

# **Simulação da dispersão de poluentes em meio aquático usando Álgebra de Lie**

*Jorge R. Zabadal, Anelise Haag, Richard Vasques  
e Cíntia Feijó Segatto*

## **RESUMO**

Neste trabalho é apresentado um método analítico alternativo para obter a distribuição de concentração de poluentes em meio aquático. O método é baseado no uso de transformações conformes e modelos auxiliares em microescala usando conceitos da termodinâmica estatística. Simulações numéricas são apresentadas.

## **ABSTRACT**

In this work is presented an analytical method to obtain the pollutant concentration distribution in aquatic environment. The method is based on the use of the conformal transformation and microscale auxiliary model embodies statistical thermodynamics concepts. Numeric Simulations are reported.

## **1. INTRODUÇÃO**

Os modelos numéricos usualmente empregados na simulação de processos ambientais são baseados em formulações por diferenças finitas do tipo implícito [1]. Embora estes métodos forneçam, em geral, bons resultados no que diz respeito a distribuição de concentração de poluentes em rios, lagos e oceanos, apresentam as seguintes inconveniências: utilizam grande quantidade de memória computacional e exigem tempo de processamento bastante elevado. Neste trabalho é apresentado um método analítico alternativo de resolução da equação advecção-difusão no qual a função corrente que descreve o escoamento potencial é utilizada como uma nova variável espacial. O método tem sido utilizado com sucesso na simulação de acidentes com cargas tóxicas e no planejamento de redes de esgoto [2,3]. O trabalho proposto é organizado como segue. Na seção 2 é apresentado o método de solução da equação advecção-difusão através de uma mudança de variável. Na seção 3 são apresentados modelos auxiliares utilizados na correção das distribuições obtidas, considerando o perfil batimétrico da turbulência e as oscilações da superfície. Na seção 4 são apresentados resultados obtidos pelo método proposto, utilizando o sistema de computação simbólica MAPLE V release 5.0 bem como análise dos resultados.

## **2. RESOLVENDO A EQUAÇÃO DE PROPAGAÇÃO DE POLUENTES**

A equação advectivo-difusiva bidimensional que descreve a propagação de poluentes em corpos hídricos em regime transiente é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + kC = 0, \quad (1)$$

onde  $C$  representa a concentração do poluente,  $u$  e  $v$  os componentes de velocidade do escoamento,  $D$  é o coeficiente de difusão e  $k$  é a constante de decaimento do poluente. Essa equação pode ser expressa em termos de uma nova variável  $h = h(x, y)$ .

Utilizando a regra da cadeia a fim de redefinir os operadores presentes na equação (1), obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} = h_x \frac{\partial}{\partial h} \rightarrow \frac{\partial^2}{\partial x^2} = h_{xx} \frac{\partial}{\partial h} + h_x^2 \frac{\partial^2}{\partial h^2}. \quad (2)$$

Relações análogas são obtidas para a variável  $y$ , de modo que a equação (1), reescrita em termos da nova variável  $h$ , resulta

$$\frac{\partial C}{\partial t} + [uh_x + vh_y - D \cdot (h_{xx} + h_{yy})] \frac{\partial C}{\partial h} - D \cdot (h_x^2 + h_y^2) \frac{\partial^2 C}{\partial h^2} + kC = 0. \quad (3)$$

Impondo as condições:

$$uh_x + vh_y - D(h_{xx} + h_{yy}) = 0 \text{ e } h_x^2 + h_y^2 = \text{cte} = k_0, \text{ resulta}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} - k_0 \frac{\partial^2 C}{\partial h^2} + kC = 0, \quad (4)$$

cujas soluções são imediatas

$$C(h, t) = \frac{e^{-kt}}{\sqrt{4\pi k_0 t}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-\frac{s^2}{4k_0 t}} C_0(h-s) ds. \quad (5)$$

Nessa expressão,  $C_0$  denota a distribuição inicial de concentração  $C_0(h) = C(h, 0)$ . Para um despejo puntual,  $C_0(h) = \delta(h - h_0)$ , em que  $h_0$  representa a coordenada de lançamento da carga. Nesse caso, a integração do termo à direita na equação (5) é imediata:

$$C(h, t) = \frac{e^{-kt}}{\sqrt{4\pi k_0 t}} e^{-\frac{(h-h_0)^2}{4k_0 t}}. \quad (6)$$

