



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
Área de Concentração
Desenvolvimento de Processos Químicos

MODELAGEM TRIDIMENSIONAL DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS

Autor: Eng. Márcio Bezerra Machado

Orientador: Prof. Dr. José Roberto Nunhez – Unicamp

Co-orientador: Prof. Dr. Edson Tomaz – Unicamp

Tese de Doutorado apresentada à Faculdade de
Engenharia Química da Universidade Estadual de
Campinas como parte dos requisitos exigidos para a
obtenção do título de Doutor em Engenharia Química.

Campinas – São Paulo

6 de março de 2006

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

M18m	Machado, Márcio Bezerra Modelagem tridimensional da dispersão de poluentes em rios / Márcio Bezerra Machado. --Campinas, SP: [s.n.], 2006. Orientadores: José Roberto Nunhez, Edson Tomaz. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química. 1. Engenharia ambiental. 2. Resíduos industriais – Aspectos ambientais. 3. Água - poluição. 4. Dispersão. 5. Modelos matemáticos. 6. Método dos volumes finitos. I. Nunhez, José Roberto. II. Tomaz, Edson. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.
------	---

Título em Inglês: A three dimensional model for industrial effluent dispersion in rivers

Palavras-chave em Inglês: Environmental engineering, Industrial residues – environmental aspects, Water – pollution, Dispersion, Mathematical models, Finite volume methods, Computational fluid dynamics, CFD

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Doutor em Engenharia Química

Banca examinadora: Cláudio Augusto Oller do Nascimento, José Eduardo Bevilacqua, José Roberto Guimarães e Luis Tadeu Furlan

Data da defesa: 06/03/2006

Tese de Doutorado defendida por Márcio Bezerra Machado e aprovada em 6 de março de 2006 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador
DPQ/FEQ/Unicamp

Prof. Dr. Edson Tomaz - Co-orientador
DPQ/FEQ/Unicamp

Prof. Dr. Cláudio Augusto Oller do Nascimento
Usp

Dr. José Eduardo Bevilacqua
CETESB

Prof. Dr. José Roberto Guimarães
FEC/Unicamp

Dr. Luis Tadeu Furlan
REPLAN/Petrobras

Prof. Dr. Everton Moraes Matos (suplente)
DPQ/FEQ/Unicamp

Prof. Dr. Reginaldo Guirardello (suplente)
DPQ/FEQ/Unicamp

Este exemplar corresponde à versão final da Tese de Doutorado em Engenharia Química defendida pelo Eng. Márcio Bezerra Machado e aprovada pela banca examinadora em 6 de março de 2006.

Prof. Dr. José Roberto Nunhez - Orientador

Prof. Dr. Edson Tomaz - Co-orientador

Para a Bia.

**Para os meus pais,
José e Gilce,
e meus irmãos,
Roberto e Daniel.**

Agradecimentos

Gostaria inicialmente de agradecer ao meu orientador, prof. José Roberto Nunhez, pela oportunidade de trabalharmos juntos, pela amizade, conselhos e, principalmente, por sempre ter confiado plenamente em minha capacidade.

Bia, sem seu apoio constante a realização deste trabalho teria sido muito mais difícil. Obrigado por seu amor, carinho, atenção, disponibilidade, compreensão e por sempre ter acreditado que tudo iria dar certo. Muito obrigado por tudo que representa em minha vida e por me fazer muito feliz.

Aos meus pais José e Gilce, merecedores de minha admiração e respeito, meu referencial de força, coragem, determinação e caráter, nunca teria chegado até aqui sem o apoio e o exemplo que vocês sempre me deram. Aos meus irmãos Roberto e Daniel, e a minha cunhada Renata, cujas palavras alegres e amizade sempre me ensinaram a encarar a vida de uma maneira melhor. Muito obrigado por tudo. Tenho muito orgulho de vocês.

Aos meus avós, João (*in memoriam*) e Sueli, Ponciano (*in memoriam*) e Ilma, e Edith (*in memoriam*), que sempre estiveram muito presentes durante toda a minha vida e muito contribuíram para minha educação. A todos os meus demais familiares, em especial ao meu padrinho José Amilton, ao meu tio Flávio, ao José e a Magali, a Nelda, e aos meus primos Juliana, Camila e Eliézer, e Gustavo e Milena, deixo aqui meu muito obrigado pelo apoio, amizade e pelos muitos momentos de descontração que, mesmo à distância, sempre foram fundamentais para a minha felicidade.

A toda a família da Bia que sempre me recebeu com muito carinho, em especial a Décio, Maria Alice, Liliane e Natália. Muito obrigado pela atenção, amizade, disponibilidade, pelos agradáveis finais de semana e também pelas pescarias.

Ao meu co-orientador, professor Edson Tomaz, cujo conhecimento na área de engenharia ambiental foi de fundamental importância durante o desenvolvimento deste trabalho. Gostaria de agradecer por sua disponibilidade, ajuda constante e comprometimento com este projeto.

A Otávio Cavallet, grande amigo e parceiro de todas as horas, muito obrigado pela amizade, conversas e apoio.

As amigas Lucielen, Tati e Veri, cuja amizade cultivamos desde a época da graduação. A presença de vocês tornou essa etapa de minha vida muito mais agradável. Sou grato pelas conversas, incentivo, rodas de chimarrão, almoços, e pelo apoio, que foram muito importantes principalmente nos primeiros momentos aqui em Campinas.

Aos muitos amigos que participaram desta etapa da minha vida: Camila Peixoto, Raquel Kuhn, Cléber e Juliana, Rodrigo e Mylene, Danieli e Celso, Hélio (Pantufa), Cíntia, Caiçara, Moribe, Nirse, Márcia, Leila e Eduardo, Gustavo, Nelisa e Marina, Chris e Rodi, Eliane e Daniel (Nick), Lineu e Luciana, Juan, Odacir, Jefferson Corrêa, Rafael Pimentel, Vanessa Mochi, Valter Shimura e Karina Silveira. Obrigado pela amizade que sempre compartilhamos, pela ajuda nos momentos de necessidade, e pelos momentos de descontração e alegria que levarei para sempre comigo.

Ao amigo Mateus Furlan, pelo desenvolvimento da interface gráfica em Visual Basic.

Aos amigos Kelerson e Cecília, por muito terem me ajudado nas etapas iniciais deste trabalho.

Aos amigos do Laboratório de Fluido Dinâmica Computacional: Bruno Abdalla, Erick Martins, Paula Merigue, Jefferson Grangeiro, José Mozart Fusco, Everton Matos, Antônio Bezerra, Antônio Rudinger, Miklos, Adriana e Nicolas. Obrigado pela amizade, cordialidade, ajuda e pelo agradável ambiente de trabalho. Gostaria de agradecer especialmente a Flávio Galeazzo, pela ajuda com a utilização do Fluent, e a Thiago Ganino, pelas correções ortográficas e gramaticais deste trabalho.

A todos os professores da Faculdade de Engenharia Química da Unicamp que comigo dividiram seus conhecimentos. Não posso deixar de agradecer também aos professores do curso de Engenharia de Alimentos da Furg, de Rio Grande-RS, e do Colégio Nossa Senhora Auxiliadora, de Bagé-RS. Todos vocês tiveram uma parcela muito importante em minha formação.

Aos membros da banca examinadora, pelas valiosas correções e contribuições ao texto desta tese. Gostaria de agradecer também ao prof. Antônio Carlos Luz Lisbôa pelas sugestões feitas durante o meu segundo exame de qualificação.

A REPLAN/Petrobras, especialmente ao Dr. Luís Tadeu Furlan, pelo apoio e confiança neste projeto, pela disponibilização de dados experimentais, e pelo suporte financeiro ao laboratório.

A Rhodiaco, especialmente ao eng. Wellington Bonifácio, pela oportunidade de trabalharmos juntos, pela confiança depositada neste projeto e também por permitir a utilização dos dados experimentais coletados e a publicação dos resultados obtidos.

Ao professor Eugênio Rosa, da Faculdade de Engenharia Mecânica da Unicamp, pela ajuda na escolha do modelo de turbulência mais adequado a este trabalho.

Ao professor Milton Mori e a todos os funcionários da secretaria de extensão da Faculdade de Engenharia Química, pela oportunidade de cursar o curso de especialização em Engenharia Ambiental que muito contribuiu para o desenvolvimento desta Tese de Doutorado.

A Fapesp, pela concessão da bolsa de estudos e pelo suporte financeiro que permitiram a realização deste trabalho (Processo 03/05869-3).

A Capes, pela concessão da bolsa de estudos nos primeiros dois anos deste trabalho e pela oportunidade de ingressar no programa de Doutorado Direto.

A Nossa Senhora, pela serenidade que sempre colocou em meu coração.

A Deus, pelo dom da vida, por todas as coisas maravilhosas que sempre colocou em meu destino, por sempre guiar os meus passos... Enfim, por tudo!!!

*Muitas vezes as pessoas
São egocêntricas, ilógicas e insensatas.
Perdoe-as assim mesmo.
Se você é gentil,
As pessoas podem acusá-lo de interesseiro.
Seja gentil assim mesmo.
Se você é um vencedor,
Terá alguns falsos amigos e alguns inimigos verdadeiros.
Vença assim mesmo.
Se você é honesto e franco,
As pessoas podem enganá-lo.
Seja honesto e franco assim mesmo.
O que você levou anos para construir,
Alguém pode destruir de uma hora para outra.
Construa assim mesmo.
Se você tem paz e é feliz,
As pessoas podem sentir inveja.
Seja feliz assim mesmo.
O bem que você faz hoje,
Pode ser esquecido amanhã.
Faça o bem assim mesmo.
Dê ao mundo o melhor de você,
Mas isso pode não ser o bastante.
Dê o melhor de você assim mesmo.
Veja você que, no final das contas,
É tudo entre você e Deus.
Nunca foi entre você e as pessoas.*

Madre Tereza de Calcutá

*Ultrapassa-te a ti mesmo
a cada dia,
a cada instante ...
Não por vaidade,
mas para corresponderes
à obrigação sagrada
de contribuir sempre mais
e sempre melhor,
para a construção do Mundo.*

D. Hélder Câmara

Resumo

Estudos têm mostrado que a humanidade enfrentará severa falta de água nas próximas décadas. Muitos esforços têm sido direcionados para o desenvolvimento de novas ferramentas computacionais a fim de se garantir uma melhor utilização dos recursos hídricos. Diversos estudos estão sendo realizados utilizando ferramentas de CFD (*Computational Fluid Dynamics*) para obtenção de novas formas de gerenciamento destes recursos. Neste contexto, é de suma importância o desenvolvimento de novas técnicas para prever o impacto ambiental causado por emissões industriais em rios de modo que estratégias possam ser planejadas para diminuir os efeitos desta poluição. Este trabalho apresenta um modelo Fluidodinâmico Computacional tridimensional para simular a dispersão de substâncias solúveis em rios. O método dos volumes finitos foi utilizado para aproximar as equações de conservação de momento, de massa e de espécie química. O sistema de coordenadas cartesianas foi escolhido para representar o sistema. Foi utilizado um modelo algébrico de turbulência de ordem zero. O modelo de Streeter-Phelps foi usado para prever a concentração de substâncias orgânicas e de oxigênio dissolvido ao longo do rio. O modelo pode também prever o impacto causado pela ocorrência de múltiplos pontos de emissão no trecho estudado. O modelo matemático foi desenvolvido em linguagem Fortran. Os resultados mostram que a metodologia proposta é uma boa ferramenta para a avaliação do impacto ambiental causado pela emissão de efluentes em rios. O software é bastante rápido, especialmente quando comparado com outros pacotes de CFD disponíveis comercialmente. Foram feitas comparações entre os resultados numéricos e dados experimentais coletados no rio Atibaia. Os resultados numéricos apresentaram uma boa concordância com os dados coletados experimentalmente.

Palavras-chave: 1.Engenharia ambiental. 2.Resíduos industriais - Aspectos ambientais. 3.Água - poluição. 4.Dispersão. 5.Modelos matemáticos. 6.Método dos volumes finitos.

Abstract

A future lack of water in the next decades has been observed by many studies. Much effort has been devoted to find strategies which will help to manage properly water resources. Theoretical studies have been used recently since the scope of computational fluid dynamics (CFD) has increased, allowing its use in the issue of water quality. In this scenario, it is important to develop new techniques to predict the environmental impact of emissions in rivers so that strategies can be devised to decrease the effects of pollution. This work presents a three-dimensional Computational Fluid Dynamics (CFD) in house model to simulate the dispersion of soluble substances in a river. The finite volume method is used to approximate the momentum, mass and species conservation equations. A Cartesian coordinate system has been chosen to represent the river. Turbulence is taken into account by a zero-order equation model. The Streeter-Phelps model has been used to predict the concentration of organic substances and dissolved oxygen along the river. The model can also predict the impact of multiple effluents discharges. Results show that the proposed methodology is a good tool for the evaluation of the environmental impact caused for pollutants emissions in rivers. The software has been developed from the model and use the Fortran language. It is very fast, especially when compared to available commercial CFD packages. Experimental comparisons for soluble substances dispersion have been made for the Atibaia River. The results show good agreement with experimental data.

Keywords: 1.Environmental engineering. 2.Industrial residues - Environmental aspects. 3.Water - pollution. 4.Dispersion. 5.Mathematical models. 6.Finite volume methods. 7.Computational fluid dynamics. 8.CFD.

Sumário

Agradecimentos	vii
Resumo	xiii
Abstract	xv
Lista de Figuras	xxi
Lista de Tabelas	xxv
Nomenclatura	xxvii
1 Introdução	1
2 Objetivos	5
3 Revisão Bibliográfica	7
3.1 Fluxo em rios e canais	9
3.2 Dispersão de efluentes	12
3.3 Poluentes biodegradáveis	17
3.4 Efeitos da turbulência no escoamento	22
3.5 Introdução aos métodos numéricos	24
3.5.1 Método dos Volumes Finitos	26
3.5.2 Problemas elípticos e parabólicos	28
4 Modelagem Matemática do Problema	31
4.1 Descrição do problema	31
4.2 Coordenadas Curvilíneas	33
4.3 Equações do modelo em um sistema generalizado de coordenadas	35
4.3.1 Equação da continuidade	35
4.3.2 Equação de movimento	36

SUMÁRIO

4.3.3	Equação de transferência de massa de uma substância A	40
4.4	Aplicação do modelo ao problema de Geometria Cartesiana	41
4.4.1	Sistema de equações em coordenadas cartesianas	47
4.5	Condições de contorno	48
4.6	Equação de Streeter-Phelps	49
4.7	Turbulência	51
4.8	Coefficiente de Dispersão	53
5	Metodologia de Solução Numérica	55
5.1	Aplicação do método dos volumes finitos ao problema	56
5.1.1	Determinação do perfil de velocidade	57
5.1.2	Determinação do perfil de concentração de uma substância inerte	61
5.2	Metodologia de solução numérica do problema com múltiplos pontos de despejo de efluentes	65
6	Resultados	67
6.1	Perfil de velocidade e concentração	67
6.2	Modelo de autodepuração	75
6.3	Estudo da independência da malha	79
6.4	Múltiplos pontos de emissão	85
6.5	Estudo do coeficiente de dispersão	88
6.5.1	Efeito da variação do coeficiente de dispersão em escoamento turbulento	91
6.6	Estudo da variação do local de emissão do efluente	92
6.7	Comparação dos resultados numéricos com resultados obtidos em simulação com o software Fluent	94
6.8	Comparação com dados experimentais	96
6.8.1	Dispersão de uma substância volátil	96
6.8.2	Dispersão de cloretos	100
6.9	Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real	108
6.9.1	Descrição do sistema de estudo	108
6.9.2	Método de estudo	110
6.9.3	Resultados da determinação do coeficiente de dispersão	115
6.10	Desenvolvimento de uma interface gráfica	127
7	Conclusões	135
8	Sugestões para Trabalhos Futuros	137

SUMÁRIO

Referências Bibliográficas	139
Apêndice A	145
Apêndice B	147

Lista de Figuras

3.1	Tipos de fluxo em canais abertos.	11
3.2	Esquema de dispersão de efluentes.	14
3.3	Representação do processo de autodepuração em um rio. . . .	19
3.4	Perfil de concentração de DBO e OD em um canal.	21
3.5	Comparação dos perfis de velocidade laminar (I) e turbulento (II).	23
3.6	Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema de mecânica dos fluidos.	25
3.7	Volume elementar para os balanços de conservação.	27
3.8	Comparação entre os casos elíptico e parabólico.	30
4.1	Figura representativa da calha de seção transversal retangular.	44
4.2	Decomposição vetorial da força gravitacional.	44
5.1	Esquema explicativo da metodologia de solução numérica. . .	56
5.2	Malha tridimensional utilizada na determinação do perfil de concentração.	57
5.3	Esquema de formulação explícita.	62
6.1	Perfil de velocidade do estudo de caso.	68
6.2	Perfil de velocidade na superfície do rio.	68
6.3	Perfil de velocidade na linha de centro do rio.	70
6.4	Comparação entre os perfis de velocidade laminar e turbulenta em coordenadas cartesianas.	70
6.5	Perfil de concentração na seção transversal de emissão do efflu- ente.	71
6.6	Figura representativa de uma seção transversal do trecho de rio.	72
6.7	Perfil de concentração da linha de controle A representada na Figura 6.6.	72

LISTA DE FIGURAS

6.8	Perfil de concentração da linha de controle B representada na Figura 6.6.	73
6.9	Perfil de concentração da linha de controle C representada na Figura 6.6.	73
6.10	Perfil de concentração da linha de controle D representada na Figura 6.6.	74
6.11	Perfil de concentração da linha de controle E representada na Figura 6.6.	74
6.12	Perfil de concentração (mg/L) na superfície do trecho do rio em estudo.	75
6.13	Perfil de DBO na superfície do rio.	77
6.14	Perfil de concentração de oxigênio dissolvido na superfície do rio.	77
6.15	Perfis de velocidade obtidos com diferentes números de linhas.	80
6.16	Perfil de concentração a 1,38 m da margem de lançamento para todos os refinamentos de malha utilizados.	81
6.17	Perfil de concentração a 1,38 m da margem de lançamento nos 5 m iniciais de escoamento.	82
6.18	Perfil de velocidade para todos os refinamentos de malha utilizados.	82
6.19	Perfil de concentração para todos os refinamentos de malha utilizados.	83
6.20	Perfil de concentração nos 5 m iniciais do escoamento.	84
6.21	Perfil de concentração para todos os refinamentos de malha utilizados.	84
6.22	Figura representativa do estudo de caso.	87
6.23	Perfil de concentração de um estudo de caso com múltiplos pontos de emissão.	87
6.24	Perfis de concentração da linha de controle A representada na Figura 6.6.	89
6.25	Perfis de concentração da linha de controle B representada na Figura 6.6.	89
6.26	Perfis de concentração da linha de controle C representada na Figura 6.6.	90
6.27	Perfis de concentração da linha de controle D representada na Figura 6.6.	90
6.28	Perfis de concentração da linha de controle E representada na Figura 6.6.	91
6.29	Malha gerada pelo software Fluent.	95
6.30	Região próxima a parede do escoamento.	95
6.31	Comparação dos perfis de velocidade obtidos pelas duas simulações.	96

LISTA DE FIGURAS

6.32	Pontos de coleta de amostras no rio Atibaia nas proximidades da REPLAN.	97
6.33	Perfil de concentração de amônia a 3 m da margem de lançamento.	98
6.34	Perfil de concentração de amônia a 11 m da margem de lançamento.	98
6.35	Perfil de concentração de amônia a 22 m da margem de lançamento.	99
6.36	Perfil de concentração de amônia a 30 m da margem de lançamento.	99
6.37	Imagem da área estudada no rio Atibaia.	101
6.38	Pontos de coleta de amostras no rio Atibaia para análise de concentração de cloretos.	102
6.39	Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 3 m da margem de lançamento.	104
6.40	Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 8 m da margem de lançamento.	104
6.41	Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 15 m da margem de lançamento.	105
6.42	Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 21 m da margem de lançamento.	105
6.43	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 3 m da margem de lançamento.	106
6.44	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 8 m da margem de lançamento.	107
6.45	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 15 m da margem de lançamento.	107
6.46	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 21 m da margem de lançamento.	108
6.47	Representação do lançamento do efluente da Rhodiaco associado ao efluente da Rhodia.	109
6.48	Imagem aérea da área estudada.	111
6.49	Representação dos pontos de amostragem do rio Atibaia próximos ao despejo de efluentes da Rodhiaco	113
6.50	Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 3 m da margem de lançamento.	118

LISTA DE FIGURAS

6.51	Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 7 m da margem de lançamento.	119
6.52	Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 14 m da margem de lançamento.	119
6.53	Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 21 m da margem de lançamento.	120
6.54	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 3 m da margem de lançamento.	120
6.55	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 7 m da margem de lançamento.	121
6.56	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 14 m da margem de lançamento.	121
6.57	Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 21 m da margem de lançamento.	122
6.58	Perfil de concentração na superfície do rio para as condições do dia da amostragem.	124
6.59	Perfil de concentração na superfície do rio para as condições críticas de vazão.	126
6.60	Perfil da concentração do efluente no rio em função da distância do ponto de emissão.	126
6.61	Perfil de concentração na superfície do rio para as condições críticas de vazão nos 142 m iniciais de escoamento.	127
6.62	Perfis de concentrações de diferentes seções transversais do trecho estudado.	128
6.63	Software de dispersão: opção <i>dimensões</i>	130
6.64	Software de dispersão: opção <i>características</i>	131
6.65	Software de dispersão: opção <i>concentrações</i>	131
6.66	Figura ilustrativa para definição do local de despejo do efluente.	132
6.67	Gráfico de perfil de concentração gerado pelo software.	133
A.1	Imagem fotográfica do local de lançamento dos efluentes da Rhodiaco.	145
A.2	Imagem fotográfica do local de lançamento da Caixa 007.	145
B.1	Imagem aérea georreferenciada da área estudada no rio Atibaia nas imediações da Rhodiaco.	147

Lista de Tabelas

3.1	Distribuição da água mundial.	10
4.1	Coefficientes de desoxigenação para diferentes níveis de tratamento.	51
5.1	Coefficientes da equação de conservação de momento para as fronteiras.	60
5.2	Coefficientes da equação de conservação de momento para os cantos.	60
5.3	Simplificações decorrentes das condições de contorno.	64
6.1	Dados de entrada do estudo de caso.	69
6.2	Dados de entrada do estudo de caso com reação química . . .	76
6.3	Dados de entrada do estudo de caso com múltiplos pontos de emissão	86
6.4	Dados de entrada para estudo da variação do coeficiente de dispersão	88
6.5	Distância de diluição para cada coeficiente de dispersão estudado.	91
6.6	Distância de diluição para cada coeficiente de dispersão em escoamento turbulento.	92
6.7	Dados de entrada do estudo de caso com variação do ponto de emissão.	93
6.8	Distância de diluição para cada local de emissão do efluente. .	93
6.9	Dados do rio Atibaia e do efluente emitido pela REPLAN. . .	100
6.10	Características do rio Atibaia e do efluente emitido pela REPLAN.	102
6.11	Concentração de cloreto nos pontos de amostragem no rio Atibaia.	103

LISTA DE TABELAS

6.12	Concentração de cloreto nos pontos de amostragem dos efluentes da REPLAN.	103
6.13	Pontos de emissão localizados à jusante da emissão da Rhodiaco	110
6.14	Concentração de sódio nos pontos de amostragem.	116
6.15	Concentração de sódio da amostra 209 (lançamento da Rhodiaco).	117
6.16	Concentração de sódio dos demais pontos de emissão ao longo do trecho de estudo.	117
6.17	Distâncias das seções transversais em relação a porcentagem de efluente na água do rio.	123
6.18	Distâncias das seções transversais em relação a porcentagem de efluente na água do rio para $Q_{7,10}$	125

Nomenclatura

Letras Latinas

A_T	área da seção transversal	m^2
B	parâmetro adimensional do modelo de turbulência	
C_A	concentração de uma substância A	mg/L
C_{A0}	concentração de uma substância no rio	mg/L
C_{Ae}	concentração de uma substância no poluente	mg/L
C_{DBO}	DBO do poluente	mg/L
$C_{Oxigenio}$	Concentração de oxigênio	mg/L
C_S	Concentração de saturação de oxigênio dissolvido	mg/L
$\vec{D}$	tensor taxa de deformação	
D	Difusividade efetiva	m^2/s
D_L	Difusividade laminar	m^2/s
$D_{Oxigenio}$	Déficit de oxigênio	mg/L
D_T	Difusividade turbulenta	
E	Leste	
$\vec{e}_1$	vetor unitário na direção u_1	
$\vec{e}_2$	vetor unitário na direção u_2	
$\vec{e}_3$	vetor unitário na direção u_3	
g	aceleração gravitacional	m^2/s
$\vec{g}$	vetor gravidade	
g_i	componente da gravidade na direção i	
h	profundidade do rio	m
H	cota de inclinação do rio	m
h_1	fator de proporcionalidade tangencial à linha coordenada u_1	
h_2	fator de proporcionalidade tangencial à linha coordenada u_2	

h_3	fator de proporcionalidade tangencial à linha coordenada u_3	
$\vec{I}$	matriz identidade	
$\vec{i}$	vetor unitário na direção x	
$\vec{j}$	vetor unitário na direção y	
$\vec{k}$	vetor unitário na direção z	
K	constante de proporcionalidade	
k_a	constante de reaeração	dia ⁻¹
k_d	constante de desoxigenação	dia ⁻¹
K_G	coeficiente global de dispersão	m ² /s
K_v	coeficiente de volatilidade	m ² /s
L	comprimento do trecho do rio	m
L_C	raio hidráulico	m
L_D	distância de diluição	m
m	número de volumes de controle na direção x	
$\dot{m}$	fluxo mássico	g/s
n	número de volumes de controle na direção y	
$\vec{n}$	coordenada normal à superfície	
N	Norte	
p	número de volumes de controle na direção z	
P	pressão	atm
P_0	pressão inicial	atm
P_m	perímetro molhado	m
$\vec{r}$	vetor posição	
R_A	termo de reação química	mg/L
Q_{calc}	vazão calculada	m ³ /s
Q_e	vazão do poluente	m ³ /s
Q_r	vazão do rio	m ³ /s
Re	número de Reynolds	
S	Sul	
Sc_T	número de Schmidt turbulento	
t	tempo	s
U	velocidade média do escoamento	m/s
u_1	coordenada 1 de um sistema generalizado	
u_2	coordenada 2 de um sistema generalizado	

Nomenclatura

u_3	coordenada 3 de um sistema generalizado	
$\vec{v}$	vetor velocidade	m/s
v_i	componente da velocidade na direção i	
v_{med}	velocidade média do escoamento	m/s
w	largura do rio	m
W	Oeste	
x	coordenada cartesiana relativa à largura do leito	m
y	coordenada cartesiana relativa à profundidade do rio	m
z	coordenada cartesiana axial	m
Z	parâmetro do modelo algébrico de turbulência	

Letras Gregas

κ	constante de von Kármán	
λ	coeficiente de proporcionalidade	
μ	viscosidade	Pa.s
μ_l	viscosidade laminar	Pa.s
μ_t	viscosidade turbulenta	Pa.s
ν	viscosidade cinemática	m ² /s
ρ	massa específica	kg/m ³
τ_T	tensão de atrito	
$\vec{\tau}$	tensor tensão	
ω	ângulo de inclinação	

Símbolos Matemáticos

$\frac{D}{Dt}$	derivada substantiva
δ	derivada parcial
∇^2	operador Laplaciano
div	operador divergente
grad	operador gradiente

Siglas

CFD	<i>Computational Fluid Dynamics</i>
DBO	Demanda Biológica de Oxigênio
EDP	Equação Diferencial Parcial
EIA	Estudo de Impacto Ambiental
L-CFD	Laboratório de Fluidodinâmica Computacional
MVF	Método dos Volumes Finitos
OD	Oxigênio Dissolvido
ONU	Organização das Nações Unidas
REPLAN	Refinaria de Paulínia
RIMA	Relatório de Impacto Ambiental

Capítulo 1

Introdução

Os recursos naturais são a base para o desenvolvimento da sociedade. Durante muito tempo, esta afirmação não foi vista com a importância que realmente representa. A crença de que esses recursos seriam inesgotáveis custou à humanidade a destruição de florestas, extermínio de animais e plantas, além da poluição das águas e do ar.

O crescimento de centros urbanos e industriais, que por muitas décadas se realizou de forma desordenada e sem um correto planejamento, mostra hoje suas conseqüências. Os efeitos da atividade humana na poluição de águas, solo e ar são atualmente temas de discussão e estudo em diversos centros de pesquisa. Todo esse conhecimento adquirido na área gerou maior conscientização sobre os riscos que a civilização humana corre caso os recursos naturais existentes não sejam adequadamente preservados.

No Brasil, os recursos naturais têm importância decisiva no plano econômico. O país é dotado de uma vasta e densa rede hidrográfica, sendo que muitos de seus rios destacam-se pela extensão, largura e profundidade. Dentre os grandes rios em território nacional, destacam-se o Amazonas, o Paraguai, o São Francisco e o Paraná. A situação da poluição hídrica tem-se agravado no país, devido ao aumento das cargas poluidoras urbanas e industriais, uso inadequado do solo e de insumos agrícolas, erosão, desmatamento e mineração. Estes fatores levam a danos dos recursos hídricos, dentre os quais se destacam o aumento do transporte de sedimentos e a contaminação orgânica e química das águas.

Durante o III Fórum Mundial das Águas, realizado em março de 2003 em Kyoto, no Japão, foi divulgado um estudo com previsões aterradoras, feitas pela Organização das Nações Unidas (ONU). Segundo o estudo, entre 2 bilhões e 8 bilhões de pessoas poderão sofrer com a falta de água potável ou com saneamento básico inadequado até a metade do século XXI.

No Brasil, o problema da qualidade das águas superficiais, antes normalmente exclusivo das grandes capitais está se disseminando pelo interior, dado o crescimento econômico que algumas regiões vêm apresentando. Um exemplo deste problema é a região de Campinas, no interior do estado de São Paulo, que vem apresentando um desenvolvimento crescente nas últimas décadas com a implantação de indústrias de vários setores da economia. Este desenvolvimento causou um crescimento desordenado da região, que já apresenta sinais de debilidade no sistema público de abastecimento de água.

Esta situação crítica faz com que cuidados adicionais sejam tomados na implantação de novas indústrias, especialmente quando for necessário o descarte de seus efluentes em rios. Na implantação de novos empreendimentos, para se obter a licença de instalação, embora em muitos casos seja elaborado um Estudo de Impacto Ambiental (EIA), e seu respectivo Relatório de Impacto ao Meio Ambiente (RIMA), a abordagem a respeito da previsão de impacto ambiental causado pela emissão de efluentes em rios tem sido pouco substanciada em metodologias científicas reconhecidamente aplicáveis para cada caso.

O atual consenso sobre a preservação da qualidade da água de rios e lagos foi o fator motivante para a realização deste trabalho. Compreender o fluxo, a dispersão e a decomposição dos compostos presentes nos efluentes lançados em canais naturais é de extrema importância para a solução de vários problemas presentes no despejo de efluentes industriais nos rios. Entre estes problemas destacam-se a escolha do melhor ponto de emissão de um efluente industrial, a determinação da distância necessária para a dispersão deste efluente e a distância para que ocorra a degradação das substâncias biodegradáveis presentes neste lançamento. Entretanto, o mais importante é desenvolver ferramentas numéricas preditivas do impacto causado por novas emissões de efluentes em um rio e por outras situações que ponham em risco o equilíbrio ambiental.

Levando em consideração os problemas e as necessidades apresentadas, este trabalho dará continuidade a um estudo de base realizado no Laboratório de Fluidodinâmica Computacional (L-CFD), descrito na Dissertação de Mestrado do aluno Kelerson Modenesi e sob orientação do Prof.

Dr. José Roberto Nunhez. Nesse trabalho, foi desenvolvido um modelo fluidodinâmico tridimensional de previsão da dispersão de um dado efluente inerte sendo lançado em um rio. Embora considerando escoamento laminar e limitado ao estudo de trechos retilíneos, o trabalho apresentou bons resultados quando comparados com dados experimentais coletados no Rio Atibaia num projeto em conjunto com a REPLAN/Petrobras.

Nesta pesquisa de Doutorado, procurando representar um maior número de casos, o escoamento é considerado turbulento, característica da grande maioria dos rios. Para um melhor entendimento do comportamento do efluente no meio aquático, as reações de decomposição das substâncias não inertes presentes no efluente também podem ser levadas em consideração. Além disso, é possível obter o perfil de concentração do oxigênio dissolvido ao longo de todo o trecho em estudo. O modelo também permite o estudo da dispersão de efluentes em trechos de rio onde exista mais de um ponto de lançamento.

Ainda em relação ao potencial do presente trabalho, convém citar a Resolução Nº 357 de 17 de março de 2005 do Conselho Nacional de Meio Ambiente que dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes. Nesta resolução, pode-se ler no artigo 33: *"A extensão e as concentrações de substâncias na zona de mistura deverão ser objeto de estudo, nos termos determinados pelo órgão ambiental competente, às expensas do empreendedor responsável pelo lançamento"*. Sendo assim, de acordo com esta resolução publicada recentemente, todo empreendedor que venha a lançar efluentes em um corpo de água terá que realizar estudos semelhantes aos desenvolvidos neste trabalho.

É importante salientar que não existe na literatura acadêmica um trabalho como este, embora seja grande o interesse por parte de empresas e órgãos ambientais no desenvolvimento de instrumentos de previsão de impacto ambiental como o que será obtido.

Capítulo 2

Objetivos

O presente trabalho tem como principais objetivos:

- O desenvolvimento de um modelo fluidodinâmico tridimensional para um trecho de rio capaz de prever a dispersão de compostos industriais sendo lançados neste rio. Este modelo deverá considerar escoamento turbulento, reações de decomposição dos componentes envolvidos e a possibilidade de mais de um ponto de despejo.
- A obtenção do perfil de concentração de oxigênio dissolvido na água ao longo do trecho em estudo.
- A implementação de uma metodologia de solução das equações do modelo com o uso do Método dos Volumes Finitos.
- O desenvolvimento de um programa em Linguagem Fortran capaz de resolver o modelo matemático proposto.
- A comparação dos resultados obtidos pelo modelo proposto com resultados experimentais e numéricos.
- A determinação de uma metodologia para determinação do coeficiente de dispersão para um determinado trecho de rio.
- O desenvolvimento de uma interface gráfica em Visual Basic de fácil utilização por qualquer usuário interessado em compreender os fenômenos envolvidos na dispersão de efluentes em rios.

Capítulo 3

Revisão Bibliográfica

A humanidade, durante milênios, considerou a água como um recurso inesgotável e de qualidade adequada para seu consumo e o desenvolvimento de suas atividades. Em um mundo essencialmente rural, o meio ambiente tinha capacidade de assimilação superior à poluição produzida pelo homem.

