

ESTUDO NUMÉRICO DA DINÂMICA DE DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS POR DIFUSÃO-CONVECÇÃO



<https://doi.org/10.22533/at.ed.569112531036>

Data de aceite: 22/09/2025

João Victor Tovany Soares da Silva

Faculdade de Biotecnologia, Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil

Matheus Bastos do Carmo

Faculdade de Biotecnologia, Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil

Waldecléia Queiroz da Costa

Faculdade de Biotecnologia, Instituto de Ciências Biológicas, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil

Miguel Fernando Saraiva Maia

Faculdade de Engenharia Química, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil

Ana Paula Souza de Sousa

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil.

Haiany Beatriz Saraiva Lima

Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil.

Diego Cardoso Estumano

Laboratório de Biologia Computacional, Centro de Computação de Alto Desempenho, Universidade Federal do Pará, Belém – PA, Brasil

RESUMO: Os rios desempenham um papel fundamental na manutenção do equilíbrio ecológico e na preservação da vida na Terra, uma vez que integram grandes reservatórios aquáticos que abrigam uma rica biodiversidade. No entanto, esse equilíbrio pode ser comprometido pela dispersão de poluentes, que consiste no espalhamento natural e aleatório de substâncias contaminantes, pelo movimento do rio e pela presença de fontes poluidoras nesses ambientes. Nesse contexto, a modelagem surge como uma ferramenta que transforma esse problema físico em formulações matemáticas, com o fito de simular esse fenômeno e compreender os diversos cenários que podem surgir a partir dele. Fundamentado nisto, este estudo utilizou a equação de difusão-convecção e termo fonte de poluição para simular a dispersão de poluentes nos rios e obter perfis de concentrações em diferentes

tempos. A fim de resolver a Equação Diferencial Parcial (EDP), utilizou-se o método das linhas (MOL) para buscar a solução numérica do problema, e utilizou-se a análise de convergência para garantir a precisão e confiabilidade do modelo. Além disso, o termo fonte foi modelado como o único responsável pela introdução de poluentes no sistema, sendo assim o problema foi classificado como isolado, o qual pode ser representado pelas condições de isolamento de Newman. Por meio das técnicas numéricas empregadas no modelo, foram obtidos gráficos que demonstram os perfis de concentrações em diferentes tempos (t) em segundos para verificar como esse poluente está distribuído ao longo do rio estudado e como os valores constantes dos termos difusivo e convectivo o afetam. Além disso, fez-se a análise de convergência para verificar como o refinamento da malha é influenciada pelo aumento do número de pontos N_x , e com isso observou-se que a partir de um determinado valor de N_x , as curvas de concentração se sobrepuseram, indicando uma solução numérica estável, o que garante a precisão e exatidão do modelo. Portanto, o modelo proposto permitiu simular a dispersão de poluentes no rio, possibilitando a compreensão do impacto ambiental e servindo como ferramenta para buscar soluções de remediação.

PALAVRAS-CHAVE: Dispersão de poluentes; Difusão-Convecção; Método das linhas.

NUMERICAL STUDY OF POLLUTANT DISPERSION DYNAMICS IN RIVERS BY DIFFUSION-CONVECTION

ABSTRACT: Rivers play a fundamental role in maintaining ecological balance and preserving life on Earth, as they integrate large aquatic reservoirs that sustain rich biodiversity. However, this balance can be compromised by pollutant dispersion, which consists of the natural and random spreading of contaminants due to river flow and the presence of pollution sources in these environments. In this context, modeling emerges as a tool that transforms this physical problem into mathematical formulations, enabling the simulation of the phenomenon and the analysis of different scenarios that may arise from it. Based on this, the present study employed the convection-diffusion equation with a pollution source term to simulate pollutant dispersion in rivers and obtain concentration profiles at different times. To solve the Partial Differential Equation (PDE), the method of lines (MOL) was applied to achieve a numerical solution, and convergence analysis was performed to ensure the model's accuracy and reliability. Additionally, the source term was modeled as the only contributor to pollutant introduction in the system; therefore, the problem was classified as isolated, represented by Neumann boundary conditions. Using the numerical techniques employed in the model, graphs were obtained to demonstrate concentration profiles at different times (t) in seconds, in order to evaluate how the pollutant spreads along the studied river and how the constant values of the diffusive and convective terms affect it. Furthermore, convergence analysis was carried out to verify how mesh refinement is influenced by the increase in the number of points (N_x). It was observed that, beyond a certain N_x value, the concentration curves overlapped, indicating a stable numerical solution, thereby ensuring the precision and accuracy of the model. Therefore, the proposed model enabled the simulation of pollutant dispersion in the river, allowing for a better understanding of environmental impacts and serving as a tool to support remediation strategies.