Para retornar às variáveis originais, é preciso explicitar  $h(x, y)$ , obtendo uma solução particular da equação

$uh_x + vh_y - D(h_{xx} + h_{yy}) = 0$  que também é solução particular de  $h_x^2 + h_y^2 = k_0$ :

$$\underbrace{uh_x + vh_y}_a = \underbrace{D(h_{xx} + h_{yy})}_a \quad (7)$$

A solução de  $uh_x + vh_y = a$  é imediata. Lembrando que  $\partial\psi/\partial y = u$  e  $\partial\psi/\partial x = -v$ , resulta  $h = \psi$  caso seja escolhido  $a=0$ . Neste caso,

$$h_{xx} + h_{yy} = \nabla^2 h = \nabla^2 \psi = 0, \quad (8)$$

onde  $h = \psi$  é a função corrente para o escoamento potencial. A segunda condição,  $h_x^2 + h_y^2 = k_0 = cte$  é equivalente a impor a condição  $u^2 + v^2 = cte$ . Então, as novas coordenadas representam o tempo e a trajetória do poluente, e a solução em termos das novas variáveis resulta em

$$C(\psi, t) = \frac{e^{-kt}}{\sqrt{4\pi k_0 t}} e^{-\frac{(\psi - \psi_0)^2}{4k_0 t}}. \quad (9)$$

A solução obtida é válida para corpos hídricos de qualquer geometria, uma vez que a nova coordenada espacial descreve a própria trajetória da corrente principal, considerando quaisquer ilhas ou acidentes geográficos eventualmente presentes no mapa do corpo hídrico.

## 2.1. Cálculo da função corrente

A função corrente para o escoamento potencial é calculada através do ajuste de uma função de variável complexa que efetua o mapeamento conforme [4] de retas horizontais em contornos irregulares. O ajuste é efetuado em quatro etapas:

- i) Ajuste das equações paramétricas dos contornos irregulares, produzindo  $x(t)$  e  $y(t)$  ;
- ii) Obtenção de

$$z(w) = x(t + i\psi) + iy(t + i\psi) = x(w) + iy(w) = g(w) = F^{-1}(z);$$

- iii) Inversão da função ajustada, resultando na obtenção de  $F(z)$ ;
- iv) Obtenção da função corrente via composição de escoamentos

$$\psi = \psi_{\text{livre}} + \text{Im}(f(z)), \quad (10)$$

onde  $\psi_{\text{livre}}$  representa a função corrente do escoamento livre -  $\psi_{\text{livre}} = U_{\infty} y$  - com  $U_{\infty}$  denotando a velocidade de escoamento correspondente.

### 3. MODELOS AUXILIARES

Embora a solução obtida na seção anterior seja bidimensional, os efeitos tridimensionais mais relevantes que regem a propagação de poluentes em meio aquático podem ser considerados através do uso de modelos auxiliares. Esses modelos são utilizados para efetuar correções na distribuição de concentração, levando em conta a turbulência, a oscilação superficial e a difusão anisotrópica, que considera as variações batimétricas do corpo hídrico.

#### 3.1. Modelo de turbulência

As componentes transversais à corrente principal do escoamento são produzidas essencialmente devido à desvios, causados pela rugosidade do leito, na trajetória do fluido. Esse desvios podem ser avaliados através da simulação de um escoamento potencial em microescala, responsável pelo surgimento das componentes flutuantes que caracterizam a turbulência e o próprio atrito em escala macroscópica. As equações que descrevem o escoamento potencial nas direções vertical e da corrente principal são dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial h} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \\ \frac{\partial w}{\partial h} - \frac{\partial u}{\partial z} = 0 \end{array} \right., \quad (11)$$

ou, em termos de função corrente,

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial h^2} + \frac{\partial^2 \psi}{\partial z^2} = 0, \quad (12)$$

lembrando que  $u = \partial \psi / \partial z$  e  $-w = \partial \psi / \partial h$ . Nessa equação a coordenada  $h$  representa a função corrente do escoamento bidimensional nas direções  $x$  e  $y$ , utilizada na seção anterior para a obtenção da função  $C(x,y,t)$ . A notação foi adotada para distinguir as funções corrente empregadas na análise. Efetuando as mudanças de variáveis:  $s = h + iz$  e  $\bar{s} = h - iz$ , a equação (12) se torna

