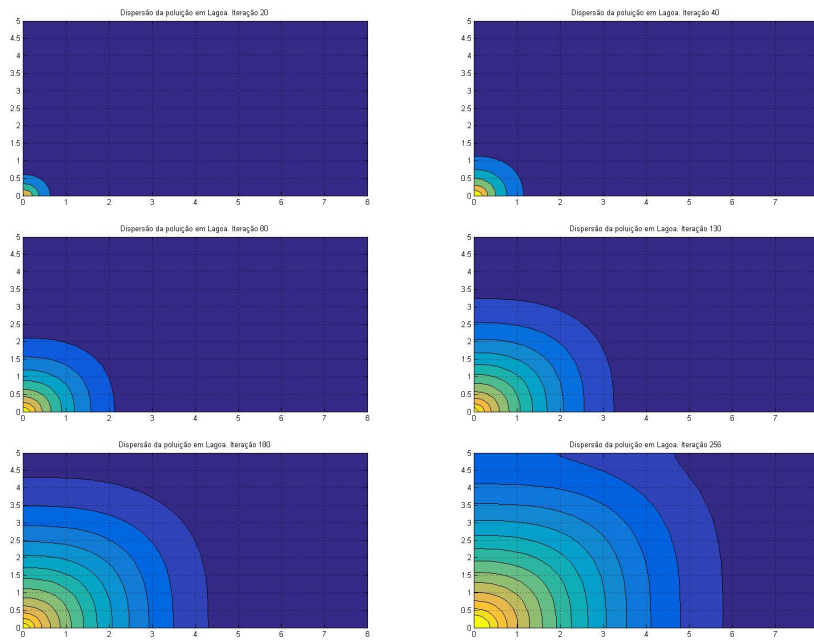


Figura 3.3: Variação da concentração de poluentes na lagoa de formato retangular. Coeficientes usados:  $\alpha = 0.01875$ ,  $\nu = 0.05$ ,  $w = 0.05$ ,  $\mu = 0.01$ ,  $f = 0.5$ ,  $H = 8$ ,  $L = 5$ ,  $T = 100$ .

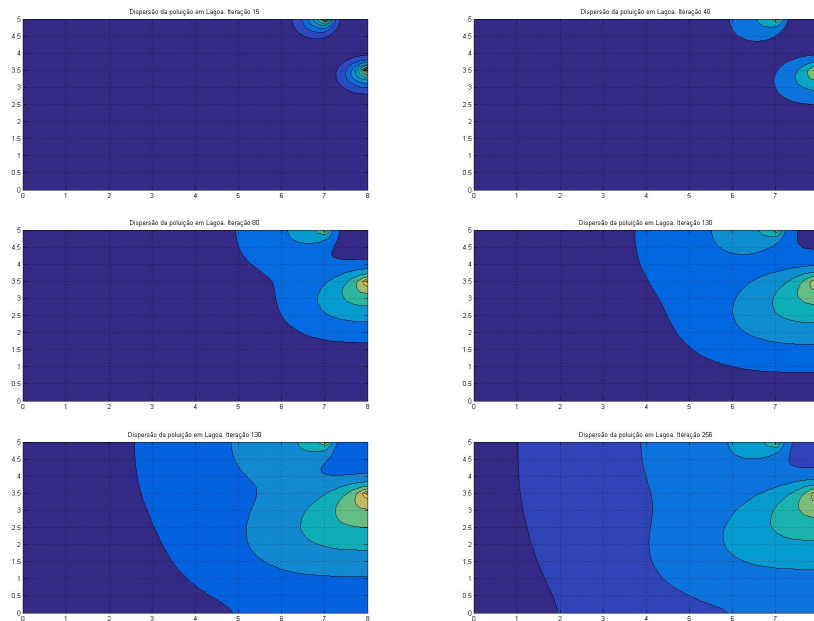


Figura 3.4: Variação da concentração de poluentes na lagoa de formato retangular. Coeficientes usados:  $\alpha = 0.01875$ ,  $\nu = -0.08$ ,  $w = -0.04$ ,  $\mu = 0.01$ ,  $f = 0.5$ ,  $H = 8$ ,  $L = 5$ ,  $T = 100$ .