KEYWORDS: Pollutant dispersion; Convection-Diffusion; Method of Lines.

INTRODUÇÃO

Os corpos hídricos são de grande importância para a sociedade, visto que eles são utilizados das mais diversas formas, como na produção de alimentos, uma vez que cerca de 40% da produção agrícola mundial depende da irrigação, isso porque aproximadamente 60% da água para esse processo vem dos rios; no uso desse recurso pelas famílias brasileiras que pode variar conforme a região, a exemplo disso, no Sudeste que apresentou o maior consumo per capita diário, enquanto no Nordeste apresentou o menor; além de servir como vias de transporte que são importantes para o comércio de commodities agrícolas, como o transporte de madeira, grãos de soja e milho (Opperman, 2023; Samora, 2024).

Todavia, esses rios estão sendo afetados por diversas formas de poluição, como a contaminação por metais pesados como chumbo (Pb) e mercúrio (Hg), os quais afetam o sistema nervoso central do seres humanos causando doenças neurotóxicas, além de que o descarte irregular de antibióticos nesse meio favorecem a seleção de microrganismos resistentes, os quais podem se multiplicar e transmitir genes de resistência, a qual configura-se como um aspecto agravante tanto para o meio ambiente, desestabilizando todo um ecossistema, como para saúde humana, pois esses microrganismos tornam os tratamentos menos eficazes e prolongam o tempo de internação e recuperação dos pacientes (Martínes, 2009; Shetty *et al.* 2023).

Nesse contexto, a modelagem matemática surge como uma ferramenta fundamental para o entendimento dos processos de transporte e dispersão de poluentes em corpos hídricos. Ao simular cenários diversos com base em parâmetros físicos, ela permite prever a dinâmica dos contaminantes ao longo do tempo e do espaço, contribuindo para o monitoramento ambiental e subsidiando a elaboração de estratégias de controle e mitigação da poluição, o que possibilita análises com menor custo em comparação aos métodos essencialmente experimentais (Ghiasi *et al.* 2022; Gao *et al.*, 2025).

Portanto, o presente estudo objetivou aplicar o modelo matemático de difusão-convecção acoplado a um termo fonte, obtido por meio da equação geral do balanço de massa, contendo os termos de difusão e convecção, para simular a dispersão de poluentes em rios. O intuito foi demonstrar a distribuição da concentração de determinada espécie poluente em diferentes cenários, a partir da variação dos parâmetros do modelo. Além disso, utilizou-se o método das linhas (MOL) para garantir precisão e exatidão nos resultados, complementado pela análise de convergência para assegurar a estabilidade numérica do modelo. Dessa forma, buscou-se contribuir com a formulação de estratégias voltadas à mitigação da poluição hídrica.

METODOLOGIA

O estudo empregou a (EDP) de difusão-convecção junto a um termo fonte para simular a dispersão de poluentes no rio, onde a difusão representa o processo pelo qual uma substância se espalha de regiões de maior concentração para a de menor concentração, devido ao movimento aleatório das partículas (movimento Browniano). Já o termo de convecção descreve o transporte de uma substância devido ao movimento do rio na direção horizontal e o termo fonte especifica o tipo de fonte de poluição que pode ser interna ou externa ao rio, ou seja, nas margens do rio (Cremasco, 2021).