$$\frac{\partial^2 \psi}{\partial s \partial \bar{s}} = 0, \quad (13)$$

cuja solução é imediata:  $\psi = F_1(s) + F_2(\bar{s})$ , onde  $F_1$  e  $F_2$  são funções arbitrárias. A fim de tratar o problema em meio infinito, considerando o leito do rio como a única interface sólida presente no sistema, torna-se possível escolher  $F_2 = 0$ , e determinar a função  $F_1$  aplicando uma única condição de contorno, que estabelece a geometria aproximada da rugosidade presente na interface. Aproximando a rugosidade por um perfil senoidal na forma  $\psi(h,0) = c_1 e^{ic_2 h}$ , onde  $c_1$  representa a amplitude média das irregularidades superficiais e  $c_2$  a respectiva frequência, a solução resulta

$$\psi(x, y) = \text{Re}[c_1 e^{ic_2(h+iz)}] = c_1 e^{-c_2 z} \cos(c_2 h), \quad (14)$$

uma vez que a solução deve ser real.

O modelo de turbulência é usado na correção da difusividade, e no cálculo da redissolução de sedimentos:

**3.1.1. Correção da Difusividade** - a difusividade é definida como o quociente entre o quadrado do percurso livre médio das partículas transportadas e o período médio transcorrido entre duas colisões sucessivas [5]

$$D' = \frac{\ell^2}{2\tau} = \frac{\ell}{2} \frac{\ell}{\tau} = \frac{c_1}{2} |V'|. \quad (15)$$

Nessa equação,  $|V'|$  é o módulo da componente flutuante da velocidade, calculada através do modelo de turbulência:

$$|V'| = \sqrt{u'^2 + v'^2} = \sqrt{\left(\frac{\partial \psi}{\partial y}\right)^2 + \left(-\frac{\partial \psi}{\partial x}\right)^2} = c_1 c_2 e^{-c_2 y} \quad (16)$$

$$D' = \frac{c_1^2}{2} c_2 e^{-c_2 y} \quad (17)$$

**3.1.2. Redissolução de Sedimentos** - o modelo de turbulência também é utilizado para avaliar a redissolução de sedimentos, através do cálculo da componente vertical efetiva da velocidade,

$$w = v - v_\ell, \quad (18)$$

sendo  $v_\ell$  a velocidade limite de queda e

$$v' = -\partial \psi(x, z) / \partial h = c_1 c_2 e^{-c_2 z} \cos(c_2 h) \quad (19)$$

### 3.2. Modelo de oscilação superficial

O movimento de oscilação vertical da superfície de corpos hídricos provoca transferência de massa nas direções  $x$  e  $y$ . Essa transferência produz um acréscimo significativo no coeficiente de difusão. A fim de estimar esse acréscimo, pode ser utilizado o modelo de ondas não dissipativas (hiperbólicas) [6],

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} - c^2 \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0, \quad (20)$$

cujas formas fatoradas são expressas como

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} + c \frac{\partial}{\partial z}\right) \left(\frac{\partial}{\partial t} - c \frac{\partial}{\partial z}\right) \phi = 0, \quad (21)$$

para a qual a solução geral é dada por

$$\phi = F_1(z + ct) + F_2(z - ct). \quad (22)$$

Uma vez que o sentido do deslocamento aparente da onda é irrelevante para o cálculo do coeficiente de difusão, pode-se arbitrar  $F_2 = 0$ , e aplicar condições restritivas sobre  $F_1$ .

1ª Restrição: a função deve ser periódica:

$$\varphi(y, t + T) = \varphi(y, T), \quad (23)$$

onde  $T$  é o período de oscilação (da ordem de 1 segundo).

