



RBES

Revista Brasileira de
Engenharia e Sustentabilidade

ISSN 2448-1661

Pelotas, RS, UFPel-Ceng

<https://periodicos.ufpel.edu.br/ojs2/index.php/RBES/index>

V.9.N.3, p.1-7

[X ERMAC-RS]

MODELO NUMÉRICO APLICADO À DISPERSÃO DE MERCÚRIO EM SISTEMAS HÍDRICOS

PERIN, P. Z.¹; QUADROS, R. S.²

¹ Discente do Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat) - Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Capão do Leão, Rio Grande do Sul, Brasil.

² Docente e Coordenador do Programa de Pós-graduação em Modelagem Matemática (PPGMMat) - Universidade Federal de Pelotas (UFPel), Capão do Leão, Rio Grande do Sul, Brasil.

Palavras-chave: contaminação ambiental, equação de advecção-difusão, método de diferenças finitas, modelagem matemática.

Resumo

A contaminação ambiental cresce concomitante ao desenvolvimento da sociedade. Com o passar dos anos a preocupação com a situação do meio ambiente fomentou a utilização da modelagem matemática na representação de fenômenos ligados a dispersão de poluentes, a fim de avaliar a abrangência e a ocorrência destes eventos. Desta forma, a modelagem da dispersão de um metal pesado na água é bastante relevante, pois a partir da equação de advecção-difusão pode-se trazer contribuições sobre o transporte de contaminantes nocivos para a saúde dos ecossistemas. No presente estudo a solução da equação de transporte unidimensional, em regime transiente, é feita numericamente, a partir do método de diferenças finitas. A validação da solução numérica ocorre mediante a comparação com a solução analítica, disponível na literatura, havendo correspondência dada a proximidade entre ambas. Para a aplicação do modelo considerou-se um ambiente aquático hipotético para investigar a dispersão de Mercúrio.

NUMERICAL MODEL APPLIED TO MERCURY DISPERSION IN WATER SYSTEMS

Keywords: environmental contamination, advection-diffusion equation, finite difference method, mathematical modeling.

Abstract

Environmental contamination grows at the same time as the development of society. Over the years, the concern with the environmental situation has fostered the use of mathematical modeling in the representation of phenomena associated with the dispersion of pollutants, in order to assess the scope and occurrence of these events. In this way, the modeling of metal dispersion in the water is very relevant, because from the advection-diffusion equation, contributions can be made in the transport of contaminants harmful to the health of ecosystems. In the present study, the solution of the one-dimensional transport equation in a transient regime, was numerically developed, using the finite difference method. The numerical solution is valid for comparison with the analytical solution, available in the literature, with correspondence given by the proximity between both solutions. For the model application, a hypothetical aquatic environment was considered to investigate the Mercury dispersion.

INTRODUÇÃO

Os estudos referentes ao impacto da poluição no meio ambiente, segundo Yoshinari (2014), ganharam relevância a partir de 1970 graças ao aprimoramento da legislação ambiental e do fomento à pesquisa na área. Desse modo, a questão ambiental ganha cada vez mais destaque, uma vez que ao tomarmos conhecimento dos efeitos causados pela poluição cresce o interesse e a necessidade de conscientização social, referentes à dimensão e gravidade das ações humanas.

A contaminação do meio ambiente é um problema que se estende há muito tempo, afetando as civilizações em diferentes períodos. Inicialmente, a poluição constituía-se apenas por material orgânico, mas no decorrer dos anos, com o avanço tecnológico, a mesma foi ampliada e agravada concomitantemente ao desenvolvimento industrial e a urbanização (LACERDA; MALM, 2008).

Na contemporaneidade a questão deixa de ser a existência de contaminantes nos recursos naturais, e sim o grau e o risco aos ecossistemas. Sendo assim, a modelagem matemática é uma ferramenta para estimar e avaliar a contaminação, tanto ao verificar casos reais como feito por Yoshinari, Teramoto e Chang (2015) e Furtado et al. (2021), até na projeção de cenários hipotéticos.