A partir da Revolução Industrial, houve alterações substanciais na ocupação dos espaços em face da implantação de indústrias e da urbanização das cidades. Ante o crescimento econômico e populacional após a Segunda Guerra Mundial, vários países começaram a identificar problemas decorrentes dessa industrialização e urbanização na qualidade da água de seus rios. Os efluentes industriais e domésticos passaram a gerar problemas de qualidade que implicavam aumento nos custos de tratamento, redução da disponibilidade de água e conflitos entre usuários, ou até entre países. Associada ao processo de desenvolvimento, a impermeabilização e a ocupação desordenada do solo, a expansão da agricultura e a destinação inadequada de resíduos sólidos vieram contribuir para a deterioração da qualidade da água dos rios e a ocorrência de enchentes.

Essa situação é preocupante, principalmente pelo fato de a população mundial haver ultrapassado o marco de 6 bilhões de habitantes em 1999 e de suas atividades antrópicas já terem atingido uma escala de utilização dos recursos naturais disponíveis que obriga todos a pensar no futuro sob nova perspectiva.

Shiklomanov (36, 1997) estima que a quantidade total de água na Terra, de 1.386 milhões km³, tem permanecido praticamente constante durante os últimos 500 milhões de anos e que, desse total, como apresentado na Tabela 3.1, apenas 0,27 %, ou seja, 93.100 km³, corresponde ao volume de água doce da Terra, correspondente aos rios e lagos, formas de armazenamento mais acessíveis ao uso humano, e aos ecossistemas. A exploração do potencial hídrico subterrâneo, em aquíferos profundos, apesar de apresetar uma reserva hídrica cem vezes superior a dos rios e lagos, constitui uma atividade de risco que exige tecnologia avançada de investigação hidrogeológica e perfuração de poços, de altíssimo custo, para a captação de águas subterrâneas em lençóis a mais de 1.000 m de profundidade.

Shiklomanov (36, 1997) estima que, atualmente, a demanda anual de água no mundo seja de 3.940 km³, representando menos de 10 % do volume total disponível. Sendo assim, em nível global, não haveria escassez hídrica, porém, a má distribuição espacial e temporal da água, somada à distribuição demográfica irregular na Terra, faz com que algumas regiões sofram permanentemente com a falta de água.

A escassez de água potável se deve a uma série de fatores: econômicos, geográficos, demográficos, entre outros. Além destes fatores, observa-se também um número alarmante de rios cujas águas tornaram-se impróprias para o uso devido ao despejo de efluentes industriais e domésticos.

Quase a totalidade da água utilizada para servir ao abastecimento público e industrial é proveniente dos rios. Com relação a estes recursos hídricos, a possibilidade de escassez de água tem se mostrado cada vez maior e conseqüências já podem ser percebidas por parte da população do planeta. Algumas regiões convivem diariamente com a suspensão parcial do abastecimento de água potável. Cerca de um quarto da população mundial não tem acesso à água adequada ao consumo humano. Pesquisas realizadas em 1985 pela Organização Mundial da Saúde revelaram que 97 % dos habitantes de países industrializados tinham acesso à água tratada; já nos países em desenvolvimento este índice caía para 35 %.

O Brasil tem uma situação privilegiada em termos de água, com 13,7 % da água doce disponível no planeta e dois terços do maior aquífero subterrâneo do mundo, o Aquífero Guarani. Isto significa uma disponibilidade de água 80 % maior que a do Canadá e a da China, e duas vezes maior que a dos Estados Unidos.

A água doce é entretanto extremamente mal distribuída no Brasil, pois 80 % das águas brasileiras estão na Amazônia, enquanto São Paulo,

que tem 20 % da população do país, conta apenas com 1,6 % dos recursos hídricos. Sendo assim, existe uma baixa disponibilidade de água em algumas regiões do estado de São Paulo.

3.1 Fluxo em rios e canais

Um canal aberto é, por definição, um conduto que possui uma superfície livre [French (15, 1986)]. Tais canais podem ter sido originados por processos naturais, como rios, riachos e estuários; ou por processos artificiais, como canais para navegação, canais para irrigação e valas de drenagem.

O fluxo de água em rios ou canais é, sob vários aspectos, semelhante ao fluxo em tubos. A principal diferença entre estes dois tipos de fluxo é que em canais abertos existe uma superfície livre; enquanto no fluxo em tubos isto não ocorre, já que o fluido deve preenchê-lo completamente.

Apesar da semelhança entre os dois tipos de fluxo, problemas envolvendo canais abertos têm, normalmente, uma solução mais difícil que aqueles que envolvem tubos. As condições de fluxo em canais abertos e rios são complicadas pelo fato de que a posição da superfície livre pode mudar com o tempo e com o espaço.

A classificação dos escoamentos existentes em canais abertos é feita com base em diferentes critérios. Chow (6, 1959) classificou os fluxos em canais de acordo com as variações ocorridas na profundidade do fluxo em relação ao tempo e ao espaço.

De acordo com a variação do fluxo em relação ao tempo, tem-se:

Fluxo permanente: Ocorre quando a profundidade do fluxo não varia ou é considerada constante ao longo do tempo.

Fluxo não-permanente: A profundidade do fluxo varia com o tempo.

De acordo com a variação do fluxo em relação ao espaço, tem-se:

Fluxo uniforme: Ocorre quando a profundidade do fluxo é considerada constante em qualquer seção transversal do canal estudado.

Fluxo variado: Ocorre quando a profundidade do fluxo varia ao longo do comprimento do canal. O fluxo variado pode ainda ser dividido em rapidamente variado ou gradualmente variado.

3.1 Fluxo em rios e canais

Tabela 3.1: Distribuição da água mundial.

Reservatório	Volume (10^3 Km^3)	% do Volume Total
Oceanos	1.338.000,0	95,5379
Subsolo	23.400,0	1,6883
Água doce	10.530,0	0,7597
Água salgada	12.870,0	0,9286
Umidade do Solo	16,5	0,0012
Áreas congeladas	24.064,0	1,7362
Antártica	21.600,0	1,5585
Groelândia	2339,5	0,1688
Ártico	83,5	0,0060
Montanhas	40,6	0,0029
Solos congelados	300,0	0,0216
Lagos	176,4	0,0127
Água doce	91,0	0,0066
Água salgada	85,4	0,0062
Pântanos	11,5	0,0008
Rios	2,1	0,0002
Biomassa	1,1	0,0001
Vapor d'água na atmosfera	12,9	0,0009
Total de água salgada	1.350.955,4	97,4726
Total de água doce	35.029,1	2,5274
Total de água no planeta	1.385.984,5	100,0

Fonte: Shiklomanov (36, 1997)

3.1 Fluxo em rios e canais

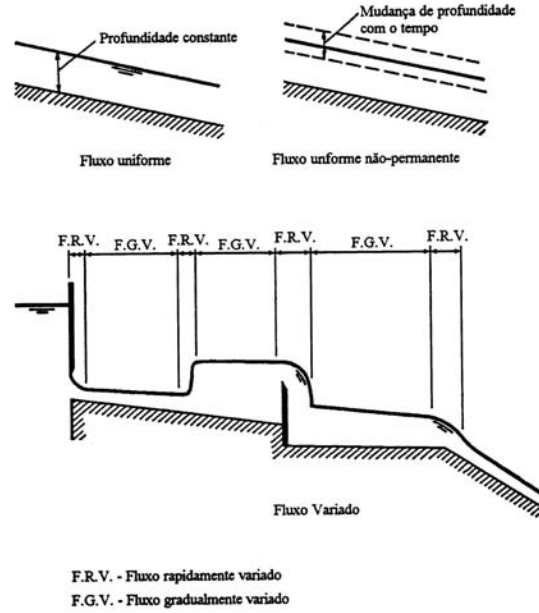


Figura 3.1: Tipos de fluxo em canais abertos. Fonte: Chow (6, 1959)

Os diversos tipos de escoamento definidos por Chow (6, 1959) são ilustrados na Figura 3.1.

Assim como o escoamento em tubos, dependendo da magnitude entre as forças inerciais e as forças viscosas, o fluxo em canais pode ser classificado como laminar, de transição ou turbulento. O parâmetro adimensional que relaciona estes dois tipos de força é o número de Reynolds (Re), cuja definição é apresentada na Equação 3.1.

$$Re = \frac{UL_C}{\nu} \quad (3.1)$$

Sendo:

- U = velocidade característica do escoamento (velocidade média).
- L_C = comprimento característico do canal (raio hidráulico).

- ν = viscosidade cinemática.

O raio hidráulico de um canal é determinado pela razão entre a área da seção transversal ao escoamento, A_T , e o perímetro molhado, P_m , como são mostrados na Equação 3.2.

$$L_C = \frac{A_T}{P_m} \quad (3.2)$$

O fluxo laminar é aquele em que as forças viscosas são predominantes sobre as fontes inerciais. No fluxo turbulento, as forças inerciais predominam. A faixa de transição é aquela onde o escoamento não pode ser classificado nem como laminar nem como turbulento. French (15, 1986) apresentou a seguinte classificação em relação ao número de Reynolds para fluxos em canais abertos:

$Re < 500$	Laminar
$500 \leq Re \leq 12.500$	Transição
$Re > 12.500$	Turbulento

Apesar destas faixas de números de Reynolds existirem na literatura, acredita-se que os escoamentos em rios são de variedade e complexidade tais que se torna difícil classificar um escoamento específico a partir de definições generalizadas. Chow (6, 1959) diz que a maioria dos escoamentos em canais abertos se dá de forma turbulenta. O fato da superfície de um rio parecer plana e suave para um observador não significa que o escoamento em questão seja laminar. Provavelmente isso indica apenas que a velocidade na superfície é menor que a requerida para a formação de ondas.

3.2 Dispersão de efluentes

A dispersão é definida como o fenômeno de transporte de efluentes causado pela ocorrência conjunta de difusão molecular e/ou turbulenta e da convecção. O transporte difusivo ocorre quando as moléculas do efluente se dispersam entre as camadas do fluido devido ao gradiente de concentração

existente entre as diferentes regiões do escoamento. Já a dispersão convectiva ocorre devido às componentes de velocidade existentes. A convecção ocorre, por exemplo, em regimes turbulentos devido à existência de velocidades paralelas. Embora estes fenômenos estejam sempre presentes durante a dispersão dos efluentes, existem situações em que apenas um predomina.

Os parâmetros que levam em consideração a difusão do efluente são chamados coeficientes de dispersão [Cox (9, 2003)]. Fischer (12, 1967) apresentou uma metodologia para predição da taxa de dispersão longitudinal em correntes naturais. Foram apresentados diversos valores de coeficientes de dispersão determinados em laboratório para diferentes condições de escoamento. Nordin & Sabol (29, 1974) verificaram que os escoamentos que ocorrem no meio ambiente não apresentam coeficientes de dispersão constantes.

Neste trabalho, o coeficiente de dispersão é considerado um parâmetro de ajuste do modelo, sendo seu valor determinado a partir de dados de concentração e vazão do rio de interesse.

O fenômeno de dispersão de efluentes industriais em rios é mostrado esquematicamente na Figura 3.2. De acordo com esta figura, o efluente é lançado com uma dada vazão constante Q_e na lateral do rio que escoar com uma vazão também constante Q_r . À medida que percorre o leito do rio, a pluma formada de efluente vai se expandindo ao longo da zona de mistura, de comprimento L_D , até atingir uma zona de mistura completa, onde não há mais dispersão significativa. A partir deste ponto, apenas as reações de decomposição da substância em estudo, caso seja um componente degenerativo, devem ser levadas em consideração.

Nokes & Huges (28, 1994) propuseram um método para modelar problemas tridimensionais turbulentos de dispersão em canais abertos de seção transversal arbitrária regular. Uma técnica semi-analítica foi aplicada para investigar a descarga permanente de um efluente não degenerativo em um canal com o perfil de velocidade e difusividade conhecidos. O modelo assumiu a não existência de fluxo secundário, representando uma limitação do modelo matemático. Shiono & Knight (37, 1991) e Tominaga & Nezu (41, 1991) mostraram que mesmo canais de geometria simples apresentam fluxos secundários. Naot & Rodi (27, 1982), utilizando um modelo de turbulência $k-\varepsilon$, mostraram que fluxos secundários também aparecem nas proximidades das paredes de canais de seção transversal retangular.

A principal dificuldade na modelagem da dispersão de efluentes em rios é a obtenção de dados experimentais confiáveis devido à complexidade

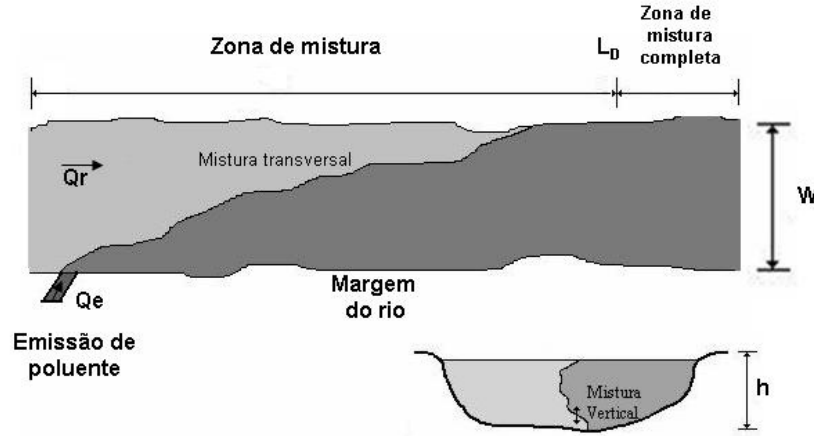


Figura 3.2: Esquema de dispersão de efluentes.

do fluxo em canais abertos e as dificuldades na amostragem. Contudo, a calibração de um modelo matemático é feita através da obtenção destes dados experimentais. Ciffroy *et al* (7, 2000) realizaram experimentos ao longo do rio Seine para determinar parâmetros sedimentológicos e químicos necessários para calibrar um modelo numérico previamente desenvolvido. Uma vez obtidos os parâmetros, o modelo foi utilizado para simular o transporte de cobre pelo rio.

Muitos estudos vêm sendo realizados com o intuito de compreender as interações entre a geometria do canal, descarga de efluentes, estrutura do fluido e transporte de material sedimentado. A investigação em campo destas interações é realizada pontualmente em sua maioria. Esse procedimento é demorado, caro e, de certa maneira, ineficiente, uma vez que o sistema em si pode sofrer mudanças. Já um modelo numérico, se comprovada sua habilidade de predição, pode ser ajustado a uma nova situação sem a necessidade de um novo estudo detalhado. Uma questão que surge na escolha de um modelo é o número de dimensões a ser considerada. Embora, podendo representar melhor o processo em estudo, os modelos tridimensionais devem ser tratados com cautela, uma vez que estes requerem um considerável aumento de esforço computacional.

Lane *et al* (20, 1999) aplicaram a dinâmica dos fluidos computacional para modelar o fluxo em rios e canais. Neste estudo, eles compararam

as abordagens bidimensional e tridimensional. Os resultados obtidos para ambos os modelos foram comparados com dados experimentais. Além disso, o artigo descreve as principais características da modelagem tridimensional adotadas no estudo, a metodologia para validar as predições obtidas e calcula o desempenho do modelo 3D e sua comparação com os resultados obtidos em uma modelagem 2D sob mesmas condições de contorno. As equações utilizadas foram a de conservação de massa e a de momento de Navier-Stokes para um fluido incompressível. Os termos de gradiente de pressão horizontal, a influência do vento sobre a superfície e o termo associado ao efeito Coriolis não foram considerados. Foram observadas limitações na modelagem tridimensional no que se refere a capacidade de predição do modelo. Isto se deve a grande quantidade de informações referentes a topografia do rio ou canal necessários neste tipo de modelagem. Por outro lado, apenas o modelo 3D foi capaz de prever fluxos secundários. A grande vantagem do modelo 3D foi observada quando testada sua capacidade de predição em escala de aplicação. Os resultados obtidos para as tensões de cisalhamento mostraram-se mais confiáveis com o modelo 3D.

Venutelli (43, 1998) apresentou um método de terceira ordem de Taylor-Galerkin para simular fluxos bidimensionais transientes de superfície livre. Com isso, foi possível descrever a propagação de onda em um fluido incompressível perto da superfície na presença de possíveis descontinuidades. Como aplicação do modelo, foi simulada a propagação de uma onda submersa conseqüente da partição de uma represa vertical localizada em um rio considerado de base horizontal e sem efeitos de fricção. Não foi realizada nenhuma comparação com dados experimentais. De um modo geral, o método utilizado mostrou-se interessante, uma vez que reduziu consideravelmente os custos computacionais por ter trabalhado apenas com termos lineares em seu modelo.

Lien *et al* (22, 1999) desenvolveram um modelo de profundidade média bidimensional para simular as características do fluxo em canais curvos. O modelo utilizado leva em consideração a existência de fluxo secundário através do cálculo de tensões de dispersão. O sistema de coordenadas utilizado foi o ortogonal curvilíneo. Para demonstrar a capacidade do modelo, os resultados obtidos foram comparados com alguns dados experimentais. As tensões de cisalhamento na superfície da água causadas pelo vento foram consideradas nulas. O fluxo secundário existente era causado pelo desequilíbrio local entre as forças centrífugas e de pressão transversais geradas pela elevação da superfície da água. O campo de velocidade assumido foi de distribuição logarítmica. Nas fronteiras sólidas, a lei da parede foi aplicada

fora da subcamada laminar e da camada de transição. Os resultados obtidos considerando o fluxo secundário e em condição de não-deslizamento apresentaram boa concordância com os dados experimentais no caso de canais com curvatura média.

Vasiliev *et al* (42, 1997) estudaram o fluxo bidimensional e assimétrico em um canal plano que apresentava uma depressão em sua base. Para isso foi utilizado um modelo de turbulência de uma única equação. O sistema de coordenadas utilizado foi o ortogonal curvilíneo. A condição de contorno de não deslizamento foi utilizada para as paredes. As distribuições de velocidade e viscosidade foram consideradas iguais àquelas presentes em um problema de placas planas paralelas. Os resultados mostraram razoável concordância com dados experimentais

Jya & Wang (18, 1999) apresentaram um modelo bidimensional de profundidade média, CCHE2D*, para simular o fluxo turbulento transiente em um canal aberto e o transporte de sedimentos. Os autores adotaram um método de elementos finitos denominado EEM[†], que tem a habilidade de lidar com geometrias complexas, como o método dos elementos finitos; e a eficiência de formulação do modelo presente no método das diferenças finitas. As tensões de cisalhamento na superfície foram consideradas nulas, uma vez que o efeito do vento pode ser desconsiderado. O estudo considerou fronteiras fixas onde as condições de deslizamento e não-deslizamento foram aplicadas. A lei logarítmica de distribuição de velocidade foi utilizada nas proximidades da parede. O estudo considerou ainda o problema com fronteiras móveis. Os resultados obtidos para um canal de 180° de curvatura mostraram boa concordância com dados experimentais, apesar do modelo não ser capaz de prever fluxo secundário. Isso indica que para canais de curvatura pouco acentuada o modelo mostra-se eficiente para simular o campo de fluxo.

Ye & McCorquodale (48, 1998) utilizaram um modelo matemático tridimensional para simular os fenômenos de transferência de momento e massa em um canal curvo. O modelo de turbulência utilizado foi o k- ϵ , com algumas modificações necessárias para descrever de forma mais adequada os efeitos de fluxos secundários que aparecem em canais superficiais curvilíneos. O modelo foi utilizado para simular duas situações típicas para canais curvos. Em uma primeira simulação, um canal de 270° de curvatura foi simulado. Posteriormente um canal de curvas opostas de 90° foi estudado. Todos os resultados foram comparados com dados experimentais. Na entrada do canal,

*Modelo matemático de transporte de sedimentos para simulação de rios e lagos.

[†]Do inglês *Efficient Element Method*.

distribuições uniformes para todas as variáveis dependentes foram prescritas. Na saída, os gradientes normais de todas as variáveis dependentes foram considerados nulos. Os efeitos de parede foram determinados por meio de uma função de parede refinada que se mostrou mais adequada que a convencional lei logarítmica. Para esta função, a velocidade normal à parede foi considerada nula. O gradiente normal de concentração era nulo nas fronteiras sólidas. Na superfície livre os gradientes normais das variáveis dependentes também eram nulos. Os resultados obtidos pelo modelo mostraram boa concordância com os dados experimentais em ambas as simulações. Na segunda simulação, nas proximidades do ponto de descarga, algumas discrepâncias foram observadas. Em uma comparação com o modelo $k-\epsilon$ padrão, o modelo proposto mostrou-se mais eficiente para descrever efeitos de correntes secundárias comuns em canais curvos.

Schreck & Schäfer (35, 2000) utilizaram o método dos volumes finitos para estudar numericamente o comportamento de um fluido escoando através de um canal de seção transversal retangular que apresentava uma expansão repentina nesta seção. O estudo numérico realizado é baseado na resolução das equações de Navier-Stokes. Todas as simulações foram realizadas para uma razão de expansão de 1:3. Condições de contorno de simetria foram utilizadas para as paredes. A malha mais refinada que foi utilizada possuía $184 \times 96 \times 64$ volumes de controle. Os resultados mostraram o aparecimento de zonas de circulação após a expansão. Contudo nenhuma comparação com dados experimentais foi realizada.

3.3 Poluentes biodegradáveis

Muitos pesquisadores desenvolveram modelos matemáticos para descrever, prever e controlar o nível de substâncias orgânicas em rios e canais. O conhecimento da quantidade de matéria orgânica e do déficit de oxigênio dissolvido em um rio permite estimar a carga máxima de matéria orgânica que este rio pode receber [Leu *et al* (21, 1998)]. Modelos de qualidade de água são amplamente utilizados por agências ambientais e companhias de recursos hídricos em todo o mundo [Cox (9, 2003)].

A demanda bioquímica de oxigênio (DBO) e o oxigênio dissolvido (OD) são os dois parâmetros normalmente mais utilizados como indicadores do nível de poluição de um canal [Padgett & Rao (30, 1979)]. Os modelos matemáticos que descrevem a variação destes dois componentes são baseados

em equações de balanço de massa da matéria biodegradável e do oxigênio dissolvido [Rinaldi *et al* (32, 1979)].

Quando a matéria orgânica biodegradável é despejada no meio aquático, os microrganismos decompositores fazem a sua decomposição por meio de mecanismos bioquímicos. Para realizarem esta digestão, os microrganismos aeróbios utilizam o oxigênio dissolvido na água e passam a competir com os demais organismos. Como eles têm substrato a sua disposição (neste caso, a matéria orgânica a ser decomposta) e necessitam de uma pequena concentração de oxigênio para se desenvolverem, ganham a competição. Com isso, os peixes morrem e a população de microrganismos cresce rapidamente. É dessa forma que a matéria orgânica biodegradável causa poluição.

Peixes e outras espécies animais precisam de uma certa quantidade de oxigênio para sobreviver, sendo necessária uma concentração mínima de 2 mg/L para a existência de formas de vida aeróbia superior. Algumas espécies são mais exigentes com relação à presença de oxigênio dissolvido, necessitando no mínimo de uma concentração de 4 mg/L.

A concentração de oxigênio dissolvido na água é função de diversas variáveis:

- Características do despejo, tais como a natureza do material biodegradável envolvido, a facilidade com que ele é biodegradado pelos microrganismos decompositores, a quantidade de oxigênio necessário para a biodegradação, a quantidade de poluente e a vazão despejada.
- Características do rio, que estão associadas à facilidade com que as cargas poluidoras são misturadas ao meio aquático. Entre as variáveis mais importantes estão a velocidade do fluido, a geometria do escoamento e a intensidade da difusão turbulenta.
- Produção de oxigênio, que pode ser originado pela atividade fotossintética dos microrganismos autótrofos ou pela reaeração, a qual consiste na passagem do oxigênio atmosférico para o meio aquático.

Um rio poluído por lançamentos de matéria orgânica biodegradável sofre um processo natural de recuperação denominado autodepuração. A autodepuração realiza-se por meio de processos físicos (diluição, sedimentação), químicos (oxidação) e biológicos. A decomposição da matéria orgânica corresponde, portanto, a um processo biológico integrante do fenômeno da autodepuração.

3.3 Poluentes biodegradáveis

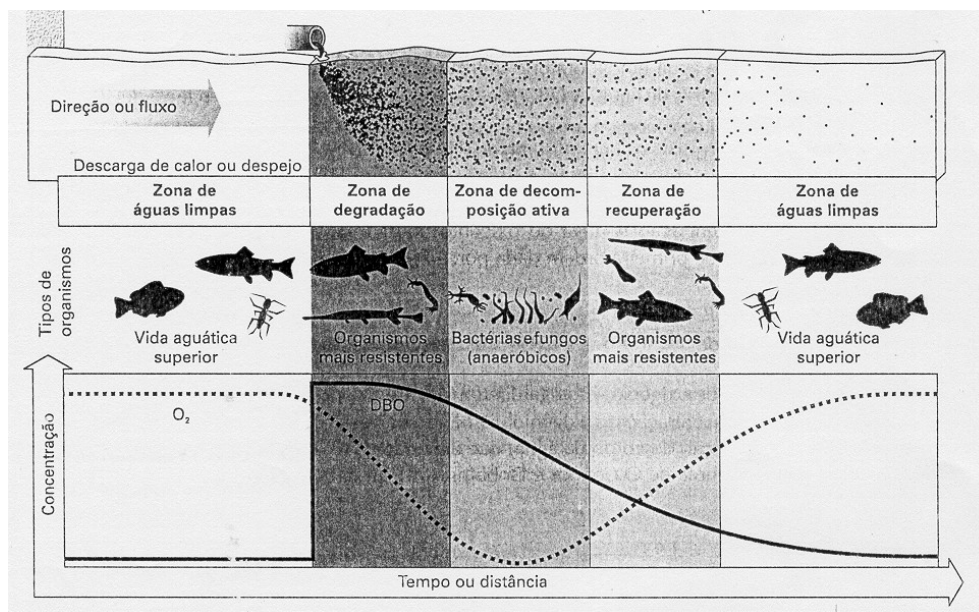


Figura 3.3: Representação do processo de autodepuração em um rio. Fonte: Braga *et al* (3, 2002)

A matéria orgânica biodegradável é consumida pelos microrganismos decompositores aeróbios, que transformam os compostos orgânicos de cadeias mais complexas em compostos mais simples. Durante a decomposição, há um decréscimo na concentração de oxigênio dissolvido na água devido à respiração destes microrganismos. O processo de autodepuração se completa com a reposição, pela reaeração, deste oxigênio consumido.

Na Figura 3.3 é mostrada uma representação de um processo de autodepuração, com as seguintes regiões características:

Região anterior ao lançamento da matéria orgânica: em geral é uma região de águas limpas, com elevada concentração de oxigênio dissolvido e vida aquática superior, isso se já não existir poluição anterior;

Zona de degradação: localiza-se a jusante do ponto de lançamento do poluente biodegradável, sendo caracterizada por uma diminuição inicial na concentração de oxigênio dissolvido, sedimentação de parte do material sólido e aspecto indesejável. Nessa região ainda existem peixes que afluem ao local em busca de alimentos, quantidade elevada de bactérias e fungos, mas poucas algas;

Zona de decomposição ativa: é a zona em torno da qual a concentração de oxigênio dissolvido atinge o valor mínimo, podendo inclusive tornar-se igual a zero em alguns casos. Nessa região a quantidade de bactérias diminui, havendo também uma redução ou mesmo eliminação da quantidade de organismos aeróbios;

Zona de recuperação: nesta zona ocorre um aumento na concentração de oxigênio dissolvido, pois os mecanismos de reaeração acabam predominando sobre os mecanismos de desoxigenação. A concentração de oxigênio pode voltar a atingir a concentração de saturação. O aspecto da água melhora continuamente, havendo uma redução na quantidade de bactérias e um aumento na quantidade de peixes e outros organismos aeróbios. Existe uma tendência para a proliferação de algas devido à disponibilidade de nutrientes, resultantes da decomposição da matéria orgânica;

Zona de águas limpas: é a zona na qual a água volta a apresentar condições satisfatórias em relação à concentração de oxigênio dissolvido. Devido a essas condições, a quantidade de peixes e outros seres vivos aeróbios voltam a níveis normais.

Em 1925, Streeter & Phelps publicaram uma modelagem da concentração de oxigênio dissolvido no rio Ohio. Este modelo mostrou que a concentração de oxigênio dissolvido diminuía a partir do ponto da emissão do efluente devido à degradação da matéria orgânica solúvel presente. Foi proposta uma equação matemática para descrever o fenômeno, que se tornou amplamente conhecida como a equação de Streeter-Phelps [Schnoor (34, 1996)].

O modelo de Streeter-Phelps é o mais utilizado na predição da qualidade de água de um canal natural, e muitos dos demais modelos de qualidade de água existentes atualmente foram concebidos a partir de sua modificação [Leu *et al* (21, 1998), Cox (9, 2003)]. O modelo de Streeter-Phelps inclui duas equações: a primeira descreve a distribuição espacial da demanda bioquímica de oxigênio, e a segunda descreve o perfil de concentração do oxigênio dissolvido. Estas duas equações estão acopladas, já que a decomposição da matéria orgânica resulta em uma diminuição do oxigênio dissolvido [Chapra & Runkel (5, 1999)].

Uma aplicação do modelo de Streeter-Phelps para modelagem da concentração de oxigênio dissolvido é mostrada na Figura 3.4. Esta figura representa um canal originalmente não poluído e com concentração de oxigênio dissolvido próxima à concentração da saturação. Um efluente com uma alta demanda bioquímica de oxigênio é então adicionado. Os microrganismos

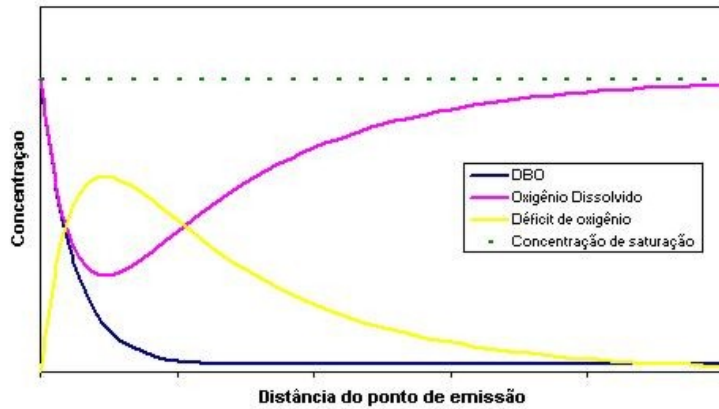


Figura 3.4: Perfil de concentração de DBO e OD em um canal.

mos decompositores, com substrato à disposição, começam a se desenvolver e a consumir o oxigênio presente na água. Devido à diminuição do nível de oxigênio, ocorre um processo de reaeração com a finalidade de compensar este déficit. Inicialmente, a reaeração é prejudicada pela oxidação da matéria orgânica. Entretanto, com a diminuição da quantidade de matéria orgânica presente no escoamento, a concentração de oxigênio dissolvido volta a subir até novamente atingir um nível próximo ao da concentração de saturação [Cox (9, 2003)].

Kamal *et al* (19, 1999) investigaram a qualidade da água do rio Buriganga, um dos mais poluídos de Bangladesh, e simularam os níveis de oxigênio dissolvido utilizando um modelo de qualidade da água. A fim de atingir os objetivos do trabalho, foi desenvolvido um programa de aquisição de dados, tanto *in situ* como em testes laboratoriais. Foi utilizado um modelo matemático unidimensional desenvolvido pelo *Danish Hydraulic Institute* (DHI) da Dinamarca. Diferentes cenários foram testados para prever as mais diversas condições do rio. Apesar das simplificações do modelo, os resultados da simulação replicaram os baixos níveis de oxigênio dissolvido no rio determinados experimentalmente.

Campolo *et al* (4, 2002) avaliaram a qualidade das águas do rio

Arno utilizando um modelo matemático calibrado com dados experimentais. O modelo foi desenvolvido a partir das equações de transferência de massa, energia e quantidade de movimento. O regime foi considerado transiente e o sistema unidimensional. O rio Arno foi dividido em 198 células de 500 m. Os parâmetros avaliados pelo modelo foram DBO e oxigênio dissolvido. Os resultados mostraram a necessidade de elevação dos níveis de oxigênio dissolvido em algumas regiões do rio Arno para que estes não desçam abaixo de determinados índices de segurança. Também mostraram que o controle da poluição neste rio pode ser feito de maneira eficaz através do gerenciamento da vazão dos reservatórios de água, uma vez que a capacidade de degradação da matéria orgânica varia de acordo com a vazão do rio.

3.4 Efeitos da turbulência no escoamento

A maior parte dos escoamentos encontrados na natureza, inclusive em rios e canais abertos, é turbulento. Conseqüentemente, é de grande importância considerar seus efeitos para se obter um melhor entendimento do fenômeno estudado. Um dos principais efeitos da turbulência é um aumento considerável do poder de difusão do escoamento, desta forma o transporte de um poluente em um dado ambiente pode ser extremamente acelerado.

O modo mais simples de se definir o problema é considerar que os fenômenos de transferência de quantidade de movimento laminar e turbulento se processem de modo análogo. Esta abordagem, proposta pioneiramente por Boussinesq em 1877, sugeria que a tensão turbulenta deveria estar relacionada ao gradiente local de velocidade do escoamento médio através de uma viscosidade associada às características do escoamento e da geometria envolvida no problema sob consideração.

A hipótese de Boussinesq é comumente utilizada para a representação de escoamentos turbulentos. Esta hipótese é empregada para a resolução de diversas equações diferenciais parciais empregadas na modelagem de problemas ambientais e tem a vantagem que sua determinação depende de apenas duas variáveis (tensão de atrito e viscosidade turbulenta), sendo portanto relativamente simples de ser modelada [Hardy *et al* (17, 1999)].

A definição proposta por Boussinesq é mostrada na Equação 3.3.

$$\tau_T = \mu_T \frac{d\bar{U}}{dy} \quad (3.3)$$

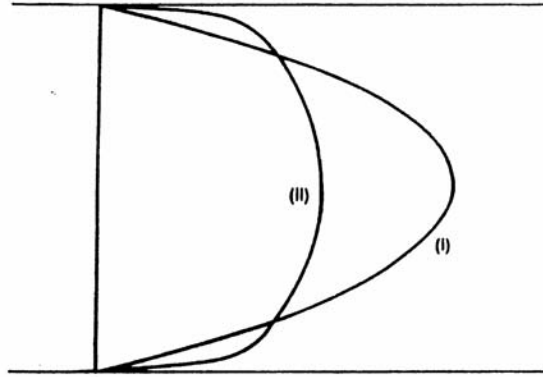


Figura 3.5: Comparação dos perfis de velocidade laminar (I) e turbulento (II).

