# Simulação computacional da equação de difusão transiente aplicada à dispersão de poluentes

# Computational simulation of the transient diffusion equation applied to pollutant dispersion

**Victor Hugo Corrêa**
victorcorrea@alunos.utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

**Cosmo Damião Santiago**
cosmo@utfpr.edu.br
Universidade Tecnológica Federal do Paraná, Apucarana, Paraná, Brasil

## RESUMO

No presente trabalho apresenta-se um estudo da equação de difusão bidimensional transiente com reação química na aplicação de um caso hipotético. As hipóteses consideradas permitem reproduzir superficialmente o campo de concentração de poluentes liberadas por fontes contínuas em uma região quadrada. Este estudo é motivado pela grande atenção que especialistas têm dado ultimamente para a poluição causada pelo rápido desenvolvimento industrial e tecnológico, com sérios impactos ambientais em rios e lagos. O modelo matemático é discretizado com o Método de Diferenças Finitas – MDF, em malha uniforme, com acurácia de segunda ordem nas variáveis espaciais e primeira ordem na variável temporal. O sistema de equações algébricas é resolvido com o método Gauss-Seidel. Os resultados demonstram boa concordância com a literatura.

**PALAVRAS-CHAVE:** Poluição. Água. Poluentes. Diferenças finitas.

**Recebido:** 19 ago. 2019.

**Aprovado:** 01 out. 2019.



## ABSTRACT

The present work presents a study of the transient two-dimensional diffusion equation with chemical reaction in the application of a hypothetical case. The hypotheses considered allow superficially reproducing the concentration field of pollutants released by continuous sources in a square region. This study is motivated by the great attention that experts have lately given to pollution caused by rapid industrial and technological development, with serious environmental impacts on rivers and lakes. The mathematical model is discretized with the Finite Difference Method - MDF, in uniform grid, with second order accuracy in the spatial variables and first order in the temporal variable. The system of algebraic equations is solved with the Gauss-Seidel method. The results show good agreement with the literature.

**KEYWORDS:** Pollution. Water. Implementation. Diffusion. Numerically.

## INTRODUÇÃO

A modelagem matemática de fenômenos físicos é muito utilizada para representar problemas de engenharia por meio de equações diferençais parciais. Os modelos resultantes, quando são resolvidos, fornecem informações essenciais para auxiliar engenheiros e gestores em suas escolhas. Em geral, os modelos matemáticos são utilizados para simular fenômenos físicos porque reduzem os custos operacionais associados aos laboratórios experimentais. No âmbito da engenharia ambiental há grande preocupação com a dispersão de poluentes, tanto em canais fluviais, que são as principais fontes de recursos hídricos, quanto em superfícies de solo e atmosfera (MOREIRA e TIRABASSI, 2004). No tocante a poluição das águas, nota-se que grande parte desse impacto ambiental ocorre por conta do descarte de poluentes em rios, o que causa contaminação (chumbo, mercúrio, pesticida, cotinina, esgotos urbanos e outros) (KACHIASHVILI e MELIKDZHANIAN, 2006; DINIZ, 2003), podendo inclusive torná-la impróprio para o consumo, cuja reversão requer investimentos para tratamentos convencionais ou até mesmo avançados.

Os modelos, quando bem formulados, exercem papel fundamental em sistemas ambientais. É possível, por exemplo, quantificar as informações para que se possa entender o que ocorre no sistema que está sendo analisado, como discutido por Prestes e Meyer (2013) e Oliveira, (2015). A equação de transporte, também chamada de equação de advecção-difusão (FORTUNA, 2000), é uma das equações amplamente utilizada por técnicos para estudar a qualidade de água em rios, ou seja, uma importante ferramenta no gerenciamento e planejamento ambiental. De acordo com Moreira e Tibassi (2004) os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes são numerosos e de uma complexidade tal que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos, que se mostram, então, ser um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental. Os modelos matemáticos são capazes de descrever e interpretar os dados experimentais; administrar as liberações acidentais, avaliar, prever e mensurar as áreas de risco. Na literatura podem ser encontradas diversos trabalhos com o foco na dispersão de poluentes no meio ambiente em que é empregada a equação de advecção-difusão, seja na água, solo ou atmosfera (PRESTES e MEYER, 2013; OLIVEIRA, 2015; MOREIRA e TIRABASSI, 2004).