Dentre os diversos contaminantes presentes no meio ambiente os metais possuem relevância dada a sua toxicidade e não serem degradáveis (CONZA, 2017). Deste modo, o presente trabalho objetiva apresentar a concentração de um metal nocivo para a saúde num recurso hídrico ao longo do tempo. Para isso, faz-se a solução numérica da equação de advecção-difusão pelo método de diferenças finitas, verificando-a mediante a comparação com a solução analítica proposta por Ogata e Banks (1961).

O modelo

A modelagem matemática da dispersão de um agente poluente é descrita pela equação de advecção-difusão, a qual é proposta por Chapra (2008) e Fletcher (1997) na sua forma unidimensional (1D), em regime transiente. Ou seja:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} - k \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \gamma C - f = 0, \quad (1)$$

onde C é a concentração do poluente (g/m^3), k é o coeficiente de difusão (m^2/s), u é a velocidade de

transporte (m/s), x é a direção (m), γ é o coeficiente de degradação e f refere-se a fontes e/ou sumidouros.

A equação (1) é composta pelos termos: transiente, advectivo e difusivo. Estes correspondem à variação temporal da concentração, ao transporte das partículas por fatores do meio e a transferência de substâncias entre diferentes sistemas, respectivamente. Além disso, as últimas duas parcelas da equação apresentam o fator de degradação e a fonte.

Com o intuito de obter a solução da equação (1) podem ser aplicados diversos métodos analíticos e/ou numéricos, como proposto por Conza (2017) e Pilatti, Rodriguez e Prolo Filho (2019) ao compararem ambas as soluções. Enquanto, Buske et al. (2017) calcula a solução analítica de um modelo vertical e Danconi, Poletti e Angelis (2013) aplica apenas o método numérico.

Método de diferenças finitas

O método de diferenças finitas é bastante presente na literatura, capaz de resolver numericamente uma equação diferencial, como feito por Scotton, Suarez e Goulart (2020) na difusão de calor, Antunes et al. (2014) para um problema de onda e Conza (2017) na dispersão de Mercúrio.

Para empregar o método das diferenças finitas faz-se necessário discretizar o domínio, devido às técnicas numéricas não abrangerem uma região contínua R , obtendo assim a sua solução em pontos. Deste modo, são selecionados alguns pontos da região para ser calculada a solução, cujo processo é chamado de discretização e o conjunto de pontos de malha, apresentados na Figura 1.

Figura 1. Região contínua e discretizada

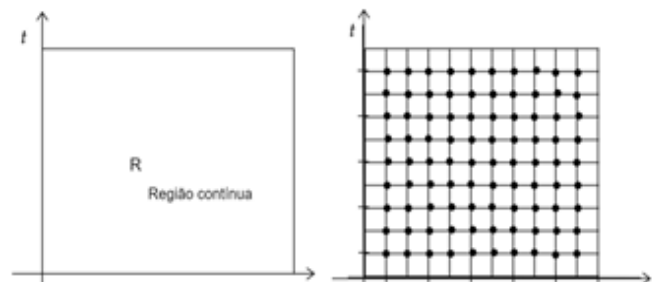


Figura 1. Fonte: Autores, 2021.

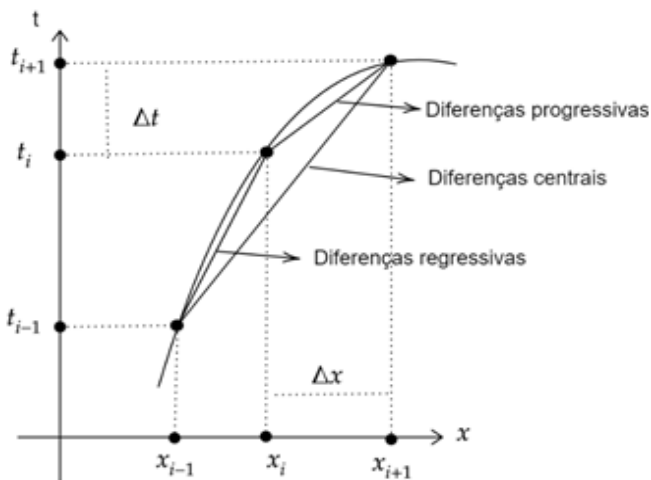
Os pontos na malha são identificados por coordenadas (i,j) , dividindo as grandezas com pontos igualmente espaçados ou não. A discretização da região