Fonte: White (45, 1992)

Desta maneira, a viscosidade turbulenta, μ_T , deveria conter em sua definição parâmetros que bem caracterizassem a turbulência através da representação do fluido, do escoamento médio e da geometria utilizada. O efeito prático desta definição é o aumento da difusão no escoamento.

A idéia básica da utilização da viscosidade turbulenta na modelagem de escoamentos turbulentos é a inclusão desta viscosidade na equação de conservação de quantidade de movimento que descreve o fenômeno [White (45, 1992)]. De maneira análoga, a difusividade turbulenta pode ser introduzida na equação de transferência de massa.

Na Figura 3.5 são mostrados, para uma mesma vazão, os perfis de velocidade em uma canalização para as condições correspondentes ao escoamento turbulento e ao escoamento laminar. Fica evidente a variação mais brusca do perfil de velocidade junto à parede no caso do escoamento turbulento.

Os maiores efeitos do fenômeno da turbulência ocorrem próximos às paredes, onde os gradientes de velocidade são muito elevados. Yamamoto *et al* (47, 2001) simularam um escoamento turbulento com transporte de um escalar em um canal aberto. Neste trabalho, os efeitos da superfície livre no escoamento não tiveram influência considerada importante, demonstrando

que a superfície livre não contribui para a geração de turbulência.

Escoamentos que ocorrem com maior velocidade livre são mais turbulentos e tendem a apresentar uma interface ar-água com maior área superficial. Como a taxa de troca de gases nessa interface é proporcional à área da superfície, a turbulência aumenta a intensidade com que essas trocas ocorrem. Conseqüentemente, o oxigênio atmosférico penetra mais rapidamente no meio aquático e os gases resultantes da decomposição anaeróbia podem deixar o meio aquático com a mesma rapidez.

3.5 Introdução aos métodos numéricos

Para se fazer um estudo de um fenômeno físico com a utilização de métodos numéricos, deve-se inicialmente modelar a física do problema. Um modelo é elaborado a partir da aplicação de princípios físicos, descritos por leis de conservação adequadas ao fenômeno, como conservação de massa, energia e momento.

Em geral, problemas envolvendo o movimento de fluidos não possuem soluções analíticas conhecidas. Métodos experimentais e, mais recentemente, computacionais são, então, utilizados para verificar a validade do modelo teórico.

Para tratar o modelo computacionalmente, é necessário expressar de forma adequada as equações e a região (domínio) em que elas são válidas. O primeiro passo nesta direção é a chamada discretização. A discretização consiste em dividir o domínio de cálculo em um determinado número de subdomínios. Somente nesses subdomínios é que as soluções das equações serão obtidas. Ao conjunto dos pontos discretos dá-se o nome de malha. Em seguida, os termos que aparecem nas equações são escritos em função dos valores das incógnitas em pontos discretos adjacentes. O resultado é um conjunto de equações algébricas. Nessa etapa, introduzem-se as condições de contorno do problema, normalmente modificando-se apropriadamente as equações para pontos perto das fronteiras. As condições de contorno, junto com as condições iniciais, as propriedades físicas do fluido e os parâmetros do escoamento, especificam o problema a ser tratado.

Finalmente, as equações algébricas são resolvidas, fornecendo a solução do problema. Esta solução deve ser analisada para verificar se os resultados estão corretos. Ao se comparar os resultados numéricos com dados experimentais, pode-se ajustar o modelo matemático até que o mesmo reflita

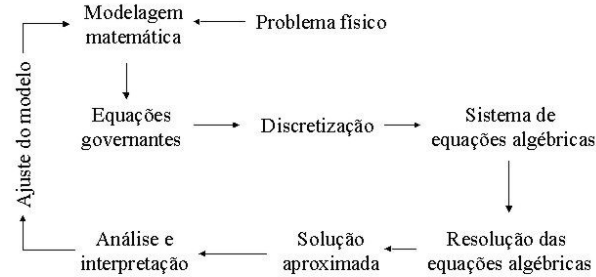


Figura 3.6: Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema de mecânica dos fluidos. Fonte: Fortuna (14, 2000)

esses dados experimentais. Na Figura 3.6 são resumidas as etapas necessárias para a obtenção da solução numérica de um problema de mecânica dos fluidos.

Um fator importante a ser considerado é que o modelo matemático deve ser tal que possa ser resolvido com tempos de computação não-proibitivos e que os resultados obtidos representem adequadamente o fenômeno físico em questão.

A área da computação científica que estuda métodos computacionais para simulação de fenômenos que envolvem fluidos em movimento é denominada dinâmica de fluidos computacional.

Estão sendo desenvolvidos atualmente diversos códigos computacionais capazes de simular o comportamento de sistemas ambientais. Já foi relatado o desenvolvimento de programas computacionais com capacidade de aplicação em rios com extensão entre 1 e 60 km, mantendo uma elevada resolução espacial e temporal [Hardy *et al* (17, 1999)].

Existem no mercado mundial diversos pacotes computacionais que simulam os mais variados tipos de escoamento. Entre eles, pode-se citar Fluent, Polyflow e CFX. Muitos destes programas apresentam soluções completas (ambientes de simulação), que incluem desde sistemas de definição da geometria e de geração de malhas até diferentes modelos de turbulência e de visualização científica. Porém, devido a sua complexidade, esses sistemas possuem elevados custos de aquisição (alguns na faixa de dezenas de milhares de dólares) e de manutenção, na forma da renovação periódica da licença de

uso [Fortuna (14, 2000)].

3.5.1 Método dos Volumes Finitos

A tarefa de um método numérico é resolver uma ou mais equações diferenciais, substituindo as derivadas existentes por expressões algébricas que envolvam a função incógnita (Maliska, 2004).

O método de volumes finitos é por vezes confundido com o método das diferenças finitas pelo fato de que, em vários casos, as equações discretizadas obtidas por ambos os métodos são iguais. Entretanto, os dois métodos têm bases de formulação bastante diferentes. Enquanto o método de diferenças finitas tem uma dedução puramente matemática, a partir das aproximações de derivadas usando séries de Taylor, a formulação do método de volumes finitos tem base física.

Segundo Maliska (24, 2004), todo método que, para obter as equações aproximadas, satisfaz a conservação da propriedade em nível de volumes elementares é um método de volumes finitos. Existem duas maneiras de se obter as equações aproximadas no método dos volumes finitos. A primeira é a realização de balanços da propriedade em questão nos volumes elementares, ou volumes finitos, e a segunda é integrar sobre o volume elementar, no espaço e no tempo, as equações na forma conservativa. Forma conservativa é aquela em que na equação diferencial os fluxos estão dentro do sinal da derivada e, na primeira integração, aparecem os fluxos nas fronteiras do volume elementar, equivalente, portanto, ao balanço.

É fácil reconhecer que os processos são equivalentes, pois basta lembrar que, para deduzir as equações diferenciais que representam os fenômenos físicos, é necessário primeiro realizar um balanço em volume finito, fazendo-se, em seguida, o processo de limites para obter a equação diferencial. Para ilustrar a conexão entre as equações aproximadas usadas no método dos volumes finitos e as equações diferenciais na forma conservativa, considerou-se o volume elementar bidimensional mostrado na Figura 3.7. O interesse, nesse momento, é deduzir a equação diferencial que representa a conservação da massa em regime permanente. O balanço de massa no volume elementar mostrado na figura é dado por:

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s = 0 \quad (3.4)$$

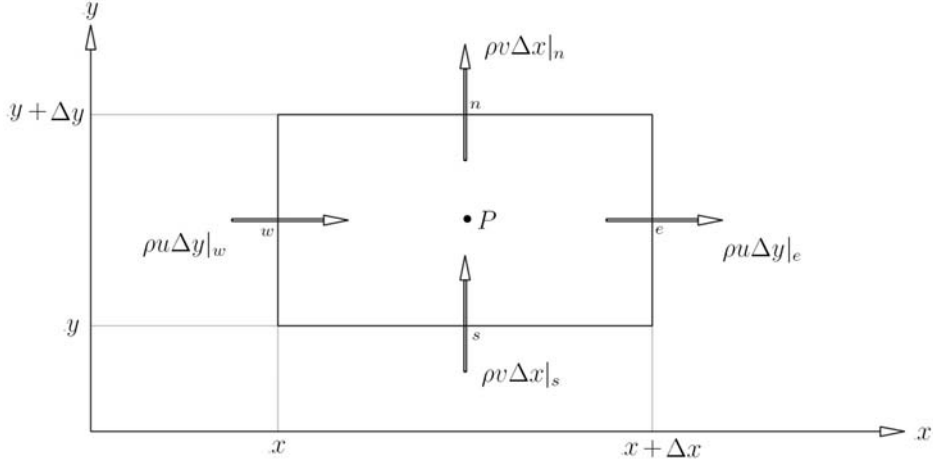


Figura 3.7: Volume elementar para os balanços de conservação.

que é exatamente a conservação de massa para regime permanente. Em termos das velocidades, para o volume elementar no sistema de coordenadas cartesianas, tem-se:

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0 \quad (3.5)$$

em que as letras minúsculas e, w, n e s na Figura 3.7 representam, respectivamente, os pontos cardeais leste, oeste, norte e sul e são a nomenclatura usada para identificar as faces do volume de controle na discretização numérica. Dividindo a equação 3.5 pelo produto $\Delta x \Delta y$, encontra-se:

$$\frac{\rho u|_e - \rho u|_w}{\Delta x} + \frac{\rho v|_n - \rho v|_s}{\Delta y} = 0 \quad (3.6)$$

que, após a aplicação do limite, resulta na forma diferencial conservativa da equação de conservação da massa.

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (3.7)$$

A obtenção de uma aproximação numérica da equação da conservação da massa infinitesimal através da sua integração no volume elementar

é a prática corrente do método dos volumes finitos. Realizando a integração da Equação 3.7 sobre o volume mostrado na Figura 3.7, obtém-se

$$\int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) \right] dx dy = 0 \quad (3.8)$$

$$\int_s^n [\rho u|_e + \rho u|_w] dy + \int_w^e [\rho v|_n + \rho v|_s] dx = 0 \quad (3.9)$$

Considerando que o fluxo de massa avaliado no meio da face do volume de controle representa a média da variação na face, pode-se escrever

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0 \quad (3.10)$$

que é exatamente a Equação 3.5, obtida através do balanço. Essa equação pode ser também escrita como:

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s = 0 \quad (3.11)$$

Essa equação, ou a Equação 3.4, é a equação aproximada válida para o volume P . Portanto, realizar a integração da forma conservativa da equação diferencial ou fazer o balanço são procedimentos equivalentes. Realizando a integração para todos os volumes elementares obtém-se um sistema de equações algébricas, cuja solução é a solução numérica procurada para o problema.

3.5.2 Problemas elípticos e parabólicos

Do ponto de vista numérico, é importante reconhecer as características das equações para que se possa tirar vantagens computacionais, como tempo computacional e armazenamento de variáveis. E é precisamente interpretando as vantagens computacionais que é mais útil definir os problemas de mecânica dos fluidos em problemas que permitem a sua solução pelo processo de marcha em uma determinada coordenada (temporal ou espacial) e aqueles que não permitem esse procedimento.

Pode-se dizer que os problemas parabólicos permitem o procedimento de marcha, enquanto os elípticos não permitem. Problemas de marcha são aqueles que não necessitam de condições de contorno a jusante, isto é, dependem apenas de informações a montante. Os termos convectivos das equações de Navier-Stokes são termos parabólicos, sendo fácil entender que, se não existir outro meio de transporte da propriedade presente na equação, não será possível que informações a jusante sejam transmitidas a montante, uma vez que as informações da convecção viajam apenas no sentido da velocidade e levadas por ela.

Computacionalmente, existe uma grande vantagem na solução de problemas em marcha, pois o armazenamento necessário é apenas correspondente a duas estações: a de cálculo e a montante, ao passo que, se o tratamento for elíptico, necessita-se do armazenamento global. Ainda mais importante é o fato que a solução completa é um conjunto de soluções independentes, extremamente mais rápida do que a solução envolvendo todos os pontos da malha.

Os problemas elípticos são aqueles nos quais as informações físicas se transmitem em todas as direções coordenadas. Efeitos difusivos e de pressão são efeitos elípticos os quais, se presentes no fenômeno, requerem o estabelecimento de condições de contorno em ambos os sentidos da coordenada em consideração. Ou seja, esses efeitos viajam também no sentido contrário ao da velocidade, conferindo características elípticas ao escoamento.

É fácil entender fisicamente que, em um dado meio, quando acontecer uma elevação de temperatura em algum ponto, o calor se transmitirá em todas as direções, de acordo com o valor da condutibilidade térmica. A difusão de calor, bem como de massa e quantidade de movimento, são fenômenos elípticos e, portanto, requerem condições de contorno em toda a fronteira do domínio.

Na Figura 3.8, o domínio de influência de um ponto P sobre o escoamento nos casos elíptico e parabólico é mostrado. Considerando a coordenada x mostrada, uma perturbação em P irá influenciar o domínio a montante e a jusante de P , no caso elíptico; e apenas a jusante de P , no caso parabólico.

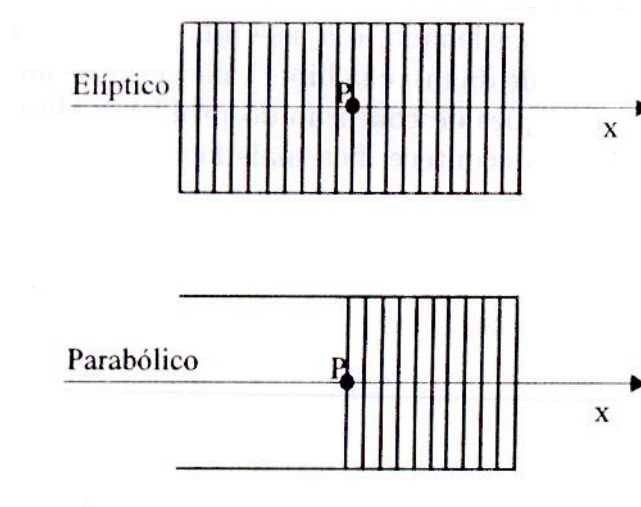


Figura 3.8: Comparação entre os casos elíptico e parabólico. Fonte: Fortuna (14, 2000)

Capítulo 4

Modelagem Matemática do Problema

4.1 Descrição do problema

Neste trabalho, o problema está sendo modelado através da resolução das equações de continuidade, conservação de movimento e de transferência de massa de um dado componente presente no efluente. Como o objetivo está focado na descrição global do fenômeno da dispersão deste efluente em um determinado trecho do escoamento, o rio pode ser considerado um canal rígido, onde as variações do leito podem ser desconsideradas.

A superfície da água, que seria a única superfície livre presente, também é considerada rígida e plana, pois a modelagem do problema é realizada para uma dada vazão constante. Esta consideração impossibilita a mobilidade da fronteira, que caracteriza a superfície livre.

É importante salientar que o foco deste trabalho consiste na construção de cenários de impactos ambientais causados por emissões de efluentes em rios. Busca-se assim um modelo capaz de descrever o comportamento de um determinado efluente sendo despejado continuamente em um rio em um dado momento, caracterizando dessa maneira um estudo de caso com condições permanentes. Desta forma, não há o interesse de que o modelo

4.1 Descrição do problema

esteja apto a simular o comportamento do sistema rio+efluente sob condição de variabilidade de vazões, concentrações iniciais e dimensões do leito do rio ao longo do tempo.

Para a formulação do modelo, foram assumidas ainda as seguintes hipóteses:

- **Escoamento permanente** – Conforme foi comentado, o interesse do trabalho é estudar o comportamento da dispersão de efluentes industriais em um determinado trecho de rio. O despejo de efluentes industriais se dá, em sua maioria, de forma contínua sem grandes variações ao longo de um determinado período de tempo. Nestes casos, não existem grandes variações com o tempo das propriedades em estudo, de forma que o regime como um todo pode ser considerado permanente. Na verdade, em um estudo de impacto ambiental, é fundamental o estudo do cenário de vazão mínima do rio que ocorre de 10 em 10 anos. Se o estudo indica viabilidade ambiental neste cenário, com certeza não ocorrerão maiores problemas para vazões maiores.
- **Escoamento predominantemente unidirecional** – O escoamento em um trecho de rio que não apresenta regiões de grande curvatura é predominantemente unidirecional. Esta hipótese permite a solução parabólica do problema na direção do escoamento.
- **Sistema diluído** – Os componentes presentes em efluentes industriais despejados em rios apresentam baixas concentrações caracterizando sistemas diluídos, permitindo que se resolvam as equações de Navier-Stokes apenas para a fase líquida, ou seja, de forma que a concentração do efluente não influencie o escoamento do rio.
- **Propriedades físicas constantes** – Todas as propriedades dos fluidos são consideradas constantes.
- **Escoamento incompressível**

Caso esteja se modelando a dispersão de uma substância inerte, o termo de reação química da equação de transferência de massa será igual a zero. Caso a substância a ser modelada seja não-inerte, o termo de reação química será substituído pelo modelo proposto por Streeter-Phelps, que nada mais é do que uma equação cinética de primeira ordem.

Dada a grande irregularidade da topografia do leito dos rios, torna-se extremamente difícil representá-los com exatidão. Para que isso fosse

possível, geometrias bastante complexas e não uniformes seriam necessárias. Neste trabalho, optou-se pela representação do sistema de estudo utilizando o sistema de coordenadas cartesianas. Este sistema de coordenadas, embora simples, foi capaz de prever satisfatoriamente diversos casos reais analisados.

4.2 Coordenadas Curvilíneas

A resolução das equações de movimento, em conjunto com as equações de continuidade e de energia representa um grande desafio no estudo de problemas envolvendo fluxos. As características geométricas envolvidas no problema definem o sistema de coordenadas a ser utilizado em cada situação.

Para os sistemas de coordenadas cartesianas e cilíndricas, essas equações são amplamente conhecidas. Contudo, quando a geometria do problema exige um sistema atípico de coordenadas ortogonais, a determinação das equações do modelo impõe um esforço extra.

Uma maneira de solucionar este problema é a obtenção das equações no que é chamado sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas. Com as equações descritas neste sistema de coordenadas, torna-se possível obtê-las em qualquer outro sistema de coordenadas, bastando conhecer a relação entre este novo sistema e o cartesiano.

Porém, antes da obtenção das equações do modelo no sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, algumas definições tornam-se necessárias.

Sejam (x, y, z) as coordenadas de um ponto qualquer, expressas em função de (u_1, u_2, u_3) , de modo que:

$$x = x(u_1, u_2, u_3), y = y(u_1, u_2, u_3), z = z(u_1, u_2, u_3) \quad (4.1)$$

A solução do sistema 4.1, quando possível, gera:

$$u_1 = u_1(x, y, z), u_2 = u_2(x, y, z), u_3 = u_3(x, y, z) \quad (4.2)$$

4.2 Coordenadas Curvilíneas

O conjunto de Equações 4.1 ou 4.2 define uma transformação de coordenadas.

Seja $\vec{r}$ o vetor posição de um dado ponto, tal que:

$$\vec{r} = x\vec{i} + y\vec{j} + z\vec{k} \quad (4.3)$$

e $\vec{i}, \vec{j}, \vec{k}$ sejam os vetores unitários na direção dos eixos x, y e z .

A partir das equações de transformação de coordenadas, é possível escrever o vetor posição $\vec{r}$ em função das novas coordenadas u_1, u_2 e u_3 . As derivadas parciais do vetor $\vec{r}$ em relação às coordenadas u_1, u_2 e u_3 são tangenciais às linhas coordenadas u_1, u_2 e u_3 correspondentes, e são chamadas vetores base ou fatores de proporcionalidade, sendo:

$$h_1 = \frac{\delta \vec{r}}{\delta u_1}, h_2 = \frac{\delta \vec{r}}{\delta u_2}, h_3 = \frac{\delta \vec{r}}{\delta u_3} \quad (4.4)$$

A partir destes vetores base, definem-se $\vec{e}_1, \vec{e}_2$ e $\vec{e}_3$, que correspondem aos vetores unitários na direção de u_1, u_2 e u_3 respectivamente, sendo:

$$\vec{e}_1 = \frac{1}{h_1} \frac{\delta \vec{r}}{\delta u_1}, \vec{e}_2 = \frac{1}{h_2} \frac{\delta \vec{r}}{\delta u_2}, \vec{e}_3 = \frac{1}{h_3} \frac{\delta \vec{r}}{\delta u_3} \quad (4.5)$$

Em termos destes vetores unitários, o vetor velocidade é dado por:

$$\vec{v} = v_1 \vec{e}_1 + v_2 \vec{e}_2 + v_3 \vec{e}_3 \quad (4.6)$$

O operador gradiente é dado por:

$$grad() = \frac{\delta()}{\delta u_1} \frac{\vec{e}_1}{h_1} + \frac{\delta()}{\delta u_2} \frac{\vec{e}_2}{h_2} + \frac{\delta()}{\delta u_3} \frac{\vec{e}_3}{h_3} \quad (4.7)$$

Em que o termo entre parênteses pode ser preenchido por um escalar, um vetor ou um tensor.

De forma equivalente, o operador divergente é dado por:

$$div() = \frac{\delta()}{\delta u_1} \cdot \frac{\vec{e}_1}{h_1} + \frac{\delta()}{\delta u_2} \cdot \frac{\vec{e}_2}{h_2} + \frac{\delta()}{\delta u_3} \cdot \frac{\vec{e}_3}{h_3} \quad (4.8)$$

As Equações 4.1 a 4.8 permitem escrever as equações de movimento, de continuidade e de transferência de massa em qualquer sistema ortogonal de coordenadas curvilíneas. Para a obtenção destas equações em um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, as mesmas são escritas em função das coordenadas u_1 , u_2 e u_3 e dos fatores de proporcionalidade h_1 , h_2 e h_3 , característicos de cada sistema.

4.3 Equações do modelo em um sistema generalizado de coordenadas

Modenesi (25, 2001) propôs um modelo em sistema ortogonal generalizado de coordenadas capaz de descrever o fenômeno do escoamento em um canal aberto. Este modelo é apresentado nas seções 4.3.1, 4.3.2 e 4.3.3. A partir deste modelo e das relações entre este sistema e o sistema de coordenadas de interesse, pode-se obter o modelo matemático escrito nas coordenadas desejadas.

4.3.1 Equação da continuidade

A equação da continuidade ou de conservação de massa, na sua forma vetorial é dada pela expressão a seguir:

$$\frac{\delta \rho}{\delta t} + div(\rho \vec{v}) = 0 \quad (4.9)$$

No presente estudo, o escoamento é considerado incompressível, dessa forma ρ é constante. Então a equação da continuidade se torna:

$$div(\vec{v}) = 0 \quad (4.10)$$

4.3 Equações do modelo em um sistema generalizado de coordenadas

A Equação 4.10, escrita em um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, é obtida das Equações 4.1 a 4.8 após algum desenvolvimento.

$$\frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta}{\delta u_1} (h_2 h_3 v_1) + \frac{\delta}{\delta u_2} (h_1 h_3 v_2) + \frac{\delta}{\delta u_3} (h_1 h_2 v_3) \right] \quad (4.11)$$

4.3.2 Equação de movimento

A equação de movimento, derivada da Segunda Lei de Newton, em sua forma vetorial, é expressa da seguinte maneira:

$$\rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \text{grad}(p) + \text{div}(\vec{\tau}) \quad (4.12)$$

Esta expressão é válida para todos os tipos de fluidos e pode ser aplicada a qualquer sistema de coordenadas. Na Equação 4.12, $\vec{\tau}$ é o tensor tensão que representa o campo de forças formado pela resistência dos elementos de fluido à taxa de deformação [Warsi (44, 1992)]. No presente problema, o fluido é Newtoniano, de maneira que o tensor tensão é dado por:

$$\vec{\tau} = \lambda(\text{div}\vec{v})\vec{I} + 2\mu\vec{D} \quad (4.13)$$

Além disso, como o fluido é incompressível, o tensor $\vec{\tau}$ passa a:

$$\vec{\tau} = 2\mu\vec{D} \quad (4.14)$$

Para a determinação da Equação 4.12 em um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, cada termo deve ser determinado separadamente, com exceção do termo $\rho\vec{g}$ que é obtido diretamente.

Determinação de $\frac{D\vec{v}}{Dt}$

O termo da derivada substantiva é expresso da seguinte maneira:

$$\frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{\delta\vec{v}}{\delta t} + (\vec{v} \cdot \text{grad})\vec{v} \quad (4.15)$$

4.3 Equações do modelo em um sistema generalizado de coordenadas

A Equação 4.15, escrita em um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, é obtida das Equações 4.1 a 4.8.

Direção u_1

$$\begin{aligned} \frac{D\vec{v}}{Dt} = & \frac{\delta v_1}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta v_1}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta v_1}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta v_1}{\delta u_3} + \\ & + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} - \frac{v_2^2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{v_3^2}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} \end{aligned} \quad (4.16)$$

Direção u_2

$$\begin{aligned} \frac{D\vec{v}}{Dt} = & \frac{\delta v_2}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta v_2}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta v_2}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta v_2}{\delta u_3} + \\ & + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} - \frac{v_3^2}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} \end{aligned} \quad (4.17)$$

Direção u_3

$$\begin{aligned} \frac{D\vec{v}}{Dt} = & \frac{\delta v_3}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta v_3}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta v_3}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta v_3}{\delta u_3} + \\ & + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} - \frac{v_2^2}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} \end{aligned} \quad (4.18)$$

Determinação de $grad(p)$

O termo de gradiente de pressão é obtido da Equação 4.7

Direção u_1

$$grad(p) = \frac{1}{h_1} \frac{\delta p}{\delta u_1} \quad (4.19)$$

Direção u_2

$$grad(p) = \frac{1}{h_2} \frac{\delta p}{\delta u_2} \quad (4.20)$$

Direção u_3

$$grad(p) = \frac{1}{h_3} \frac{\delta p}{\delta u_3} \quad (4.21)$$

Determinação de $div(\vec{\tau})$

Direção u_1

$$div(\vec{\tau}) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta(h_2 h_3 \tau_{11})}{\delta u_1} + \frac{\delta(h_1 h_3 \tau_{12})}{\delta u_2} + \frac{\delta(h_1 h_2 \tau_{13})}{\delta u_3} \right] + \frac{\tau_{21}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} + \frac{\tau_{31}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} - \frac{\tau_{33}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} \quad (4.22)$$

Direção u_2

$$div(\vec{\tau}) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta(h_2 h_3 \tau_{21})}{\delta u_1} + \frac{\delta(h_1 h_3 \tau_{22})}{\delta u_2} + \frac{\delta(h_1 h_2 \tau_{23})}{\delta u_3} \right] + \frac{\tau_{12}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} + \frac{\tau_{32}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} - \frac{\tau_{33}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} \quad (4.23)$$

Direção u_3

$$div(\vec{\tau}) = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta(h_2 h_3 \tau_{31})}{\delta u_1} + \frac{\delta(h_1 h_3 \tau_{32})}{\delta u_2} + \frac{\delta(h_1 h_2 \tau_{33})}{\delta u_3} \right] + \frac{\tau_{13}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} + \frac{\tau_{23}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_3} - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} \quad (4.24)$$

Com todos os termos definidos, torna-se possível escrever a equação de movimento para um fluido Newtoniano e incompressível em um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas.

Direção u_1

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\delta v_1}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta v_1}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta v_1}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta v_1}{\delta u_3} + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} - \frac{v_2^2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} + \right. \\ \left. + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{v_3^2}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} \right) = - \frac{1}{h_1} \frac{\delta p}{\delta u_1} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta(h_2 h_3 \tau_{11})}{\delta u_1} + \right. \\ \left. + \frac{\delta(h_1 h_3 \tau_{12})}{\delta u_2} + \frac{\delta(h_1 h_2 \tau_{13})}{\delta u_3} \right] + \frac{\tau_{21}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} + \frac{\tau_{31}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \\ - \frac{\tau_{22}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} - \frac{\tau_{33}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} \end{aligned} \quad (4.25)$$

Direção u_2

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\delta v_2}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta v_2}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta v_2}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta v_2}{\delta u_3} + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} + \right. \\ \left. + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} - \frac{v_3^2}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} \right) = -\frac{1}{h_2} \frac{\delta p}{\delta u_2} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta(h_2 h_3 \tau_{21})}{\delta u_1} + \right. \\ \left. + \frac{\delta(h_1 h_3 \tau_{22})}{\delta u_2} + \frac{\delta(h_1 h_2 \tau_{23})}{\delta u_3} \right] + \frac{\tau_{12}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} + \frac{\tau_{32}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} - \\ - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} - \frac{\tau_{33}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} \end{aligned} \quad (4.26)$$

Direção u_3

$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\delta v_1}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta v_1}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta v_1}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta v_1}{\delta u_3} + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} - \frac{v_2^2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} + \right. \\ \left. + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{v_3^2}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} \right) = -\frac{1}{h_3} \frac{\delta p}{\delta u_3} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta(h_2 h_3 \tau_{31})}{\delta u_1} + \right. \\ \left. + \frac{\delta(h_1 h_3 \tau_{32})}{\delta u_2} + \frac{\delta(h_1 h_2 \tau_{33})}{\delta u_3} \right] + \frac{\tau_{13}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} + \frac{\tau_{23}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_3} - \\ - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} \end{aligned} \quad (4.27)$$

Os componentes do tensor $\vec{\tau}$, presentes nas Equações 4.25, 4.26 e 4.27, são obtidos da Equação 4.14:

$$\tau_{11} = 2\mu \left(\frac{1}{h_1} \frac{\delta v_1}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} \right) \quad (4.28)$$

$$\tau_{22} = 2\mu \left(\frac{1}{h_2} \frac{\delta v_2}{\delta u_2} + \frac{v_1}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} + \frac{v_3}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} \right) \quad (4.29)$$

$$\tau_{33} = 2\mu \left(\frac{1}{h_3} \frac{\delta v_3}{\delta u_3} + \frac{v_1}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} \right) \quad (4.30)$$

$$\tau_{12} = \tau_{21} = \mu \left(\frac{1}{h_2} \frac{\delta v_1}{\delta u_2} + \frac{1}{h_1} \frac{\delta v_2}{\delta u_1} - \frac{v_1}{h_1 h_2} \frac{\delta h_1}{\delta u_2} - \frac{v_2}{h_1 h_2} \frac{\delta h_2}{\delta u_1} \right) \quad (4.31)$$

$$\tau_{13} = \tau_{31} = \mu \left(\frac{1}{h_3} \frac{\delta v_1}{\delta u_3} + \frac{1}{h_1} \frac{\delta v_3}{\delta u_1} - \frac{v_1}{h_1 h_3} \frac{\delta h_1}{\delta u_3} - \frac{v_3}{h_1 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_1} \right) \quad (4.32)$$

$$\tau_{23} = \tau_{32} = \mu \left(\frac{1}{h_3} \frac{\delta v_2}{\delta u_3} + \frac{1}{h_2} \frac{\delta v_3}{\delta u_2} - \frac{v_2}{h_2 h_3} \frac{\delta h_2}{\delta u_3} - \frac{v_3}{h_2 h_3} \frac{\delta h_3}{\delta u_2} \right) \quad (4.33)$$

4.3.3 Equação de transferência de massa de uma substância

A

Em notação vetorial, a equação de transferência de massa de uma substância A em um determinado meio é dada por:

$$\frac{DC_A}{Dt} = K_G \nabla^2 C_A + R_A \quad (4.34)$$

Sendo:

- R_A é o termo de reação química.
- K_G é a difusividade da substância A no meio em questão.
- C_A é a concentração da substância A no meio.

Como foi mostrado na Equação 4.15, o termo da derivada substantiva pode ser escrito da seguinte forma:

$$\frac{DC_A}{Dt} = \frac{\delta C_A}{\delta t} + (\vec{v} \cdot grad) \vec{C}_A \quad (4.35)$$

Considerando as Equações 4.6 e 4.7, a derivada substantiva da função escalar é dada por:

$$\frac{DC_A}{Dt} = \frac{\delta C_A}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta C_A}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta C_A}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta C_A}{\delta u_3} \quad (4.36)$$

4.4 Aplicação do modelo ao problema de Geometria Cartesiana

Segundo Spiegel (40, 1972), a expressão para o Laplaciano de uma função escalar, Φ , é dada por:

$$\nabla^2 \Phi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta}{\delta u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\delta \Phi}{\delta u_1} \right) + \frac{\delta}{\delta u_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\delta \Phi}{\delta u_2} \right) + \frac{\delta}{\delta u_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\delta \Phi}{\delta u_3} \right) \right] \quad (4.37)$$

Desta maneira, a Equação 4.34 pode ser escrita em um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas:

$$\begin{aligned} & \frac{\delta C_A}{\delta t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\delta C_A}{\delta u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\delta C_A}{\delta u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\delta C_A}{\delta u_3} = \\ & = \frac{K_G}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\delta}{\delta u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\delta C_A}{\delta u_1} \right) + \frac{\delta}{\delta u_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\delta C_A}{\delta u_2} \right) + \frac{\delta}{\delta u_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\delta C_A}{\delta u_3} \right) \right] + R_A \end{aligned} \quad (4.38)$$

4.4 Aplicação do modelo ao problema de Geometria Cartesiana

Para o caso da Geometria Cartesiana, as equações do modelo são expressas em coordenadas cartesianas.

Segundo Spiegel (40, 1972), para se transformar um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas em um sistema de coordenadas cartesianas, deve-se utilizar a seguinte relação:

$$h_1 = h_2 = h_3 = 1 \quad (4.39)$$

Assim, fazendo $u_1 = x$, $u_2 = y$ e $u_3 = z$, e substituindo 4.39 em 4.11, 4.25 a 4.27 e 4.38, pode-se escrever as equações do modelo em coordenadas cartesianas.