Com o objetivo de que modelo o proposto seja resolvido, utilizou-se o método das linhas (MOL), uma técnica numérica eficiente para resolver a (EDP) por meio da discretização da variável espacial mantendo a variável temporal contínua. Além disso, para verificar a precisão e exatidão do modelo, foi utilizado a análise de convergência para garantir a estabilidade do modelo e dos resultados obtidos (Leveque, 2007).

Além disso, para a implementação computacional do modelo, empregou-se o software *MATLAB*, utilizando a subrotina “ode15s”, que recebe o sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO) e as condições do modelo para resolver o problema. Com isso, pôde-se obter os gráficos de linhas para se adquirir a distribuição da concentração no eixo especificado.

Demonstração do modelo

A partir da equação de balanço de massa de determinada substância, juntamente com a Primeira Lei de Fick, é possível desenvolver a Equação (1) que é responsável por descrever o fenômeno de transporte de um poluente em um rio:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \nabla^2(DC) - \nabla(VC) + S \quad (1)$$

onde C é a concentração do poluente no rio em mol/m^3 , D é o coeficiente difusivo em m^2/s , V é o coeficiente convectivo em m/s^2 e S é o termo fonte de poluição em $\text{mol/m}^2.\text{s}$ (Cremasco, 2015).

No processo de dispersão do poluente no rio, cada termo da equação representa um fenômeno físico, onde:

$\frac{\partial C}{\partial t}$: Representa a variação da concentração do poluente ao longo do tempo e que é independente do espaço.

$\nabla^2(DC)$: Representa a variação da concentração no espaço, ou seja, como o poluente se dispersa pela existência de um gradiente de concentração devido ao movimento aleatório das moléculas, desse modo, esse processo difusivo ocorre da região de maior concentração para a de menor concentração.

$\nabla(\text{DC})$: Representa a variação da concentração devido a variação da velocidade do meio, ou seja, a velocidade do rio.

Considerações do modelo

Para fins de simplificação do modelo, foram consideradas as hipóteses a seguir:

- Os coeficientes de difusão e convecção *são constantes*;
- O transporte ocorre somente na direção x , ou seja, unidimensional;

Com isso, a Equação (1) toma a forma da Equação 2:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - V \frac{\partial C}{\partial x} + S \quad (2)$$

Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais e de contorno são necessárias para buscar a resolução da EDP, visto que elas dão o cenário que está sendo posto no modelo em questão. Com isso, entende-se como condição inicial o estado da concentração no tempo igual a zero. Já as condições de contorno referem-se ao valor da concentração em determinados pontos do volume de controle ou nas fronteiras do mesmo (Cremasco, 2015). Com isso, as condições impostas no modelo foram:

- *Condição inicial*: Não há nenhum tipo de influência no início, ou seja, quando o tempo é igual a zero, não há concentração de poluentes no início do rio. Pode-se representar isso na forma $C(x,0) = 0$;
- *Condições de contorno*: Não há nenhum tipo de influência nas bordas dos rios, ou seja, o caso é considerado isolado, pois não há fluxo mássico através do volume de controle. Esse tipo de condição é chamado de *Condições de Neumann*, ou seja, em x igual a zero, o gradiente da função escalar, ou seja, a concentração do poluente multiplicada pelo vetor normal é igual a zero. Da mesma forma, em x igual a L , que é o ponto final do comprimento, a derivada direcional da função escalar multiplicada pelo vetor normal é igual a zero (Ozisik *et al.*, 2017). A representação respectivamente dessas duas condições é dada por $\frac{\partial C_{(0,t)}}{\partial \eta} = \nabla C_{(0,t)} \cdot \eta = 0$ e $\frac{\partial C_{(L,t)}}{\partial \eta} = \nabla C_{(L,t)} \cdot \eta = 0$.

Termo fonte

Considerou-se que o rio não sofria nenhum tipo de influência externa, tanto em sua origem quanto nas margens, ou seja, o escoamento ocorria sem a presença de dispersão de poluentes. Posteriormente, foi inserido um termo fonte genérico, modelado como o único responsável pela introdução de poluentes no sistema. Para isso, definiu-se que, no

trecho compreendido entre os pontos 40% e 60% do comprimento total do rio, esse termo passaria a influenciar o meio, iniciando o processo de dispersão sob a ação conjunta dos mecanismos de convecção e dispersão.