O foco do presente trabalho era simular superficialmente a dispersão de poluentes a partir da implementação de códigos computacionais. A equação de difusão foi utilizada na forma de um modelo transiente e um termo de reação química foi adicionado ao problema. Foram realizadas análises gráficas com o foco no transporte de propriedades físicas em uma região limitada.

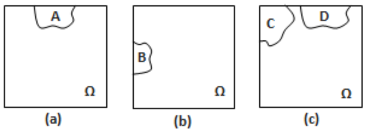
## MODELOS MATEMÁTICO E NUMÉRICO

Neste trabalho é estudado o problema de difusão bidimensional (2D) em regime transiente com reação química. Busca-se, de forma simples, simular uma situação em que é despejado material poluente em um corpo d’água. A difusão está associada ao transporte de massa que ocorre em um sistema quando nele existe um gradiente de concentração, podendo ocorrer no interior de sólidos, líquidos e gases [4]. A equação associada a este problema é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} - \mu\left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2}\right) = \kappa C \qquad (1)$$

onde $C = C(x, y, t)$ representa a concentração em um ponto de coordenadas $(x, y)$ no tempo t, $\mu$ é a difusibilidade do poluente no meio líquido (ou difusividade molecular de massa), $\kappa$ é o coeficiente de reação química. O temo $\kappa C$ mede o quanto o poluente é inserido no meio líquido ponto a ponto. Ainda, nota-se na Eq. (1) que os termos advectivos nas direções coordenadas são desprezados, o que demonstra que o modelo apresentado não é totalmente realista. As condições de contornos são do tipo Dirichlet, ou seja, são conhecidas e artificiais, visto que não se trata de problema real. O problema é resolvido em um domínio quadrado definido por Ω, conforme mostrado a Figura 1.

Figura 1 - Esquematização domínio com as regiões de concentração de poluentes. (a) concentração na vertical, (b) concentração na horizontal e (c) concentração está localizada na vertical e na horizontal.

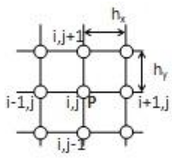



Fonte: autor.

Os pontos A, B, C e D da Figura 1 são regiões de concentração de despejos de supostos materiais poluentes. As Figuras (a), (b) e (c) ilustram os casos estudados neste trabalho.

O modelo matemático que governa o problema dado pela Eq. (1) é resolvida no domínio $\Omega = \{0 \le x \le L_x;\, 0 \le y \le L_y\}$, Figura 1, que é particionado em um número de nós dado por $N = N_x N_y$, onde $N_x$ e $N_y$ são o número de nós nas direções x e y, respectivamente. Qualquer ponto da malha é definido como $(x_i, y_j) = ((i-1)h_x, (j-1)h_y)$, com $h_x = 1/(N_x - 1)$ e $h_y = 1/(N_y - 1)$ em que $i = 1, \ldots, N_x$, $j = 1, \ldots, N_y$, $h_x$ e $h_y$ são os tamanhos dos elementos da malha nas direções $x$ e $y$, com $h_x = h_y = h$ e $P = i, j$, conforme pode ser visto na Figura 2.

Figura 2 – Esquema de diferenças finitas na malha computacional.