Entre 1940 e 1949, a Represa de Salto Grande foi construída para a geração de energia elétrica. Sua presença impulsionou a urbanização e industrialização da região do rio Atibaia, e as consequências dos anos de desgaste ambiental podem ser observados no atual estado de emergência da cidade de Americana, dominada por aguapés, segundo a reportagem de G1 (2019) [4], que surgem da poluição doméstica e urbana no entorno da represa cujas águas ameaçam severamente a biota.

Para se obter o modelo matemático que aproxime a situação de concentração de poluentes na represa recorreremos à Equação clássica de difusão-advecção-reação (Equação (4.1), dada por Okubo (1980) [6] e Edelstein-Keshet (1988) [3], que necessitará ser aproximada numericamente, de modo a se obterem resultados para a variação temporal da mencionada concentração de poluentes na represa como um todo, considerada em duas dimensões como um domínio de fronteira suficientemente regular.

$$\frac{\partial c}{\partial t}(x, y, t) - \alpha \Delta c(x, y, t) + \nabla c(x, y, t) \cdot V + \mu c(x, y, t) = f, \quad (4.1)$$

$$(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2 \quad \text{e} \quad t \in \psi = (0, T]$$

em que  $c = c(x, y, t)$  é contaminação,  $\alpha$  a difusibilidade do contaminante,  $V$  o vetor representativo do vento predominante,  $\mu$  é o decaimento do contaminante,  $f$  representa as fontes poluentes,  $\Omega$  é o domínio espacial,  $\psi$  é o domínio temporal e  $T$  é o tempo final de simulação.

Para obter aproximações de  $c(x, y, t)$  é necessário um tratamento numérico e a opção aqui adotada é a de se usar Diferenças Finitas Centradas na discretização espacial e Crank-Nicolson no tempo, ambas com erro de ordem quadrática, como descrito por LeVeque (2007) [5] e por Burden, Faires (1997) [1].

Os resultados tanto numéricos quanto qualitativos através de gráficos para visualização serão executados e obtidos com o uso do software Matlab nos laboratórios do IMECC. Os resultados obtidos simulam o efeito difusivo ao longo do tempo para um domínio espacial semelhante à Represa de Salto Grande, como mostrado na Figura 4.1.

A discretização da Equação Diferencial 4.1 foi feita como descrito na seção anterior, obtendo-se um sistema linear com equações da forma 3.2. Agora a malha discretizada corresponde à região mapeada da represa e só esses pontos são considerados na simulação computacional, o mesmo processo de discretização é feito por Zamora [7].

Infelizmente, devido a essa discretização de uma região mapeada, os resultados obtidos não se mostram tão robustos e satisfatórios quanto para região simplificada.

## 5 CONCLUSÕES

Com relação à Aplicação: Estudo de Dispersão de Poluentes na Represa de Salto Grande, tive a oportunidade de apresentar os resultados obtidos no Encontro Regional de Matemática Aplicada 2019, na UNESP Bauru. E em setembro, poderei também apresentar estes resultados no Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional 2019, na UFU em Uberlândia.

Futuramente, gostaria de realizar o processo de afinamento de malha para a Aplicação na Represa de Salto Grande e assim obter um programa satisfatório. Com isso, as simulações futuras podem ser focadas em taxas de poluentes reais.

