

Modelagem e Simulações Numéricas de um Material Impactante na Bacia Sedimentar da Foz do Amazonas: Difusão-Advecção

Vitor Hugo Muniz Oliveira¹

IME-USP, São Paulo, SP

André Krindges²

UFMT, Cuiabá, MT

Daniela Ribeiro Monteiro³

IBMEC, Rio de Janeiro, RJ

João Frederico da Costa Azevedo Meyer⁴

IMECC-Unicamp, Campinas, SP

Marcos Marreiro Salvatierra⁵

UEA, Manaus, AM

Resumo. O presente trabalho refere-se a modelagem matemática da dispersão de um poluente em meio aquático na região da Bacia Sedimentar da Foz do Amazonas (BSFA). Tal modelo é representado por uma Equação Diferencial Parcial (EDP), possuindo termos de difusão-advecção. A equação deste modelo foi discretizada espacialmente, pelo Método de Galerkin via Elementos Finitos e temporalmente, pelo Método de Crank-Nicolson via diferenças centradas no tempo. O perfil de velocidades da região ocasionada pelas correntes marítimas foi desenvolvido pelo Método de Interpolação conhecido como Krigagem. Por fim, os resultados gráficos foram gerados a partir de um algoritmo desenvolvido no *software Matlab* e constam ilustrados neste trabalho. Vale ressaltar que este trabalho é importante para o conhecimento de pesquisadores que se interessam na área de Ecologia Matemática e que estudam sobre impactos ambientais provenientes da interferência humana.

Palavras-chave. Ecologia Matemática. Impactos Ambientais. Material Impactante. Método de Elementos Finitos. Método de Galerkin. Método de Crank-Nicolson.

1 Introdução

Este trabalho contém o estudo de uma modelagem matemática da Equação de Difusão-Advecção com a dispersão de um poluente na região da Bacia Sedimentar da Foz do Amazonas (BSFA), proveniente de uma ação antrópica por meio de um material impactante tóxico inserido na região. Pode-se observar uma proposta inicial nos estudos realizados em [6] e [8].

O objetivo é apresentar o desenvolvimento e os resultados numéricos da análise do comportamento da dispersão do poluente na região. Para isso, iremos levar em consideração os seguintes fenômenos:

¹vitor.hmuniz@ime.usp.br

²krindges@gmail.com

³danielar Monteiro@gmail.com

⁴jmeyer@unicamp.br

⁵msalvatierra@uea.edu.br

- **Difusão:** espalhamento natural do poluente em contato com a região. A dinâmica difusiva resulta de movimentos aleatórios micro e macroscópicos. Neste trabalho será considerada a difusão efetiva, fundamentada em [5], e que são levadas em conta a difusão molecular, que deriva do movimento browniano das moléculas, e a difusão turbulenta, derivada do espalhamento macroscópico de tensão superficial;
- **Advecção:** movimento provocado pela movimentação da própria região (correntezas);
- **Decaimento:** fenômeno que reúne alterações pelas moléculas das substâncias componentes do produto tóxico ao longo do tempo, ocasionando perda de massa e conseqüentemente sua exclusão na região;
- **Fontes poluentes:** presença de material impactante na região.

A equação que descreve esses fenômenos e representa a concentração de poluente denotada por C , onde $C = C(x, y, t)$, $(x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2$ e $t \in J = (0, T] \subset \mathbb{R}$, C de Classe \mathcal{C}^2 em Ω , é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \operatorname{div}(\alpha_c \nabla C) + \operatorname{div}(\vec{V}C) + \sigma_c C = f, \quad (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad t \in J = (0, T], \quad (1)$$

com os parâmetros dando os seguintes significados biológicos para a equação, temos:

- α_c representa o coeficiente de difusão do poluente na região;
- $\vec{V} = (V_1(x, y, t), V_2(x, y, t))$ representa o campo de velocidades da circulação local, com $\operatorname{div}(\vec{V}) = 0$;
- $\sigma_c = \sigma_c(x, y, t)$ representa a taxa de decaimento do poluente na região;
- $f = f(x, y, t)$ representa o termo fonte ou fontes poluentes.

