DEFINIÇÃO DO COEFICIENTE DE DIFUSÃO PARA PROPAGAÇÃO DE POLUENTES EM ÁGUAS RASAS EMPREGANDO UM MODELO BASEADO EM SOLUÇÕES EXATAS PARA A EQUAÇÃO DE KORTEWEG-DE VRIES

RENATO GARCIA[1], JORGE ZABADAL[1], VINICIUS RIBEIRO[2], CRISTIANA POFFAL[3]
[1] Professor da Universidade Estadual do Rio Grande do Sul, Doutor em Engenharia Mecânica - renatolgarcia@uol.com.br,
[1] Professor da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Doutor em Engenharia Mecânica - jorge.zabadal@ufrgs.br
[2] Professor do Centro Universitário Ritter dos Reis, Doutor em Ciência da Computação - vinicius@uniritter.edu.br
[3]Professora da FURG, Doutora em Engenharia Mecânica - poffal@gmail.com

RESUMO

A dispersão de poluentes no meio aquático decorre dos processos de advecção e difusão, cuja propagação se produz no sentido longitudinal e transversal ao escoamento do corpo hídrico. A contribuição associada ao processo difusivo, regido pela lei de Fick, é proporcional ao coeficiente de difusão, cujo valor deve ser estimado. Neste trabalho é obtida uma solução analítica para a equação de Korteweg-de-Vries (KdV) a fim de avaliar o coeficiente de difusão baseado na ação de ondas de gravidade em corpos hídricos. O método proposto consiste na transformação da equação KdV em sua forma original em uma equação diferencial ordinária cuja solução é obtida através de integração. Quando uma onda solitária ou um trem de ondas é produzido na superfície de um rio, uma determinada quantidade de água é transferida a partir das vizinhanças, transportando poluentes por advecção. Contudo, uma vez que as oscilações são alternantes ao longo do corpo hídrico, e o comprimento de onda típico das vagas é muito inferior à distância entre margens, esse processo de advecção pode ser considerado um mecanismo de difusão isotrópica, quando observado em escala geográfica. Desse modo, a difusividade mássica pode ser estimada a partir de valores locais para o laplaciano e a derivada temporal da concentração, obtidos através de um balanço de massa efetuado em torno da onda solitária. Ao final, são apresentados resultados numéricos para a situação do Lago Guaíba, em Porto Alegre.

PALAVRAS-CHAVE: modelo de dispersão de poluentes, equação KdV, equações diferenciais

ABSTRACT

MASS DIFFUSIVITY ESTIMATION FOR SHALLOW WATERS USING EXACT SOLUTIONS FOR THE KORTEWEG-DE-VRIES EQUATION

Pollutant dispersion in rivers occurs as a consequence of diffusion and advection both transversal and longitudinal dretions of the flow. The contribution related to the diffusion process, ruled by Fick´s law, is proportional to diffusion coefficient, which must be estimated. In this work a new analytical solution to the Korteweg-de-Vries equation is obtained, in order to evaluate the increase in the mass diffusivity due to the action of gravity waves along water bodies. The proposed method consists in mapping the original KdV equation into an ordinary differential one whose solution is obtained by integration. When a soliton or a wave packet is produced on the surface, a certain amount of water is transferred from the neighborhoods, carrying the pollutants by means of advection transport. However, since the oscillations are alternant along the water body, and the typical wavelength of the packets is much smaller than the distance between margins, this advection process can be regarded as an isotropic diffusion mechanism, when observed at a geographic scale. Hence, the mass diffusivity due to the gravity waves can be estimated from the local values for the laplacian and the time derivative of the concentration distribution, obtained through a mass balance in a region around the soliton. Numerical solutions are presented.

KEYWORDS: pollutant dispersion model, KdV Equation, differential equations.