Equação da continuidade

$$\frac{\delta v_x}{\delta x} + \frac{\delta v_y}{\delta y} + \frac{\delta v_z}{\delta z} = 0 \quad (4.40)$$

Equação de movimento

Direção x :

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\delta v_x}{\delta t} + v_x \frac{\delta v_x}{\delta x} + v_y \frac{\delta v_x}{\delta y} + v_z \frac{\delta v_x}{\delta z} \right) = -\frac{\delta p}{\delta x} + \\ & + \frac{\delta}{\delta x} [2\mu \left(\frac{\delta v_x}{\delta x} \right)] + \frac{\delta}{\delta y} \left[\mu \left(\frac{\delta v_x}{\delta y} + \frac{\delta v_y}{\delta x} \right) \right] + \frac{\delta}{\delta z} \left[\mu \left(\frac{\delta v_z}{\delta x} + \frac{\delta v_x}{\delta z} \right) \right] + \rho g_x \end{aligned} \quad (4.41)$$

Direção y :

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\delta v_y}{\delta t} + v_x \frac{\delta v_y}{\delta x} + v_y \frac{\delta v_y}{\delta y} + v_z \frac{\delta v_y}{\delta z} \right) = -\frac{\delta p}{\delta y} + \\ & + \frac{\delta}{\delta x} \left[\mu \left(\frac{\delta v_x}{\delta y} + \frac{\delta v_y}{\delta x} \right) \right] + \frac{\delta}{\delta y} [2\mu \left(\frac{\delta v_y}{\delta y} \right)] + \frac{\delta}{\delta z} \left[\mu \left(\frac{\delta v_y}{\delta z} + \frac{\delta v_z}{\delta y} \right) \right] + \rho g_y \end{aligned} \quad (4.42)$$

Direção z :

$$\begin{aligned} & \rho \left(\frac{\delta v_z}{\delta t} + v_x \frac{\delta v_z}{\delta x} + v_y \frac{\delta v_z}{\delta y} + v_z \frac{\delta v_z}{\delta z} \right) = -\frac{\delta p}{\delta z} + \\ & + \frac{\delta}{\delta x} \left[\mu \left(\frac{\delta v_x}{\delta z} + \frac{\delta v_z}{\delta x} \right) \right] + \frac{\delta}{\delta y} \left[\mu \left(\frac{\delta v_y}{\delta z} + \frac{\delta v_z}{\delta y} \right) \right] + \frac{\delta}{\delta z} [2\mu \left(\frac{\delta v_z}{\delta z} \right)] + \rho g_z \end{aligned} \quad (4.43)$$

Equação de transferência de massa de uma substância A

$$\begin{aligned} & \frac{\delta C_A}{\delta t} + v_x \frac{\delta C_A}{\delta x} + v_y \frac{\delta C_A}{\delta y} + v_z \frac{\delta C_A}{\delta z} = \\ & = K_G \left[\frac{\delta^2 C_A}{\delta x^2} + \frac{\delta^2 C_A}{\delta y^2} + \frac{\delta^2 C_A}{\delta z^2} \right] + R_A \end{aligned} \quad (4.44)$$

As Equações 4.40 a 4.44 podem ser simplificadas de acordo com as hipóteses assumidas para o modelo. Uma das hipóteses consideradas é de que o fluxo é unidirecional. Esta consideração pode ser feita para este caso, pois o comprimento da calha, L , é muitas vezes maior do que a profundidade e a largura da mesma. Nestas condições, as componentes da velocidade v_x e v_y são muito pequenas, a ponto de serem desprezadas. Assim:

$$v_x = v_y \cong 0 \quad (4.45)$$

Outra hipótese assumida é de que o escoamento é plenamente desenvolvido. Desta maneira:

$$\frac{\delta v_z}{\delta z} = 0 \quad (4.46)$$

De acordo com estas condições, e sabendo que o escoamento é permanente, obtém-se as seguintes equações de movimento:

Direção x :

$$-\frac{\delta p}{\delta x} + \rho g_x = 0 \quad (4.47)$$

Direção y :

$$-\frac{\delta p}{\delta y} + \rho g_y = 0 \quad (4.48)$$

Direção z :

$$-\frac{\delta p}{\delta z} + \frac{\delta}{\delta x}(\mu \frac{\delta v_z}{\delta x}) + \frac{\delta}{\delta y}(\mu \frac{\delta v_z}{\delta y}) + \rho g_z = 0 \quad (4.49)$$

Para o tratamento dos termos da pressão nas Equações 4.47, 4.48 e 4.49, a geometria utilizada para o estudo do fenômeno, mostrada na Figura 4.1, deve ser considerada.

Da Figura 4.1, tem-se:

$$\sin w = \frac{H}{L} \quad (4.50)$$

A força motriz do escoamento é a gravidade. A ação da gravidade pode ser decomposta vetorialmente, como mostrado na Figura 4.2.

Assim, o vetor gravitacional possui componentes somente nas direções y e z , sendo que estas são dadas por:

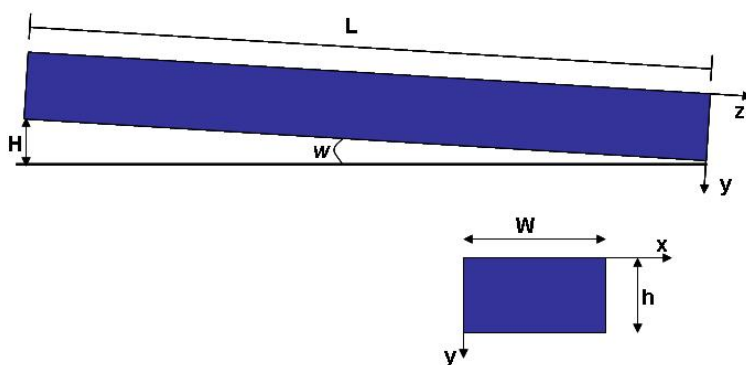


Figura 4.1: Figura representativa da calha de seção transversal retangular.

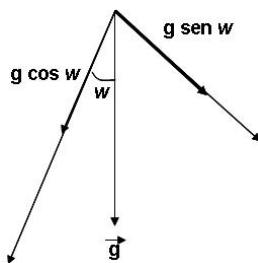


Figura 4.2: Decomposição vetorial da força gravitacional.

$$g_y = g \cos w \quad (4.51)$$

$$g_z = g \sin w \quad (4.52)$$

Desta maneira, como não existe componente do vetor gravitacional na direção x , a equação de conservação de quantidade de movimento para esta direção (4.47) passa a:

$$\frac{\delta p}{\delta x} = 0 \quad (4.53)$$

Substituindo a Equação 4.51 na Equação 4.48, tem-se que a equação de conservação de quantidade de movimento para a direção y é:

$$\frac{\delta p}{\delta y} = \rho g \cos w \quad (4.54)$$

Já para a direção z , obtém-se a seguinte equação de conservação de quantidade de movimento:

$$\frac{\delta p}{\delta z} = \frac{\delta}{\delta x} \left(\mu \frac{\delta v_x}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left(\mu \frac{\delta v_z}{\delta y} \right) + \rho g \sin w \quad (4.55)$$

A integração da Equação 4.54 em relação a y resulta em:

$$P = P_0 + \rho g y \cos w + f(z) \quad (4.56)$$

Da Equação 4.55, vê-se que a derivada de P em relação à z é uma função somente de x e y . Ou seja:

$$\frac{\delta P}{\delta z} = f(x, y) \quad (4.57)$$

Derivando a Equação 4.57 em relação a z , obtém-se:

$$\frac{\delta^2 P}{\delta z^2} = 0 \quad (4.58)$$

Como a derivada segunda da pressão em relação a z é nula, sabe-se que a função $f(z)$ é uma reta, cuja constante já foi incorporada no termo P_0 . Desta forma, tem-se:

$$f(z) = Kz \quad (4.59)$$

Portanto a Equação 4.56 passa a:

$$P = P_0 + \rho g y \cos w + Kz \quad (4.60)$$

Desta forma:

$$K = \frac{\delta P}{\delta z} \quad (4.61)$$

Para um z qualquer, sendo a pressão na superfície ($y = 0$) igual a atmosférica, e considerando a Equação 4.60, tem-se:

$$P_{atm} = P_0 + \frac{\delta P}{\delta z} z \quad (4.62)$$

Da Equação 4.57, sabe-se que a derivada da pressão em relação a z não é função de z , logo se pode afirmar:

$$\frac{\delta P}{\delta z} = 0 \quad (4.63)$$

Substituindo a Equação 4.50 e a Equação 4.63 na Equação 4.55, obtém-se a equação de transferência de quantidade de movimento para a direção z :

$$0 = \frac{\delta}{\delta x}(\mu \frac{\delta v_x}{\delta x}) + \frac{\delta}{\delta y}(\mu \frac{\delta v_z}{\delta y}) + \frac{\rho g H}{L} \quad (4.64)$$

Em relação à equação de transferência de massa, outra hipótese assumida é que a difusão na direção z é muito menor que a difusão nas direções x e y , conforme descrito nas Equações 4.65 e 4.66.

$$\frac{\delta^2 C_A}{\delta x^2} \gg \frac{\delta^2 C_A}{\delta z^2} \quad (4.65)$$

$$\frac{\delta^2 C_A}{\delta y^2} \gg \frac{\delta^2 C_A}{\delta z^2} \quad (4.66)$$

Desta forma, o termo difusivo na direção z é desprezado, conforme a Equação 4.67.

$$\frac{\delta^2 C_A}{\delta z^2} \cong 0 \quad (4.67)$$

4.4.1 Sistema de equações em coordenadas cartesianas

É apresentado a seguir, de forma sintetizada, o sistema de equações em coordenadas cartesianas que descrevem o modelo matemático do escoamento em um canal de seção transversal retangular, levando em consideração as hipóteses do modelo.

Equação da continuidade:

$$\frac{\delta v_z}{\delta z} = 0 \quad (4.68)$$

Equação de movimento:

$$0 = \frac{\delta}{\delta x}(\mu \frac{\delta v_x}{\delta x}) + \frac{\delta}{\delta y}(\mu \frac{\delta v_z}{\delta y}) + \frac{\rho g H}{L} \quad (4.69)$$

Equação de transferência de massa de uma substância A:

$$v_z \frac{\delta C_A}{\delta z} = \frac{\delta}{\delta x} \left(K_G \frac{\delta C_A}{\delta x} \right) + \frac{\delta}{\delta y} \left(K_G \frac{\delta C_A}{\delta y} \right) + R_A \quad (4.70)$$

4.5 Condições de contorno

Equação de movimento

As condições de contorno para a equação de movimento são baseadas em duas hipóteses básicas, a de não deslizamento na parede e a condição de tensão nula na superfície, que representa a inexistência de atrito com o ar. Desta forma, na parede do escoamento: $v_z = 0$, e na superfície $\vec{\tau} \cdot \vec{n} = 0$, sendo que $\vec{n}$ é o vetor normal à superfície.

De acordo com estas equações, as condições de contorno são as seguintes:

Na parede:

$$v_z = 0 \quad (4.71)$$

Na superfície:

$$\frac{\delta v_z}{\delta y} = 0 \quad (4.72)$$

Equação de transferência de massa de uma substância A

As condições inicial e de contorno para a equação de transferência de massa são a de concentração conhecida no início do domínio e a de fluxo de massa nula na superfície e na parede. Esta última condição representa que não há acúmulo de massa nas paredes do rio e que não há transferência de massa do escoamento para o ar. Assim no início do domínio $C_A = C_{Ai}$, e nas paredes e na superfície ao longo do domínio $\frac{\delta C_A}{\delta n} = 0$, onde $\frac{\delta}{\delta n}$ é a derivada na direção normal à superfície do domínio.

De acordo com estas equações, as condições inicial e de contorno para a equação de transferência de massa são as seguintes:

No início do domínio:

$$C_A(x, y, 0) = C_{A,i}(x, y) \quad (4.73)$$

Na superfície e no fundo do rio:

$$\frac{\delta C_A}{\delta y} = 0 \quad (4.74)$$

Nas paredes laterais do rio:

$$\frac{\delta C_A}{\delta x} = 0 \quad (4.75)$$

4.6 Equação de Streeter-Phelps

Para a obtenção da solução das equações de transferência de massa obtidas, torna-se necessária a adoção de um termo para substituir R_A , referente a reação de oxidação da matéria orgânica presente no rio.

Como o objetivo deste trabalho é obter tanto um perfil de concentração do efluente lançado no rio, quanto um perfil de concentração de oxigênio dissolvido na água ao longo do escoamento, torna-se necessária a solução da equação de transferência de massa para cada uma dessas substâncias.

A maneira usualmente mais utilizada para estimativa da quantidade de matéria orgânica presente no rio é por meio da estimativa da variação da demanda bioquímica de oxigênio (DBO) ao longo do rio. Para a modelagem deste fenômeno será utilizado o modelo proposto por Streeter-Phelps. A hipótese básica deste modelo é que o processo de decomposição da matéria orgânica no meio aquático segue uma reação de primeira ordem.

Este modelo desconsidera a sedimentação da matéria orgânica ao longo do escoamento. Também é considerado que não há liberação de oxigênio pelos organismos fotossintetizantes presentes na água. O oxigênio que é incorporado à água é oriundo exclusivamente da atmosfera devido ao processo de reaeração

4.6 Equação de Streeter-Phelps

Para a obtenção do perfil de valores de DBO, o termo referente a reação química, R_A , presente na equação de transferência de massa é:

$$R_A = v_z \frac{dC_{DBO}}{dz} = -k_d C_{DBO} \quad (4.76)$$

Em que:

- C_{DBO} = DBO no estágio anterior;
- v_z = velocidade do escoamento;
- k_d = constante de desoxigenação.

Já para a obtenção do perfil de concentração de oxigênio dissolvido (OD) na água, o termo R_A presente na equação de transferência de massa é:

$$R_A = v_z \frac{dC_{Oxigenio}}{dz} = -k_d C_{DBO} + k_a (C_S - C_{Oxigenio}) \quad (4.77)$$

- $C_{Oxigenio}$ = concentração de oxigênio no estágio anterior;
- C_S = concentração de saturação de oxigênio dissolvido;
- k_a = constante de reaeração.

A Equação 4.77 pode ser reescrita em função do déficit de oxigênio:

$$v_z \frac{dD_{Oxigenio}}{dz} = +k_d C_{DBO} - k_a (D_{Oxigenio}) \quad (4.78)$$

Em que: $D_{Oxigenio}$ = Déficit de oxigênio em relação a concentração de saturação.

Cox (9, 2003) apresentou valores do coeficiente de desoxigenação de acordo com o nível de tratamento com que o efluente tenha sofrido. Os valores são apresentados na Tabela 4.1. Padgett & Rao (30, 1979), em estimativas de valores de DBO e OD, utilizaram uma constante de desoxigenação igual a $0,35 \text{ dia}^{-1}$ e uma constante de reaeração igual a $0,75 \text{ dia}^{-1}$.

4.7 Turbulência

Tabela 4.1: Coeficientes de desoxigenação para diferentes níveis de tratamento.

Tratamento	$k_d(\text{dia}^{-1})$ a 20°C
Não tratado	0,35 (0,20 - 0,50)
Primário	0,20 (0,10 - 0,30)
Lodo ativado	0,075 (0,05 - 0,10)

Fonte: Cox (9, 2003)

O coeficiente de reaeração pode ser obtido através da Equação 4.79.

$$k_a = 3.k_d \quad (4.79)$$

O modelo de Streeter-Phelps foi desenvolvido para simulação de sistemas unidimensionais e não leva em consideração a profundidade do rio. Desta forma, como a constante de reaeração não estava definida apenas para a superfície do rio, optou-se pela inclusão desta constante em todos os volumes de controle, inclusive nos que não estão localizados na superfície do rio. Sendo assim, o modelo proposto considera que todos os volumes de controle sofrem o efeito da reaeração.

4.7 Turbulência

A fim de se avaliar os efeitos da turbulência no escoamento, foram adicionados termos de viscosidade turbulenta e de difusividade turbulenta nas equações de quantidade de movimento e de transferência de massa.

Desta forma, a viscosidade presente na equação de quantidade de movimento é considerada a viscosidade efetiva, ou seja, a soma da viscosidade laminar e da viscosidade turbulenta, como mostrado na Equação 4.80.

$$\mu = \mu_L + \mu_T \quad (4.80)$$

4.7 Turbulência

Da mesma maneira, a difusividade presente na equação de transferência de massa é considerada a soma das contribuições das difusividades laminar e turbulenta, como mostra a Equação 4.81.

$$D = D_L + D_T \quad (4.81)$$

Para determinação dos valores da viscosidade turbulenta, foi utilizado um modelo algébrico de ordem zero, proposto por Spalding (39, 1991).

$$\mu_T \approx \mu_L k e^{-kB} \left(e^Z - 1 - Z - \frac{Z^2}{2} \right) \quad (4.82)$$

Em que:

$$Z = \frac{k \bar{v}_z}{v^*} \quad (4.83)$$

e

$$\begin{aligned} k &= 0,41 \\ B &= 5,0 \end{aligned} \quad (4.84)$$

Já o valor da difusividade turbulenta pode ser obtido por meio da relação entre a viscosidade turbulenta e o número de Schmidt turbulento (Sc_T).

$$D_T = \frac{\mu_T}{Sc_T \rho} \quad (4.85)$$

Rodi (33, 1993) propôs que o número de Schmidt turbulento deveria variar entre 0,7 a 0,9.

4.8 Coeficiente de Dispersão

O coeficiente de dispersão, ou coeficiente global de transferência de massa, depende de vários fatores como largura, profundidade, rugosidade, vazão, e, principalmente, do regime de escoamento, ou seja, da turbulência. Estes parâmetros e variáveis não são facilmente determináveis e nem tampouco é simples relacioná-los com o coeficiente de dispersão.

Sendo assim, para simulação de casos reais, o método empregado no presente trabalho baseia-se na determinação experimental desse coeficiente de dispersão através da coleta e análise de amostras no trecho do rio em estudo, usando um traçador adicionado ao efluente ou encontrado naturalmente neste. Ou seja, o modelo é ajustado para o trecho do rio e, uma vez validado, ele pode ser usado para simulações de vários cenários, reais e atuais, ou futuros.

A determinação experimental do coeficiente de dispersão constitui simultaneamente a determinação de um parâmetro essencial para a simulação e a validação do modelo para o trecho de rio estudado.

O grande interesse na determinação experimental do coeficiente de dispersão para um determinado trecho de rio está no fato que torna-se possível representar por meio deste coeficiente todas as não idealidades do sistema. Ou seja, o valor do coeficiente de dispersão será influenciado pela presença de irregularidades no leito, curvas no rio ou vórtices causados pela turbulência.

Sendo assim, a determinação experimental do coeficiente de dispersão acaba se tornando uma consideração indireta de todos os demais fatores não considerados no desenvolvimento do modelo matemático.

Capítulo 5

Metodologia de Solução Numérica

Um procedimento bastante utilizado para a obtenção de uma solução numérica de uma equação diferencial parcial (EDP) é a integração desta EDP em uma região ou volume do espaço. Esta técnica é conhecida como o método dos volumes finitos (MVF), muito utilizada na literatura da dinâmica dos fluidos computacional [Fortuna (14, 2000)].

O método dos volumes finitos consiste em dividir a região de interesse em volumes de controle e integrar as equações diferenciais parciais em cada um desses elementos de volume. O método dos volumes finitos utiliza vários conceitos físicos na integração das equações, de tal forma que o significado físico da solução calculada tende a ser preservado. Por esta principal razão, o método dos volumes finitos será o método numérico utilizado neste trabalho.

A solução do problema em estudo consiste basicamente em duas etapas: a de determinação dos perfis de velocidades e, a partir destes resultados, a de determinação dos perfis de concentração da substância de interesse.

O fluxograma apresentado na Figura 5.1 mostra, de uma forma geral, a metodologia de solução das equações a ser adotada neste trabalho.

Na Figura 5.1, a caixa de Dados de Entrada representa o conjunto de

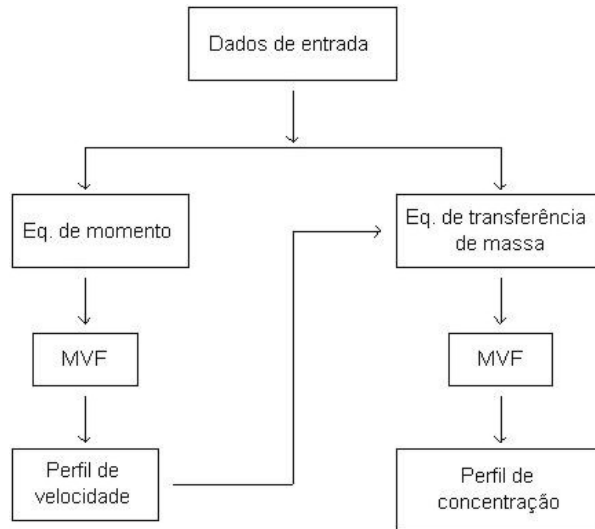


Figura 5.1: Esquema explicativo da metodologia de solução numérica.

dados necessários para o cálculo dos perfis de velocidade e de concentração. Entre esses dados, estão incluídos as dimensões e a vazão do rio e do efluente que está sendo lançado, a concentração da substância de interesse no rio a montante do lançamento e no efluente, e o coeficiente de dispersão desta substância na água. Caso o escoamento apresente reações de autodepuração, deve-se incluir também a concentração de oxigênio dissolvido na água, tanto no efluente quanto no rio a montante do lançamento.

Para o cálculo dos perfis de velocidade e concentração são utilizadas respectivamente as equações de movimento e transferência de massa.

5.1 Aplicação do método dos volumes finitos ao problema

A fim de se implementar o método dos volumes finitos, deve-se adotar uma malha tridimensional de discretização. Na Figura 5.2, a malha utilizada na elaboração do programa é mostrada. A largura do rio é dividida em m partes iguais de comprimento Δx , a profundidade do rio é dividida em

5.1 Aplicação do método dos volumes finitos ao problema

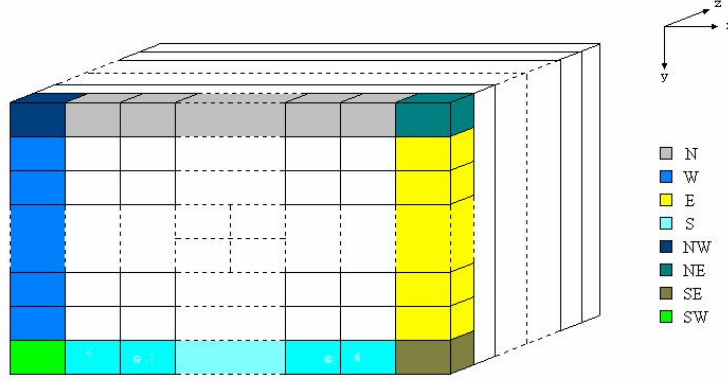


Figura 5.2: Malha tridimensional utilizada na determinação do perfil de concentração.

n partes iguais de comprimento Δy , e o comprimento do rio é dividido em p partes de iguais de comprimento Δz . Desta forma, a malha utilizada terá um total de $m*n*p$ volumes de controle.

Para o cálculo do perfil de velocidades, a malha utilizada é semelhante à apresentada na Figura 5.2. Porém deve-se lembrar que não há variação da velocidade na direção do escoamento, já que todas as seções transversais ao longo do domínio têm as mesmas dimensões. Desta forma, como o perfil de velocidade será igual em quaisquer seções transversais do rio, é necessário que ele seja calculado uma única vez.

5.1.1 Determinação do perfil de velocidade

Para obtenção do perfil de velocidade do escoamento, aplicou-se o método dos volumes finitos à equação de conservação de quantidade de movimento na direção z . Partindo da Equação 4.69, e integrando-a no volume de controle $\Delta x*\Delta y*\Delta z$, sendo Δz unitário, tem-se:

$$0 = \int_W^E \int_S^N \frac{\delta}{\delta x} \left(\mu \frac{\delta v_z}{\delta x} \right) dy dx + \int_W^E \int_S^N \frac{\delta}{\delta y} \left(\mu \frac{\delta v_z}{\delta y} \right) dy dx + \int_W^E \int_S^N \frac{\rho g H}{L} dy dx \quad (5.1)$$

$$0 = \mu \left(\frac{\delta v_z}{\delta x} \Big|_e - \frac{\delta v_z}{\delta x} \Big|_w \right) \Delta y + \mu \left(\frac{\delta v_z}{\delta y} \Big|_n - \frac{\delta v_z}{\delta y} \Big|_s \right) \Delta x + \frac{\rho g H}{L} \Delta x \Delta y \quad (5.2)$$

É necessária a adoção de uma função de interpolação para a aproximação das derivadas da velocidade nas interfaces do volume de controle. Como a Equação 5.2 possui apenas termos difusivos, pode-se utilizar uma função linear. Desta forma:

$$\frac{\delta v_z}{\delta x} \Big|_e = \frac{v_{z,E} - v_{z,P}}{\Delta x_e} \quad (5.3)$$

$$\frac{\delta v_z}{\delta x} \Big|_w = \frac{v_{z,P} - v_{z,W}}{\Delta x_w} \quad (5.4)$$

Como as dimensões dos volumes de controle são constantes tem-se:

$$\Delta x_e = \Delta x_w = \Delta x \quad (5.5)$$

Assim:

$$\frac{\delta v_z}{\delta x} \Big|_e = \frac{v_{z,E} - v_{z,P}}{\Delta x} \quad (5.6)$$

$$\frac{\delta v_z}{\delta x} \Big|_w = \frac{v_{z,P} - v_{z,W}}{\Delta x} \quad (5.7)$$

Da mesma forma:

$$\frac{\delta v_z}{\delta y} \Big|_n = \frac{v_{z,N} - v_{z,P}}{\Delta y} \quad (5.8)$$

$$\frac{\delta v_z}{\delta y} \Big|_s = \frac{v_{z,P} - v_{z,S}}{\Delta y} \quad (5.9)$$

Substituindo 5.6, 5.7, 5.8 e 5.9 em 5.2, tem-se:

$$\begin{aligned} \mu(v_{z,E} - 2v_{z,P} + v_{z,W})\frac{\Delta y}{\Delta x} + \mu(v_{z,N} - 2v_{z,P} + v_{z,S})\frac{\Delta x}{\Delta y} + \\ + \frac{\rho g H}{\mu L} \Delta x \Delta y = 0 \end{aligned} \quad (5.10)$$

A Equação 5.10 pode ser rearranjada para:

$$(v_{z,E} - 2v_{z,P} + v_{z,W})\frac{1}{\Delta x^2} + (v_{z,N} - 2v_{z,P} + v_{z,S})\frac{1}{\Delta y^2} + \frac{\rho g H}{\mu L} = 0 \quad (5.11)$$

Em que:

$$\frac{\rho g H}{\mu L} = K \quad (5.12)$$

A viscosidade, μ , da Equação 5.11 é dada pela Equação 4.80. A viscosidade turbulenta é calculada de maneira iterativa, a partir da Equação 4.82, e com a estimativa de um valor inicial para v^* .

A Equação 5.11 pode ser reorganizada de modo a assumir a forma indicada em 5.13.

$$v_{z,P}A_P + v_{z,E}A_E + v_{z,W}A_W + v_{z,N}A_N + v_{z,S}A_S + B = 0 \quad (5.13)$$

E assim, para o caso dos pontos centrais, tem-se:

$$\begin{aligned} A_P &= -\frac{2}{\Delta x^2} - \frac{2}{\Delta y^2} \\ A_N &= A_S = \frac{1}{\Delta y^2} \\ A_E &= A_W = \frac{1}{\Delta x^2} \\ B &= K \end{aligned} \quad (5.14)$$

5.1 Aplicação do método dos volumes finitos ao problema

Os coeficientes apresentados em 5.14 são válidos para todos os volumes internos do domínio. Porém é necessário determinar os coeficientes para os volumes que estão nas fronteiras e cantos, através da aplicação das condições de contorno consideradas. Nas Tabelas 5.1 e 5.2, são mostrados os coeficientes válidos para os volumes de controle localizados nas fronteiras e nos cantos do domínio, respectivamente.

Tabela 5.1: Coeficientes da equação de conservação de momento para as fronteiras.

Fronteira	Condições de contorno	A_P	A_E	A_W	A_S	A_N	B
Norte (N)	$\frac{\delta v_z}{\delta y} = 0$	$-\frac{2}{\Delta x^2} - \frac{1}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	$\frac{1}{\Delta y^2}$	0	K
Sul (S)	$v_{z,S} = 0$	$-\frac{2}{\Delta x^2} - \frac{3}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	0	$\frac{1}{\Delta y^2}$	K
Leste (E)	$v_{z,E} = 0$	$-\frac{3}{\Delta x^2} - \frac{2}{\Delta y^2}$	0	$\frac{1}{\Delta x^2}$	$\frac{1}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta y^2}$	K
Oeste (W)	$v_{z,W} = 0$	$-\frac{3}{\Delta x^2} - \frac{2}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	0	$\frac{1}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta y^2}$	K

Tabela 5.2: Coeficientes da equação de conservação de momento para os cantos.

Fronteira	Condições de contorno	A_P	A_E	A_W	A_S	A_N	B
Noroeste	$\frac{\delta v_z}{\delta y} = 0$ e $v_{z,W} = 0$	$-\frac{3}{\Delta x^2} - \frac{1}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	0	$\frac{1}{\Delta y^2}$	0	K
Nordeste	$\frac{\delta v_z}{\delta y} = 0$ e $v_{z,E} = 0$	$-\frac{3}{\Delta x^2} - \frac{1}{\Delta y^2}$	0	$\frac{1}{\Delta x^2}$	$\frac{1}{\Delta y^2}$	0	K
Sudoeste	$v_{z,S} = 0$ e $v_{z,W} = 0$	$-\frac{3}{\Delta x^2} - \frac{3}{\Delta y^2}$	$\frac{1}{\Delta x^2}$	0	0	$\frac{1}{\Delta y^2}$	K
Sudeste	$v_{z,S} = 0$ e $v_{z,E} = 0$	$-\frac{3}{\Delta x^2} - \frac{3}{\Delta y^2}$	0	$\frac{1}{\Delta x^2}$	0	$\frac{1}{\Delta y^2}$	K

Com os coeficientes apresentados nas Tabelas 5.1, 5.2 e na Equação 5.14, constrói-se um sistema linear que pode ser representado na forma matricial, $A \cdot x = B$, sendo:

- A – matriz de coeficientes de dimensão $(m \cdot n) * (m \cdot n)$
- x – vetor de variáveis $V_{Z,i,j}$ de dimensão $(m \cdot n)$

- B – vetor força de dimensão $(m \cdot n)$

O sistema gerado possui $(m \cdot n)$ equações, com um número igual de velocidades a serem determinadas, mais a constante K . Para a determinação desta constante foi proposto um valor inicial igual a 1. A partir deste valor determinou-se o perfil de velocidade, com a solução do sistema de equações.

Tendo-se o perfil, calculou-se numericamente a velocidade média, v_{med} , correspondente. A área da seção transversal, A_T , é dada por:

$$A_T = W * h \quad (5.15)$$

sendo W e h , respectivamente, a largura e a profundidade do rio.

Com a velocidade média e a área da seção transversal, calculou-se a vazão para este valor K .

$$Q_{calc} |_{K=1} = v_{med} \cdot A_T \quad (5.16)$$

Foi verificado que quando $K = 0$, $Q_{calc} = 0$. Além disso, foi observada uma relação linear entre K e a vazão calculada. Desta forma o valor de K para qualquer vazão pode ser obtido através da relação:

$$K = \frac{Q_{rio}}{Q_{calc} |_{K=1}} \quad (5.17)$$

Em que Q_{rio} , vazão volumétrica do escoamento, é um dado do problema.

Com a determinação do valor de K correspondente à vazão volumétrica do problema, torna-se possível obter o perfil de velocidades do escoamento.

5.1.2 Determinação do perfil de concentração de uma substância inerte

Para obtenção do perfil de concentração de uma substância inerte presente no escoamento, aplicou-se o método dos volumes finitos à equação

5.1 Aplicação do método dos volumes finitos ao problema

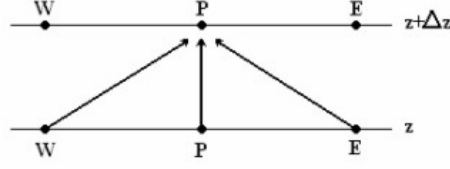


Figura 5.3: Esquema de formulação explícita. Fonte: Maliska (24, 2004)

de conservação de quantidade de massa. Partindo da Equação 4.70, considerando $R_A = 0$, já que a substância em estudo é considerada inerte, e integrando-a no volume de controle $\Delta x * \Delta y * \Delta z$, tem-se:

$$\int_P^F \int_S^N \int_W^E v_z \frac{\delta C_A}{\delta z} dy dx dz = \int_P^F \int_S^N \int_W^E K_G \frac{\delta C_A}{\delta x} dy dx dz + \int_P^F \int_S^N \int_W^E K_G \frac{\delta C_A}{\delta y} dy dx dz \quad (5.18)$$

O equacionamento numérico da equação diferencial em questão foi obtido através da adoção de uma formulação explícita. Neste tipo de formulação, as concentrações dos pontos vizinhos a P são avaliadas com informações do passo anterior e, portanto, já são conhecidas. Na Figura 5.3, este princípio é ilustrado para um caso bidimensional. É válido lembrar que o sistema proposto utiliza uma malha tridimensional e, portanto, os pontos ao Norte (N) e ao Sul (S) do ponto P_z também entram no cálculo de $P_{z+\Delta z}$.

Após a integração da Equação 5.18, obtém-se:

$$v_z(C_{A,F} - C_{A,P})\Delta x \Delta y = K_G \left(\frac{\delta C_A}{\delta x} \Big|_e - \frac{\delta C_A}{\delta x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta z + K_G \left(\frac{\delta C_A}{\delta y} \Big|_n - \frac{\delta C_A}{\delta y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta z \quad (5.19)$$

Os termos difusivos da Equação 5.19 equivalem à:

$$\frac{\delta C_A}{\delta x} \Big|_e = \frac{C_{A,E} - C_{A,P}}{\Delta x_e} \quad (5.20)$$

$$\frac{\delta C_A}{\delta x} \Big|_w = \frac{C_{A,P} - C_{A,W}}{\Delta x_w} \quad (5.21)$$

Como as dimensões dos volumes de controle são constantes a seguinte relação pode ser utilizada:

$$\Delta x_e = \Delta x_w = \Delta x$$

Assim:

$$\frac{\delta C_A}{\delta x} \Big|_e = \frac{C_{A,E} - C_{A,P}}{\Delta x} \quad (5.22)$$

$$\frac{\delta C_A}{\delta x} \Big|_w = \frac{C_{A,P} - C_{A,W}}{\Delta x} \quad (5.23)$$

Da mesma forma:

$$\frac{\delta C_A}{\delta y} \Big|_n = \frac{C_{A,N} - C_{A,P}}{\Delta x_n} = \frac{C_{A,N} - C_{A,P}}{\Delta x} \quad (5.24)$$

$$\frac{\delta C_A}{\delta y} \Big|_s = \frac{C_{A,P} - C_{A,S}}{\Delta x_s} = \frac{C_{A,P} - C_{A,S}}{\Delta x} \quad (5.25)$$

Substituindo 5.22, 5.23, 5.24 e 5.25 em 5.19, tem-se:

$$\begin{aligned} & C_{A,F} V_Z \Delta x \Delta y - C_{A,P} V_Z \Delta x \Delta y = \\ & = K_G \left(\frac{C_{A,E} - 2C_{A,P} + C_{A,W}}{\Delta x} \right) \Delta y \Delta z + \\ & \quad + K_G \left(\frac{C_{A,N} - 2C_{A,P} + C_{A,S}}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta z \end{aligned} \quad (5.26)$$

Dividindo a Equação 5.26 pelo volume de controle $\Delta x \Delta y \Delta z$, obtém-se:

$$\frac{C_{A,F}V_z}{\Delta z} - \frac{C_{A,P}V_z}{\Delta z} = K_G\left(\frac{C_{A,E} - 2C_{A,P} + C_{A,W}}{\Delta x^2}\right) + K_G\left(\frac{C_{A,N} - 2C_{A,P} + C_{A,S}}{\Delta y^2}\right) \quad (5.27)$$

Isolando-se $C_{A,F}$ torna-se possível determinar a concentração nos volumes de controle centrais para cada passo em z .

$$C_{A,F} = C_{A,P} \frac{\Delta z}{V_z} \left[K_G\left(\frac{C_{A,E} - 2C_{A,P} + C_{A,W}}{\Delta x^2}\right) + K_G\left(\frac{C_{A,N} - 2C_{A,P} + C_{A,S}}{\Delta y^2}\right) \right] \quad (5.28)$$

A Equação 5.28 é válida para os volumes internos da malha. Nas fronteiras, as condições de contorno são aplicadas. Na Tabela 5.3, são mostradas as simplificações que podem ser feitas na Equação 5.28 em função das condições de contorno.