Impondo a condição de periodicidade sobre a solução obtida, resulta

$$F_1(y + c(t + T)) = F_1(y + cT) \rightarrow \left[ e^{\lambda \frac{\partial}{\partial y}} \right] F_1(y + ct) = F_1(y + ct) \quad (24)$$

A exponencial do operador [7] pode ser expressa como Série de Taylor

$$\left[ I + T \frac{\partial}{\partial t} + \frac{T^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + \dots \right] F_1(y + ct) = F_1(y + ct), \quad (25)$$

uma vez que o período de oscilação é muito pequeno em relação aos transientes dos processos difusivo e advectivo, torna-se possível truncar a série no termo quadrático

$$I + T \frac{\partial}{\partial t} + \frac{T^2}{2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} + O(T^3) = 0. \quad (26)$$

Obtém-se, então uma equação auxiliar, que pode ser resolvida através de uma mudança de variável:

$$T \frac{\partial F_1}{\partial t} = -\frac{T^2}{2} \frac{\partial F_1^2}{\partial t^2} \xrightarrow{\partial F_1 / \partial t = g} \frac{\partial g}{\partial t} = -\frac{2}{T} g \rightarrow g = g_0 e^{-\frac{2}{T}t}, \quad (27)$$

como,  $g = \frac{\partial F_1}{\partial t}$ , temos

$$F_1 = -\frac{T}{2} g_0 e^{-\frac{2}{T}t} + F_1 = F_0 e^{-\frac{2}{T}t} + F_1 \quad (F_0, F_1, cresc). \quad (28)$$

2ª Restrição: A função deve ser limitada, o que implica em  $T = \text{Im}(T)$ , isto é,  $T$  é imaginário puro.

Assim,

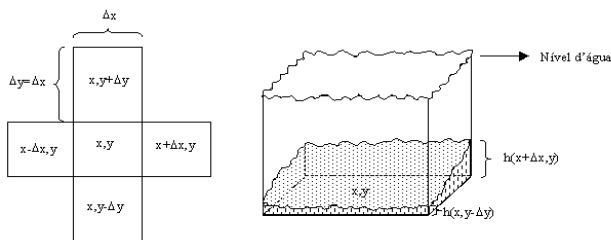
$$\varphi = k_0 + k_1 e^{ik_2(y+ct)}. \quad (29)$$

A solução é utilizada para estimar o coeficiente de difusão através do cálculo de  $\ell$  e  $T$ , tal como na seção 31.



### 3.3. Difusão anisotrópica

Em regiões nas quais existem gradientes apreciáveis de profundidade, a difusão se torna desfavorável na direção de elevação do leito do corpo hídrico. Isto ocorre porque a área transversal ao fluxo de massa diminui com a redução da profundidade local. A probabilidade de transferência de massa de um elemento de volume para outro é proporcional à área transversal à direção de propagação considerada. A figura 1 mostra um elemento de volume em coordenadas cartesianas e suas respectivas interfaces transversais, considerando a profundidade local variável.



**Fig. 1.** Áreas transversais ao fluxo de massa

A área total transversal ao fluxo de massa é dada por

$$A \approx [h(x - \Delta x, y) + h(x + \Delta x, y) + h(x, y + \Delta y) + h(x, y - \Delta y)]\Delta x$$

A fração da área transversal ocupada por uma das faces fornece a probabilidade de transferência de massa na direção correspondente:

$$X_i = p_i = \frac{A_i}{A} = \frac{h}{\sum h_i}. \quad (30)$$

Essa probabilidade  $p_i$  é utilizada como fator multiplicativo para efetuar correções na distribuição de concentração junto à elevações (bancos de areia, pedras ou sedimentos):

$$C^*(r) = C(r) \prod p_i = C(r) e^{\int \ln(p(r)) dr}. \quad (31)$$

Nessa equação,  $C(r)$  representa o perfil radial da concentração a partir de um ponto de referência, sem considerar variações locais de profundidade, e  $p(r)$  é a probabilidade de transferência de massa ao longo da linha radial que une o ponto de referência a um ponto arbitrário localizado sobre a elevação. O termo integral presente no termo à direita na equação representa um produto de probabilidades levado ao limite:

$$\prod p_i = e^{\ln \prod p_i} = e^{\sum \ln p_i} \rightarrow e^{\int \ln(p(r)) dr} \quad (32)$$

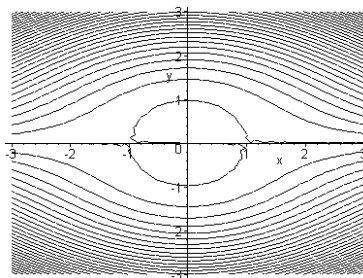
Este modelo simplificado fornece resultados concordantes com os obtidos através da solução da equação que contempla, de forma rigorosa, a difusão anisotrópica. A equação original, dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} - \iint k(x, y, v, u', v') C(x, y, u', v') du' dv' + kC = 0 \quad (33)$$