1 - INTRODUÇÃO

A propagação de poluentes em corpos hídricos tem sido efetuada utilizando modelos uni e bidimensionais advectivos-difusivos (McCUTCHEON, 1990), mesmo para os casos nos quais a profundidade dos corpos hídricos é relativamente elevada. Isso ocorre porque, em geral, o campo de velocidades é medido a pequenas distâncias da lâmina d´água. Além disso, mesmo considerando a estratificação desse campo em relação à coordenada de cota, é sabido que a difusão isotrópica por ondulação de superfície constitui o efeito preponderante dessa estratificação e o motivo da inclusão da componente de velocidade na coordenada z no modelo advectivo-difusivo. Na prática, isso significa que, lançando mão de um modelo bidimensional no qual o coeficiente de difusão seja corrigido levando em consideração o efeito das ondas de gravidade, torna-se possível obter resultados tão representativos do cenário físico em estudo quanto aqueles resultantes de modelos tridimensionais. Esse resultado é de fundamental importância para a redução do tempo de processamento, necessário para efetuar a simulação da propagação de poluentes em problemas originalmente tridimensionais via métodos numéricos. Ocorre que o tempo de processamento requerido pelas formulações numéricas é consideravelmente elevado (CARNAHAM, 1990; GREENSPAN & CASULLI, 1988; ORTEGA & POOLE, 1981), e mesmo a aplicação de formulações analíticas eventualmente tornam o processo de simulação ainda computacionalmente oneroso (McCUTCHEON, 1990; BLUMAN & KUMEI, 1989; IBRAGIMOV, 1995; OLVER, 2000; STRANG, 1986; WHITHAM, 1999; ZABADAL, 2005; ZABADAL, 2006; ZWILLINGER, 1998). Para exemplificar o argumento, utilizando o método explicito

em diferenças finitas para simular a propagação de poluentes no Lago Guaíba, discretizando o corpo hídrico em cerca de 10.000 elementos, o tempo médio de processamento requerido resulta aproximadamente 48 horas (simulações realizadas empregando Intel Pentium T4200 Dual Core e 2 GB de memória RAM, 2 GB de memória e 80 GB de disco rígido).

O Lago Guaíba, situado na foz do rio Jacuí, junto à região metropolitana de Porto Alegre, é um corpo hídrico tipicamente bidimensional, uma vez que sua extensão longitudinal e a distância entre suas margens são várias ordens de grandeza superiores à sua profundidade em qualquer ponto considerado. Nesse manancial, a dispersão de fosfato não pode ser adequadamente representada quando o valor do coeficiente de difusão é estimado a partir de modelos de turbulência ou outros métodos usualmente empregados para tal fim. Isso ocorre porque a difusão é intensa mesmo em regiões relativamente estagnadas, onde esses modelos prescrevem baixos valores para o coeficiente de difusão. A utilização de um modelo tridimensional para avaliar o efeito da difusão isotrópica por ondulação de superfície não é interessante, pois resultaria num tempo de processamento demasiado, tendo em vista a necessidade de estratificação de um domínio extenso e de geometria complexa. Assim, a melhor alternativa é a simulação bidimensional do processo advectivo-difusivo e o emprego de um modelo de ondas de gravidade para estimar o coeficiente de difusão.

O modelo proposto permite estimar a contribuição da transferência de massa por difusão isotrópica devido à formação de protuberâncias e depressões na superfície de corpos hídricos. Ao longo do desenvolvimento do trabalho, será mostrado que o coeficiente de difusão resultante é cerca de 400 vezes superior ao valor do coeficiente clássico da lei de Fick, cujo principal mecanismo subjacente a ser considerado corresponde ao movimento browniano. Também será calculado um coeficiente de difusão para o Lago Guaíba, baseado no modelo apresentado, a partir das características das suas ondulações superficiais.

O presente trabalho está estruturado da seguinte forma: na seção 2, são obtidas soluções analíticas para a equação de Korteweg-de Vries (KdV) em sua forma unidimensional; na seção 3, essas soluções são empregadas para estimar a difusividade mássica correspondente à ação das ondas de gravidade e a seção 4 apresenta resultados numéricos para o coeficiente de difusão no Lago Guaíba, bem como mapas ilustrativos da dispersão de fósforo associados a coeficientes de

difusão estimados pelo modelo de turbulência e pelo modelo proposto; a seção 5 apresenta conclusões sobre os resultados obtidos.