deve considerar a variação de um ponto ao outro, à medida que quanto maior a distância entre eles maior será o resíduo e problemas com convergência. No entanto, se utilizada uma malha com muitos pontos, ou seja, espaçamentos pequenos, o custo computacional será elevado. Por isso, o planejamento da malha é importante, principalmente ao serem tratados problemas grandes.

A partir de diferenças finitas faz-se a aproximação numérica das derivadas reescrevendo-as em função dos pontos da malha, por meio da expansão em Série de Taylor, como apresentado por Fortuna (2000).

As aproximações podem ser feitas de várias formas, como representado na Figura 2, relacionando a derivada no ponto i com a sua sucessora ou a sua antecessora, sendo diferenças progressivas e diferenças regressivas, respectivamente. Ou ainda, a diferença entre a derivada do ponto sucessor e antecessor de i , denominada diferenças centrais.

Figura 2. Interpretação geométrica de diferenças finitas



Fonte: Autores, 2021

O MÉTODO NUMÉRICO NA DISPERSÃO DE MERCÚRIO

Dados os pressupostos apresentados enunciando a contaminação ambiental propõe-se a modelagem da dispersão de Mercúrio, visto que “é o único metal que reconhecidamente causou óbitos em humanos em razão de contaminação pela via ambiental” (LACERDA; MALM, 2008, p.175).

A origem do Mercúrio está ligada a efluentes industriais e agrícolas, além de que em algumas

regiões podem ser encontrados em níveis naturais (LI; CAI, 2013). Além disso, dentre os metais, o Mercúrio apresenta a maior toxicidade e concentração conforme o nível na cadeia alimentar, graças ao fato de se acumular progressivamente nos ecossistemas.

Para resolvermos o problema da contaminação de Mercúrio aplica-se o método de diferenças finitas nos termos da equação (1), a partir do esquema explícito *Forward-Time Central-Space* (FTCS) (FLETCHER, 1997). Ou seja, as derivadas em relação ao espaço são dadas por diferenças centrais e na variável temporal faz-se a discretização por diferenças progressivas, na forma:

$$\begin{aligned} \left. \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right|_{(x_i, t_j)} &= \frac{C_{(x_{i+1}, t_j)} - 2C_{(x_i, t_j)} + C_{(x_{i-1}, t_j)}}{\Delta x^2} \\ \left. \frac{\partial C}{\partial x} \right|_{(x_i, t_j)} &= \frac{C_{(x_{i+1}, t_j)} - C_{(x_{i-1}, t_j)}}{2\Delta x} \\ \left. \frac{\partial C}{\partial t} \right|_{(x_i, t_j)} &= \frac{C_{(x_i, t_{j+1})} - C_{(x_i, t_{j-1})}}{\Delta t} \end{aligned} \quad (2)$$

Enquanto os termos de degradação e de fonte são escritos na forma:

$$C = \left(\frac{C_i^j + C_{i+1}^j}{2} \right) e f = \left(\frac{f_i^j + f_{i+1}^j}{2} \right). \quad (3)$$

Assim, substituindo as igualdades supracitadas, equações (2) e (3), e realizando manipulações algébricas, a fim de isolar o termo em $j+1$ ou $t+\Delta t$, obtêm-se a equação de diferenças finitas na forma explícita:

$$C_i^{j+1} = C_{i+1}^j \left(\lambda_1 - \lambda_2 - \frac{\Delta t \gamma}{2} \right) + C_{i-1}^j \left(1 - 2\lambda_1 - \frac{\Delta t \gamma}{2} \right) + \frac{\Delta t}{2} (f_i^j + f_{i+1}^j) \quad (4)$$

onde, $\lambda_1 = k \frac{\Delta t}{\Delta x^2}$ e $\lambda_2 = u \frac{\Delta t}{2\Delta x}$.