Tabela 5.3: Simplificações decorrentes das condições de contorno.

Fronteira	Condição de contorno	Simplificação
Norte (N)	$\frac{\delta C_A}{\delta y} = 0$	$C_{A,P} = C_{A,N}$
Sul (S)	$\frac{\delta C_A}{\delta y} = 0$	$C_{A,P} = C_{A,S}$
Leste (E)	$\frac{\delta C_A}{\delta x} = 0$	$C_{A,P} = C_{A,E}$
Oeste (W)	$\frac{\delta C_A}{\delta x} = 0$	$C_{A,P} = C_{A,W}$

No caso dos volumes de controle localizados nos cantos do domínio, devem-se aplicar simultaneamente as simplificações para ambas as fronteiras formadoras do canto.

Como já foi mencionado, o perfil de concentração é determinado de maneira parabólica. Ou seja, o rio é dividido em diversas seções transversais, onde cada seção é calculada em função dos coeficientes determinados pelo método dos volumes finitos e do perfil de concentração da seção imediatamente anterior. O perfil de concentração da primeira seção transversal do rio deve ser conhecido e é uma condição inicial do problema.

5.2 Metodologia de solução numérica do problema com múltiplos pontos de despejo de efluentes

O perfil de concentração da camada inicial do domínio é obtido em função do perfil de velocidade, da vazão total do rio, da vazão do efluente e da concentração do componente em estudo, tanto no efluente quanto a presente no rio anteriormente ao despejo. Sabendo que $Q = vA$, deve-se somar os volumes de controle necessários para que a vazão total nestes volumes seja a mais próxima possível da vazão do efluente despejado (Q_e). Por exemplo, considerando que o ponto de partida para tais cálculos seja o volume de controle localizado no canto esquerdo superior, são adicionados a este, inicialmente, os volumes necessários para completar o próximo quadrado. Ou seja, é verificado se o quadrado 1x1 possui vazão suficiente, em seguida o 2x2 e assim por diante. Ao quadrado final calculado é estabelecida a concentração do componente A igual à do efluente e, ao resto do rio, é estabelecida a concentração igual àquela já presente no rio.

Admite-se que o efluente ao ser lançado no rio não causa qualquer perturbação no escoamento. Ou seja, o lançamento não causa turbilhões, vórtices ou fluxos secundários no rio. Caso esses efeitos fossem considerados, uma metodologia de solução numérica elíptica deveria ser adotada para o cálculo do perfil de concentração, o que aumentaria excessivamente o esforço computacional para a obtenção do resultado.

5.2 Metodologia de solução numérica do problema com múltiplos pontos de despejo de efluentes

No caso da solução de um problema com múltiplos pontos de despejo de efluentes, a metodologia de solução numérica é semelhante a descrita na seção 5.1.

O modelo matemático inicialmente determina o perfil de velocidade e de concentração do sistema na primeira seção transversal do domínio.

Quando há o despejo de uma nova fonte de efluentes ao longo do domínio, o modelo matemático realiza os seguintes passos:

- Cálculo da nova vazão do escoamento, através da soma da vazão do efluente sendo despejado e da vazão atual do rio.
- Determinação do novo perfil de velocidade do escoamento, já que a vazão apresenta variação devido a presença de um novo ponto de emissão.

5.2 Metodologia de solução numérica do problema com múltiplos pontos de despejo de efluentes

- Cálculo de um novo perfil de concentração do efluente já presente no rio. Esta etapa se faz necessária, uma vez que os efluentes presentes no rio serão diluídos pela nova emissão.
- Determinação do perfil de concentração do novo ponto de lançamento de efluentes.
- Determinação de um novo perfil de concentração na seção transversal onde ocorre o despejo do efluente. Esse novo perfil de concentração é calculado através da soma do perfil de concentração já existente no rio e do perfil de concentração do efluente lançado pelo novo ponto de emissão.

O modelo matemático segue essas etapas toda vez que existe um novo ponto de emissão ao longo do domínio. Vale lembrar que o modelo desenvolvido tem a propriedade de considerar a emissão do efluente em diversos locais da seção transversal do rio: na margem esquerda, na margem direita ou no centro do rio, tanto no fundo quanto na superfície da água.

Quando ocorre um novo lançamento ao longo do domínio, considera-se que o poluente já presente no rio dilui-se instantaneamente devido à adição da nova vazão de efluente.

Capítulo 6

Resultados

6.1 Perfil de velocidade e concentração

Os resultados apresentados referem-se à dispersão de uma substância inerte presente em um efluente sendo despejado na lateral do rio. Este é apenas um estudo de caso hipotético, porém o modelo está apto a resolver problemas reais. Os dados que caracterizam este exemplo são mostrados na Tabela 6.1.

Foi utilizada uma malha com 60 volumes de controle no eixo x, 60 volumes de controles no eixo y e 1.000.000 volumes de controle no eixo z.

Inicialmente foi determinado o perfil de velocidade para uma seção transversal do rio em estudo. Na Figura 6.1, é apresentado o perfil de velocidade para a seção transversal do rio em estudo.

Para uma melhor visualização dos resultados, nas Figuras 6.2 e 6.3 são apresentados os perfis de velocidade para a superfície e para a linha de centro do rio, respectivamente.

Analisando os resultados, percebe-se que a velocidade máxima do escoamento se apresenta no volume de controle localizado na maior distância de todas as paredes. O volume de controle de maior distância das paredes está localizado na superfície do rio, exatamente em seu centro. A velocidade do escoamento calculada neste volume é 0,647 m/s. Nos volumes de

6.1 Perfil de velocidade e concentração

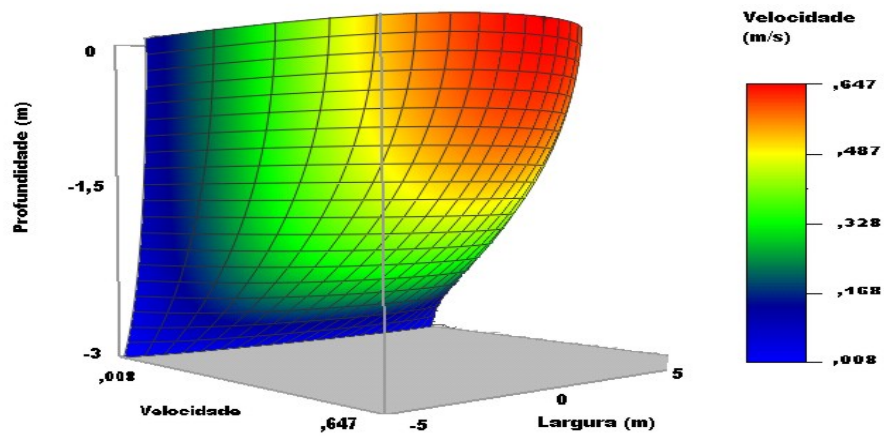


Figura 6.1: Perfil de velocidade do estudo de caso.

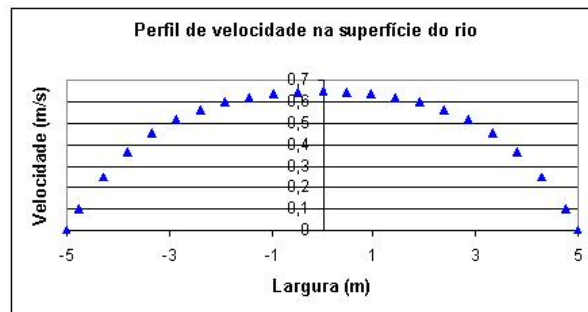


Figura 6.2: Perfil de velocidade na superfície do rio.

6.1 Perfil de velocidade e concentração

Tabela 6.1: Dados de entrada do estudo de caso.

Dados de entrada	Valores
Profundidade (m)	3,0
Largura (m)	10,0
Comprimento (m)	1.000,0
Vazão do rio (m^3/s)	10,0
Vazão do efluente (m^3/s)	0,1
Coefficiente de dispersão (m^2/s)	0,02
Concentração da substância no rio antes do ponto de despejo (mg/L)	0,5
Concentração da substância no efluente (mg/L)	5,0

controle localizados junto às paredes do rio, a velocidade do escoamento do fluido tende a zero, devido à condição de não deslizamento adotada nestas fronteiras.

De acordo com Pimenta (31, 1981), sabe-se que a velocidade decresce rapidamente ao se aproximar das paredes do canal e que ela é máxima nas proximidades da superfície livre, pouco abaixo dela. A velocidade máxima está geralmente na vertical da profundidade máxima.

É apresentada na Figura 6.4 uma comparação entre os perfis de velocidade laminar e turbulento para o escoamento em estudo. A partir desta figura, pode-se concluir que a influência do termo de viscosidade turbulenta inserido no modelo é pequena, já que o comportamento das duas curvas é bastante semelhante.

Após a determinação do perfil de velocidade, torna-se possível a obtenção do perfil de concentração da substância em estudo em todo o domínio. Vale lembrar que o efluente é despejado na margem esquerda do rio, gerando um perfil inicial de concentração, o qual é mostrado na Figura 6.5.

6.1 Perfil de velocidade e concentração

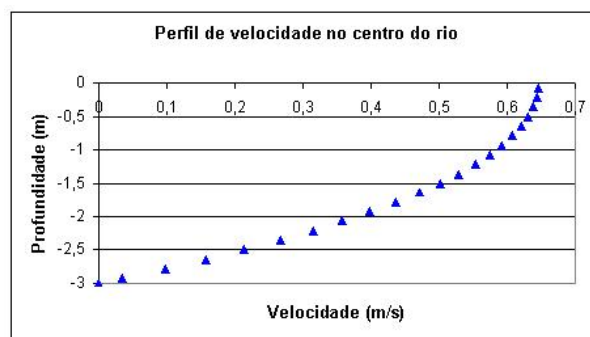


Figura 6.3: Perfil de velocidade na linha de centro do rio.

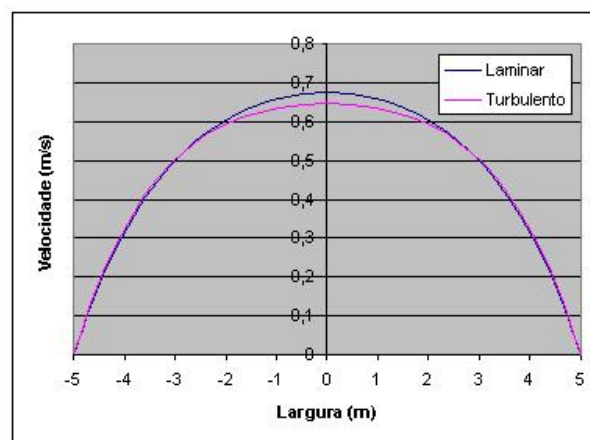


Figura 6.4: Comparação entre os perfis de velocidade laminar e turbulenta em coordenadas cartesianas.

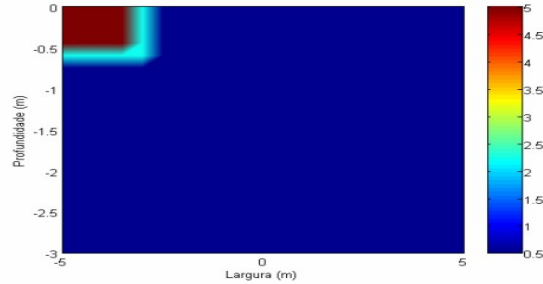


Figura 6.5: Perfil de concentração na seção transversal de emissão do efluente.

Serão apresentados os perfis de concentração para cinco diferentes linhas de controle, localizados em regiões distintas do rio, conforme mostrado na Figura 6.6. Nesta figura, os volumes assinalados representam as regiões do rio por onde passam as linhas de controle.

Os perfis de concentração das linhas de controle A-E mostrados na Figura 6.6 ao longo de um trecho de rio de 1 km são apresentados nas Figuras 6.7 a 6.11.

Os gráficos apresentados na Figura 6.7 a 6.11 mostram que a maior variação de concentração ocorre na região próxima ao ponto de emissão de efluente. Pode-se observar também que a concentração tende a se estabilizar sempre em um mesmo valor, o que caracteriza a diluição da substância no rio.

A linha de controle que apresentou uma maior variação de concentração ao longo do domínio foi a A, linha esta que passa diretamente no ponto de lançamento do efluente na seção transversal inicial do domínio. A linha de controle E, localizada no fundo do rio e na margem esquerda apresentou inicialmente um forte aumento de concentração ao longo do trecho estudado; seguido de um decréscimo até a sua estabilização.

As linhas de controle B, C e D apresentaram comportamentos semelhantes, sendo que a linha C apresentou um aumento de concentração mais suave que as demais, por se localizar em uma região mais distante do ponto de descarga do efluente.

Na Figura 6.12, é apresentado o perfil de concentração ao longo da superfície do rio.

6.1 Perfil de velocidade e concentração

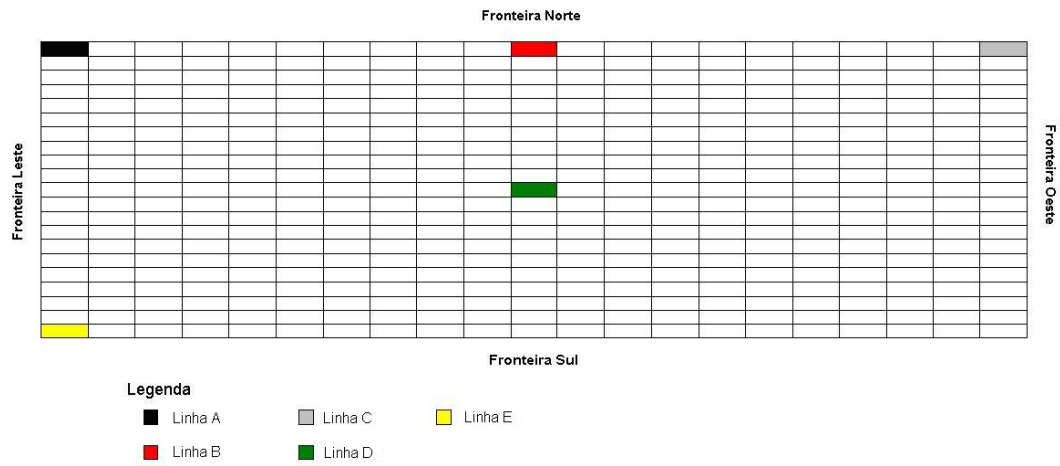


Figura 6.6: Figura representativa de uma seção transversal do trecho de rio.

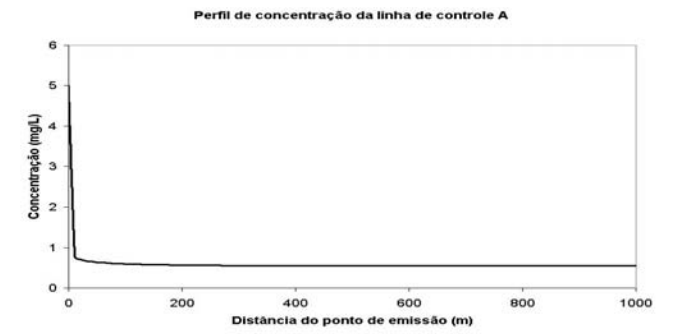


Figura 6.7: Perfil de concentração da linha de controle A representada na Figura 6.6.

6.1 Perfil de velocidade e concentração

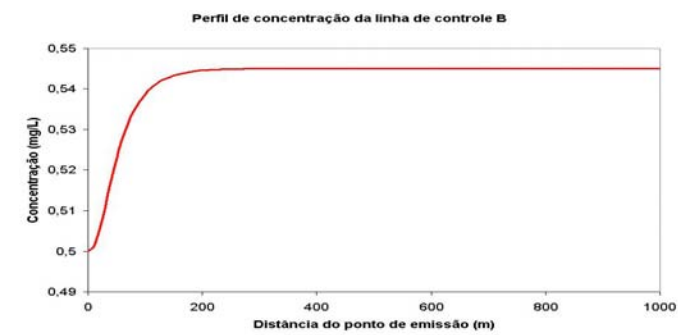


Figura 6.8: Perfil de concentração da linha de controle B representada na Figura 6.6.

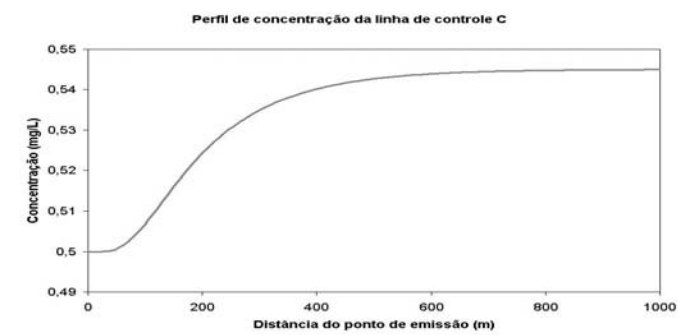


Figura 6.9: Perfil de concentração da linha de controle C representada na Figura 6.6.

6.1 Perfil de velocidade e concentração

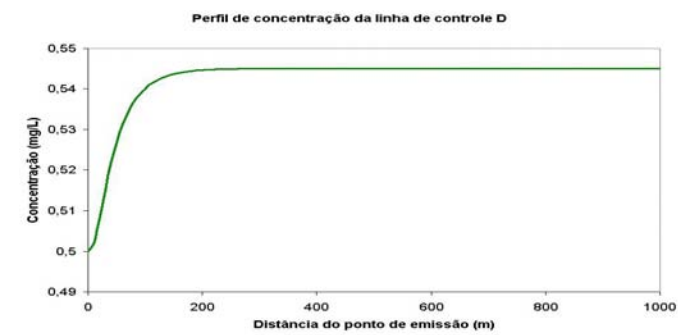


Figura 6.10: Perfil de concentração da linha de controle D representada na Figura 6.6.

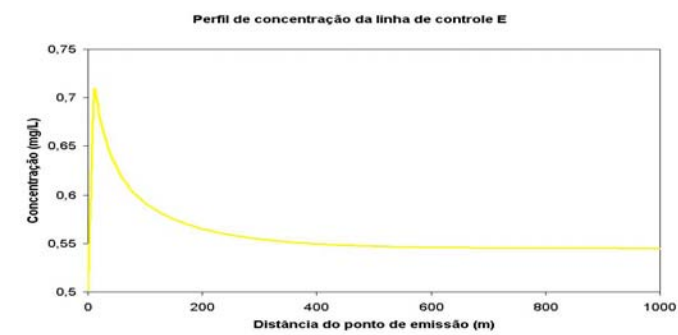


Figura 6.11: Perfil de concentração da linha de controle E representada na Figura 6.6.

6.2 Modelo de autodepuração

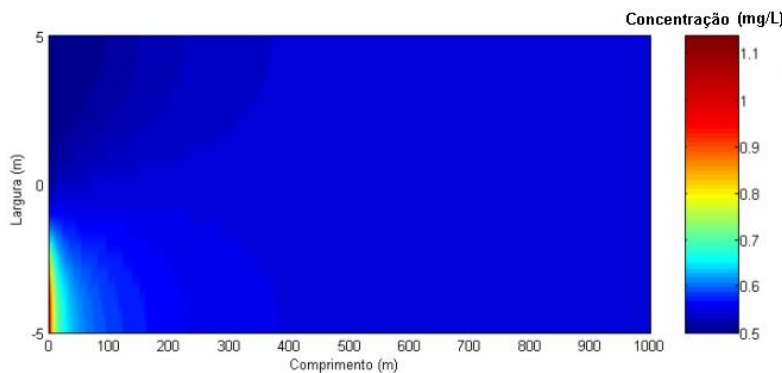


Figura 6.12: Perfil de concentração (mg/L) na superfície do trecho do rio em estudo.

Foi determinada também a distância de diluição da substância em estudo. A distância de diluição é considerada a distância a partir da qual todos os volumes de controle de uma mesma seção transversal apresentam as concentrações da substância em estudo com diferenças inferiores a 1,0 %. Para este caso, a distância do ponto de emissão em que ocorreu a diluição da substância foi de 488,4 m. A concentração média após esta distância é de 0,545 mg/L.

O tempo de execução do software desenvolvido para o estudo de caso apresentado foi inferior a 20 minutos, utilizando um PC Pentium IV de 3 GHz e 1 Gb de memória RAM.

A partir dos dados da Tabela 6.1, torna-se possível determinar o fluxo mássico entrando no sistema. O fluxo mássico que entra no sistema é: $\dot{m} = 5,5$ g/s. A partir dos resultados obtidos, o fluxo mássico calculado ao final do trecho do rio é: $\dot{m} = 5,45$ g/s. Pode-se perceber que o erro no balanço global de massa é de apenas 0,9 %.

6.2 Modelo de autodepuração

Para tornar possível a modelagem da concentração de substâncias biodegradáveis, é necessária a inclusão de um termo de decomposição bioquímica na equação de transferência de massa. No presente trabalho, a

6.2 Modelo de autodepuração

decomposição da matéria orgânica é modelada em função da sua DBO, segundo o modelo proposto por Streeter-Phelps. De acordo com este modelo, é necessário apenas conhecer a DBO inicial do rio e a DBO do efluente, não sendo preciso saber exatamente quais compostos orgânicos estão presentes na água. Também é possível realizar uma estimativa da concentração de oxigênio dissolvido em todo o trecho em estudo.

Foi realizado um estudo de um caso hipotético para possibilitar a visualização dos resultados gerados. Os dados de entrada utilizados no programa são apresentados na Tabela 6.2.

Tabela 6.2: Dados de entrada do estudo de caso com reação química

Dados de entrada	Valores
Profundidade (m)	3,0
Largura (m)	10,0
Comprimento (m)	1.000,0
Vazão do rio (m^3/s)	10,0
Vazão do efluente (m^3/s)	0,1
Coefficiente de dispersão (m^2/s)	0,02
DBO no rio antes do ponto de despejo (mg/L)	0,5
DBO do efluente (mg/L)	5,0
Concentração de oxigênio no rio antes do despejo (mg/L)	8,0

Foi utilizada uma constante de desoxigenação de $0,35 \text{ dia}^{-1}$, que caracteriza um efluente que não recebeu nenhum tipo de tratamento antes de seu lançamento, conforme mostrado na Tabela 4.1. Desta maneira, a constante de reaeração é de $1,05 \text{ dia}^{-1}$. Os perfis de DBO e de oxigênio dissolvido obtidos são mostrados respectivamente nas Figuras 6.13 e 6.14.

Analisando os gráficos expostos nas Figuras 6.13 e 6.14, percebe-se que há uma variação muito pequena da DBO e da concentração de oxigênio

6.2 Modelo de autodepuração

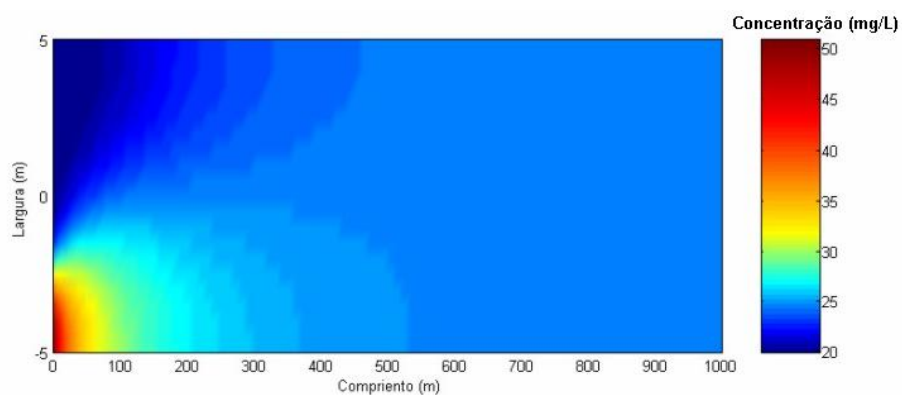


Figura 6.13: Perfil de DBO na superfície do rio.

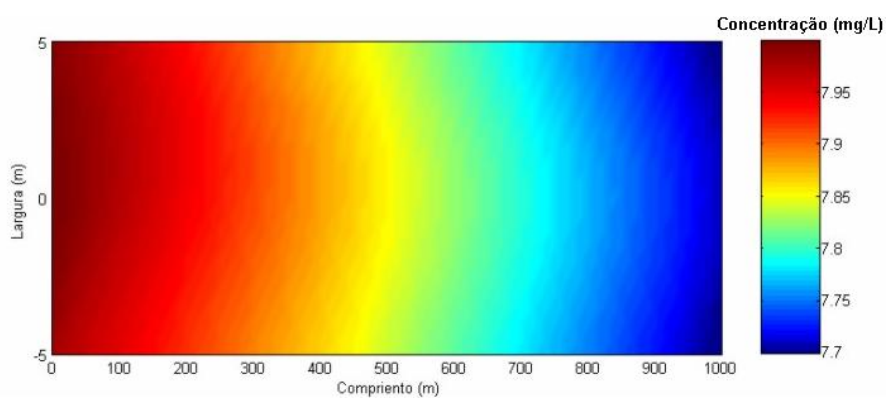


Figura 6.14: Perfil de concentração de oxigênio dissolvido na superfície do rio.

dissolvido. Observa-se na Figura 6.13 apenas um forte efeito difusivo no início do escoamento devido à elevada diferença entre as concentrações de matéria orgânica do efluente e do rio. Porém o efeito do termo reacional inserido na equação de transferência de massa foi muito pequeno. A concentração de oxigênio dissolvido teve uma diminuição de no máximo 0,3 mg/L em todo o trecho de rio em estudo. Seria necessário estudar um trecho bem mais longo para tornar possível a visualização de todo o processo de autodepuração. Esses resultados precisam ser validados com dados experimentais para verificar se há necessidade de ajustes nos coeficientes de desoxigenação e reaeração, ou se o processo de autodepuração é realmente lento.

Deve-se levar em consideração também que as constantes do modelo proposto por Streeter-Phelps foram determinadas para rios localizados no hemisfério Norte, onde o clima é mais frio que o clima brasileiro. Dessa forma, é possível que as constantes determinadas em um rio de águas mais quentes, como a maioria dos rios localizados no Brasil, tenham valores mais elevados que os propostos por esse modelo.

A baixa influência dos termos de reação química e de reaeração também é ocasionada pelo fato de que o poluente percorre todo domínio considerado em um tempo relativamente curto. Caso o escoamento tenha uma velocidade média de 0,5 m/s, o poluente levaria em média apenas 33 min para percorrer todo o trecho de estudo.

Outro fator a ser considerado é a inclusão da constante de reaeração em todos os volumes de controle do domínio. Como a reaeração ocorre apenas na superfície, acredita-se que o valor desta constante seja mais elevado para a utilização no presente trabalho do que o valor proposto por Streeter-Phelps.

A partir da determinação experimental dessa constante, a reaeração poderia ser considerada como uma condição de contorno na superfície do rio. Desta forma, a absorção de oxigênio da atmosfera seria considerada apenas na fronteira do domínio que tem contato com a atmosfera. Sendo assim, após a transferência do oxigênio nos volumes de controle da superfície, os efeitos difusivos originados pelas diferenças de concentração entre a superfície e as regiões mais profundas seriam os responsáveis pelo transporte do oxigênio para o restante do domínio.

Da forma como a constante de reaeração é considerada atualmente, acredita-se que o modelo seja inválido para rios com profundidade muito elevadas, uma vez que criaria uma condição irreal de reaeração em águas profundas.

O tempo de execução do software desenvolvido para este estudo de caso apresentado foi inferior a 16 minutos, utilizando um PC Pentium IV de 3 GHz e 1 Gb de memória RAM. Caso a simulação deste estudo de caso fosse realizada por softwares comerciais, seria necessária a utilização de vários computadores atuando em paralelo, e ainda assim o tempo computacional seria excessivamente alto.

Esta diferença no tempo de execução entre o software desenvolvido neste trabalho e os softwares disponíveis comercialmente deve-se ao fato de que a maneira de obtenção da solução numérica por estes softwares é feita de maneira diferente. Um software comercial irá resolver as equações que descrevem o fenômeno de maneira elíptica e essa forma de solução exige um elevado esforço computacional. Já o modelo desenvolvido neste trabalho resolve o problema de maneira parabólica, dessa forma o esforço computacional é consideravelmente menor. Outro fator importante é que o modelo desenvolvido no presente trabalho precisa de uma memória computacional pequena, uma vez que necessita armazenar os valores numéricos de concentração em apenas duas seções transversais: a seção que está sendo calculada e a seção a montante da que está sendo calculada.

6.3 Estudo da independência da malha

De forma a garantir a exatidão dos resultados, os perfis de velocidade e de concentração não podem ser dependentes da malha utilizada. Assim sendo, foi necessário a realização de estudos com o intuito de garantir tal independência.

O estudo de independência da malha foi dividido em duas partes.

Inicialmente, são comparados perfis de velocidade para malhas de números de elementos distintos nas direções transversais ao escoamento. Sendo o escoamento considerado desenvolvido, o perfil de velocidade é constante ao longo da direção do fluxo, não sofrendo influência do número de intervalos da malha na direção do escoamento.

Para garantir a independência da malha em relação ao perfil de concentração, são comparados perfis de concentração para malhas com número de elementos distintos em todas as três dimensões.

Os resultados apresentados neste relatório foram obtidos por meio de um estudo de caso da dispersão de uma substância não-inerte presente em

6.3 Estudo da independência da malha

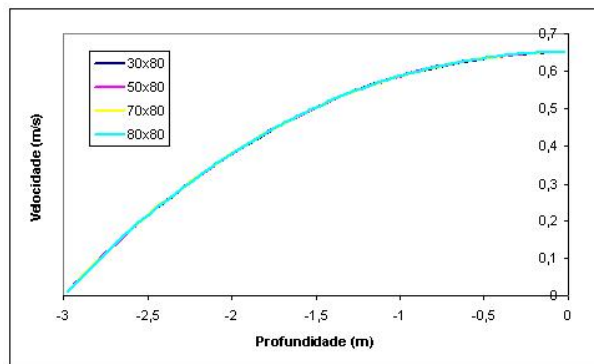


Figura 6.15: Perfis de velocidade obtidos com diferentes números de linhas.

um efluente sendo despejado na lateral do rio. Os dados que caracterizam este estudo de caso são mostrados na Tabela 6.2. Foram simulados apenas 500 m do domínio.

Foi escolhida a modelagem do perfil de concentração em termos de DBO, pois dessa forma o modelo apresentará termos exponenciais em sua equação de transferência de massa. Como a dispersão de uma substância inerte não apresenta esses termos em seu equacionamento, ela se torna menos dependente do tamanho da malha utilizado.

O estudo da independência da malha seguiu as etapas descritas a seguir. Inicialmente verificou-se sua independência em relação ao número de linhas. Desta forma fixou-se um número de colunas e de seções transversais e variou-se apenas o número de linhas. O número de colunas foi fixado em 80 e o número de seções transversais em 10.000.000. Os números de linhas utilizados foram: 30, 50, 70 e 80.

Na Figura 6.15 é mostrado o perfil de velocidade obtido na linha de centro do rio para todas as malhas utilizadas. Pode-se verificar nesta figura que o perfil de velocidade não é dependente da malha utilizada.

Já na Figura 6.16 é apresentado o perfil de concentração para todas as malhas utilizadas.

Pode-se verificar na Figura 6.16 que todos os perfis de concentração apresentaram comportamentos semelhantes. Porém será apresentada uma nova figura com apenas os primeiros metros após a emissão do efluente para

6.3 Estudo da independência da malha

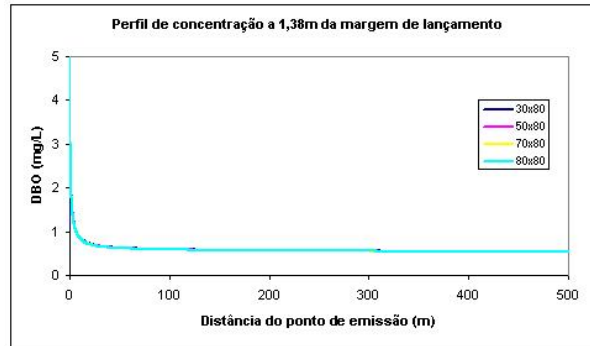


Figura 6.16: Perfil de concentração a 1,38 m da margem de lançamento para todos os refinamentos de malha utilizados.

uma melhor visualização dos resultados obtidos. Na Figura 6.17 é apresentado o perfil de concentração dos 5 m iniciais do escoamento.

Pode-se visualizar na Figura 6.17 que no início do escoamento, as malhas menos refinadas apresentam algumas oscilações. A curva representativa da malha 30x80 tem uma concentração inicial menor que as outras curvas; isto ocorre devido ao modo como o modelo insere as concentrações iniciais no domínio. Já a malha 50x80 apresentou uma pequena oscilação devido provavelmente ao menor refino da malha. As malhas 70x80 e 80x80 apresentaram comportamentos bastante semelhantes.

Desta maneira, foi determinado que neste estudo de caso a malha necessita ter um total de 70 linhas para que não apresente oscilações em seus resultados.

A partir deste valor, foi realizado o estudo de independência da malha em relação ao número de colunas. O número de linhas foi fixado em 70, conforme demonstração anterior, e o número de seções transversais foram fixados em 10.000.000. Os números de colunas utilizados foram 30, 50, 70 e 80.

Na Figura 6.18 são apresentados os perfis de velocidade obtidos com os diferentes refinamentos de malha utilizados. É possível observar nesta figura que todos os perfis apresentaram comportamentos bastante próximos. Desta forma, conclui-se que o perfil de velocidade é independente do refino da malha utilizado.