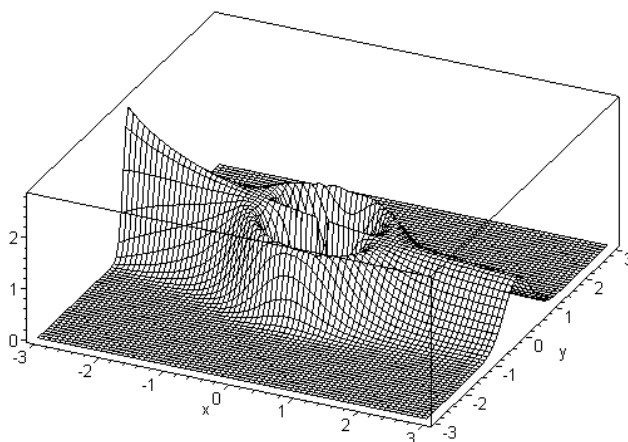
requer elevado tempo de processamento para sua resolução.

#### 4. RESULTADOS

A fim de comprovar a adaptabilidade do método proposto à geometria do domínio, foi efetuada a simulação de um despejo puntual unitário em regime permanente à montante do escoamento em torno de um obstáculo cilíndrico. A figura 2 mostra as isolinhas para a função corrente correspondente ao escoamento potencial em torno de um cilindro, utilizadas como novas coordenadas para o sistema. A função corrente para o escoamento potencial, obtida através da transformação conforme  $w = z + 1/z$ , é dada por  $\psi = y - y/(x^2 + y^2)$ . A figura 3 mostra a respectiva distribuição de concentração em regime estacionário. Note-se que o comportamento qualitativo da solução é consistente com a geometria do escoamento principal. Além disso, os valores numéricos da concentração reproduzem corretamente os perfis experimentais para parâmetros conservativos e não-conservativos, tais como coliformes, fosfatos, OD e DBO [2-3].



**Fig. 2:** Isolinhas da função corrente



**Fig. 3:** Distribuição de concentrações resultante

## 5. CONCLUSÃO

A distribuição da concentração obtida pelo método proposto reproduz, com razoável exatidão, a propagação de poluentes conservativos e não conservativos em regime transiente. em particular, o método se mostra bastante eficiente na determinação de concentrações de coliformes, fosfato, nitrogênio, benzeno, tolueno, metanol e metil tercbutil éter (MTBE). O tempo de processamento resultante torna viável a aplicação do sistema na simulação de acidentes com cargas tóxicas e no planejamento de redes de esgoto.

## 6. REFERÊNCIAS

- [1] Chapra, S. - Har03: Water Pollution Simulation System. Environmental Protection Agency, New York, 1974
- [2] Zabadal, J.R.S.: Approximate Solutions For Two Dimensional Problems In Water Pollution - Component Suppression Schemes. *Revista Ciência e Natura*, pp. 25 - 36, 2000.
- [3] Hoffmann, C., Lersch, E., Soares, P. Staruk, J., Zabadal, J.: Revista ECOS Pesquisa, edição especial - Prêmio Mercocidades 1998 - Departamento Municipal de Água e Esgotos, Porto Alegre (1999).
- [4] Churchil, R. : Variáveis Complexas e suas Aplicações. MacGraw-Hill, New York, 1975.
- [5] Reichl, L.: A Modern Course In Statistical Physics. Edward Arnolds, London, 1980.
- [6] Witham, G.: Linear And Nonlinear Waves. John Wiley - Sons, New York, 1974.
- [7] Dattoli, G., Giannessi, L., Quattromini, M. and Torre, A.: Exponential operators, operational rules and evolution problems. II *Nuovo Cimento*, 113B(6), pp. 699-710, 1998.

JORGE R. ZABADAL<sup>1</sup>

ANELISE HAAG<sup>2</sup>

RICHARD VASQUES<sup>3</sup>

CÍNTIA FEIJÓ SEGATTO<sup>4</sup>

<sup>1</sup>Departamento de Engenharia Nuclear

<sup>2</sup>Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada

<sup>3,4</sup>Departamento de Matemática Aplicada

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

Porto Alegre, RS - Brasil

jorge.zabadal@ufrgs.br

anelise@yahoo.com.br

richardvasques@yahoo.com.br

cynth@mat.ufrgs.br