Porém, ao resolvermos o problema de forma numérica não possuímos garantia de correspondência entre a solução obtida e a real. Deste modo, segundo Fortuna (2000), o método garantirá convergência quando houver consistência e estabilidade. Quanto à consistência, refere-se ao fato da aproximação de diferenças finitas corresponder a equação diferencial, de modo que:

$$\lim_{\Delta x \rightarrow 0} \frac{C(x + \Delta x) - C(x)}{\Delta x} = \frac{\partial C}{\partial x}, \quad (5)$$

uma vez que desprezando os erros de truncamento da expansão em Série de Taylor, quanto menor o espaçamento de malha melhor será a aproximação, sendo válido para a variável espacial bem como para a temporal. E, caso a discretização não seja consistente, diz-se que ela não é mais representativa da solução da equação diferencial.

Já a estabilidade do método diz respeito ao fato de erros ou perturbações causarem modificações na solução, uma vez que se ele é estável não há influência. No caso contrário, a solução diverge, pois os módulos dos valores calculados crescerão de maneira aleatória.

O esquema FTCS é classificado por Fortuna (2000) como condicionalmente estável devido ao seu carácter explícito, de modo que ao satisfazer certa condição de estabilidade tem-se uma solução numérica estável.

Segundo em Fletcher (2000), para problemas lineares há a análise de estabilidade de Von Neumann, a qual propõe para termos difusivos que $\lambda_1 \leq \frac{1}{2}$ e para os advectivos $\lambda_2 \leq 1$. Assim, em um problema de advecção-difusão faz-se necessário considerarmos ambas. Mas, se atendermos a condição para λ_1 , logo se atende para λ_2 .

Desse modo, manipulando algebricamente a inequação, há estabilidade quando:

$$k\Delta t \leq \frac{\Delta x^2}{2} \cdot \quad (6)$$

Por fim, dizemos que a solução numérica proveniente do método converge quando C_j^i aproxima-se da solução exata $C(x, t)$, sendo estritamente necessário haver consistência para haver convergência. Mas, já a estabilidade é apenas necessária em métodos explícitos.

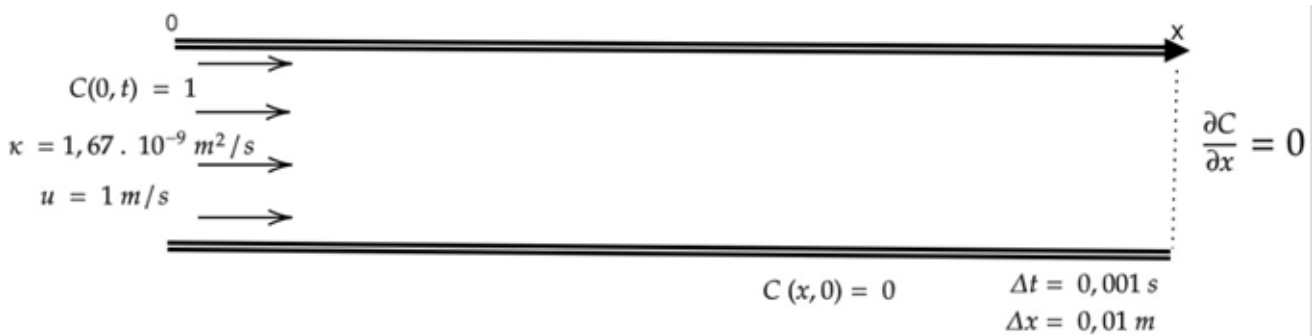
RESULTADOS E DISCUSSÃO

Os pressupostos apresentados são aplicados num ambiente aquático hipotético, cuja variação do Mercúrio se dá pela extensão (x) no tempo (t).