O campo de velocidades \vec{V} será considerado independente do tempo, não levando em conta, assim, perturbações locais, no tempo, onde possa haver na circulação da água, sejam elas causadas por chuvas, rajadas de vento, etc., mas descrevendo globalmente o fenômeno advectivo.

Os parâmetros α_c e σ_c podem até, por algum tempo, depender fortemente da concentração C , porém, devido ao intervalo de tempo que será considerado nas simulações e à proposta de tratamento numérico para este modelo, um sistema associado linear, é aceitável usar valores médios para α_c e σ_c , tornando-os constantes.

Considerando como condição inicial o ponto $C(x, y, 0) = C_0(x, y)$, $(x, y) \in \Omega$ e as condições de contorno para todo $t \in J$ dadas por:

$$\begin{aligned} C|_{\Gamma_0} &= 0, & (\text{Condição de Contorno de Dirichlet Homogênea}) & \text{ e} \\ \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} &= 0, & (\text{Condição de Contorno de Von-Neumann Homogênea}) & \end{aligned} \quad (2)$$

onde a fronteira da região Ω será dada por $\partial\Omega = \Gamma_0 \cup \Gamma_1$ com $\Gamma_0 \cap \Gamma_1 = \emptyset$.

Devido à proposta de aplicação deste modelo serão realizadas algumas simplificações, com o propósito de torná-lo mais tratável. Dessa forma o modelo torna-se:

$$\begin{cases} \frac{\partial C}{\partial t} - \alpha \Delta C + \vec{V} \cdot \nabla C + \sigma_c C = 0, & \forall (x, y) \in \Omega \subset \mathbb{R}^2, \quad \forall t \in (0, T], \\ C(x, y, 0) = C_0(x, y), & \forall (x, y) \in \Omega, \\ C|_{\Gamma_0} = 0; \quad \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\Gamma_1} = 0, & \forall t \in (0, T]. \end{cases} \quad (3)$$

2 Formulação Variacional

Nesta seção, aplicamos o método variacional para discretizar a equação e assim garantir uma aproximação numérica da solução. A formulação variacional da Equação de Difusão-Advecção apresentará a dispersão de poluente na região, considerando o nosso domínio espacial de estudo $\Omega \subset \mathbb{R}^2$. De acordo com [7], a solução do problema em sua formulação clássica exige que $C(x, y, t)$ seja no mínimo de classe C^2 em um aberto do \mathbb{R}^2 , que pode ser encontrada e fundamentada em [1] e [3].

O desenvolvimento da formulação variacional pode ser visto na dissertação de mestrado em [6], onde apresenta uma solução C , que satisfaça a equação (1), em que $C \in \mathcal{V} = \{C \in L_2((0, T], H_1(\Omega)) : \frac{\partial C}{\partial t} \in L_2(\Omega), \forall t \in (0, T]\}$. A seguir, veja o resultado da equação na formulação variacional.

$$\int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial t} \phi \, d\mu + \alpha_c \int_{\Omega} \nabla C \cdot \nabla \phi \, d\mu + V_1 \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial x} \phi \, d\mu + V_2 \int_{\Omega} \frac{\partial C}{\partial y} \phi \, d\mu + \sigma_c \int_{\Omega} C \phi \, d\mu = 0, \quad \forall \phi \in H_1(\Omega). \quad (4)$$

Reescrevendo a equação (4) na notação de produto interno, podemos reescrever a formulação variacional da equação (1), da seguinte forma:

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \mid \phi\right) + \alpha_c (\nabla C \mid \nabla \phi) + V_1 \left(\frac{\partial C}{\partial x} \mid \phi\right) + V_2 \left(\frac{\partial C}{\partial y} \mid \phi\right) + \sigma_c (C \mid \phi) = 0, \quad \forall \phi \in H_1(\Omega). \quad (5)$$

Observação 2.1: Pode-se encontrar em [1] e [9] a demonstração da existência e unicidade de solução para a equação (5).

3 Discretização Espacial: Método de Galerkin

Agora, apresentamos a discretização espacial da formulação variacional para a Equação de Difusão-Advecção com dispersão de poluente na região. Utilizaremos o Método de Galerkin via Método de Elementos Finitos (MEF) fundamentado em [2], para obtermos uma solução numérica aproximada, isto é, o nosso espaço de solução será igual ao espaço das funções testes, logo temos que obter uma discretização espacial para a equação (5).