2 – MATERIAIS E MÉTODOS: soluções exatas para a equação KdV

A equação KdV foi deduzida em 1895, por Diederik Johannes Korteweg e Gustav de Vries em 1895 (WHITHAM, 1972),a partir das equações de Navier-Stokes, com o intuito de estimar a amplitude, a freqüência e o número de onda das vagas produzidas pela ação do vento e da gravidade na superfície de corpo híbridos de baixa profundidade em relação à distância entre margens.

Embora já existam na literatura soluções exatas para a equação KdV (POLYANIN & ZAITZEV, 2003), essas soluções não são adequadas para efetuar o cálculo do respectivo coeficiente de difusão, pelo fato de exigirem a avaliação de integrais numéricas.

A equação KdV unidimensional dada por

$$f_t + f_{xxx} + 6.f.f_x = 0 \qquad (1)$$

pode ser facilmente convertida em uma equação diferencial ordinária através da seguinte mudança de variáveis:

$$u = a_0 + a_1.x + a_2.t = 0 \qquad (2)$$

Reescrevendo a equação (1) em termos da nova variável u, vem

$$a_2.\frac{df}{du} + a_1^3.\frac{d^3 f}{du^3} + 6.a_1.f.\frac{df}{du} = 0 \qquad (3).$$

Nessa equação, as derivadas presentes em (1) foram redefinidas por meio da regra da cadeia.. Essa equação pode sofrer uma redução de ordem através de integração direta. Integrando a equação (2) em u, resulta

$$a_2 . f + a_1^3 . \frac{d^2 f}{du^2} + 3.a_1 . f^2 + a_3 = 0 \quad (4).$$

Reagrupando as constantes, a equação (4) pode ser escrita como

$$\frac{d^2 f}{du^2} + c_1 . f^2 + c_2 . f + c_0 = 0 \quad (5).$$

Multiplicando todas as parcelas por 2*df/du, e integrando novamente em relação a u, essa equação sofre nova redução de ordem

$$\left(\frac{df}{du}\right)^2 + \frac{2}{3} . c_1 . f^3 + c_2 . f^2 + 2.c_0 . f + c_4 = 0 \quad (6).$$

A equação (6) admite soluções exatas expressas em termos de funções racionais:

$$f = k_0 + \frac{k_1}{u} + \frac{k_2}{u^2} \quad (7).$$

Utilizando (2) para reescrever (7) em termos das variáveis originais, obtém-se

$$f = k_0 + \frac{k_1}{a_0 + a_1 x + a_2 t} + \frac{k_2}{a_0 + a_1 x + a_2 t^2} \quad (8).$$

De fato, substituindo a função dada por (8) na equação (1), são obtidas relações entre os parâmetros presentes nessa expressão

$$k_0 = \frac{-a_2}{6a_1} \quad (9)$$

$$k_2 = -2a_1^2 \quad (10)$$

Assim, a solução exata para a equação KdV expressa em termos de funções racionais assume a forma

$$f\ x,t\ = -\frac{a_2}{6a_1} + \frac{2a_1^2}{a_0 + a_1 x + a_2 t^2} \quad (11).$$

Essa solução será utilizada para estimar a quantidade de água deslocada pela formação das vagas entre um elemento de volume e suas vizinhanças. Desse modo, podem-se obter valores médios ou locais para o respectivo coeficiente de difusão.

3 - RESULTADOS OBTIDOS: cálculo da difusividade mássica

A fim de estimar o coeficiente de difusão, torna-se necessário avaliar a quantidade de água. O volume de água deslocado pela formação de uma vaga é obtido através da integração da amplitude correspondente, sendo utilizada no cálculo do volume do respectivo sólido de revolução. Para tanto, a função f definida por (11) deve ser expressa em função da variável radial, em substituição à variável x

$$v(r,t) = \int 2\pi r f(r,t)\, dr \qquad (12).$$

Substituindo f(r,t) pela expressão correspondente na equação (11), a integral resulta imediata:

$$v = 4\pi\left(-\frac{r^2 a_2}{12 a_1} - \frac{2a_0}{a_0 + a_1 r + a_2 t} - \frac{2a_2 t}{a_0 + a_1 r + a_2 t} - 2\ln\ a_0 + a_1 r + a_2 t \right) \qquad (13).$$