Para a simulação numérica utilizou-se $\Delta x = 0,01\text{m}$ e $\Delta t = 0,001\text{s}$ para estabilidade.

Enquanto, $u = 1\text{ m/s}$, $v = 0$, $f = 0$ e $k = 1,67 \cdot 10^{-9}\text{ m}^2/\text{s}$ são provenientes de Conza (2017), incluindo adaptações para correspondência com o problema 1D. O problema demanda condições iniciais e de contorno, representadas na Figura 3, possibilitando a inicialização das simulações e a delimitação do meio.

Figura 3. Caracterização da geometria e condições do modelo



Fonte: Autores, 2021

O software Scilab viabilizou a simulação numérica do problema, por isso desenvolveu-se nele um algoritmo a partir da equação (4), considerando as condições de contorno e explicitando os parâmetros.

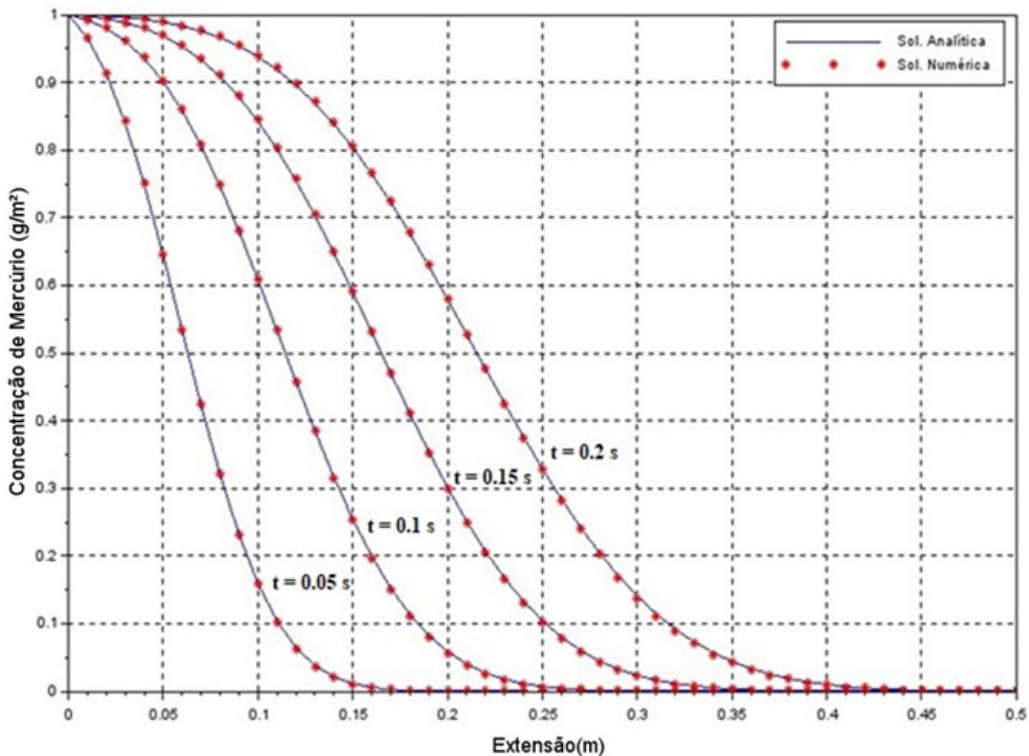
Com o objetivo de validar o resultado numérico utilizou-se da solução analítica apresentada por Ogata e Banks (1961) para a comparação. Na Figura 4 dispõe-se da comparação entre a solução analítica e a numérica, exibindo a concentração de Mercúrio ao longo da extensão em $t = 0,05; 0,1; 0,15$ e $0,2\text{ s}$.