Considere o subespaço $\mathcal{V}_h \subset H_1(\Omega)$ de dimensão finita gerado pela base $\mathfrak{B} = \{\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N\}$ sendo a solução da equação (5) e definida como uma combinação linear de elementos da base \mathfrak{B} . Construiremos uma aproximação da solução nesse espaço, realizando uma separação entre as variáveis espaciais e a variável temporal com as aproximações dadas da seguinte forma:

$$C(x, y, t) \cong C_h(x, y, t) = \sum_{j=1}^N C_j(t) \phi_j(x_i, y_i), \quad (6)$$

$$\frac{\partial C_h}{\partial t} = \sum_{j=1}^N \frac{dC_j(t)}{dt} \phi_j, \quad \frac{\partial C_h}{\partial x} = \sum_{j=1}^N C_j(t) \frac{\partial \phi_j}{\partial x}, \quad \frac{\partial C_h}{\partial y} = \sum_{j=1}^N C_j(t) \frac{\partial \phi_j}{\partial y},$$

O campo vetorial de velocidades de dispersão do poluente relacionado ao termo advectivo $V(x, y) = (V_1(x, y), V_2(x, y))$ do meio em questão foram objeto de estudo em [3]. Seus valores pontuais aproximados são obtidos através da resolução numérica do Método de Krigagem e encontra-se

fundamentado em [4]. Interpolando $V(x, y)$ através das funções da base \mathfrak{B} temos:

$$V_1(x, y) = \sum_{l=1}^N V_{1_l} \phi_l(x, y) \quad \text{e} \quad V_2(x, y) = \sum_{m=1}^N V_{2_m} \phi_m(x, y). \quad (7)$$

Utilizando as aproximações dadas em (6) e substituindo os valores de $V_1(x, y)$ e $V_2(x, y)$ dados em (7) na equação (5), obtemos:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \frac{dC_j(t)}{dt} (\phi_j | \phi_i) + \sum_{j=1}^N C_j(t) \left\{ \alpha_c (\nabla \phi_j \parallel \nabla \phi_i) + \sum_{l=1}^N V_{1_l} \left(\phi_l \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \mid \phi_i \right) \right. \\ & \left. + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\phi_m \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \mid \phi_i \right) + \sigma_c (\phi_j | \phi_i) \right\} = 0, \quad \forall \phi_i \in \mathcal{V}_h. \end{aligned} \quad (8)$$

A equação (8) representa a discretização espacial da formulação variacional dada pela equação (5). Os procedimentos para chegar neste resultado podem ser vistos em [6].

4 Discretização Temporal: Método de Crank-Nicolson

Como último passo para chegar na solução aproximada, apresentamos a discretização temporal da Equação de Difusão-Advecção da dispersão do poluente, para isso, utilizaremos o Método de Crank-Nicolson, que de acordo com [1] é bastante utilizado por ser um método incondicionalmente estável e de segunda ordem. Para a construção do método, usaremos diferença centrada no tempo, ou seja, tomaremos $t_n + \frac{\Delta t}{2}$ sendo que n representa o passo no tempo. Assim, para as derivadas temporais, temos a aproximação dada por:

$$\frac{dC_j^{n+\frac{1}{2}}}{dt} \cong \frac{C_j^{n+1} - C_j^n}{\Delta t}. \quad (9)$$

Para o valor de C_j , têm-se a aproximação definida por:

$$C_j^{n+\frac{1}{2}} = \frac{C_j^{n+1} + C_j^n}{2}. \quad (10)$$

A partir das aproximações dadas por (9) e (10), obtemos como resultado da formulação variacional discretizada temporalmente a seguinte equação:

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N C_j^{n+1} \left\{ \left[1 + \sigma_c \frac{\Delta t}{2} \right] (\phi_j | \phi_i) + \frac{\Delta t}{2} \left[\alpha_c (\nabla \phi_j \parallel \nabla \phi_i) + \sum_{l=1}^N V_{1_l} \left(\phi_l \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \mid \phi_i \right) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\phi_m \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \mid \phi_i \right) \right] \right\} = \sum_{j=1}^N P_j^n \left\{ \left[1 - \sigma_c \frac{\Delta t}{2} \right] (\phi_j | \phi_i) - \frac{\Delta t}{2} \left[\alpha_c (\nabla \phi_j \parallel \nabla \phi_i) \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{l=1}^N V_{1_l} \left(\phi_l \frac{\partial \phi_j}{\partial x} \mid \phi_i \right) + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\phi_m \frac{\partial \phi_j}{\partial y} \mid \phi_i \right) \right] \right\}, \quad \forall \phi_i \in \mathcal{V}_h, \end{aligned} \quad (11)$$

que na forma de sistema matricial é denotada por $AC(t)^{(n+1)} = BC(t)^{(n)}$, e as matrizes \mathbb{A} e \mathbb{B} são dadas na forma:

$$\begin{aligned}
 A = a_{ji} &= \left[1 - \sigma_c \frac{\Delta t}{2} \right] (\phi_j | \phi_i) + \frac{\Delta t}{2} \left[\alpha_c (\nabla \phi_j \parallel \nabla \phi_i) + \sum_{l=1}^N V_{1_l} \left(\phi_l \frac{\partial \phi_j}{\partial x} | \phi_i \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\phi_m \frac{\partial \phi_j}{\partial y} | \phi_i \right) \right] e \\
 B = b_{ji} &= \left[1 + \sigma_c \frac{\Delta t}{2} \right] (\phi_j | \phi_i) - \frac{\Delta t}{2} \left[\alpha_c (\nabla \phi_j \parallel \nabla \phi_i) + \sum_{l=1}^N V_{1_l} \left(\phi_l \frac{\partial \phi_j}{\partial x} | \phi_i \right) \right. \\
 &\quad \left. + \sum_{m=1}^N V_{2_m} \left(\phi_m \frac{\partial \phi_j}{\partial y} | \phi_i \right) \right],
 \end{aligned}$$

e caracteriza-se como um sistema linear de equações diferenciais ordinárias na variável t que será resolvido iterativamente a cada passo no tempo, a partir da condição inicial C_0 já discretizada e dada implicitamente por meio da formulação variacional:

$$\sum_{j=1}^N C_j^{(0)} (\phi_j | \phi_i) = (C_{j_0} | \phi_i).$$

5 Simulações Numéricas

Nesta seção, apresentamos os resultados numéricos da dispersão do poluente deste modelo. O algoritmo e parâmetros utilizados para obtê-los foram baseados na pesquisa realizada em [8], porém foram feitas algumas modificações devido ao domínio de estudo ser diferente.

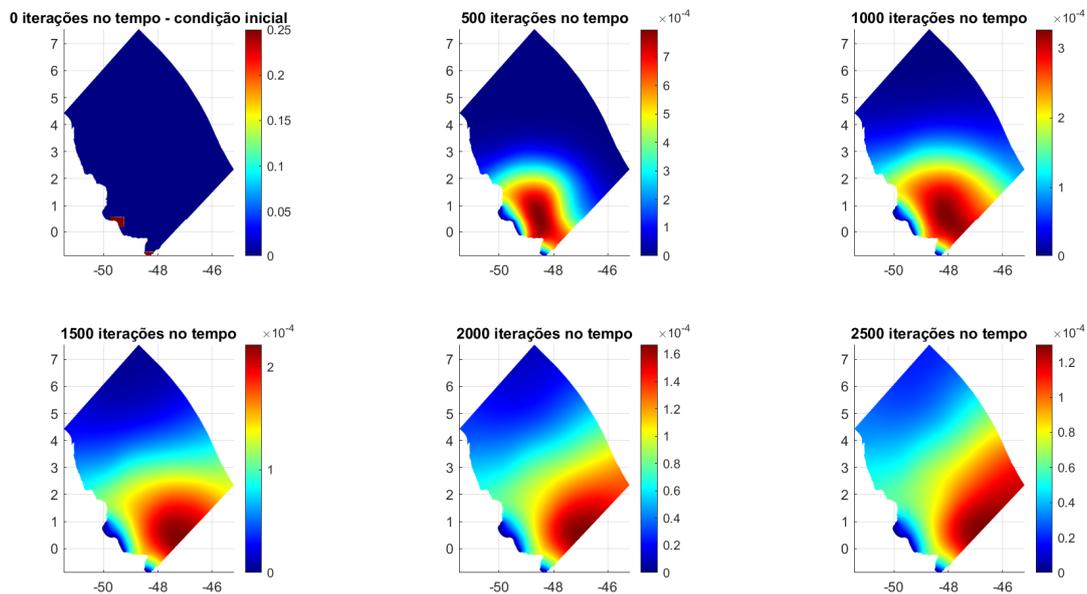
Para simular a concentração do poluente na BSFA foram inseridos dois focos (manchas) como condição inicial, assim sugerindo um derramamento de material impactante proveniente de poluição urbana. Para o acompanhamento da dispersão desse poluente foram escolhidos alguns nós que estão distribuídos na extensão da malha.