Esse volume é deslocado em uma região correspondente ao raio da vaga em um intervalo de tempo igual à metade do seu período de oscilação. Desse modo, a vazão transferida de um elemento de volume situado abaixo da vaga correspondente para suas vizinhanças imediatas é dada por

$$Q = 4\pi\left(-\frac{r^2 a_2}{12 a_1} - \frac{2a_0}{a_0 + a_1 r + \frac{a_2\tau}{2}} - \frac{2a_2\tau}{a_0 + a_1 r + \frac{a_2\tau}{2}} - 2\ln\left(a_0 + a_1 r + \frac{a_2\tau}{2} \right) \right)$$

$$-4\pi\left(-\frac{2a_0}{a_0 + \frac{a_2\tau}{2}} - \frac{2a_2 t}{a_0 + \frac{a_2\tau}{2}} - 2\ln\left(a_0 + \frac{a_2\tau}{2} \right) \right) \qquad (14)$$

, onde τ representa o período de oscilação da vaga e r_0 seu raio. Conseqüentemente, a vazão mássica de poluente transferida pelo deslocamento desse volume de água vale

$$m = \left(4\pi \left(-\frac{r^2 a_2}{12 a_1} - \frac{2a_0}{a_0 + a_1 r + \frac{a_2 \tau}{2}} - \frac{2a_2 \tau}{a_0 + a_1 r + \frac{a_2 \tau}{2}} \right) \right. \qquad -2\ln\left(a_0 + a_1 r + \frac{a_2 \tau}{2} \right)$$

$$\left. -4\pi \left(-\frac{2a_0}{a_0 + \frac{a_2 \tau}{2}} - \frac{2a_2 t}{a_0 + \frac{a_2 \tau}{2}} - 2\ln\left(a_0 + \frac{a_2 \tau}{2} \right) \right) \right) C \quad , \qquad (15)$$

onde *C* é a concentração de poluente.

Para o Lago Guaíba, considerando-se condições típicas de vento, os parâmetros que definem o formato das ondulações superficiais, presentes na equação (11), correspondem aos seguintes valores:

a_0 = 3.1821

a_1 = 1

a_2 = -1.185.

Esses valores foram obtidos a partir da amplitude máxima da oscilação que vale aproximadamente 0.05 m, período de oscilação τ de aproximadamente 0,5 segundos, e raio de 0.5 m.

Supondo unitária a concentração de poluente no interior do elemento de volume que se encontra abaixo da vaga, a concentração nas vizinhanças, depois de transcorrido o período de uma oscilação, é igual a 0.2729 kg/cm^3.

Desse modo, torna-se possível estimar os valores locais para o laplaciano da concentração e para a derivada primeira da concentração em relação ao tempo. O laplaciano é definido como a diferença entre o valor central da concentração e o seu valor médio, nas vizinhanças:

$$\nabla^2 C = 1 - 0.2729 = 0.7271 \, . \qquad (16)$$

A derivada temporal, por sua vez, pode ser estimada através de uma diferença ascendente de primeira ordem:

$$\frac{\partial C}{\partial t} \sim \frac{1-0.7271}{\tau} \tag{17}$$

Finalmente, o coeficiente de difusão médio é definido como o quociente entre a derivada temporal e o laplaciano:

$$D = \frac{\frac{\partial C}{\partial t}}{\nabla^2 C} = 0.19\, m^2/s \tag{18}$$

O balanço de massa correspondente fornece valores aproximados de 0.72 e 0.13 respectivamente para o laplaciano e a derivada temporal. Assim, o coeficiente de difusão resulta 0.19 m^2/s. Essa definição foi obtida diretamente da equação de difusão, assumindo *a priori* que a contribuição para o coeficiente de difusão devido ao movimento browniano é desprezível.