Método das linhas

O método das linhas (MOL) é um método de resolução de Equações Diferenciais Parciais (EDP's), no qual busca-se discretizar a variável espacial mantendo o tempo contínuo gerando um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's), que pode ser resolvido por métodos clássicos como Runge-Kutta, ode15s, ode45 por exemplo. Logo, para discretizar a variável espacial, utiliza-se a técnica de diferenças finitas, a qual aproxima a derivada no ponto discretizado.

Com isso, utilizou-se os conceitos das derivadas progressiva (*forward difference*) para aproximar o primeiro ponto da malha, derivadas regressivas (*backward difference*) para o último ponto; derivadas centrais (*central difference*) e derivadas de segunda ordem (*second-order central difference*) para realizar essa aproximação dos pontos internos da malha.

Inicialmente, discretizou-se o comprimento do rio, de forma a obter uma malha com pontos igualmente espaçados ao longo do domínio. Para tal, aplicou-se a Equação (3) com a seguinte formulação para a discretização do comprimento L do rio:

$$\Delta x = \frac{L}{N-1} \quad (3)$$

A Equação (4-7) representa a derivada progressiva, regressiva, central de primeira ordem e central de segunda ordem, respectivamente:

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x)}{\Delta x} \quad (4)$$

$$f'(x) \approx \frac{f(x) - f(x-\Delta x)}{\Delta x} \quad (5)$$

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - f(x-\Delta x)}{2\Delta x} \quad (6)$$

$$f'(x) \approx \frac{f(x+\Delta x) - 2f(x) + f(x-\Delta x)}{\Delta x^2} \quad (7)$$

Baseado nisso, foi possível aplicar esses conceitos no modelo e nas condições de contorno, a fim de aproximar as derivadas dos pontos discretos. Aplicando a Equação (6) e (7) no modelo, representado pela Equação (2), têm-se a forma da Equação (8). Esse modelo é aplicado nos pontos internos da malha, ou seja, nos pontos $i+1$ (ponto após o inicial) e i -ésimo - 1 (penúltimo ponto).

$$\frac{dC_{(i)}}{dt} \approx D \frac{C_{(i+1)} - 2C_{(i)} + C_{(i-1)}}{\Delta x^2} - V \frac{C_{(i+1)} - C_{(i-1)}}{2\Delta x} + S_{(i)} \quad (8)$$

Além disso, as Equações (4) e (5) foram aplicadas nas condições de contorno, pois essas estão no formato de EDP's, portanto fazendo-se necessária a discretização das mesmas. Com isso, obteve-se as condições de contorno (9) e (10) no formato:

$$\frac{C(i+\Delta x)-C(i)}{\Delta x} = 0 \quad ; \quad x = 0; \quad (9)$$

$$\frac{C(i)-C(i-\Delta x)}{\Delta x} = 0 \quad ; \quad x = L; \quad (10)$$

Com o intuito de resolver o sistema de (EDO) gerado pelo método empregado, utilizou-se a subrotina ode15s do software MATLAB. Com isso, foi possível gerar gráficos que representam a dinâmica do poluente ao longo do tempo e do espaço. Adicionalmente, foi gerado um gráfico para visualizar a análise de convergência das soluções.

Análise de convergência

A análise de convergência é uma parte essencial dos métodos numéricos, usada para avaliar se uma solução numérica se aproxima da solução exata de um problema matemático, à medida que os parâmetros usados no método, como variáveis espaciais, número de iterações e tamanho da malha são refinados. Esse processo é fundamental para garantir a confiabilidade dos resultados obtidos numericamente, pois indica se o erro entre a solução numérica e a exata tende a diminuir com o aumento da precisão do método. Além disso, esse método permite estimar a taxa com que esse erro diminui, conhecida como ordem de convergência, o que auxilia na escolha do método mais eficiente para resolver um determinado problema.