6.3 Estudo da independência da malha

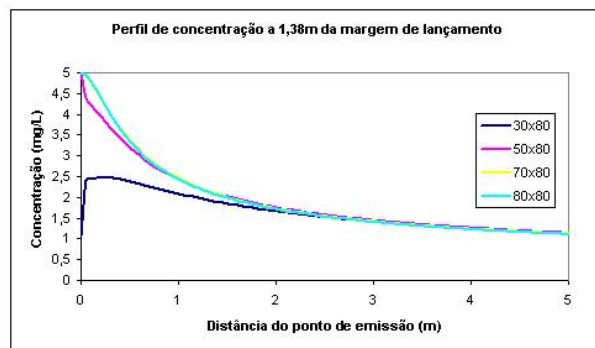


Figura 6.17: Perfil de concentração a 1,38 m da margem de lançamento nos 5 m iniciais de escoamento.

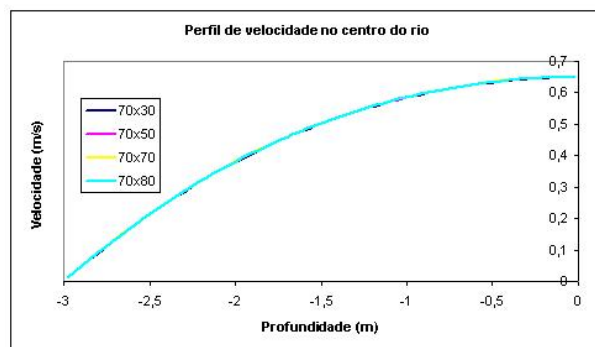


Figura 6.18: Perfil de velocidade para todos os refinamentos de malha utilizados.

6.3 Estudo da independência da malha

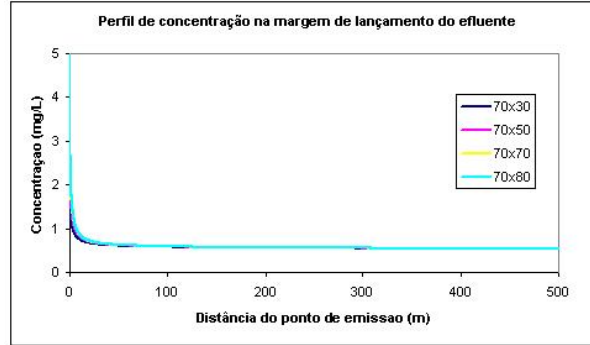


Figura 6.19: Perfil de concentração para todos os refinamentos de malha utilizados.

Na Figura 6.19 são mostrados os perfis de concentração obtidos para todos os refinamentos de malha utilizados.

Para permitir uma melhor visualização dos resultados, na Figura 6.20 são mostrados apenas os perfis de concentração obtidos para os 5 m iniciais do escoamento.

Observando os resultados mostrados na Figura 6.20, percebe-se que ocorre uma pequena diferença no comportamento dos perfis de concentração para cada refinamento da malha. As malhas com números de colunas de 70 e 80 apresentaram comportamentos semelhantes. Desta forma, optar-se-á por utilizar uma malha com número de colunas de 70 para a continuação do estudo da independência da malha. Não será utilizado um total de 80 colunas, pois com este refinamento o modelo exige uma capacidade computacional muito elevada.

Finalmente foi realizado o estudo de independência da malha em relação ao número de seções transversais. O número de linhas e de colunas foi fixado em 70, conforme demonstração anterior. Os números de seções transversais utilizados foram 5.000.000, 10.000.000, 20.000.000 e 50.000.000.

Na Figura 6.21 são mostrados os perfis de concentração obtidos para todos os refinamentos de malha utilizados.

Observando os resultados apresentados na Figura 6.21, pode-se perceber que o perfil de concentração é independente do refinamento da malha utilizado no sentido do escoamento, uma vez que o comportamento dos perfis de concentração foram bastante semelhantes.

6.3 Estudo da independência da malha

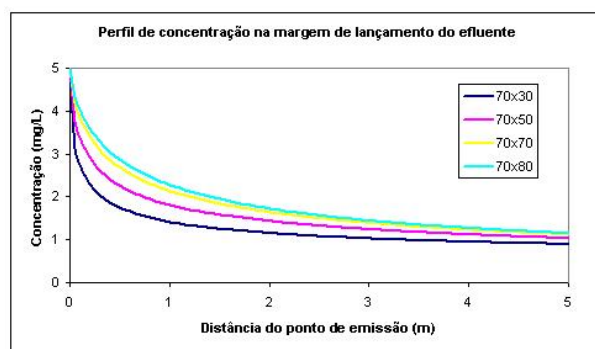


Figura 6.20: Perfil de concentração nos 5 m iniciais do escoamento.

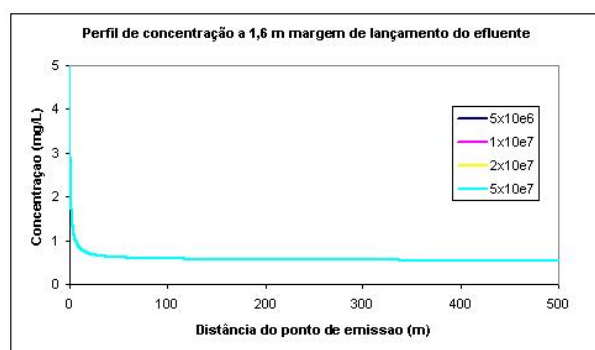


Figura 6.21: Perfil de concentração para todos os refinamentos de malha utilizados.

6.4 Múltiplos pontos de emissão

Após análise dos resultados obtidos, determinou-se que a malha considerada ideal para este estudo de caso seria 70x70x5.000.000. Com este refino de malha, as dimensões dos volumes de controle seriam: $\Delta x = 14,29$ cm, $\Delta y = 4,28$ cm e $\Delta z = 0,1$ mm.

Pode-se observar a partir destes resultados que a malha necessita de um refino maior na direção z , que é o sentido do escoamento. Isto deve-se ao fato de que o fenômeno é predominantemente difusivo nas direções x e y . Já na direção z , o fenômeno é predominantemente convectivo, o que leva à necessidade de um maior refino da malha nesse sentido.

Yakowitz & Szidarovszky (46, 1989) expuseram a dedução matemática referente à existência de valores ótimos para passos. Tal dedução prova que o erro total equivale à soma do erro causado por arredondamentos (diretamente proporcional ao passo) com o erro inerente à equação (inversamente proporcional ao passo). Como consequência direta deste fato, tem-se que os valores considerados ótimos para os passos adotados nas três direções são experimentais, interdependentes e variantes para cada sistema estudado. Assim, o programa desenvolvido não pode ser utilizado como um *black box program* já que requer um esforço do usuário para que se determinem os valores de Δx , Δy e Δz a serem utilizados. O monitoramento de tais valores, entretanto, é simples já que ao se usar valores inadequados, obtêm-se resultados inconsistentes, sendo que os valores de concentração resultantes serão negativos, irracionais ou, em geral, o programa irá indicar uma condição de *overflow*.

Notou-se, através dos resultados do perfil de concentração, a necessidade de um maior refino dos volumes de controle próximos às paredes e ao fundo do rio. Entretanto, foi observado que um maior refino da malha e/ou maiores valores do coeficiente de difusividade geraram instabilidades numéricas que precisam ser tratadas com maiores cuidados. Porém, este problema não alterou de forma significativa os resultados mostrados neste trabalho.

6.4 Múltiplos pontos de emissão

O programa desenvolvido oferece a possibilidade do estudo do impacto ambiental de uma nova emissão de efluentes em uma região onde já existam outras emissões. Assim, torna-se possível a avaliação de casos mais complexos. A fim de ilustrar esta propriedade do programa, foi realizado um estudo de caso hipotético com cinco despejos de efluentes em diferentes

6.4 Múltiplos pontos de emissão

locais do rio. Todos os efluentes lançados tinham concentração de uma substância hipotética inerte igual a 5 mg/L. Os pontos de emissão dos efluentes se localizavam a 0 m, 100 m, 150 m, 260 m e 380 m em relação ao início do domínio, conforme Figura 6.22. Os demais dados de entrada do programa são apresentados na Tabela 6.3.

Tabela 6.3: Dados de entrada do estudo de caso com múltiplos pontos de emissão

Dados de entrada	Valores
Profundidade(m)	3,0
Largura (m)	10,0
Comprimento (m)	500,0
Vazão do rio (m^3/s)	20,0
Vazão dos efluentes (m^3/s)	0,3
Coefficiente de dispersão (m^2/s)	0,02
Concentração de substância inerte antes do ponto de despejo (mg/L)	0,5
Concentração de substância inerte nos efluentes (mg/L)	5,0

Nos pontos de lançamento 1, 2 e 3, os efluentes foram lançados na superfície do rio; já nos pontos de lançamento 4 e 5, os efluentes foram lançados no fundo do rio.

Na Figura 6.23, é mostrado o perfil de concentração do efluente na superfície do rio obtido pelo modelo. Os resultados obtidos mostram que o modelo tem condições de prever situações onde existam mais de um ponto de lançamento de efluentes.

6.4 Múltiplos pontos de emissão

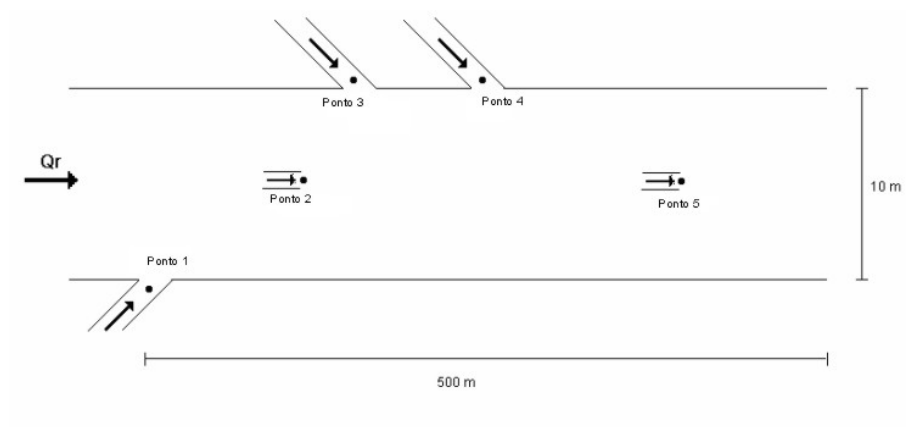


Figura 6.22: Figura representativa do estudo de caso.

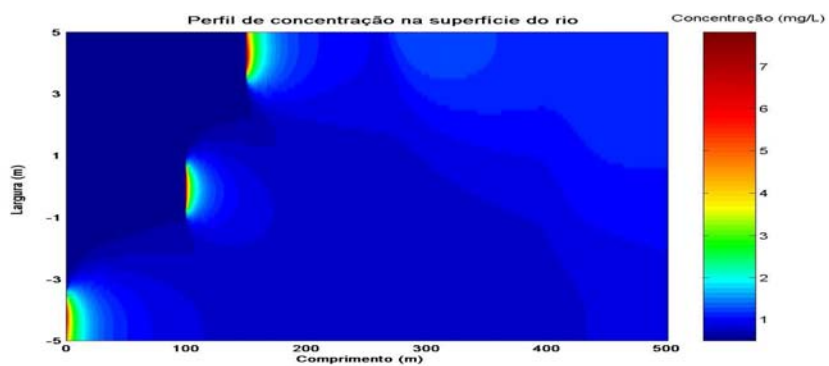


Figura 6.23: Perfil de concentração de um estudo de caso com múltiplos pontos de emissão.

6.5 Estudo do coeficiente de dispersão

Neste modelo, o coeficiente de dispersão é considerado um parâmetro de ajuste. Com o objetivo de estudar a influência deste coeficiente no perfil de concentração do modelo em estudo, o programa foi executado novamente utilizando diferentes valores para o coeficiente de dispersão. Os dados de entrada utilizados no programa estão apresentados na Tabela 6.4. Os valores utilizados para comparação foram: $0,01 \text{ m}^2/\text{s}$, $0,015 \text{ m}^2/\text{s}$ e $0,02 \text{ m}^2/\text{s}$. Inicialmente, o efeito da variação do coeficiente de dispersão foi estudado utilizando o modelo matemático considerando escoamento laminar.

Tabela 6.4: Dados de entrada para estudo da variação do coeficiente de dispersão

Dados de entrada	Valores
Profundidade (m)	3,0
Largura (m)	10,0
Comprimento (m)	2.000,0
Vazão do rio (m^3/s)	10,0
Vazão do efluente (m^3/s)	0,1
Concentração no rio antes do ponto de despejo (mg/L)	0,5
Concentração da substância no efluente (mg/L)	5,0

Nas Figuras 6.24 a 6.28 são apresentados os perfis de concentração nos volumes de controle A-E (conforme Figura 6.6) para cada coeficiente global de dispersão considerado.

Foram também determinadas as distâncias necessárias para a completa dispersão do efluente para cada um dos coeficientes considerados. O critério utilizado para determinação da distância de diluição é o mesmo descrito na seção 6.1. As distâncias determinadas estão demonstradas na Tabela 6.5.

A menor distância para a total dispersão do efluente ocorreu, como

6.5 Estudo do coeficiente de dispersão

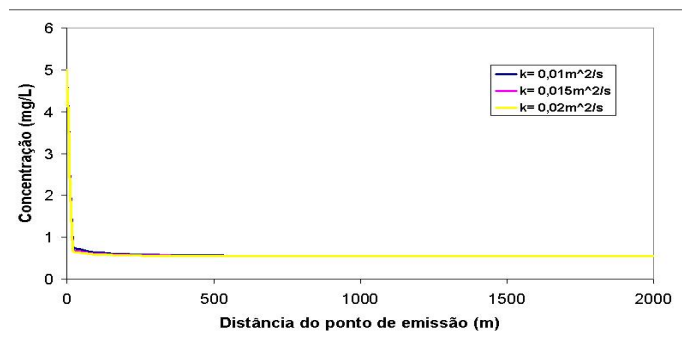


Figura 6.24: Perfis de concentração da linha de controle A representada na Figura 6.6.

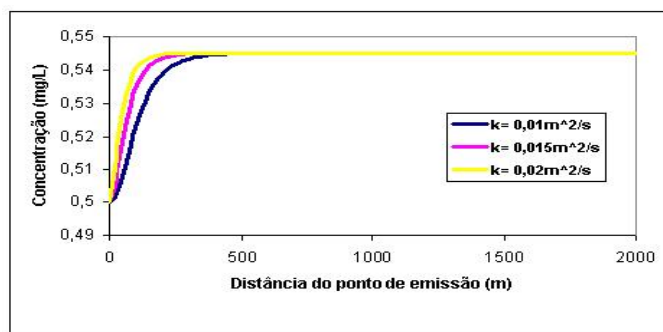


Figura 6.25: Perfis de concentração da linha de controle B representada na Figura 6.6.

6.5 Estudo do coeficiente de dispersão

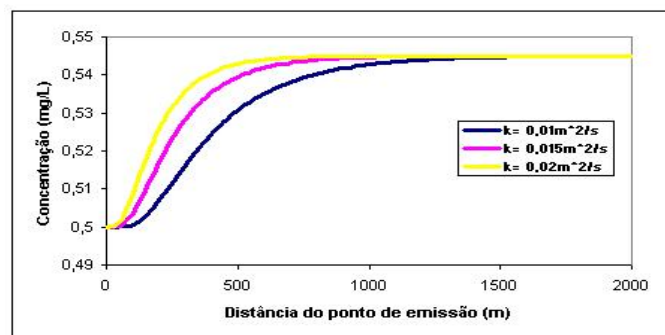


Figura 6.26: Perfis de concentração da linha de controle C representada na Figura 6.6.

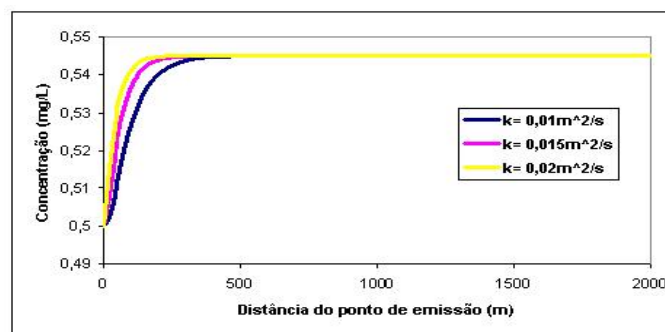


Figura 6.27: Perfis de concentração da linha de controle D representada na Figura 6.6.

6.5 Estudo do coeficiente de dispersão

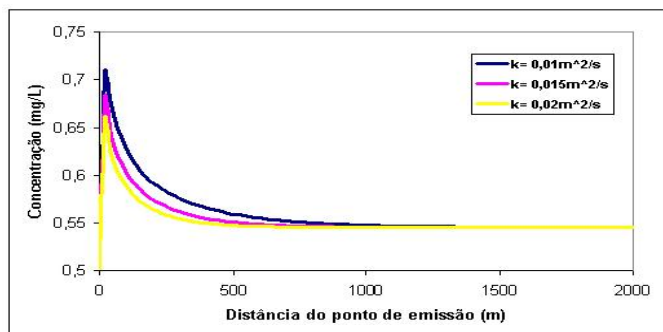


Figura 6.28: Perfis de concentração da linha de controle E representada na Figura 6.6.

Tabela 6.5: Distância de diluição para cada coeficiente de dispersão estudado.

Coef. de dispersão (m^2/s)	0,01	0,015	0,02
Distância (m)	976,4	651,1	488,4

já era esperado, com o maior coeficiente de dispersão considerado. Os resultados mostram que, a partir de dados de campo, seria possível determinar o valor que melhor representasse um determinado problema, de modo que, para cada caso específico, este coeficiente seria utilizado para prever outros lançamentos do mesmo efluente. Um estudo mais completo do modelo não utilizaria o valor do coeficiente de dispersão como um parâmetro de ajuste, visto que este coeficiente pode ser obtido experimentalmente.

6.5.1 Efeito da variação do coeficiente de dispersão em escoamento turbulento

Um estudo semelhante ao descrito na seção 6.5 foi realizado para verificação do efeito da variação do coeficiente de dispersão em um escoamento turbulento. Os dados de entrada do modelo são os descritos na Tabela 6.4. Os coeficientes de dispersão utilizados foram novamente: $0,01 \text{ m}^2/\text{s}$, $0,015 \text{ m}^2/\text{s}$ e $0,02 \text{ m}^2/\text{s}$.

6.6 Estudo da variação do local de emissão do efluente

As distâncias de diluição do efluente foram obtidas de acordo com o critério descrito na seção 6.1. As distâncias de diluição obtidas para cada um dos coeficientes de dispersão utilizados são mostradas na Tabela 6.6.

Tabela 6.6: Distância de diluição para cada coeficiente de dispersão em escoamento turbulento.

Coef. de dispersão (m^2/s)	0,01	0,015	0,02
Distância (m)	805,4	537,1	402,8

A menor distância de diluição ocorreu novamente com o maior coeficiente de dispersão considerado. Analisando os resultados apresentados nas Tabelas 6.5 e 6.6, torna-se possível verificar o efeito da inclusão dos efeitos da turbulência nos resultados obtidos. Ao se analisar os resultados, percebe-se que as distâncias de diluição com a consideração dos efeitos da turbulência foram em torno de 82,5 % menores que no escoamento laminar.

6.6 Estudo da variação do local de emissão do efluente

O local de emissão do efluente no rio é uma variável importante a ser estudada. Desta forma, foi realizado um estudo a fim de verificar o efeito da variação do local de emissão do efluente na distância de mistura completa. Neste estudo, o efluente foi lançado em 3 locais distintos do rio: na lateral do rio e em sua superfície, na superfície ao centro e no fundo do rio também ao centro. Os dados de entrada do modelo são os apresentados na Tabela 6.7. A substância a ser estudada neste caso é inerte. As distâncias de mistura completa obtidas pelo modelo são apresentadas na Tabela 6.8.

Como pode ser observado na Tabela 6.8, o efluente despejado na lateral do rio se dispersa em uma distância bem maior que o efluente despejado no centro do rio. A dispersão em uma menor distância, quando o efluente é despejado no centro do rio, era esperada, pois neste caso, a dispersão ocorre para ambos os lados do rio, enquanto na margem ocorre apenas em direção ao centro do rio.

6.6 Estudo da variação do local de emissão do efluente

Tabela 6.7: Dados de entrada do estudo de caso com variação do ponto de emissão.

Dados de entrada	Valores
Profundidade (m)	3,0
Largura (m)	10,0
Vazão do rio (m^3/s)	10,0
Vazão do efluente (m^3/s)	0,1
Coefficiente de dispersão (m^2/s)	0,02
Concentração da substância no rio antes do ponto de despejo (mg/L)	0,5
Concentração da substância no efluente (mg/L)	5,0

Tabela 6.8: Distância de diluição para cada local de emissão do efluente.

Local de emissão	Distância de mistura completa (m)
Lateral do rio	473,2
Fundo e centro do rio	124,4
Superfície e centro do rio	154,8

Comparando-se os resultados da dispersão da substância quando lançada no centro do rio, percebe-se que ocorre em uma distância ligeiramente menor quando o efluente é lançado no fundo. Esta diferença pode ser explicada pelo fato de que quando lançado no fundo, o efluente está em uma região de baixas velocidades, onde os efeitos difusivos são favorecidos. Por outro lado, quando lançado na superfície, o efluente encontra-se em uma região predominantemente convectiva, onde os efeitos difusivos são menos efetivos. Ou seja, na superfície do rio, o efluente é arrastado pela água e sua dispersão ocorre de maneira mais lenta que em regiões de baixas velocidades.

6.7 Comparação dos resultados numéricos com resultados obtidos em simulação com o software Fluent

O modelo do rio foi gerado e simulado utilizando o software Fluent, versão 6.1.22, da Fluent Inc.

A simulação foi realizada tridimensionalmente, em estado estacionário, com uma malha de 150.000 elementos hexaédricos. O domínio simulado foi um paralelepípedo de 3 m de altura, 10 m de largura e 10 m de comprimento. O tamanho do primeiro elemento da malha perto da parede do rio foi de 3 mm, e o maior elemento possuía lado de 200 mm.

O modelo de turbulência utilizado foi o modelo $k-\varepsilon$ com auxílio de funções de parede. Utilizou-se o acoplamento pressão-velocidade SIMPLE, e a interpolação dos termos convectivos seguiu o esquema *upwind*.

Como resultado, obteve-se os campos de velocidade e pressão ao final de 10 m. O resultado de cada simulação foi usado como condição inicial para uma próxima simulação, de modo que um total de 200 m do rio foram simulados. Cada trecho de 10 m de rio demandou aproximadamente 2 horas até a convergência, em uma estação de trabalho com processador Pentium 4 de 2,8 GHz e 2 GB de memória RAM, totalizando um tempo de 40 horas.

A malha utilizada para esta simulação é apresentada na Figura 6.29. Nesta Figura, o eixo x está na direção da profundidade, o eixo y está na direção da largura, e o eixo z está na direção do escoamento. Já na Figura 6.30, é apresentada uma ampliação para uma melhor visualização próxima a parede do escoamento.

Na Figura 6.31 é apresentada uma comparação entre os perfis de velocidade obtidos pelo modelo desenvolvido pelo Laboratório de Fluidodinâmica Computacional e pelo software Fluent. Os dados de entrada utilizados para esta simulação foram aqueles descritos na Tabela 6.3.

Os perfis de velocidade obtidos pelos dois softwares não apresentaram uma boa concordância. Acredita-se que a diferença entre os resultados deva-se a diferença entre os modelos de turbulência utilizados por cada software.

Vale lembrar que o perfil de velocidade do rio seria apenas o início da simulação, já que o objetivo do trabalho é determinar o perfil de concen-

6.7 Comparação dos resultados numéricos com resultados obtidos em simulação com o software Fluent

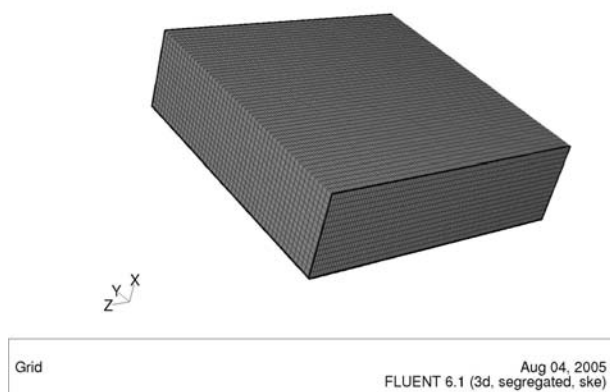


Figura 6.29: Malha gerada pelo software Fluent.

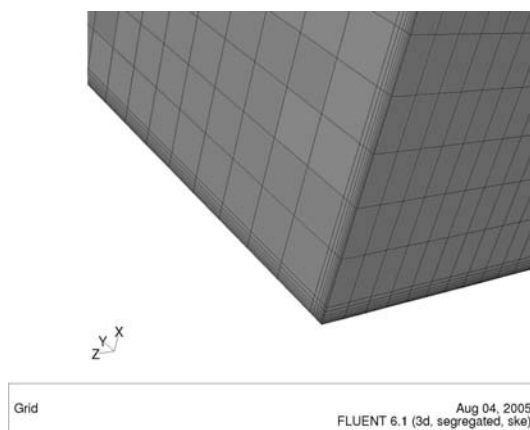


Figura 6.30: Região próxima a parede do escoamento.

tração de um efluente ao longo de todo o domínio. Desta forma, tornou-se impraticável a continuação desta etapa do trabalho, uma vez que não se dispõe de recursos computacionais capazes de realizar essa simulação.

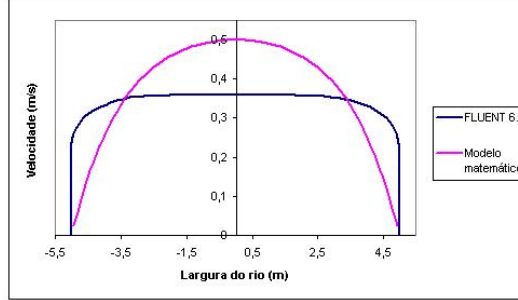


Figura 6.31: Comparação dos perfis de velocidade obtidos pelas duas simulações.

6.8 Comparação com dados experimentais

6.8.1 Dispersão de uma substância volátil

A fim de se obter a validação dos resultados numéricos obtidos, foi realizada uma comparação dos mesmos com dados experimentais. Tais dados experimentais foram obtidos de amostras coletadas no rio Atibaia, nas proximidades da Refinaria de Paulínia (REPLAN), no município de Paulínia, no estado de São Paulo.

O interesse da utilização destes dados experimentais está no fato de que a amônia é uma substância volátil. Desta forma o modelo teve que ser ajustado para levar em consideração a ocorrência deste fenômeno.

Este ajuste foi feito na condição de contorno da superfície do rio. O modelo que considera a dispersão de uma substância não volátil parte do princípio que não ocorre transferência de massa entre a água do rio e a atmosfera. Já quando a dispersão de uma substância volátil está sendo modelada, este princípio deve ser revisto.

Sendo assim, a condição de contorno na superfície do rio passa a ser a condição demonstrada na Equação 6.1.

$$\frac{\delta C_A}{\delta n} = K_v C_A \quad (6.1)$$

Em que: K_v é o coeficiente de volatilidade e C_A é a concentração do efluente

6.8 Comparação com dados experimentais

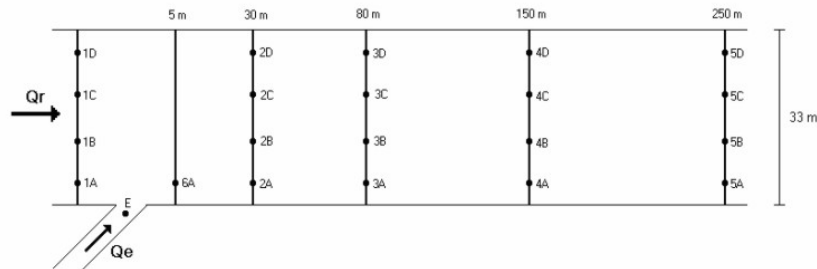


Figura 6.32: Pontos de coleta de amostras no rio Atibaia nas proximidades da REPLAN.

no volume de controle imediatamente anterior ao volume de controle que está sendo calculado.

Foram realizadas medições de concentração de amônia em diferentes pontos do rio Atibaia tanto a montante quanto a jusante do local onde ocorre a emissão dos efluentes da REPLAN. Na Figura 6.32 são mostrados os pontos em que foram coletadas as amostras para posterior análise em laboratório. Todas as amostras foram coletadas na superfície do rio.

Durante a coleta de amostra, foram medidas as dimensões do rio Atibaia. As vazões do rio e de efluente foram fornecidas pela REPLAN. Estes valores são mostrados na Tabela 6.9. O coeficiente de dispersão utilizado foi de $0,005 \text{ m}^2/\text{s}$. Já o coeficiente de volatilização da amônia foi de $0,2 \text{ m}^2/\text{s}$, utilizado por Modenesi (26, 2004).

As Figuras 6.33 a 6.36 comparam as concentrações adimensionais de amônia obtidas pelo modelo com os dados experimentais. Os resultados mostraram uma boa concordância com os dados experimentais, especialmente se forem consideradas as aproximações geométricas realizadas.

Apesar dos resultados numéricos terem se ajustado adequadamente aos dados experimentais, verificou-se a necessidade de uma quantidade maior de pontos para a validação do modelo, principalmente nos primeiros metros após a emissão do efluente, onde o gradiente de concentração é maior. Nos demais planos de amostragem foram designados um maior número de pontos onde as amostras deveriam ser coletadas.

6.8 Comparação com dados experimentais

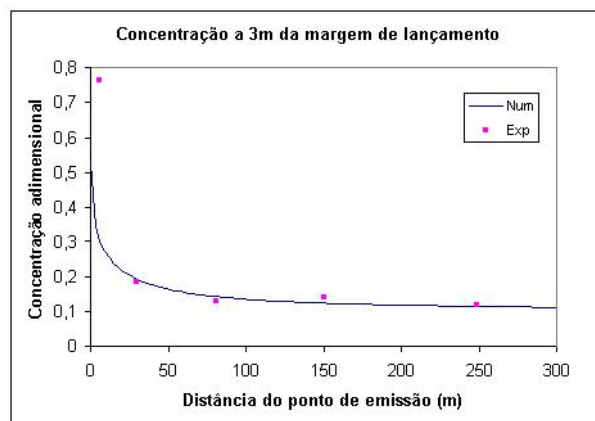


Figura 6.33: Perfil de concentração de amônia a 3 m da margem de lançamento.

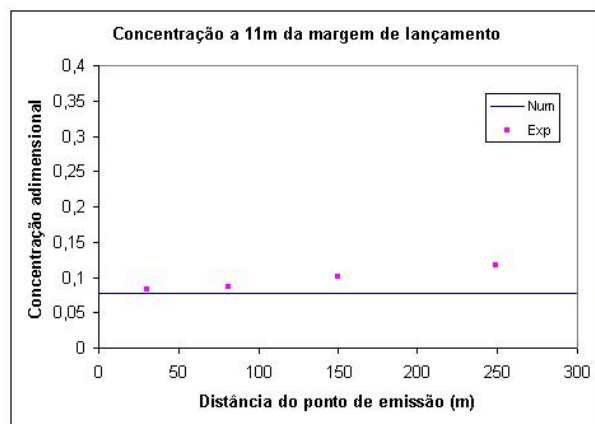


Figura 6.34: Perfil de concentração de amônia a 11 m da margem de lançamento.

6.8 Comparação com dados experimentais

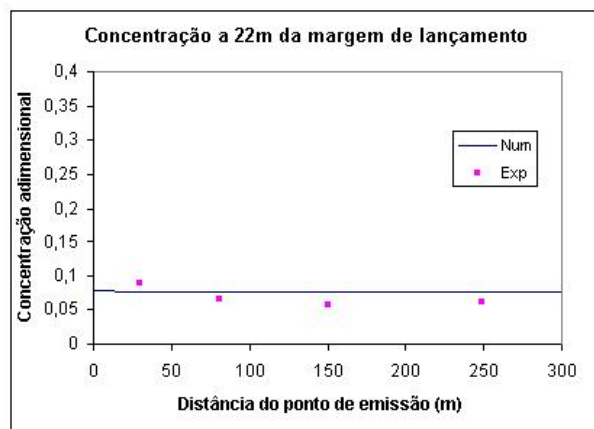


Figura 6.35: Perfil de concentração de amônia a 22 m da margem de lançamento.

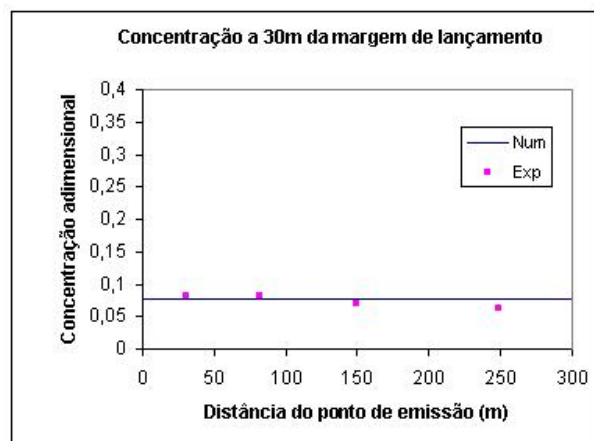


Figura 6.36: Perfil de concentração de amônia a 30 m da margem de lançamento.

Tabela 6.9: Dados do rio Atibaia e do efluente emitido pela REPLAN.

Dados de entrada	Valores
Profundidade (m)	3,0
Largura (m)	33,0
Comprimento (m)	250,0
Vazão do rio (m^3/s)	20,0
Vazão do efluente (m^3/s)	0,2

6.8.2 Dispersão de cloretos

A fim de se realizar uma comparação entre os resultados numéricos e dados experimentais, foi realizada uma coleta de amostras para obtenção de resultados. Nesta amostragem, foi definido que o parâmetro analisado seria a concentração de cloretos presente nas amostras. As amostras foram coletadas no rio Atibaia nas proximidades da REPLAN. A coleta foi realizada tanto a montante quanto a jusante do ponto de emissão dos efluentes da REPLAN.

Na Figura 6.37 é mostrada uma imagem de satélite do local estudado. Na imagem, o local de despejo do efluente da REPLAN é indicado por uma seta branca. Já a seção transversal localizada 1000 m a jusante do lançamento é indicada por uma linha branca. Nesta figura é possível observar que o rio Atibaia, no local de estudo, não apresenta uma geometria completamente retilínea.

A concentração de cloretos foi escolhida como parâmetro a ser analisado pois sua concentração é bem mais elevada no efluente da REPLAN que no rio Atibaia a montante do lançamento dos efluentes da refinaria. Além disso, os cloretos são bastante conservativos.

As amostras foram coletadas em diferentes pontos do rio Atibaia tanto a montante quanto a jusante do local onde ocorre a emissão dos efluentes da REPLAN e foram posteriormente analisadas em laboratório. Na Figura 6.38 são mostrados os pontos onde foram realizadas as coletas. Todas as amostras foram coletadas na superfície do rio.