Os parâmetros utilizados na implementação do código desenvolvido no *software Matlab* encontram-se fundamentados em [8] e [6] com os seguintes valores: $\alpha_c = 0,75$, $\sigma_c = 0,001$ e $\Delta t = 0,002$. O valor do parâmetro Δt escolhido é justificado pelo fato de que simulações testes geraram instabilidades numéricas nos gráficos quando se escolhiam valores maiores.

Nos gráficos da Figura 1 podemos observar a evolução da dispersão do poluente na BSFA a partir das duas saídas da foz do rio Amazonas. A primeira mancha de poluente encontra-se em um pequeno arquipélago onde fica localizada a ilha de Marajó e a outra no canal do porto de Pará. O algoritmo foi executado com 2500 iterações no tempo, o que equivale a 5 unidades de tempo e os resultados podem ser vistos nos gráficos através de algumas iterações que foram armazenadas.

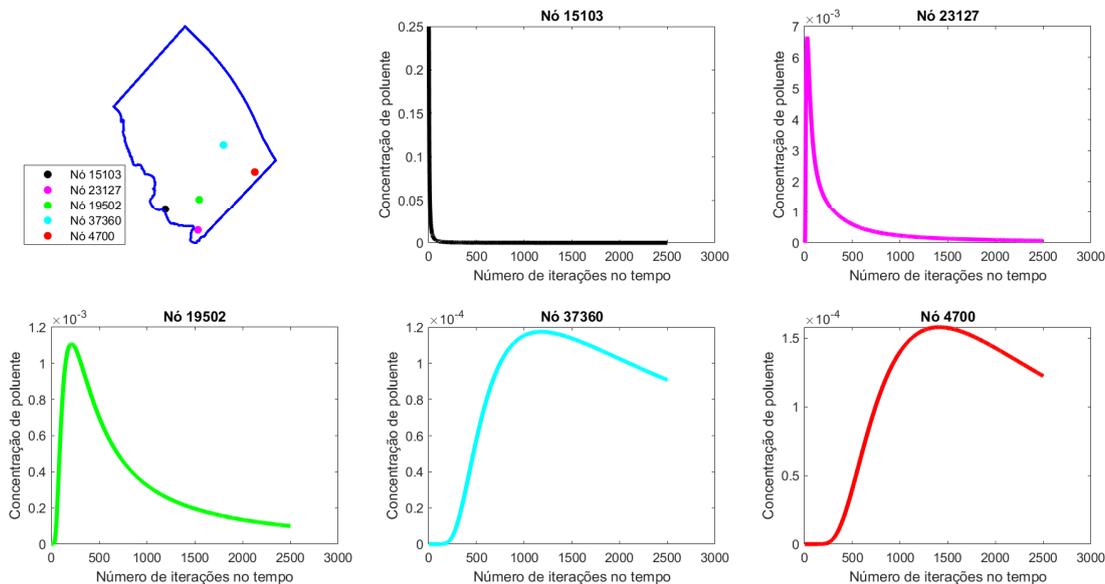
Nos gráficos da Figura 2 são apresentados cinco nós da malha que demonstram o comportamento evolutivo do material impactante nas regiões da BSFA. Observe que onde o poluente começa ou passa por influência das correntes marítimas da região temos o desenvolvimento da curva possuindo taxas de concentração maiores nos pontos mais perto da condição inicial e menores para pontos localizados mais distantes.