A concentração do contaminante decresce ao longo do corpo hídrico, de modo que a concentração máxima

é obtida no contorno, em $x = 0$, e no tempo final, $t = 0,2\text{ s}$, ainda não há mercúrio em todo domínio discretizado. Com o passar do tempo tem-se ao longo da extensão o aumento na concentração de Mercúrio em cada ponto.

Agora, com a correspondência entre as soluções faz-se a simulação considerando $f = 0,5$, como proposto por Conza (2017). Na Figura 3 tem-se a dispersão de Mercúrio em dois instantes de tempo, $t = 0,1$ e $0,2\text{ s}$, onde é comparada a solução via diferenças finitas com e sem fonte.

Figura 4. Comparação entre a solução analítica e a numérica via diferenças finitas para a dispersão de Mercúrio

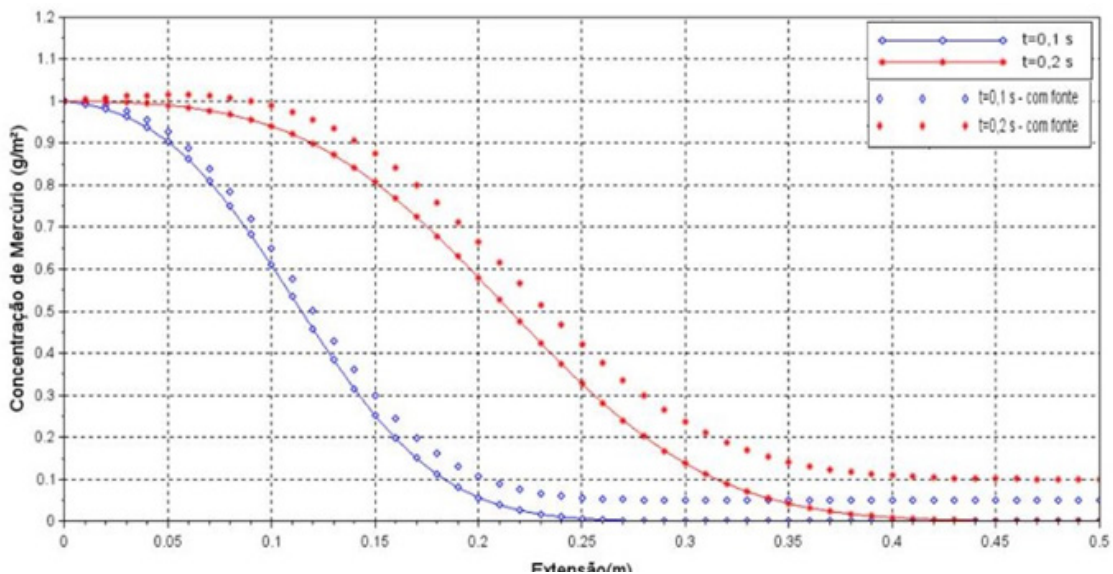


Fonte: Autores, 2021

A partir dos resultados apresentados na Figura 5, observa-se que a concentração de Mercúrio é maior ao longo da extensão do corpo hídrico, de modo que a concentração máxima do poluente não é mais em $x=0$, e sim em $x=0,05$ m.

Por fim, o método numérico de diferenças finitas descreve de forma satisfatória o fenômeno de contaminação, possibilitando estudos sobre a qualidade da água.

Figura 5. Comparação entre a solução numérica com e sem termo fonte



Fonte: Autores, 2021

CONCLUSÃO

Neste trabalho foi apresentada a solução numérica da equação de advecção-difusão unidimensional em regime transiente na modelagem da dispersão de Mercúrio, colaborando com os estudos acerca da contaminação ambiental.

A abordagem utilizada resolve a equação diferencial pelo método de diferenças finitas, sendo assim uma aproximação numérica, tendo sua validade ao compará-lo com a solução analítica disponível na literatura, atendendo as condições de estabilidade de Von Neumann.