RESULTADO E DISCUSSÃO

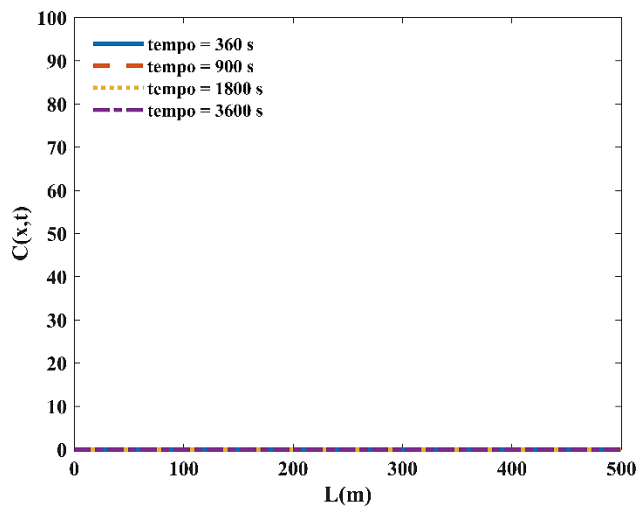
Nessa sessão serão apresentados e discutidos os resultados obtidos a partir da simulação da equação de difusão-convecção, onde se utilizou o MOL para a resolução do modelo matemático e também a análise de convergência, a fim de garantir a precisão e exatidão dos resultados.

Os valores dos parâmetros do coeficiente de difusão, convecção e termo fonte estão apresentados na Tabela 1, no qual o termo difusivo foi considerado constante e variado o termo convectivo em 25% em cada caso, a fim de verificar como esse termo afeta a dinâmica do poluente no rio. Além disso, foram geradas linhas na Figura 1(a-e) que correspondem respectivamente a 10%, 25%, 50% e 100% do tempo de uma hora (de 0 a 3600 segundos).

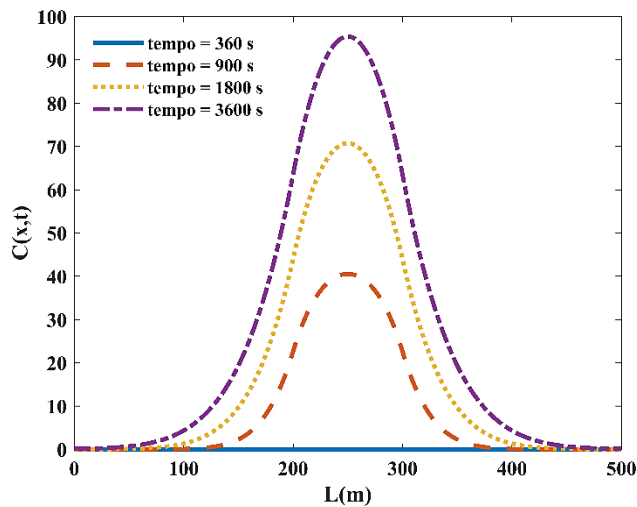
	Difusão (D) (m ² /s)	Convecção(V) (m/s)	Termo Fonte(S ₀) (mol/m ² .s)
Caso 1	1	0	0
Caso 2	1	0	0.05
Caso 3	1	0.05	0.05
Caso 4	1	0.075	0.05
Caso 5	1	0.1	0.05

Tabela 1 – Parâmetros do modelo

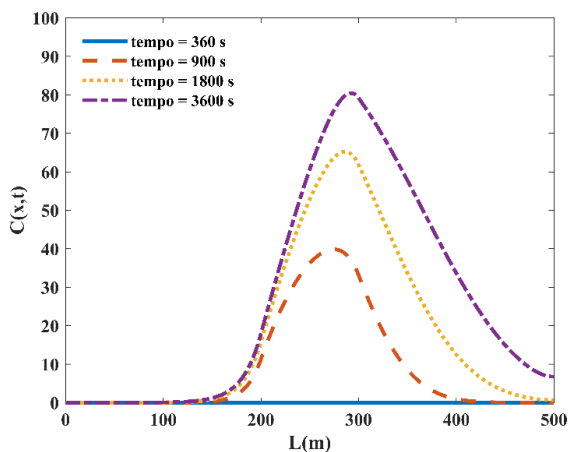
Fonte: Autor (2025)