A partir do modelo formulado, o coeficiente de difusão para um corpo hídrico arbitrário pode ser correlacionado com a amplitude, o raio e a freqüência de oscilação das vagas. Assim, campanhas de coleta de dados, realizadas ao longo do corpo hídrico em estudo, permitem determinar as características das vagas para cada condição típica de vento e, conseqüentemente, os parâmetros a_0, a_1 e a_2 associados a cada uma delas. A partir desses parâmetros podem ser obtidos os valores correspondentes para o coeficiente de difusão em qualquer corpo hídrico cuja profundidade é desprezível em relação à distância entre margens e o comprimento característico.

4 - RESULTADOS OBTIDOS E DISCUSSÃO

O coeficiente de difusão calculado com base no método proposto resultou em 0,19 m^2/s, para o Lago Guaíba. A contribuição relativa ao movimento browniano é

desprezível, pois, utilizando a definição do coeficiente de difusão em Mecânica Estatística [14]:

$$D = \frac{l^2}{2\tau} \qquad (19).$$

Assim, para o movimento browniano, l vale aproximadamente 10^{-10} m e τ ~ 10^{-17}s, resultando em D ~ 5 .10^{-4} m^2/s. O valor obtido é cerca de três ordens de grandeza inferior ao coeficiente de difusão estimado pelo modelo proposto e pelos métodos usualmente empregados para tal fim, indicando que a estimativa do coeficiente de difusão deva ser baseada nas características hidrodinâmicas do Lago Guaíba.

Contudo, a idéia de interação baseada nas colisões elásticas entre partículas pode ser transporta para a escala macroscópica. Nessa perspectiva, as vagas produzidas pela oscilação do corpo hídrico podem ser consideradas, em escala geográfica, como partículas sujeitas ao movimento browniano e a equação (19) pode ser aplicada, bastando, para tanto, considerar o percurso livre médio (l) igual a *r* e o período entre duas colisões sucessivas (τ) igual ao próprio período de oscilações das vagas (GARCIA, 2009). Desta forma, pode ser obtida outra estimativa para o coeficiente de difusão quando se considera um mecanismo similar ao movimento browniano em escala geográfica. Aplicando a equação (19) para o Lago Guaíba, obtem-se:

$$D = \frac{l^2}{2\tau} = \frac{0,5\text{m}^{\ 2}}{2.0,5\text{s}} = 0,25\ \text{m}^2/\text{s} \qquad (20)$$

A fim de obter uma melhor visualização da influência do valor de D na dispersão de poluentes no Lago Guaíba, são apresentados abaixo mapas relativos à concentração de fosfato na região do Lami, na zona sul de Porto Alegre.