Com a Figura 2, da concentração pela extensão, tornou-se conhecido o espalhamento de Mercúrio, possibilitando a investigação dos níveis de concentração para previsões futuras. Mediante a validade do modelo e do método numérico no algoritmo desenvolvido pelo autor, posteriormente podem ser acrescentadas dimensões ao problema e as equações governantes do escoamento, aproximando-se mais da realidade. Então, com um modelo mais realístico é possível utilizar a modelagem matemática na solução de problemas existentes na sociedade, auxiliando na tomada de decisões.

Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES).

LITERATURA CITADA

ANTUNES, A. J. M.; LEAL-TOLEDO, R. C.; SILVEIRA FILHO, O. T.; TOLEDO, E. M. Finite difference method for solving acoustic wave equation using locally adjustable time-steps. **Procedia Computer Science**, v.29, p.627-636, 2014.

BUSKE, D.; QUADROS, R. S.; OLIVEIRA, R. E.; WEYMAR, G. J.; HARTEP, F. P. Analytical solution for contaminant dispersion model in rivers and canals applying the method GILTT. **International Journal of Development Research**, v.7, p.13857-13864, 2017.

CHAPRA, S. C. **Surface water-quality modeling**. Waveland press, 2008, 844p.

CONZA, Adelaida Otazu. **Modelagem matemática do espalhamento do poluente mercúrio na água**. 2017. 68f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada) – Instituto de Matemática e Estatística, UFRGS, Porto Alegre.

DANCONI, L. A; POLETTI, E. C. C; ANGELIS, A. F. Modelagem e Simulação Numérica da Dispersão de Poluentes via Equação de Difusão-Advecção. In: Congresso de Matemática Aplicada e Computacional, 2013, Brasil. Anais do: CMAC, 2013.

FLETCHER, C. A. J. **Computational techniques for fluid dynamics 1: Fundamental an general techniques**. 2 ed. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1996, 401p.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações**. São Paulo: Edusp, v.30, 2000.

FURTADO, I. C.; RICKES, A.; ALMEIDA, T. F.; KONRADT, J.; BUSKE, D.; QUADROS, R. S.; WEYMAR, G. J. Estudo de influência de modelos difusivo e advectivo para a dispersão de poluentes no Rio Paraibuna. **Revista Ibero-Americana de Ciências Ambientais**, v. 12, n.1, p.262-275, 2021.

LACERDA, L.; MALM, O. **Contaminação por mercúrio em ecossistemas aquáticos: uma análise das áreas críticas**. Estudos Avançados, v. 22, n.63, p.173-190, 2008.

LI, Y.; CAI, Y. Progress in the study of mercury methylation and demethylation in aquatic environments. **Chinese Science Bulletin**, v.58, n.2, p.177-185, 2013.

OGATA, A.; BANKS, R. B. **A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media**. Geological survey professional paper 411-A. United States Government

Printing Office, 1961.

PILATTI, C.; RODRIGUEZ, B. D. A.; PROLO FILHO, J. F. Performance Analysis of Stehfest and Power Series Expansion Methods for Solution to Diffusive and Advective Transport Problems. **Defect and Diffusion Forum**, v. 396, p.99–108, 2019.

SCOTTON, J. W.; SUAREZ, J. M. S.; GOULART, A. G. O. Estudo numérico da difusão unidimensional transiente empregando o Cálculo Fracionário. **Revista Brasileira de Computação Aplicada**, v.12, n.1, p.95-103, 2020.

YOSHINARI, Andreia. **Estudo comparativo entre o modelo analítico de Domenico (1987) e Wexler (1992) e suas implicações no gerenciamento de passivos ambientais**. 2014. Dissertação (Mestrado em Geociências e Meio Ambiente) - Instituto de Geociências e Ciências Exatas, UNESP, Rio Claro.

YOSHINARI, A; TERAMOTO, E. H.; CHANG, H. K. Erro associado à solução aproximada de domenico em casos reais de contaminação e suas implicações para a quantificação de risco. **Águas Subterrâneas**, v.29, n.1, p.1-12, 2015.