Na Figura 6.38, os pontos de amostragem são representados por um número seguido por uma letra. Os pontos de amostragem representados pela



Figura 6.37: Imagem da área estudada no rio Atibaia. Fonte: *Imagem de programação do satélite QuickBird (11/05/2005), fornecida pela REPLAN.*

letra A foram coletados a 3 m da margem onde ocorre o despejo do efluente; os pontos de amostragem representados pela letra B foram coletados a 8 m da margem onde ocorre o despejo do efluente; os pontos de amostragem representados pela letra C foram coletados a 15 m da margem onde ocorre o despejo do efluente; e os pontos de amostragem representados pela letra D foram coletados a 21 m da margem onde ocorre o despejo do efluente.

Durante a coleta das amostras, as dimensões do rio Atibaia foram medidas. As vazões do rio e do efluente foram fornecidas pela REPLAN. As medições da profundidade do rio Atibaia foram realizadas em pontos aleatórios ao longo do trecho estudado.

Durante a amostragem, foi verificada a presença de uma fonte de emissão adicional no trecho estudado. Essa fonte de emissão era oriunda da estação de tratamento de esgotos (ETE) da REPLAN e localizava-se 500 m a jusante do ponto de emissão do efluente da REPLAN. Amostras das águas emitidas pela ETE também foram coletadas para posterior análise em laboratório.

Na Tabela 6.10 são apresentadas as características do rio Atibaia e do efluente emitido pela REPLAN.

6.8 Comparação com dados experimentais

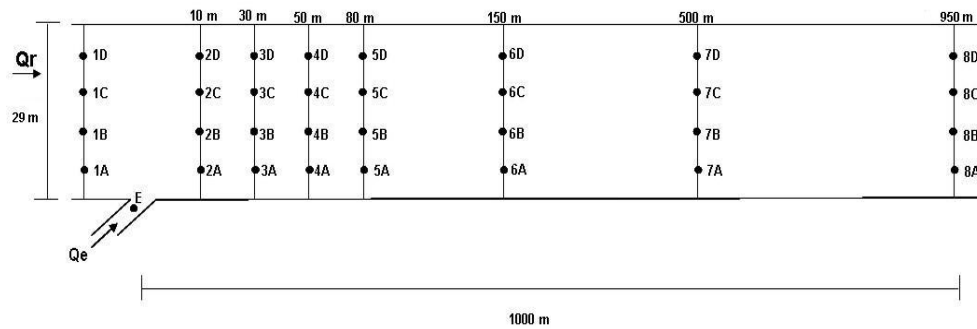


Figura 6.38: Pontos de coleta de amostras no rio Atibaia para análise de concentração de cloretos.

Tabela 6.10: Características do rio Atibaia e do efluente emitido pela REPLAN.

Dados de entrada	Valores
Profundidade (m)	1,39
Largura (m)	29,0
Comprimento (m)	950,0
Vazão do rio (m^3/s)	15,0
Vazão do efluente (m^3/s)	0,18

Na Tabela 6.11 são apresentadas concentrações de cloreto obtida em cada ponto de coleta de amostras.

Já na Tabela 6.12 são apresentadas as concentrações de cloretos obtidas nas amostras coletadas no efluente da REPLAN, denominada ETDI, e também no ponto de emissão da estação de tratamento de esgotos (ETE). A vazão da estação de tratamento de esgotos era de $12,6 \text{ m}^3/\text{h}$. A coleta das amostras foi realizada no dia 8 de agosto de 2005.

Os resultados obtidos experimentalmente foram comparados com os resultados numéricos obtidos pelo modelo matemático. Foram utilizados

6.8 Comparação com dados experimentais

Tabela 6.11: Concentração de cloreto nos pontos de amostragem no rio Atibaia.

Concentração de cloreto (mg/L)				
Amostra	A	B	C	D
1	15,3	15,8	16,0	15,7
2	16,6	17,0	16,8	16,0
3	96,7	17,2	17,1	16,4
4	86,2	21,9	16,8	16,5
5	75,0	17,4	16,6	17,2
6	50,3	23,8	15,9	16,7
7	29,1	23,2	16,6	16,9
8	24,9	23,7	18,1	17,9

Tabela 6.12: Concentração de cloreto nos pontos de amostragem dos efluentes da REPLAN.

Concentração de cloreto (mg/L)	
ETDI	441,2
ETE	75,1

vários valores de coeficientes de dispersão, variando de 0,005 a 0,14 m²/s. As comparações entre os resultados numéricos e os dados experimentais são apresentados nas Figuras 6.39, 6.40, 6.41 e 6.42.

Analisando os resultados apresentados nas Figuras 6.39, 6.40, 6.41 e 6.42, é possível verificar que o modelo matemático foi capaz de ajustar adequadamente os dados experimentais. Verifica-se apenas que o modelo não ajustou adequadamente os dados experimentais coletados nos metros iniciais do escoamento, na linha localizada a 3 m da margem onde ocorreu o lançamento do efluente, como pode ser observado na Figura 6.39.

6.8 Comparação com dados experimentais

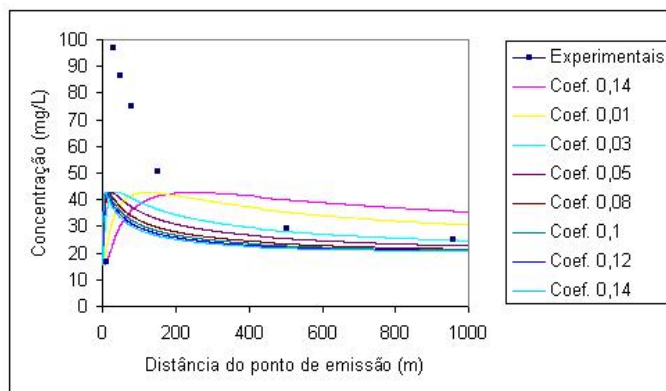


Figura 6.39: Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 3 m da margem de lançamento.

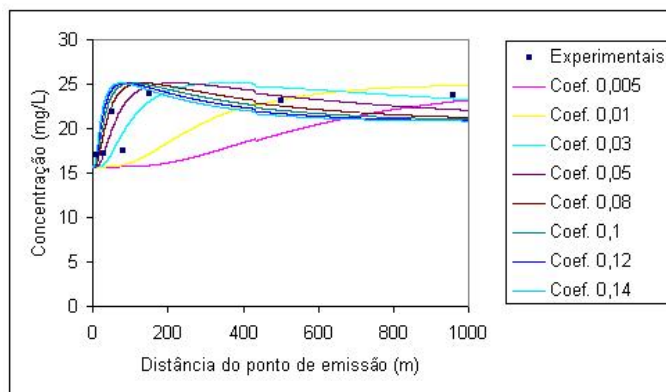


Figura 6.40: Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 8 m da margem de lançamento.

6.8 Comparação com dados experimentais

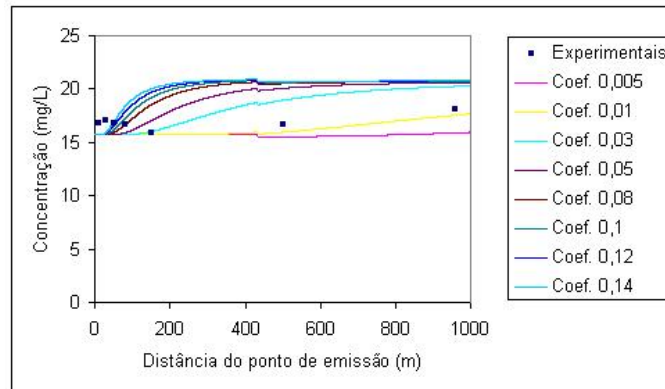


Figura 6.41: Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 15 m da margem de lançamento.

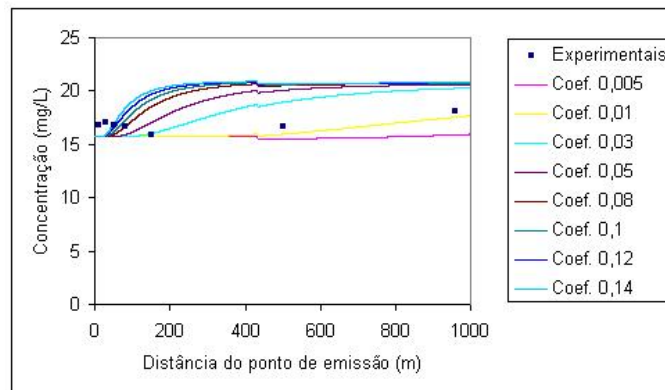


Figura 6.42: Comparação entre os perfis de concentração de cloreto e dados experimentais a 21 m da margem de lançamento.

6.8 Comparação com dados experimentais

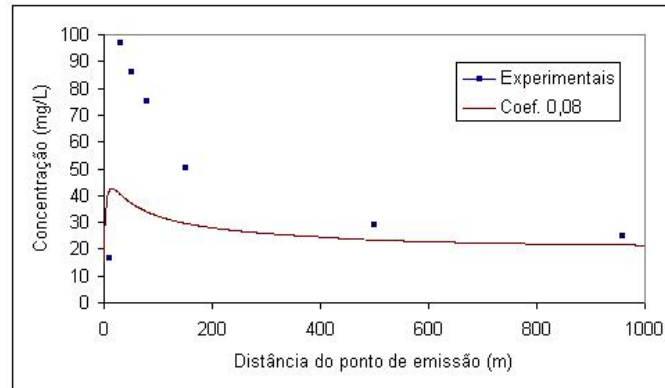


Figura 6.43: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 3 m da margem de lançamento.

Após análise das comparações entre os resultados numéricos e os dados experimentais, determinou-se que o coeficiente de dispersão que mais se adequava ao problema era o de $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$. Desta forma, nas Figuras 6.43, 6.44, 6.45 e 6.46 são apresentadas comparações entre os dados experimentais e os resultados obtidos com o coeficiente de dispersão igual a $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$.

Pode-se observar nas Figuras 6.43 a 6.46 que o modelo matemático utilizando o coeficiente de $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ ajustou muito bem os dados experimentais. A única região do rio onde os dados experimentais não foram ajustados adequadamente foi na região próxima à margem de lançamento nos metros iniciais do escoamento. Devido a grande variabilidade existente em sistemas ambientais, é importante salientar que é possível que tenham existido erros na coleta de amostras e na posterior análise em laboratório. Também é possível que possa ter ocorrido um aumento da concentração de cloreto no efluente no momento em que as amostras estavam sendo coletadas no rio Atibaia.

Porém, mesmo com esse desvio nos resultados, pode-se afirmar que o modelo matemático foi capaz de ajustar satisfatoriamente o fenômeno de dispersão de efluentes neste trecho de rio.

6.8 Comparação com dados experimentais

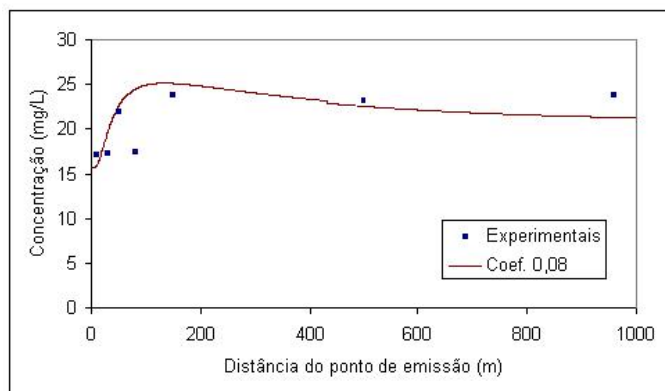


Figura 6.44: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 8 m da margem de lançamento.

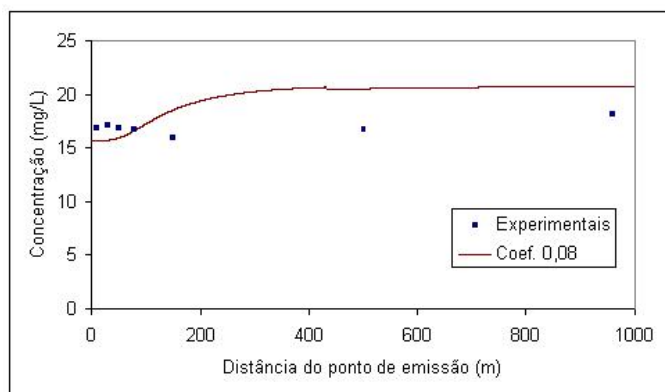


Figura 6.45: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 15 m da margem de lançamento.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

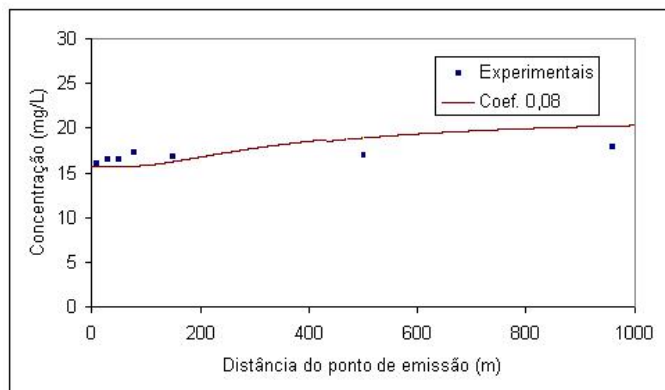


Figura 6.46: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 21 m da margem de lançamento.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

Um dos principais objetivos deste trabalho é a modelagem de casos reais de problemas ambientais. Sendo assim realizou-se um trabalho de consultoria para a empresa Rhodiaco, situada no município de Paulínia — SP, a fim de se fazer uma predição do comportamento dos seus efluentes lançados no rio Atibaia. A realização desta etapa do trabalho é descrita nas seções a seguir.

6.9.1 Descrição do sistema de estudo

A empresa Rhodiaco localiza-se no município de Paulínia — SP, e seu efluente é despejado no rio Atibaia.

O ribeirão Anhumas tem sua foz localizada 450 m a montante do local de emissão do efluente da Rhodiaco.

Vale lembrar que o efluente da Rhodiaco é composto por três correntes distintas: a corrente 209, oriunda da produção de ácido tereftálico, que no dia da amostragem apresentava uma vazão média de $132 \text{ m}^3/\text{h}$; uma corrente oriunda da purga da torre, com uma vazão média no dia da amostragem

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

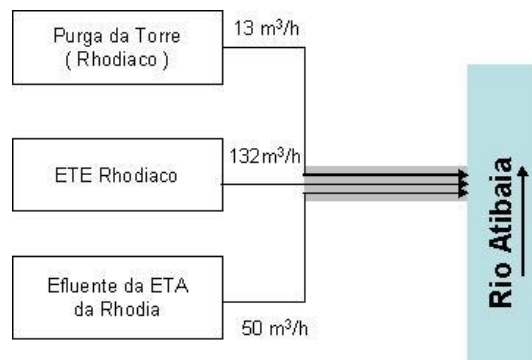


Figura 6.47: Representação do lançamento do efluente da Rhodiaco associado ao efluente da Rhodia.

de $13 \text{ m}^3/\text{h}$; e uma terceira corrente oriunda da estação de tratamento de água da Rhodia que no momento da amostragem tinha uma vazão de $50 \text{ m}^3/\text{h}$. Estas três correntes somadas têm uma vazão de $0,054 \text{ m}^3/\text{s}$. Apenas a corrente 209 apresenta uma concentração significativa de sódio em sua composição, sendo que as demais correntes apenas contribuem para a diluição do mesmo. Esta diluição foi considerada durante a simulação do sistema. Na Figura 6.47 é mostrado um esquema representativo destes lançamentos. Já no Apêndice A, pode-se observar na Figura A.1 uma imagem fotográfica do local de emissão do efluente da Rhodiaco.

A vazão do rio Atibaia no dia da amostragem era de $10,8 \text{ m}^3/\text{s}$. A coleta das amostras foi realizada no dia 1 de julho de 2005.

Existem outros três pontos de emissão localizados ao longo do trecho estudado, denominados Caixa 008, Caixa 007 e Caixa 006. Esses três pontos localizam-se na margem oposta à margem do lançamento do efluente da Rhodiaco. Na Tabela 6.13 são apresentadas as características destes três pontos de emissão. No Apêndice A, na Figura A.2, é possível observar uma imagem fotográfica do local onde as emissões oriundas da Caixa 007 são lançadas no rio Atibaia. A partir desta figura, torna-se possível observar o grande volume de efluentes que são lançados neste ponto do rio.

No momento das amostragens foram realizadas medições da profundidade em 40 diferentes locais do rio Atibaia para obtenção da profundidade média. A partir dessas medições, obteve-se uma profundidade média de $2,1 \text{ m}$ no momento da coleta das amostras. Foi definido também que a largura

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

Tabela 6.13: Pontos de emissão localizados à jusante da emissão da Rhodiaco

	Distância da Caixa 005	Vazão
Caixa 008	437 m	2320 m ³ /h
Caixa 007	540 m	1380 m ³ /h
Caixa 006	635 m	310 m ³ /h

média do rio Atibaia é de 27 m. Esta largura média foi determinada por meio da análise de um levantamento topográfico realizado na região fornecido pela Rhodiaco.

Na Figura 6.48 é mostrada uma imagem de satélite da região estudada. Nesta imagem é possível observar o ponto de emissão do efluente da Rhodiaco, e também todo o trecho de rio estudado. É importante mencionar que o contorno aparente das margens do rio não corresponde a sua largura real, uma vez que a vegetação ciliar se projeta sobre o leito dando a impressão de que o rio é mais estreito do que o real. Nestas fotos pode-se observar que este trecho de rio é bastante irregular, apresentando diversas curvas em seu trajeto. Porém os resultados obtidos mostraram que o modelo matemático foi capaz de prever satisfatoriamente o comportamento da dispersão do efluente. Na Figura B.1, no Apêndice B, é possível observar a Figura 6.48 com georreferenciamento.

6.9.2 Método de estudo

Esta fase do trabalho foi dividida em duas etapas:

- Determinação do coeficiente global de transferência de massa para o trecho de rio.
- Simulação da dispersão do efluente da Rhodiaco no trecho do rio Atibaia.

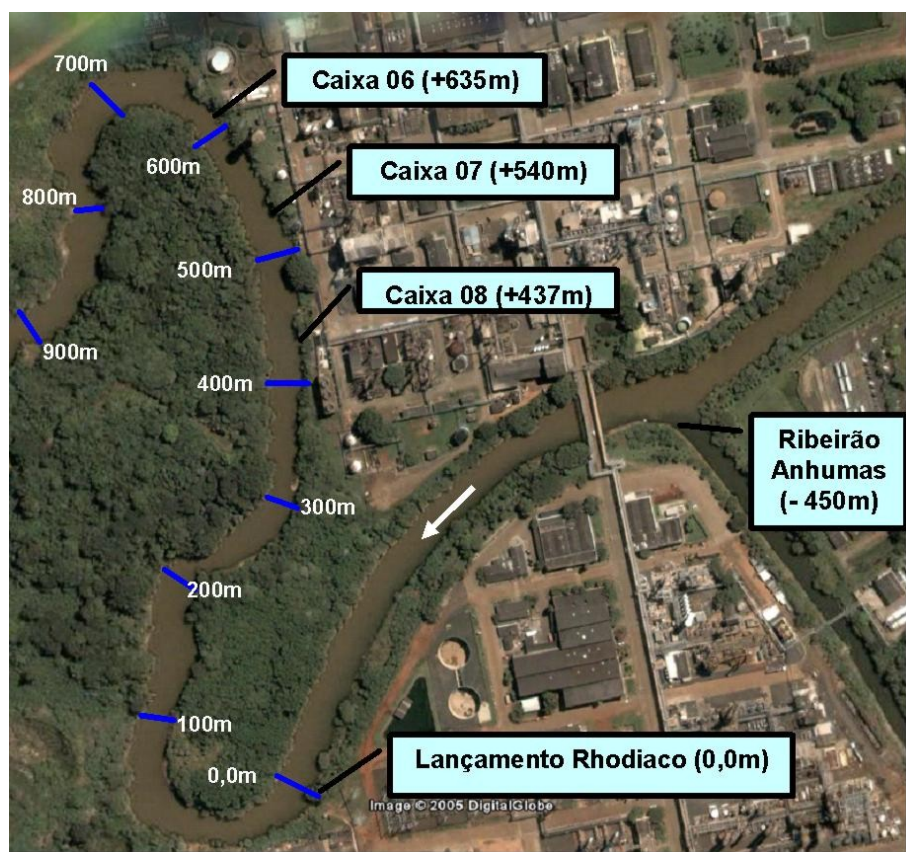


Figura 6.48: Imagem aérea da área estudada. Fonte: *Google Earth* (16)

Determinação do coeficiente global de transferência de massa para o trecho de rio

A determinação deste parâmetro é dividida em três etapas:

- Escolha do traçador
- Amostragem de campo
- Determinação do coeficiente de dispersão por ajuste do modelo aos resultados da amostragem

Um traçador ideal para a realização deste estudo deve apresentar as seguintes características:

- Deve ser conservativo, ou seja, não pode ser degradável e nem sofrer nenhuma reação química que o torne não detectável pelo método analítico, não pode ser volátil e não pode interagir por adsorção com sedimentos ou com sólidos suspensos em uma taxa significativa.
- Deve estar presente no efluente em quantidades muito acima do limite de detecção do método analítico e o método analítico deve fornecer uma boa precisão na análise;
- Não deve estar presente em quantidades significativas no rio à montante do lançamento de forma que, após a mistura total, o aumento da sua concentração possa ser detectado com precisão pelo método analítico.

Com base nesses critérios, identificou-se o sódio como traçador pois, além de estar presente em uma concentração detectável com precisão no efluente, tem uma pequena concentração no rio Atibaia.

Após ter sido escolhido o traçador, desenvolveu-se um plano de amostragem em que foram definidos diversos pontos de coleta de água em diferentes locais do rio Atibaia. Analisou-se então a concentração de sódio em todas as amostras.

Na Figura 6.49 é mostrada uma representação do rio Atibaia com a localização dos pontos ao longo de um trecho de 950 metros onde as amostras foram coletadas. Todas as distâncias lá representadas são em função da distância do ponto onde ocorre o despejo do efluente no rio Atibaia. Estas

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

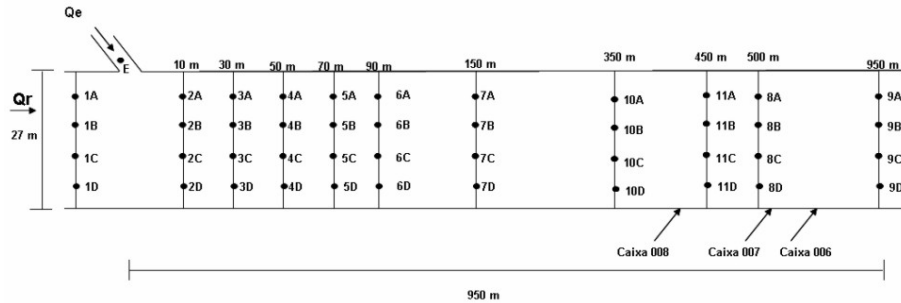


Figura 6.49: Representação dos pontos de amostragem do rio Atibaia próximos ao despejo de efluentes da Rodhiaco.

distâncias foram: 10 m, 30 m, 50 m, 70 m, 90 m, 150 m, 500 m e 950 m. Foram coletadas amostras também a montante do ponto de emissão de efluentes, a aproximadamente 50 m do local de emissão do efluente da Rhodiaco.

Na Figura 6.49, os pontos de amostragem são representados por um número seguido por uma letra. Os pontos de amostragem representados pela letra A foram coletados a 3 m da margem onde ocorre o despejo do efluente; os pontos de amostragem representados pela letra B foram coletados a 7 m da margem onde ocorre o despejo do efluente; os pontos de amostragem representados pela letra C foram coletados a 14 m da margem onde ocorre o despejo do efluente; e os pontos de amostragem representados pela letra D foram coletados a 21 m da margem onde ocorre o despejo do efluente. Considerou-se que o rio Atibaia tem uma largura média de 27 m nas imediações do ponto de emissão de efluentes da Rhodiaco.

Todas as amostras foram coletadas diretamente na superfície do rio. Análises do teor de sódio foram realizadas também no efluente que estava sendo despejado no rio Atibaia (ponto E), denominado amostra 209 na Tabela 6.15 e nos demais pontos de emissão (Caixas 008, 007 e 006) oriundos de torres de refrigeração.

Coletaram-se amostras simples em todos os pontos de amostragem; porém as análises foram todas realizadas em duplicata.

A largura e a profundidade médias do rio Atibaia foram medidas no dia em que se realizou a amostragem. Estas medidas são necessárias para simulação do sistema, uma vez que todo o plano de amostragem foi

elaborado baseado em um levantamento de batimetria do rio Atibaia que não representavam as condições apresentadas pelo rio no momento da coleta das amostras.

Uma vez obtidas as concentrações de sódio em diversos pontos do rio Atibaia, foi realizado o ajuste do modelo matemático desenvolvido pelo L-CFD. A partir deste ajuste, foi obtido um coeficiente global de dispersão característico para este trecho do rio Atibaia.

Com a obtenção do coeficiente global de dispersão, foi possível realizar a simulação de todo o domínio considerado. Nesta simulação, o efluente foi considerado como tendo apenas um único componente. Esta abordagem é necessária para permitir a avaliação das condições de mistura do efluente da Rhodiaco com as águas do rio Atibaia, como se este fosse um pseudo-elemento com as mesmas propriedades de transporte da água. Neste teste, o efluente é considerado na sua totalidade, com toda a sua complexidade, sem qualquer avaliação da sua composição. Este procedimento evita a necessidade de determinação da composição do efluente para determinar a sua toxicidade aquática, além de incorporar todos os efeitos sinérgicos e antagônicos entre os seus componentes que porventura possam aparecer. O fato do coeficiente de dispersão ter sido ajustado apenas para o sódio, e não para todo o efluente é minimizado devido à predominância dos efeitos convectivos em relação aos difusivos. Como no presente caso também é utilizado um modelo turbulento, que é a característica deste trecho de rio, considera-se suficiente a abordagem baseada na concentração do efluente no rio, como se fosse um pseudo-componente.

Simulação da dispersão do efluente da Rhodiaco no rio Atibaia

Após a determinação do coeficiente de dispersão característico e a validação do modelo para o trecho de rio estudado, o modelo encontra-se apto a prever os perfis de concentrações para qualquer cenário desde que respeitadas as hipóteses iniciais.

Com o objetivo de atender aos objetivos deste trabalho, empregou-se o modelo matemático e código Fortran desenvolvidos para calcular os perfis de concentrações do efluente da Rhodiaco no rio Atibaia, correspondentes às seguintes simulações:

- Simulação da dispersão com as condições do dia da amostragem de campo.

- Simulação da dispersão do efluente da Rhodiaco para o cenário do $Q_{7,10}^*$.

Os resultados foram expressos como perfis de concentrações em seções transversais e longitudinais, lembrando que os resultados são tridimensionais.

6.9.3 Resultados da determinação do coeficiente de dispersão

Os resultados desta etapa do trabalho estão divididos em 3 partes: inicialmente é mostrado como foi obtido o coeficiente de dispersão característico para este trecho de rio; logo após é descrita a modelagem da dispersão do efluente da Rhodiaco nas condições do dia da amostragem; e finalmente é apresentada uma simulação da dispersão do efluente da Rhodiaco nas condições do $Q_{7,10}$ do rio Atibaia.

Determinação do coeficiente de dispersão

As concentrações de sódio determinadas nas amostras coletadas no rio Atibaia estão demonstradas na Tabela 6.14.

Um fator considerado foi que a concentração de sódio a montante do lançamento não era homogênea, conforme pode ser observado na Tabela 6.14. Este fato provavelmente ocorre devido a presença da foz do ribeirão Anhumas 450 m a montante do local de lançamento. Desta forma, acredita-se que o sódio oriundo deste ribeirão, que tem uma alta carga efluente, ainda não se encontrava completamente disperso na seção transversal de amostragem 1. Foi desenvolvida uma subrotina especialmente para este caso para que se tornasse possível considerar a concentração de sódio não homogênea na seção transversal inicial do domínio.

Como se trata de modelo determinístico, o princípio da conservação da massa tem de ser verificado. Os dados experimentais obtidos trazem erros que podem ser atribuídos aos métodos de coleta e de análises químicas, bem como à variabilidade natural das condições do rio devido à sua

* $Q_{7,10}$: vazão mínima de 7 dias consecutivos para um período de retorno de 10 anos.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

Tabela 6.14: Concentração de sódio nos pontos de amostragem.

Concentração de sódio (mg/L)				
Amostra	A	B	C	D
1	23	20	17	15,5
2	26	23	17,5	15,5
3	32	21	17	16
4	33	18	15,5	15,5
5	19,5	15,5	14,5	14,5
6	24	22	15,5	15
7	18	19,5	20,5	18,5
10	20	20	20	20
11	19	19	19	19
8	17,5	19	18	17,5
9	18	18,5	18,5	19

irregularidade e complexidade, além da possibilidade da presença de interferentes. Portanto, na maior parte dos casos, esses desvios são esperados e os dados experimentais devem passar por uma avaliação de sua consistência, principalmente no que diz respeito ao princípio da conservação da massa.

No presente caso, os dados experimentais de campo obtidos à jusante do ponto de lançamento apresentaram-se coerentes entre si e permitiu que os resultados do modelo matemático se ajustassem muito bem com os resultados de campo. Entretanto, na verificação do princípio da conservação da massa entre o conjunto de resultados obtidos nas 10 seções transversais a jusante do lançamento da Rhodiaco com os dados de montante (seção transversal 1) encontrou-se um desvio de aproximadamente de 20 % (os valores obtidos na seção transversal de montante foram superiores ao esperado para produzir o perfil de concentração a jusante obtido). Estes desvios podem ser atribuídos aos possíveis erros mencionados acima. Tendo em vista

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

a coerência e a qualidade dos dados das 10 seções transversais de jusante, optou-se pelo ajuste dos dados de montante para manter a consistência com base no princípio da conservação da massa.

Nas Tabelas 6.15 e 6.16 são mostradas as concentrações de sódio obtidas nas amostras coletadas a partir das diferentes emissões localizadas no trecho de rio estudado.

Tabela 6.15: Concentração de sódio da amostra 209 (lançamento da Rhodiaco).

Concentração de sódio (mg/L)		
09h50min	10h25min	11h15min
1220	1230	1265

A amostra 209 apresentou uma concentração média de 1238 mg/L. Porém devido às demais correntes também presentes neste efluente já mencionadas anteriormente, a concentração de sódio no efluente lançado no rio é de 838 mg/L.

Tabela 6.16: Concentração de sódio dos demais pontos de emissão ao longo do trecho de estudo.

Concentração de sódio (mg/L)	
Caixa 008	10,5
Caixa 007	10,5
Caixa 008	11,5

Pode-se verificar na Tabela 6.16 que as concentrações de sódio nas demais emissões ao longo do trecho estudado são bastante baixas. Na realidade estas demais emissões nada mais são do que águas oriundas de torres de refrigeração que apenas contribuem para diluir o efluente lançado anteriormente pela Caixa 005.

Uma vez obtidos todos os parâmetros necessários, torna-se possível a realização de simulações com o modelo matemático de diversas situações a fim de se obter um coeficiente de dispersão que melhor ajuste o sistema

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

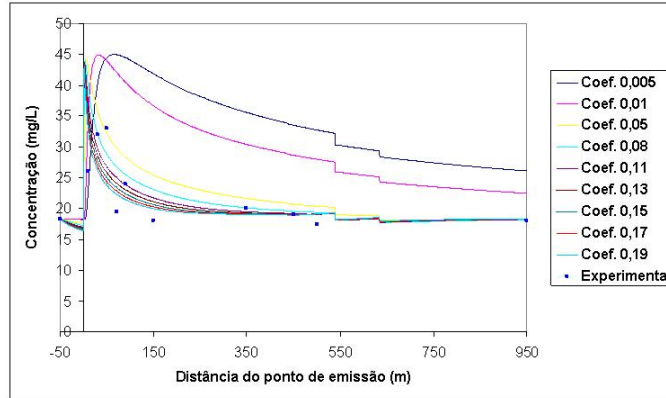


Figura 6.50: Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 3 m da margem de lançamento.

estudado. Foram testados diversos valores para o coeficiente de dispersão, variando entre $0,005 \text{ m}^2/\text{s}$ até $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$.

Na Figuras 6.50 a 6.53 são mostrados os comportamentos das curvas de concentração para cada uma das seções longitudinais estudadas com diversos coeficientes de dispersão ($0,005$, $0,01$, $0,05$, $0,08$, $0,11$, $0,13$, $0,15$, $0,17$ e $0,19 \text{ m}^2/\text{s}$). Nesta figura estão representados também os valores obtidos experimentalmente.

Ao se comparar as curvas obtidas numericamente com os resultados experimentais, verificou-se que o coeficiente que melhor representava o fenômeno era o de $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$.

Desta forma, nas Figuras 6.54 a 6.57 são apresentadas apenas as curvas obtidas com esse coeficiente juntamente com os dados experimentais. Alguns pontos obtidos experimentalmente e que apresentaram comportamentos muito distantes do comportamento predito pelo modelo foram desconsiderados. Porém foram desconsiderados no máximo dois pontos experimentais para cada seção longitudinal estudada.

Pode-se perceber nas Figuras 6.54 a 6.57 que os resultados fornecidos pelo modelo representaram satisfatoriamente o comportamento do sistema, uma vez que ficaram bem próximos dos valores obtidos experimentalmente. Nestas figuras, é possível visualizar também o efeito causado pelas emissões existentes ao longo do trecho estudado. De acordo com os resultados obtidos,

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

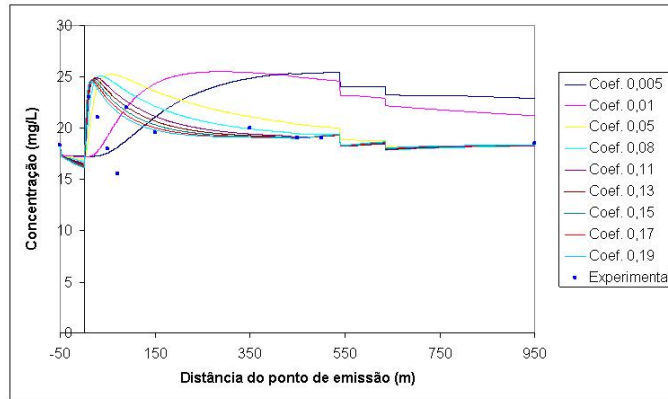


Figura 6.51: Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 7 m da margem de lançamento.