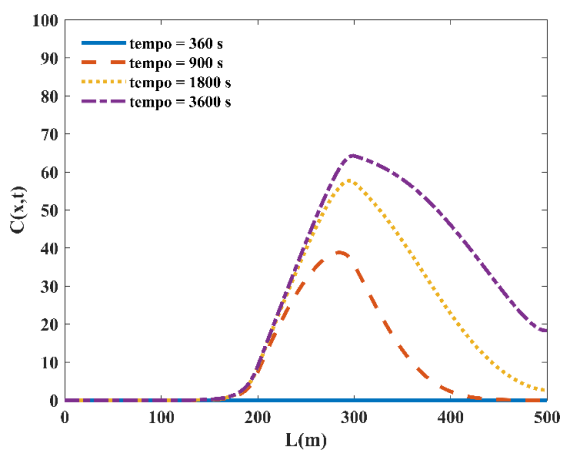
(a)



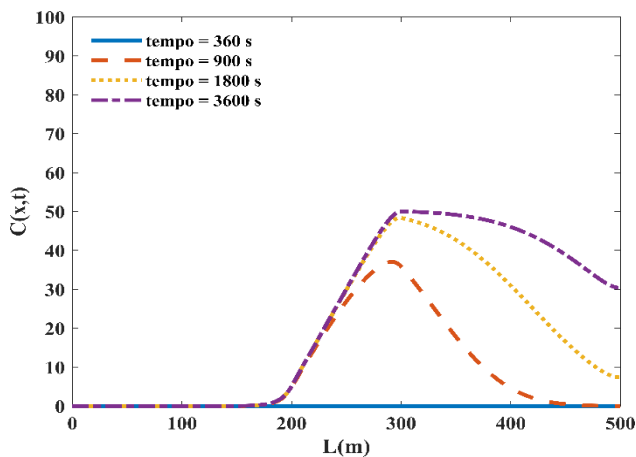
(b)



(c)



(d)



(e)

Figura 1 – Concentração do poluente em função do comprimento do rio Caso 1 (a), Caso 2 (b), Caso 3 (c), Caso 4 (d), Caso 5 (e).

Fonte: Autor (2025)

Na Figura 1 (a-e), observa-se os perfis de concentração do poluente e como o coeficiente de convecção afeta na sua dinâmica. A fim de verificação das condições de contorno, no primeiro caso da Tabela 1 o termo fonte foi considerado igual a zero, verificando assim que nenhum tipo de poluente está sendo inserido no meio apesar do avanço do tempo. Já no segundo caso em diante, esse termo fonte foi ativado e variou-se o termo convectivo em 25% em cada caso, como demonstrado na Figura 1 (b) que quando este é necessariamente zero ou muito próximo dele, o termo difusivo é dominante nesse processo físico, constando curvas no formato de distribuição normal. Entretanto, à medida que há o incremento neste coeficiente, o formato das curvas tende a não seguir a este tipo de distribuição principalmente nos tempos próximos de 3600 s, como demonstrado na Figura 1 (c-e), verificando assim o efeito do termo convectivo e seu impacto nas curvas de concentração, que destacaram a influência expressiva da velocidade do escoamento sobre a dinâmica de dispersão de poluentes em rios. Além disso, também se observa o deslocamento e atenuação da concentração conforme o avanço da frente de dispersão em meios aquáticos. (Parsaie; Haghiabi, 2017).

Ademais, para análise de convergência, foram utilizados os parâmetros da Tabela 1 referente ao terceiro caso, e também foi selecionado o instante de 1800 segundos, de modo a capturar curvas mais acentuadas, uma vez que, nesse tempo, a influência do termo fonte é mais intensa, por estar próximo ao início da propagação do poluente. Estabeleceu-se um critério de parada baseado no erro relativo entre os valores máximos de concentração de cada curva, permitindo interromper a simulação quando fosse atingido um número de pontos espaciais, N_x , suficiente para garantir a convergência.