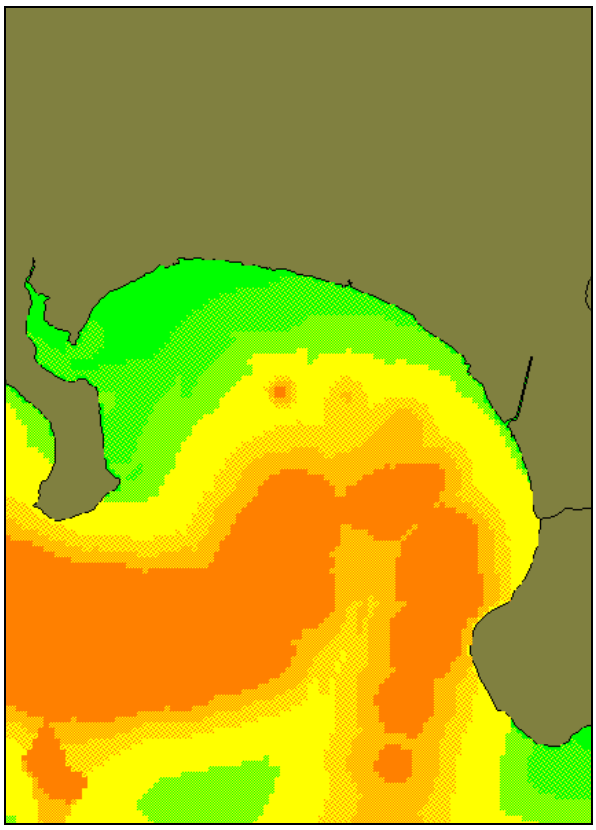


Figura 1.a Concentração de fosfato para D = 0,19

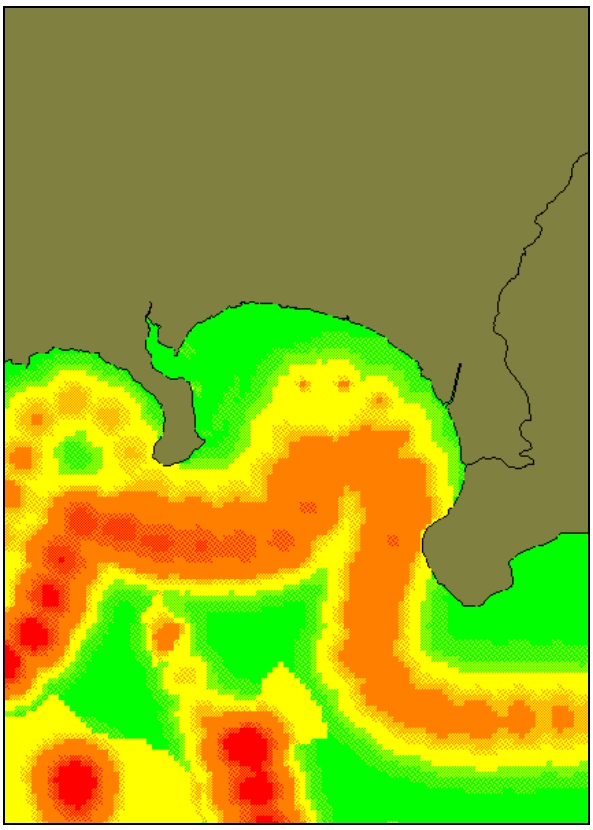


Figura 1.b Concentração de fosfato para D = 0,08

Legenda: Fosfato (mg/L)

Até 0,08	Entre 0,08 e 1
Entre 1 e 2	Entre 2 e 5
Entre 5 e 10	Acima de 10

As figuras correspondem à simulação bidimensional do processo advectivo-difusivo, sendo que o ilustrado na FIGURA 1.b corresponde a um coeficiente de difusão igual a 0,08m^2/s, estimado via modelo de turbulência (FERNANDEZ, 2007); e, o da FIGURA 1.a, ao valor de 0,19 m^2/s, conforme cálculo descrito na seção 3. Isto porque, os mapas produzidos a partir dos valores de D calculados neste trabalho (0,19 m^2/s e 0,25 m^2/s) são praticamente idênticos.

O tempo médio de processamento requerido para a obtenção das soluções apresentadas nas FIGURAS 1.a e 1.b é de, aproximadamente, 5 minutos (novamente, realizadas simulações empregando Intel Pentium T4200 Dual Core e 2 GB de memória RAM, 2 GB de memória e 80 GB de disco rígido).

O desvio quadrático médio entre os valores de concentração de fosfato calculados e os dados experimentais obtidos em campanhas de coleta realizadas junto ao Departamento Municipal de Águas e Esgotos de Porto Alegre durante o período entre os anos de1991 e 2003 é da ordem de 23%, na FIGURA 1.b. Por sua vez, o desvio quadrático médio correspondente é da ordem de 10%, na FIGURA 1.a. Além disso, os resultados obtidos com a utilização do coeficiente de difusão baseado no modelo de turbulência, considerando toda a extensão do Lago Guaíba, apresentam menor desvio frente aos dados experimentais apenas em locais onde o escoamento é relativamente rápido; sendo que, adotando o coeficiente de difusão baseado no método proposto neste artigo, o desvio é relativamente uniforme ao longo de toda a extensão do corpo hídrico. Uma vez que a oscilação superficial produz difusão isotrópica consideravelmente mais intensa do que a turbulência local, eventuais variações espaciais do coeficiente de difusão podem ser desprezadas.

5 - CONCLUSÕES

Inicialmente, cabe ressaltar que a proximidade dos valores obtidos pelo modelo proposto e pelo modelo de difusão baseado num mecanismo similar ao movimento browniano em escala geográfica, 019 m^2/s e 0,25 m^2/s, respectivamente, sugere que as vagas podem ser consideradas, de maneira aproximada, partículas independentes que obedecem a um modelo de interação baseado em colisões elásticas.