Fonte: autor

A equação foi discretizada com o Método de Diferenças Finitas (MDF) usando um esquema implícito no tempo em um sistema de coordenadas cartesianas com malha ortogonal e uniforme nas direções $x$ e $y$ (FORTUNA, 2000). As derivadas são aproximadas com o Esquema de Diferença Central (CDS – Central Difference Scheme) que possui acurácia de 2ª ordem. A discretização resulta em um sistema de equações algébricas que pode ser escrito como

$$a_{P,P}C_{i,j}^{n+1} + a_{P,n}C_{i,j+1}^{n+1} + a_{P,s}C_{i,j-1}^{n+1} + a_{P,w}C_{i-1,j}^{n+1} + a_{P,e}C_{i+1,j}^{n+1} = b_P \qquad (2)$$

onde os coeficientes são dados por

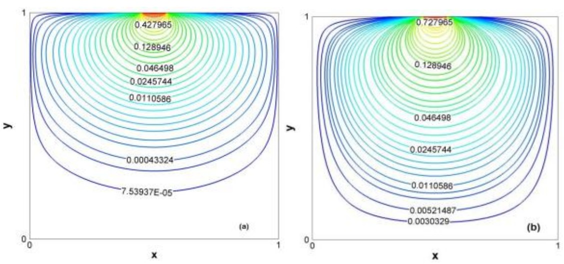
$$a_{P,e} = a_{P,w} = a_{P,n} = a_{P,s} = -\frac{\mu}{h^2}, \quad a_{P,p} = 1 + \frac{4\mu\Delta t}{h^2} \quad \text{e} \quad b_P = C_P^n(1 + \Delta t\,\kappa),$$

em que o índice *n* representa o passo de tempo. A Eq. (2) é válida para os nós internos do domínio de cálculo. Os coeficientes nos contornos são dados por $a_{P,e} = a_{P,w} = a_{P,n} = a_{P,s} = 0$, e $a_{P,p} = 1$. O termo fonte no contorno é dado por $b_P^\phi = C_{contorno}$, cujos valores são atribuídos nos locais de concentração dos supostos materiais poluentes, como mostrado na Figura 1. O sistema de equações lineares, Eq. (2) é resolvido com o método iterativo Gauss-Seidel e o processo é interrompido quando $\|R^k\|_\infty / \|R^1\|_\infty \leq 10^{-3}$ onde $R^k$ é o resíduo de $C$ na iteração *k*, e para cada passo de tempo $\max|C^n - C^{n-1}| \leq 10^{-3}$.

## RESULTADOS E DISCUSSÃO

O algoritmo foi implementado usando a linguagem de programação Matlab. Testes foram feitos alternando passos de tempo, tamanho de malha computacional, coeficientes de difusão e reação. Os resultados apresentados a seguir são apenas os mais expressivos do ponto de vista de análise e visualização. Nas simulações foram adotados $\mu = 10^{-3}$ nas duas direções, $\kappa = 10^{-3}$ e malha $257 \times 257$. O tamanho do local de concentração de poluente foi definido em 10% da largura do contorno, onde $C = 1$. As Figuras 2, 3 e 4 ilustram os resultados, com $\Delta t = 2$, em que a unidade do tempo aqui não é relevante.

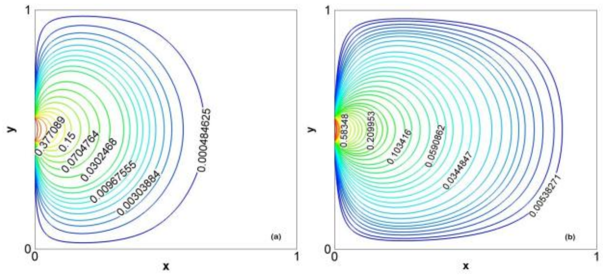
Figura 3 - Dispersão do poluente nos tempos (a) t = 6 e (b) t = 20 com a concentração horizontal.




Fonte: autor.

A Figura 3 apresenta valores da concentração ao longo da região para o caso da Fig.1(a) nos instantes de tempo t = 6 e t = 20. É possível observar nas isolinhas do campo de concentração, Figura 3(b), o efeito do tempo na dissipação do poluente, mostrando o avanço na direção do centro do domínio em relação a Figura 3(a) até atingir o estado estacionário, porém de forma regular devido a ausência do fluxo convectivo (ou advecção) na Eq. (1). Destaca-se ainda que a malha computacional utilizada $257 \times 257$ foi suficiente para mostrar que a Eq. (1) com o método aplicado aqui reproduz as características do fenômeno físico. Esta observação se aplica aos três casos analisados.