A Figura 2 ilustra o processo de convergência, evidenciando que o critério de parada (erro relativo inferior a 0,001) foi atendido. Observa-se ainda que os pontos correspondentes às duas últimas curvas, utilizados no cálculo do erro, se sobrepõem, o que indica que as soluções são praticamente idênticas, confirmando a convergência das linhas.

Adicionalmente, a modelagem computacional adotada neste estudo está alinhada às propostas de Lemos et al. (2023), que reforçam a importância desse tipo de ferramenta para prever a dinâmica de contaminantes e apoiar decisões de gestão ambiental.

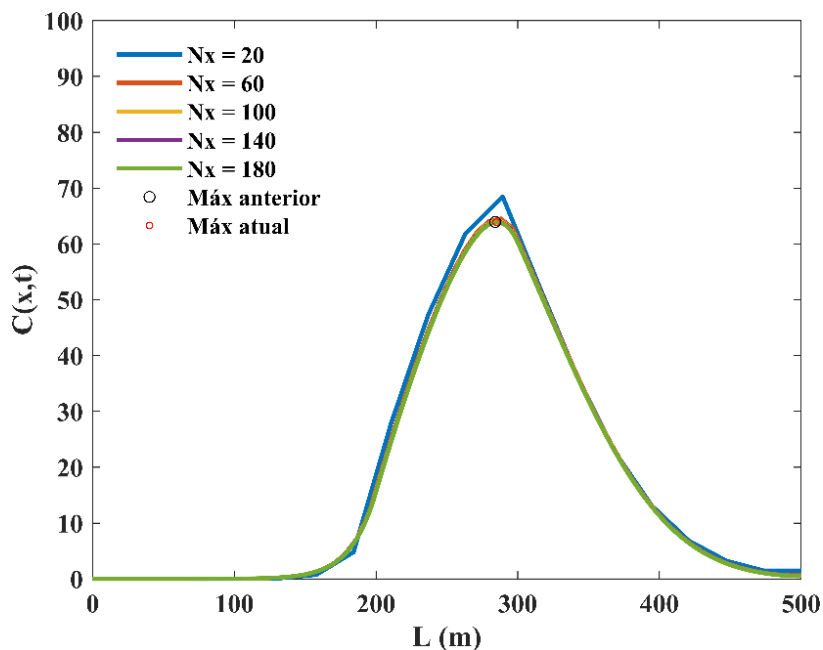


Figura 2 – Análise de convergência no tempo igual a 1800s e erro relativo de 0.001.

Fonte: Autor (2025)

Por fim, um gráfico de erros relativos em função do número de pontos N_x está exposto na Figura 3 para mostrar o decaimento desse erro com base nesses pontos, onde nele foi possível observar que o critério de parada alcançou o desejado quando o número de pontos foi igual 180, chegando ao erro previamente estabelecido. No entanto, constatou-se que mesmo antes do critério de parada ser atingido, o erro tende a aproximar-se de zero, compreendendo assim que o número de pontos necessários para haver a convergência das linhas de forma a garantir a precisão do modelo não é necessariamente 180, diminuindo o esforço computacional e o tempo do mesmo.

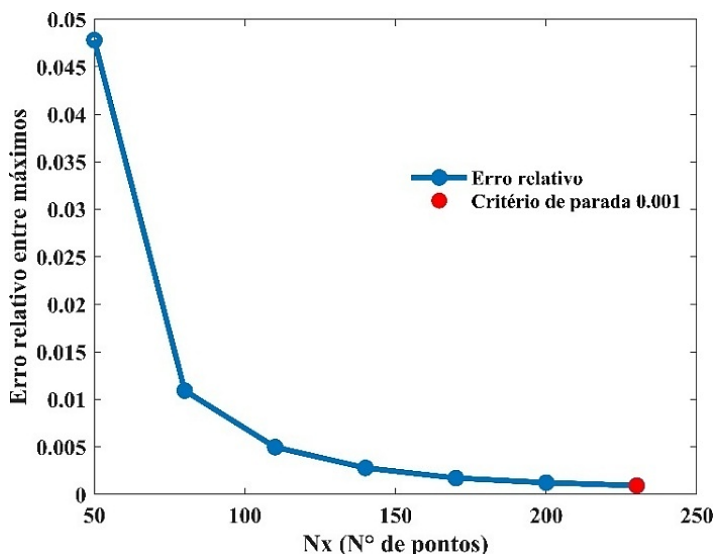


Figura 3 – Curva do erro relativo em função do número de pontos Nx.