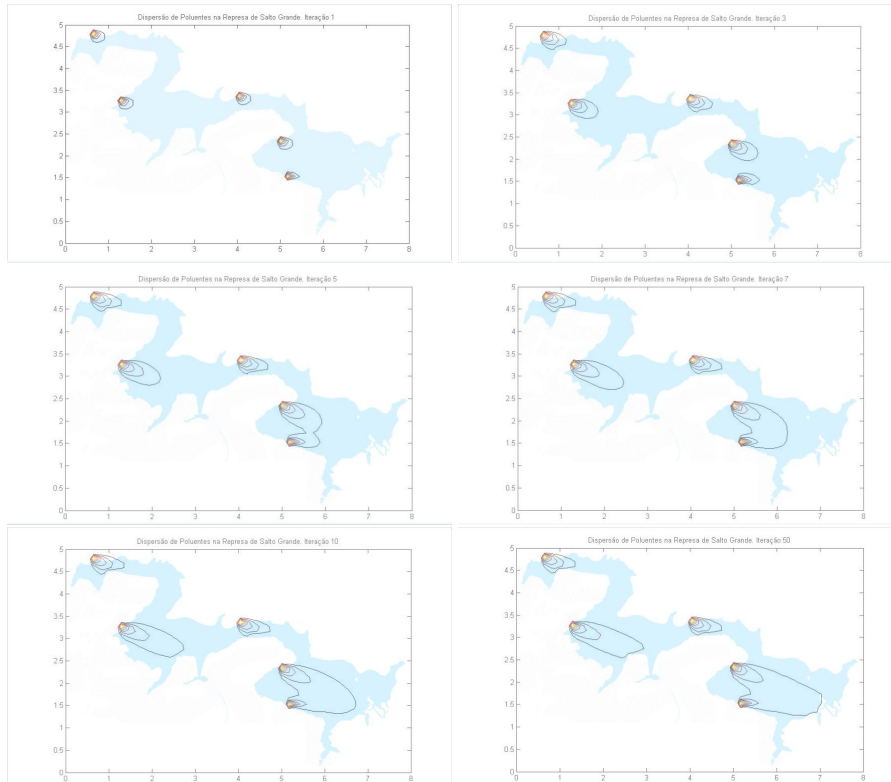


Figura 4.1: Variação da concentração de poluentes na simulação da Represa de Salto Grande.

Este trabalho representa o esforço inicial de simular diferentes cenários de difusão superficial de poluentes num domínio aquático. Estas simulações foram efetuadas de acordo com os métodos citados. Pelos resultados obtidos, podemos afirmar que este procedimento se constitui numa importante ferramenta auxiliar para ações emergenciais de prevenção, de contingenciamento e na escolha de locais para avaliar o impacto. Esperamos que os recursos computacionais desenvolvidos possam contribuir no estabelecimento de políticas públicas com vista à recuperação deste local.

## REFERÊNCIAS

- [1] Burden R. L.; Faires, J. D. *Numerical Analysis*. 6. ed. Boston: Brooks/Cole, 1997.
- [2] G. L. Diniz, J. F. C. A. Meyer. *Estudo e modelagem da dispersão de poluentes em sistemas estuarinos*. Publicação do Grupo de Biomatemática, IMECC - Unicamp, 2004.
- [3] L. Edelstein-Keshet. *Mathematical Models in Biology* Random-House, 1988, N.York.
- [4] G1 Campinas e Região. *Salto Grande: 11 cidades da região descumprem medidas de preservação da represa, diz MP* [https://g1.globo.com/sp/campinas-regiao/...](https://g1.globo.com/sp/campinas-regiao/) Acessado 15 Mar. 2019.
- [5] Randall J. LeVeque. *Finite Difference Methods for Ordinary Equations and Partial Differential Equations*. Siam, Philadelphia, 2007.
- [6] A. Okubo. *Diffusion and Ecological Problems: Mathematical Models* Springer, 1980, Berlin.
- [7] J. L. C. Zamora. *Dinâmicas Populacionais na Presença de Poluentes no Meio Aquático do Reservatório de Salto Grande: Modelagem, Aproximação e Simulações Computacionais*, Tese de Doutorado, Unicamp - 2016.