Assim, uma vez que os valores obtidos para o coeficiente de difusão via modelo proposto e via modelo browniano, em escala geográfica, são uma ordem de grandeza superior ao valor estimado através de modelos de turbulência, e, tendo em vista que os resultados obtidos neste trabalho apresentam menor discrepância frente aos valores experimentais do que aqueles correspondentes ao emprego de um modelo de turbulência; é possível afirmar que o principal mecanismo responsável pela difusão do poluente não é a turbulência, mas a transferência de massa através da oscilação superficial. Tal afirmação é corroborada pelo fato de que o coeficiente de difusão calculado a partir de modelos de turbulência resulta relativamente elevado apenas em regiões onde o escoamento é rápido, que, no caso do Lago

Guaíba, corresponde às imediações do canal de navegação e ao braço oeste do delta do rio Jacuí.

Quando se utiliza um coeficiente de difusão calculado via modelo de ondas de gravidade é possível visualizar uma maior homogeneização das concentrações de fosfato na região do Guaíba analisada. Por sua vez, o mapa correspondente a um coeficiente difusão estimado via modelo de turbulência apresenta-se pontilhado de regiões de concentrações elevadas, indicando, aparentemente, uma acentuada estagnação das águas nessa região. Isto não é compatível com a situação real do Guaíba, que, mesmo em regiões onde o campo de velocidades apresenta valores baixos, a ondulação superficial propicia a difusão isotrópica de poluentes.

AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o apoio fornecido pelo Centro Universitário Ritter dos Reis.

REFERÊNCIAS

BLUMAN, G.W.; KUMEI, S. *Symmetries and Differential Equations.* New York: Springer-Verlag, 1989.

CARNAHAM, J. *Applied Numerical Methods.* New York: McGraw-HiII, 1990.

FERNANDEZ, L. C. “Simulação da propagação de poluentes utilizando transformação de Bäcklund – modelo bidimensional”, M.Eng. thesis, PROMEC/UFRGS, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

GARCIA, R.L. “Soluções exatas para problemas de dispersão de poluentes – modelo tridimensional”, PhD Eng. thesis, PROMEC/UFRGS, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.

GREENSPAN, D.; CASULLI, V. *Numerical Methods for Applied Mathematics*. Redwood: Addison-Wesley, 1988.

IBRAGIMOV, N.H. *CRC Handbook of Lie Group Analysis of Differential Equations: Applications in Engineering and Physical Sciences*. Boca Raton, FL: CRC Press, 1995.

McCUTCHEON, S. *Water Quality Modeling: Transport and surface exchange in rivers.* Boca Raton, FL: CRC, 1990.

OLVER, P. J. *Applications of Lie Groups to Differential Equations*. New York: Springer-Verlag, 2000.

ORTEGA, J.; POOLE, W. *Numerical methods for differential equations*. Marshfield: Pitman Publishing: 1981.

POLYANIN, A. D.; ZAITSEV, V. F. *Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations*. Boca Raton, FL: CRC Press, 2003.

REICHL, J. *A modern course in statistical physics*. Hoboken, NJ: Wiley-Interscience, 1998.

STRANG, G. *Introduction to applied mathematics*. Wellesley: Wellesley Cambridge Press, 1986.

WHITHAM, G. B. *Linear and Nonlinear Waves*. New York: Wiley-Interscience, 1999.

ZABADAL, J. R.; POFFAL, C.; LEITE, S. Q. B., "Closed form solutions for water pollution problems," *Latin American Journal of Solids and Structures*, v. 3, p. 377-392, 2006.

ZABADAL, J. R.; VILHENA, M. T.; LEITE, S. Q. B.; POFFAL, C. "Solving unsteady problems in water pollution using Lie symmetries", *Ecological Modeling*, v. 186, p. 271-279, 2005.

ZWILLINGER, D. *Handbook of Differential Equations*. Boston: Academic Press, 1998.