Fonte: Autor (2025)

CONCLUSÃO

Portanto, o presente estudo demonstrou que, por meio da resolução da equação diferencial parcial que representa o fenômeno físico de difusão-convecção acoplado a um termo fonte, pelo método das linhas (MOL), foi possível determinar a distribuição da concentração do poluente espacialmente, representando uma faixa do rio, em diferentes tempos.

A dinâmica da dispersão do poluente pôde ser inferida com base nessa distribuição, sendo a análise de convergência uma etapa fundamental para definir a quantidade adequada de pontos espaciais (Nx) necessários à obtenção de soluções numéricas estáveis e precisas. Adicionalmente, por meio da construção do gráfico de erro relativo, observou-se a redução do erro à medida que se aumentou o Nx, indicando convergência numérica e assegurando a confiabilidade do modelo.

Assim, os resultados obtidos fornecem uma ferramenta eficaz para estudos que visam compreender a dinâmica de poluentes em corpos hídricos, além de servirem como base para estratégias de remediação e controle da dispersão contaminante.

REFERÊNCIAS

CREMASCO, M. A. **Fundamentos de transferência de massa**. 3.ed. São paulo: blucher, 2015.

GAO, Z.; LI, Q.; FENG, J.; WANG, Y.; TAN, M.; ZHAO, G. A study on the effects of dispersion coefficient on groundwater pollutant transport simulation. **Environmental monitoring and assessment**, v. 197, n. 2, p. 148, 2025.

GHIASI, B.; NOORI, R.; SHEIKHIAN, H.; ZEYNOLABEDIN, A.; SUN, Y.; JUN, C.; HAMOUDA, M.; BATENI, S.M.; ABOLFATHI, S. Uncertainty quantification of granular computingneural network model for prediction of pollutant longitudinal dispersion coefficient in aquatic streams. **Scientific reports**, v. 12, n. 1, p. 4610, 2022.

LEVEQUE, R. J. **Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems**. Philadelphia: society for industrial and applied mathematics (siam), 2007.

MARTINEZ, J.L. environmental pollution by antibiotics and by antibiotic resistance determinants. **Environmental pollution**, v. 157, n. 11, p. 2893-2902, 2009.

ÖZİŞİK, M. N. *et al.* **Finite difference methods in heat transfer**. 2. Ed. Boca raton: crc press, 2017.

OPPERMAN, J. Como os rios sustentam um terço do suprimento global de alimentos. Forbes brasil, 17 jun. 2023. Disponível em: <https://forbes.com.br/forbesagro/2023/06/como-os-rios-sustentam-um-terco-do-suprimento-global-de-alimentos/>. Acesso em: 21 maio 2025.

PARSAIE, A.; HAGHIABI, A.H. computational modeling of pollution transmission in rivers. **Applied water science**, v. 7, n. 3, p. 1213-1222, 2017.

SAMORA, R. Seca cessa transporte de grãos no madeira e afeta tapajós. Folha de s.paulo, 25 set. 2024. Disponível em: <https://www1.folha.uol.com.br/mercado/2024/09/seca-suspende-transporte-de-graos-no-rio-madeira-e-afeta-tapajos-medida-eleva-custos-na-exportacao.shtml>. Acesso em: 21 maio 2025.

SHETTY, S. S.; DEEPTHI, D.; HARSHITHA, S.; SONKUSARE, S.; NAIK, P. B.; KUMARI, S.N.; MADHYASTHA, H. Poluentes ambientais e seus efeitos na saúde humana. **Heliyon**, v. 9, n. 9, 2023.