Figura 1: Evolução da dispersão do poluente na BSFA.



Fonte: Desenvolvido pelos autores no *software Matlab*.

Figura 2: Localização e análise do comportamento da dispersão do poluente na BSFA.



Fonte: Desenvolvido pelos autores no *software Matlab*.

6 Considerações Finais

Durante o desenvolvimento deste trabalho foi estudado um modelo matemático de grande interesse para a área de Ecologia Matemática. Esta pesquisa partiu do princípio da importância em analisar impactos ambientais que podem afetar o ecossistema marinho.

A partir das condições iniciais, podemos observar uma dispersão do poluente causada por uma mancha de material impactante, que ocorreu por interferência humana proveniente da urbanização na região ou por outras ações antrópicas. Devido ao perfil de velocidades das correntes marítimas da BSFA, o caminho realizado pela dispersão já era esperado. Pôde-se observar a diminuição e o comportamento da proporção de concentração do poluente a cada iteração no tempo através dos gráficos (cf. Figuras 1 e 2) dos nós escolhidos na malha da região.

O algoritmo utilizado para gerar os resultados gráficos foi originalmente desenvolvido pelo pesquisador Prof. Dr. Marcos Marreiro Salvatierra, da Universidade do Estado do Amazonas (UEA), e posteriormente adaptado para ser aplicado no domínio marítimo da BSFA. Esta adaptação refere-se a mudança de território para analisar as populações, que originalmente foram estudadas na lagoa Iberá em [8] e agora no território apresentado aqui. Por fim, espera-se que trabalhos futuros possam ser objeto de estudo de outros pesquisadores interessados pela área, assim dando continuidade e aperfeiçoamento a este trabalho.

Referências

- [1] G. L. Diniz. “Dispersão de Poluentes num Sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações”. Tese de doutorado. Campinas - SP: FEEC - Unicamp, 2003, p. 120.
- [2] H. Kardestuncer, D. H. Norrie e F. Brezzi. **Finite element handbook**. New York: McGraw-Hill, Inc., 1987. ISBN: 007033305X.
- [3] A. Krindges. “Modelagem e Simulação Computacional de um Problema Tridimensional de Difusão-Advecção com Uso de Navier-Stokes”. Tese de doutorado. Campinas - SP: IMECC - Unicamp, 2011, p. 72.
- [4] P. M. B. Landim. “Introdução aos métodos de estimação espacial para confecção de mapas.” Em: **DGA, IGCE, UNESP/Rio Claro, Lab. Geomatemática, Texto Didático 02** (2000). Acessado em: 15/01/2024, <https://www.sorocaba.unesp.br/Home/Graduacao/EngenhariaAmbiental/robertowlourenco/dicas-surfer-01.pdf>, p. 20.
- [5] G. I. Marchuk. **Mathematical Models in Environmental Problems**. 1st. Vol. 16. Studies in Mathematics and its Applications. Amsterdam: North Holland, 1986, p. 216. ISBN: 9780080875378.
- [6] V. H. M. Oliveira. “Modelagem e simulações numéricas da interação de espécies na presença de um material impactante: o caso do peixe-leão (*Pterois volitans*) no litoral norte brasileiro”. Dissertação de mestrado. Campinas - SP: IMECC - Unicamp, 2024, p. 168.
- [7] E. C. C. Poletti. “Dispersão de Poluente em Sistema de Reservatório: Modelagem Matemática e Simulação Computacional utilizando-se Aproximação Numérica e Conjuntos Fuzzy”. Tese de doutorado. Campinas - SP: FEEC - Unicamp, 2009, p. 105.
- [8] M. M. Salvatierra. “Modelagem matemática e simulação computacional da presença de materiais impactantes tóxicos em casos de dinâmica populacional com competição inter e intra-específica”. Dissertação de mestrado. Campinas - SP: IMECC - Unicamp, 2005, p. 53.
- [9] R. C. Sossae. “Dinâmica Populacional Densidade-Dependente em Processos de Dispersão e Migração”. Dissertação de mestrado. Campinas -SP: IMECC - Unicamp, 1995, p. 117.