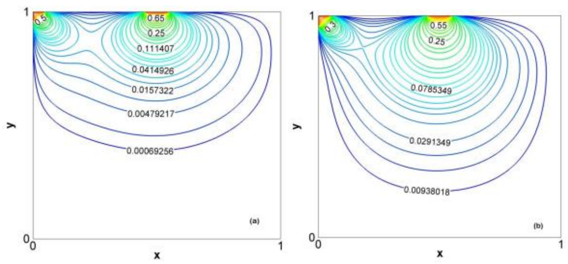
Figura 4 - Dispersão do poluente nos tempos (a) t = 6 e (b) t = 20 com a concentração vertical.




Fonte: autor.

A Figura 4 ilustra as isolinhas da dispersão na vertical ao longo da região para o caso da Fig.2(a), ou seja, com alta concentração no contorno lateral esquerdo. Aqui, também é possível observar nas isolinhas, Figura 4(b), o efeito do tempo na dissipação do poluente, mostrando que a substância se espalha de regiões de mais alta concentração para regiões de mais baixa concentração.

Figura 5 - Dispersão do poluente nos tempos (a) t = 6 e (b) t = 20 com a concentração vertical e horizontal.




Fonte: autor.

No terceiro caso, Figuras 5(a) e 5(b), procurou-se mostrar com as isolinhas a dispersão do poluente em dois pontos, no contorno superior e um dos cantos, de forma simultânea. Em todos os casos analisados, nota-se que a dispersão no contorno oposto ao despejo tende a zero no tempo final considerado, atingindo o estado permanente, que é o esperado em situações reais.

## CONCLUSÃO

Neste trabalho foi escrito um código computacional para resolver uma equação diferencial parcial 2D transiente com reação química. O modelo matemático foi discretizado com o MDF para simular a dispersão de poluente em um domínio quadrado. O sistema de equações algébrico foi resolvido com Método de Gauss-Seidel. Três casos foram analisados. Os resultados obtidos mostraram que as soluções estão muito próximas, do ponto de vista gráfico, de outros estudos disponíveis na literatura. Com o aprendizado neste trabalho, é possível avançar em pesquisas na área de métodos numéricos e simulações computacionais para problemas relacionados à dispersão de poluentes.

## AGRADECIMENTOS

Agradeço à Deus pela vida. Agradeço ao Prof. Dr. Cosmo D. Santiago, meu orientador, pela contribuição para desenvolver o estudo. Os autores agradecem ao Programa Institucional de Iniciação Científica (PIBIC) pela oportunidade do aprendizado e pela infraestrutura disponibilizada no Câmpus Apucarana.

## REFERÊNCIAS

DINIZ, G. L. **Dispersão de poluentes num sistema ar-água: modelagem, aproximação e aplicações**. Tese de doutorado. Campinas-SP. 2003

FORTUNA, Armando de O. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos – Conceitos Básicos e Aplicação**. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2000.

KACHIASHVILI, K. J. e MELIKDZHANIAN, D. I. **Identification of river water excessive pollution sources**. International Journal of Information Technology & Decision MakingVol. 05, No. 02, pp. 397-417 (2006)

MOREIRA, D.; TIRABASSI, T. **Modelo matemático de dispersão de poluentes na atmosfera: um instrumento técnico para a gestão ambiental**. Ambiente & Sociedade, vol. 7, núm. 2, julio-diciembre, 2004, pp. 159-171

OLIVEIRA, Marcelo F. **Análise do transporte de contaminantes em domínios bidimensionais utilizando o método de elementos de contorno**. Tese de Doutorado. Curitiba, 2015.

PRESTES, Manoel F. B.; MEYER, João F. C. A. **Dispersão de Material Impactante em Meio Aquático: Modelagem Matemática, Aproximação Numérica e Simulação Computacional de um Estudo de Caso**. IMECC – UNICAMP, 13.083-859, Campinas, SP, 2013.