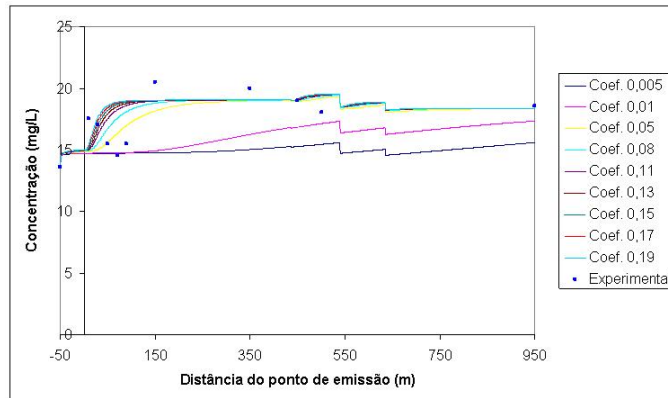


Figura 6.52: Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 14 m da margem de lançamento.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

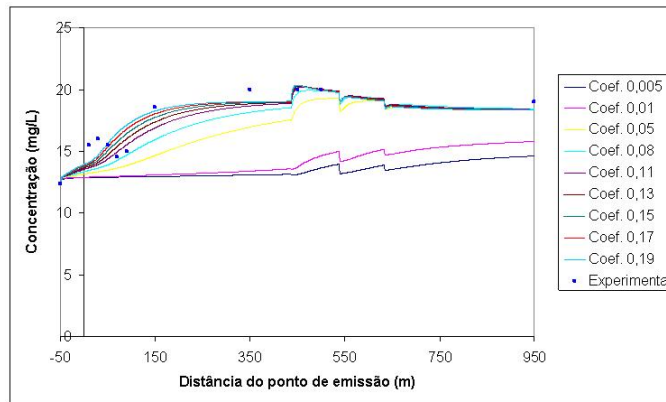


Figura 6.53: Comparação entre os resultados numéricos e experimentais a 21 m da margem de lançamento.

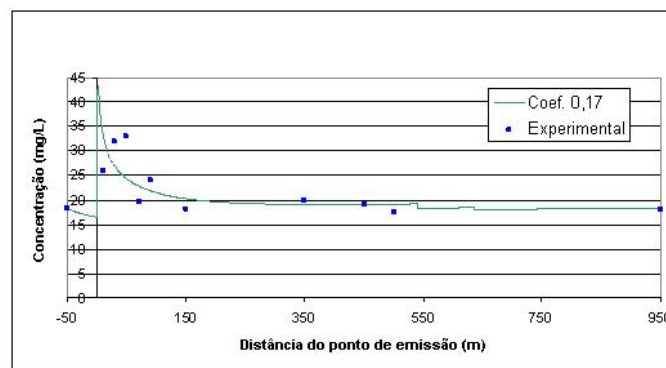


Figura 6.54: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 3 m da margem de lançamento.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

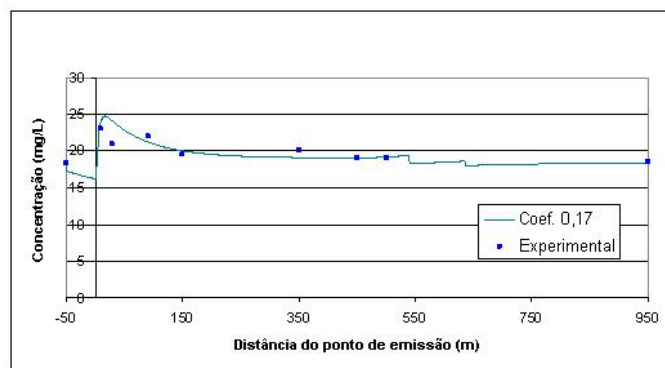


Figura 6.55: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 7 m da margem de lançamento.

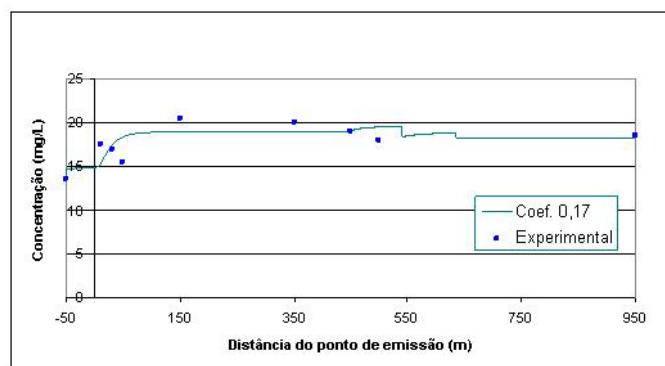


Figura 6.56: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$ e experimentais a 14 m da margem de lançamento.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

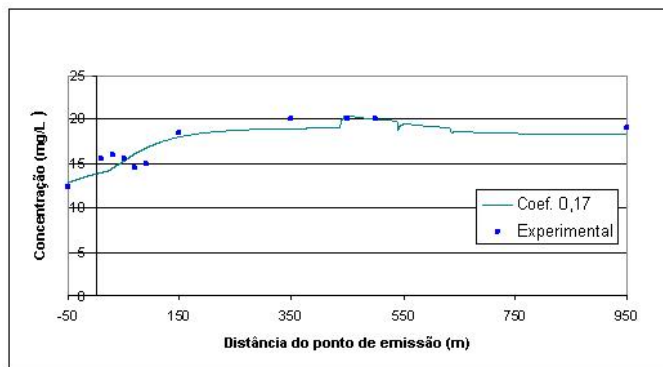


Figura 6.57: Comparação entre os resultados numéricos obtidos com coeficiente 0,17 m²/s e experimentais a 21 m da margem de lançamento.

existe uma diluição considerável do efluente nestes pontos. Este fenômeno ocorre devido à alta vazão destas correntes, que são bem mais elevadas que a vazão do efluente da Rhodiaco.

Modelagem da dispersão do efluente da Rhodiaco para as condições do dia da amostragem

Após a determinação do coeficiente de dispersão que melhor representa o fenômeno estudado, torna-se possível realizar a modelagem do efluente lançado pela Rhodiaco. Como já foi descrito anteriormente, o efluente será modelado como se todos os seus componentes se comportassem da mesma maneira. Desta forma, obter-se-á um perfil de concentração do efluente na água do rio.

Sendo assim, todo o efluente lançado pela Rhodiaco terá concentração igual a 1,0 (100 %), e a água do rio terá uma concentração de efluente igual a zero (0 %) a montante do lançamento.

Sabe-se que os componentes de um efluente não têm um comportamento semelhante, já que cada substância tem um coeficiente de dispersão característico. Porém, a realização da modelagem matemática desta maneira permite obter a determinação da porcentagem de efluente presente no escoamento ao longo de todo o trecho em estudo. A obtenção de um perfil de

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

concentração em termos de porcentagem de efluente é interessante particularmente no presente estudo, uma vez que se deseja traçar uma comparação dos resultados com testes de toxicidade do efluente.

O estudo deste caso considerou as vazões e as dimensões medidas no dia da amostragem, já descritas anteriormente. O coeficiente de dispersão determinado é $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$.

Foram determinadas as localizações das seções transversais em que as concentrações de efluente se reduzem a um máximo de 10 %, 5 %, 2 % e 1 % da concentração inicial. Estes resultados podem ser visualizados na Tabela 6.17. Ao se observar os resultados mostrados na Tabela 6.17, verifica-se que a dispersão do efluente lançado pela Rhodiaco ocorre em um pequeno trecho do rio. A uma distância de 31,21 m, verifica-se que a porcentagem de efluente presente na água já é menor que 1 % da sua concentração inicial.

Tabela 6.17: Distâncias das seções transversais em relação a porcentagem de efluente na água do rio.

Máxima porcentagem de efluente na seção transversal	Distância do ponto de emissão
100 %	0 m
10 %	0,58 m
5 %	1,77 m
2 %	8,63 m
1 %	31,21 m

A Figura 6.58 mostra o perfil de concentração na superfície do rio ao longo de todo o trecho considerado.

Modelagem da dispersão do efluente da Rhodiaco para as condições de $Q_{7,10}$

Após a realização da modelagem matemática do perfil de concentração do efluente lançado pela Rhodiaco nas condições encontradas no dia

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

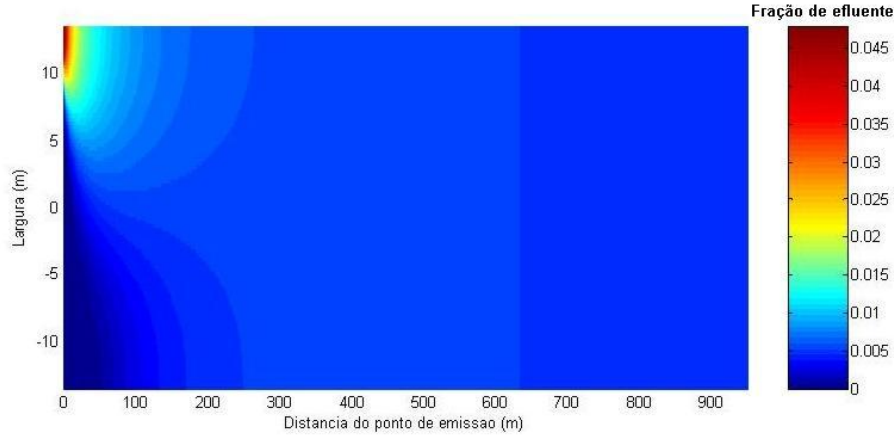


Figura 6.58: Perfil de concentração na superfície do rio para as condições do dia da amostragem.

da amostragem, realizou-se também uma modelagem visando simular as condições críticas do sistema de estudo.

Desta forma, realizou-se uma simulação utilizando como vazão do rio Atibaia o seu $Q_{7,10}$. O $Q_{7,10}$ do rio Atibaia é de $3,54 \text{ m}^3/\text{s}$.

Não há medições disponíveis das condições do rio Atibaia quando este se encontra com sua vazão mínima. Desta forma, considerou-se o pior cenário possível. Ou seja, a largura do rio será considerada a mesma do dia da amostragem (27 m), e apenas a sua profundidade terá variação em função da vazão. Com essas considerações, determinou-se que a profundidade média do rio Atibaia em condições críticas é de 0,69 m.

Esta relação entre profundidade e largura do rio é considerada o pior cenário possível, pois como o rio Atibaia é bem mais largo do que profundo, a dispersão do efluente na água do rio irá ocorrer de forma mais lenta no sentido de sua largura do que de sua profundidade. Assim, considerar que o rio Atibaia tem a mesma largura média em condições críticas de vazão que no dia da amostragem torna o estudo mais conservador.

O coeficiente de dispersão utilizado para simulação deste caso novamente foi de $0,17 \text{ m}^2/\text{s}$.

Foram determinadas as localizações das seções transversais em que as concentrações de efluente se reduzem a um máximo de 10 %, 5 %, 2 %

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

e 1,5 % da concentração inicial. Estes resultados podem ser visualizados na Tabela 6.18. Como esta simulação tem o objetivo de simular o comportamento do efluente lançado pela Rhodiaco, não foram consideradas as emissões lançadas pelas caixas 008, 007 e 006. Esta medida novamente torna o estudo mais conservador, uma vez que estas emissões são oriundas de sistemas de resfriamento, ou seja, iriam apenas contribuir para a diluição do efluente.

Tabela 6.18: Distâncias das seções transversais em relação a porcentagem de efluente na água do rio para $Q_{7,10}$.

Máxima porcentagem de efluente na seção transversal	Distância do ponto de emissão
100 %	0 m
10 %	3,16 m
5 %	12,74 m
2 %	79,60 m
1,5 %	143,80 m

A partir dos resultados mostrados na Tabela 6.18, verifica-se que nos primeiros metros após a emissão da Rhodiaco, ocorre uma dispersão bastante rápida do efluente, sendo que a apenas 12,74 m do lançamento a porcentagem máxima de efluente presente na água é de 5 %.

Após esta distância, devido a pequena vazão do rio, ocorre uma diminuição do gradiente de concentração. Desta forma a dispersão ocorre mais lentamente.

Foi determinado também que a porcentagem de efluente presente na água do rio Atibaia após dispersão total é em torno de 1,12 %.

Na Figura 6.59 é mostrado o comportamento do perfil de concentração do efluente na superfície do rio Atibaia em condições críticas de vazão. Já na Figura 6.60, é mostrado o perfil de concentração em função da distância do ponto de lançamento. Nesta figura, pode-se perceber que a dispersão ocorre de maneira bastante rápida logo após o despejo no rio Atibaia.

6.9 Determinação do coeficiente de dispersão de um caso real

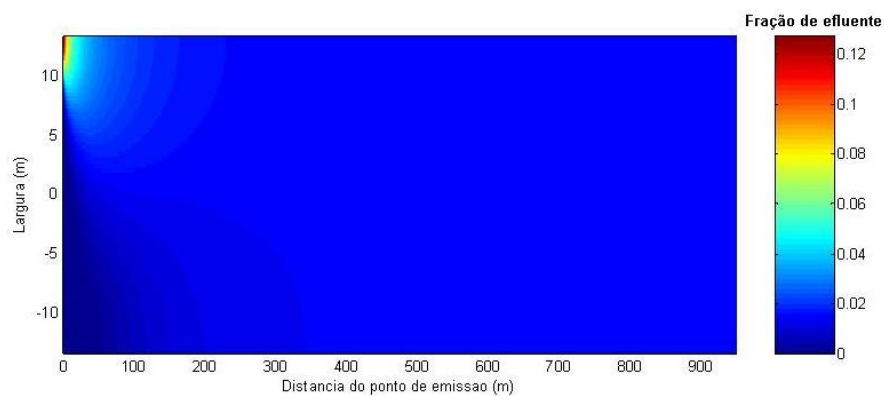


Figura 6.59: Perfil de concentração na superfície do rio para as condições críticas de vazão.

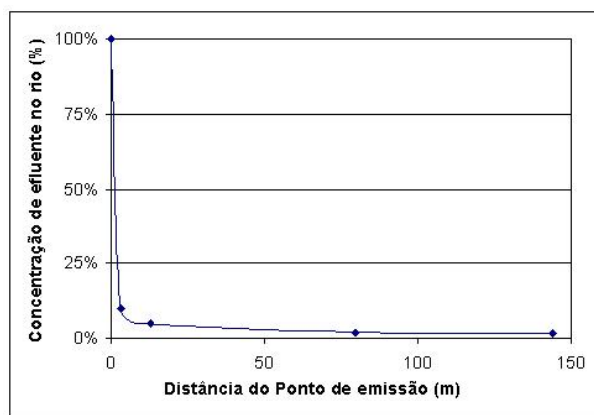


Figura 6.60: Perfil da concentração do efluente no rio em função da distância do ponto de emissão.

6.10 Desenvolvimento de uma interface gráfica

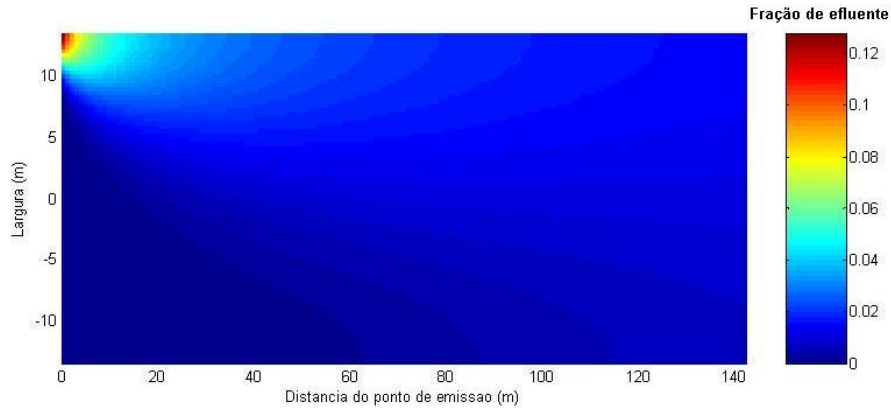


Figura 6.61: Perfil de concentração na superfície do rio para as condições críticas de vazão nos 142 m iniciais de escoamento.

A fim de possibilitar uma melhor visualização do fenômeno da dispersão, também é mostrado o perfil de concentração do efluente na superfície do rio Atibaia nos primeiros 142 m após o lançamento. Este perfil pode ser observado na Figura 6.61.

Na Figura 6.62 são mostrados os perfis de concentrações em diversas seções transversais ao longo do rio Atibaia. Nesta figura é possível observar que o fenômeno da dispersão realmente é dependente principalmente da largura do rio. Isto ocorre porque o rio é bem mais largo que profundo e, em consequência, o efluente difunde mais rapidamente para o fundo do rio. Nesta figura, deve-se tomar o cuidado de se observar que cada gráfico tem uma escala própria. As escalas destes gráficos foram ajustadas independentemente umas das outras para tornar possível uma melhor visualização do fenômeno da dispersão.

A partir destes resultados, pode-se perceber que o modelo matemático descreveu o fenômeno de dispersão satisfatoriamente.

6.10 Desenvolvimento de uma interface gráfica

A fim de facilitar o uso do modelo matemático deste trabalho, foi desenvolvida uma interface gráfica em Visual Basic .NET para ser utilizado em

6.10 Desenvolvimento de uma interface gráfica

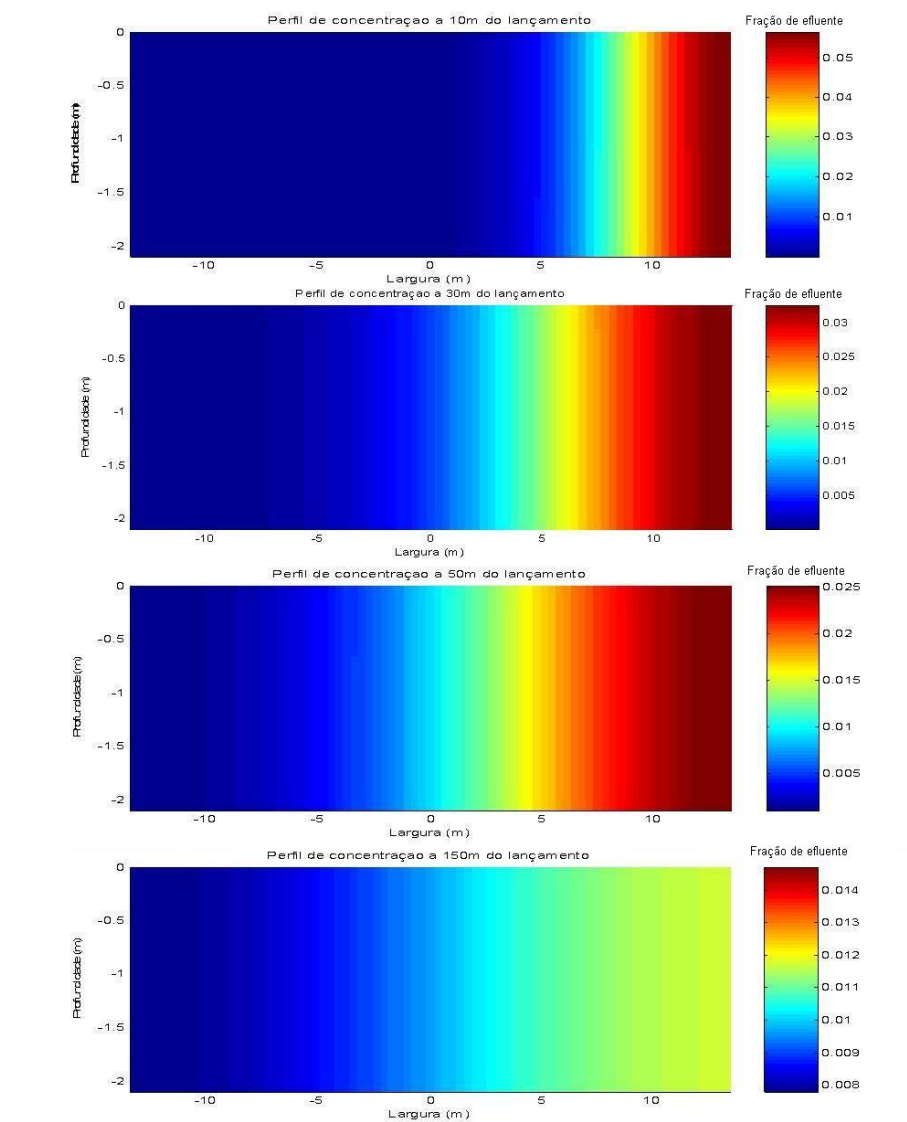


Figura 6.62: Perfis de concentrações de diferentes seções transversais do trecho estudado.

ambiente Windows 98/NT/2000. A partir desta interface gráfica, a inserção dos dados de entrada do problema e verificação dos resultados tornam-se bastante simples.

O programa funciona basicamente da seguinte forma:

- O usuário digita os dados de entrada de acordo com o tipo de problema a ser estudado e clica em um botão para executar o programa.
- O software desenvolvido em Visual Basic gera então arquivos de dados .txt e chama o programa propriamente dito que foi desenvolvido em Visual Fortran.
- O programa em Visual Fortran é compilado automaticamente e acessa o arquivo de dados de entrada gerado pelo Visual Basic.
- Após o acesso aos dados de entrada, o programa é executado a fim de se obter os resultados desejados.
- Os resultados são gerados em arquivos .txt e .f90 (que podem ser acessados a partir do Visual Fortran). Após a execução do programa, alguns gráficos serão automaticamente apresentados na tela através da utilização do software Matlab 6.5.

O software consiste em uma janela onde é possível visualizar todas as opções disponíveis. Esta janela é apresentada na Figura 6.63. Nesta janela existem várias opções a serem observadas. No lado direito da janela existem 4 botões:

- **Novo** Deve ser clicado quando se desejar limpar todas as demais opções de entrada e saída de dados.
- **OK** Deve ser clicado para execução do programa.
- **Ajuda** Abre uma janela com um arquivo contendo explicações a respeito da utilização do software.
- **Sair** Esta opção serve para fechar o programa.

O usuário pode definir se o efluente é inerte ou não inerte na parte superior direita do software. Caso o usuário defina que o efluente é inerte, uma série de opções relativas a modelagem da dispersão de efluentes não inertes serão automaticamente desabilitadas.

6.10 Desenvolvimento de uma interface gráfica

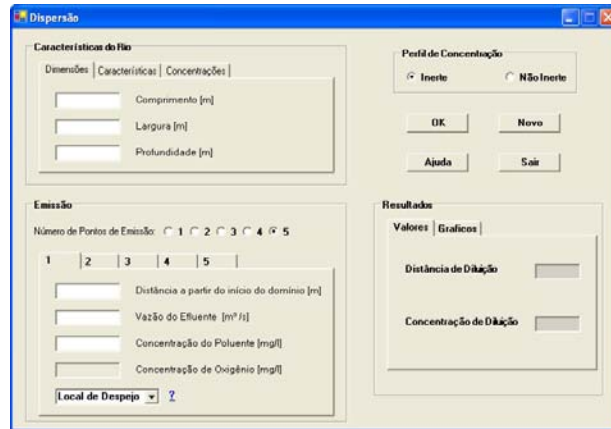


Figura 6.63: Software de dispersão: opção *dimensões*.

Na parte superior esquerda existem 3 itens: *dimensões*, *características* e *concentrações*. O item *dimensões* pode ser visualizado na Figura 6.63. Neste item, devem ser inseridas as características geométricas do rio: largura, profundidade e comprimento.

Já na Figura 6.64 pode-se observar as opções do item *características*. Neste item devem ser inseridos os seguintes dados de entrada do programa: vazão do rio, coeficiente de dispersão e coeficiente de volatilidade (no caso de uma substância volátil). Caso a substância não seja volátil, o software atribuirá automaticamente um valor igual a zero ao coeficiente de volatilidade.

Na Figura 6.65 são mostradas as opções do item *concentrações*. Neste item devem ser inseridos os valores relativos a concentração da substância no rio antes da primeira emissão de efluentes e a concentração de oxigênio no início do domínio (no caso da modelagem de uma substância inerte, a janela de concentração de oxigênio será automaticamente desabilitada).

Na parte inferior esquerda do software estão as opções relativas às características do efluente. Inicialmente deve-se definir quantos pontos de emissão existem ao longo do domínio (até 5 pontos de emissão). Após essa definição, o programa habilitará automaticamente as janelas para inserção dos dados de cada um dos efluentes. Os dados a serem inseridos são: distância entre o início do domínio e o local de lançamento do efluente, vazão do

6.10 Desenvolvimento de uma interface gráfica

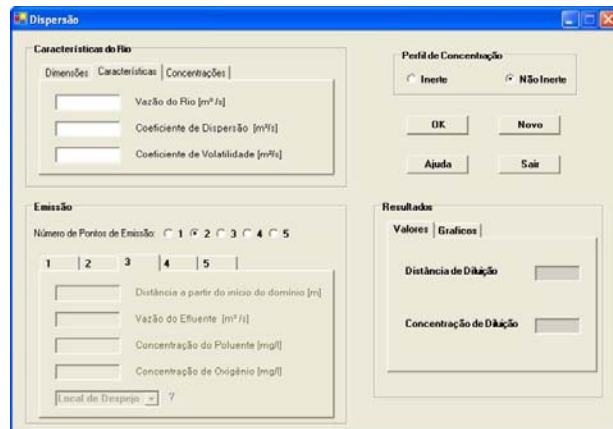


Figura 6.64: Software de dispersão: opção *características*.

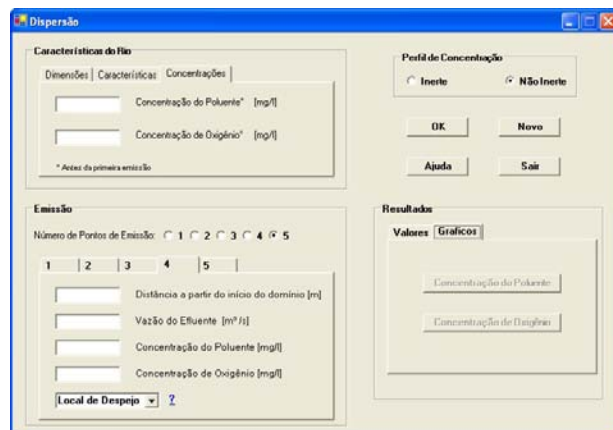


Figura 6.65: Software de dispersão: opção *concentrações*.

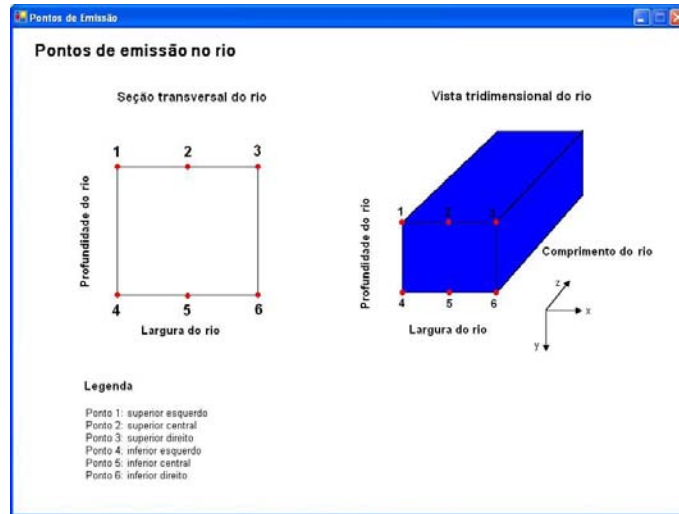


Figura 6.66: Figura ilustrativa para definição do local de despejo do efluente.

efluente, concentração da substância a ser modelada no efluente e concentração de oxigênio no efluente (em caso de modelagem de uma substância inerte, essa opção estará desabilitada).

Deve ser definido também o local de emissão do efluente em relação a seção transversal do rio. Para facilitar esta tarefa para o usuário, existe um botão de ajuda representado por um ponto de interrogação azul ao lado da opção *local de despejo*. Ao clicar no botão de ajuda, uma nova janela contendo uma figura ilustrativa será aberta. A partir desta ilustração, torna-se possível definir os locais de emissão do efluente no rio. Essa figura ilustrativa pode ser visualizada na Figura 6.66.

Após a inserção de todos os dados de entrada do problema, deve-se clicar no botão OK. Desta forma, o programa será executado e fornecerá os resultados. As opções de resultados podem ser visualizadas na parte inferior direita do software. Existem duas opções de resultados: *valores* e *gráficos*.

Na opção *valores* são fornecidas a distância de diluição, ou distância de mistura completa do efluente; e também a concentração do efluente no rio após ter ocorrido a mistura completa. Ambos os resultados serão salvos em arquivos .txt.

Na opção *gráficos* são fornecidos diferentes perfis de concentração do

6.10 Desenvolvimento de uma interface gráfica

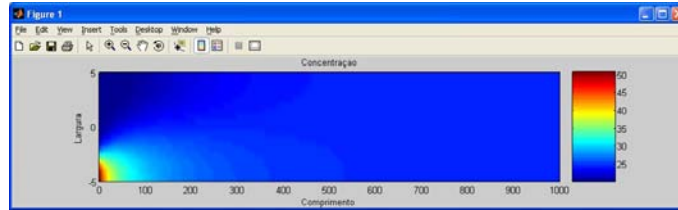


Figura 6.67: Gráfico de perfil de concentração gerado pelo software.

effluente e do oxigênio dissolvido (no caso da modelagem da dispersão de uma substância não inerte). Esses perfis de concentração são fornecidos tanto em relação a superfície do rio, como pode ser observado na Figura 6.67, quanto em relação a diferentes seções transversais do rio ao longo do escoamento. O gráfico mostrado na Figura 6.67 foi originado automaticamente pelo software Matlab 6.5 após a execução do programa. Os arquivos de resultados são salvos no formato .txt e .f90.

Capítulo 7

Conclusões

- O presente trabalho apresenta uma ferramenta computacional inovadora, capaz de simular com eficiência a dispersão de efluentes lançados em rios. É de fundamental importância salientar que não existe no mercado um software como o desenvolvido nesta Tese de Doutorado. Desta forma, este programa computacional vem suprir essa necessidade do mercado.
- O modelo matemático desenvolvido tem totais condições de atender as exigências feitas pela Resolução Nº 357 do Conselho Nacional de Meio Ambiente. Pode-se dizer que esse programa computacional poderá ser utilizado como uma importante ferramenta de suporte para a realização de estudos de impactos ambientais.
- A fluidodinâmica computacional é uma importante ferramenta na simulação da dispersão de efluentes em rios. A solução conjunta das equações de continuidade, movimento e transferência de massa utilizando a metodologia proposta neste trabalho permite a solução rápida do problema, como pode ser observado nos resultados apresentados.
- O software desenvolvido necessita de um tempo inferior a 20 minutos para simular a dispersão de uma substância inerte em todo o domínio, que pode ter quilômetros de extensão, utilizando um PC Pentium IV de 3 GHz e 1 Gb de memória RAM.

-
- O software desenvolvido necessita de um tempo inferior a 16 horas para prever a dispersão de uma substância não inerte e a concentração de oxigênio dissolvido ao longo do domínio, utilizando um PC Pentium IV de 3 GHz e 1 Gb de memória RAM.
 - Os dados experimentais obtidos mostraram boa concordância com os resultados fornecidos pelo modelo.
 - Segundo os resultados numéricos obtidos, o fenômeno de autodepuração ocorre de maneira bastante lenta, sendo necessário que a matéria orgânica percorra vários quilômetros até que os microrganismos consigam degradá-la completamente.
 - Existe a necessidade de obtenção de mais dados experimentais para validação dos resultados numéricos, especialmente para os casos de dispersão de matéria orgânica.
 - Os resultados não foram validados com nenhum software comercial, pois devido a grande extensão do domínio a ser considerado, não se dispunha de recursos computacionais suficientes para realização desta etapa do trabalho.
 - O modelo tem a propriedade de prever a dispersão de efluentes em sistemas com múltiplos pontos de emissão.
 - O desenvolvimento da interface gráfica torna possível a utilização do modelo matemático por qualquer usuário interessado em compreender o fenômeno da dispersão de efluentes em rios.

Capítulo 8

Sugestões para Trabalhos Futuros

Mesmo tendo esse trabalho atingido os seus objetivos, ficou claro que ainda há muito a ser feito na área. Dentre as sugestões para trabalhos futuros, destacam-se:

- A definição de uma metodologia de solução numérica para trechos curvos de rio. Deve-se tomar muito cuidado para a implementação desta melhoria, visto que trechos curvos devem obrigatoriamente ser resolvidos de maneira elíptica, o que provavelmente elevará o esforço computacional para a obtenção do resultado.
- A implementação de uma metodologia de solução numérica para um trecho do rio com variação de largura ou profundidade. Com essa consideração, o software poderia abranger mais realisticamente uma maior quantidade de casos de interesse, tornando o modelo desenvolvido uma ferramenta de previsão de impacto ambiental ainda mais robusta.
- A determinação das constantes do modelo de Streeter-Phelps para as condições climáticas do Brasil. Vale lembrar que essas constantes foram determinadas para rios existentes no hemisfério Norte, onde o clima é mais ameno que no Brasil. Dessa forma, acredita-se que as constantes

do modelo tenham valores mais elevados ao serem determinados em uma região de clima mais quente.

- A validação dos resultados numéricos com novos dados experimentais, principalmente o modelo dispersão de matéria orgânica que não foi validade neste trabalho.
- A implementação de uma metodologia de solução numérica para resolução do problema a partir dos sistemas de coordenadas cilíndricas e cilíndricas elípticas e utilizando o método dos volumes finitos. O desenvolvimento desses modelos aumentariam consideravelmente a abrangência do software.
- A consideração da recepção de carga difusa ao longo do escoamento, uma vez que o modelo atual apenas considera a recepção de poluentes em pontos determinados pelo usuário.
- A possibilidade da presença de pontos de captação de água ao longo do trecho em estudo. Esta consideração levaria a uma diminuição da vazão do rio no local onde ocorre a captação de água.
- A inclusão de novos termos no modelo de dispersão de matéria orgânica que pudessem considerar outros fatores associados ao fenômeno: sedimentação de matéria orgânica, produção de oxigênio pelos organismos fotossintetizantes, e oxidação química, dentre diversos outros.
- A definição de uma metodologia estatística para a definição do coeficiente de dispersão que mais se adequa a cada caso.
- A consideração da força de atrito exercida pelo ar na superfície da água.

Referências Bibliográficas

- [1] Alfonsi, G.; Passoni, G.; Pancaldo, L. and Zampaglione, D.; A spectral-finite different solution of the navier-stokes equations in three dimensions. *Int. J. Numer. Meth. Fluids*, 28:129-142, 1998.
- [2] Babarutsi, S. and Chu., V.H.; Modeling transverse mixing layer in shallow open-channel flows. *Journal of Hydraulic Engineering*, 124(7), Julho, 1998.
- [3] Braga, B.; Hespanhol, I. and Lotufo, J.G.; *Introdução a Engenharia Ambiental*. Editora Pearson, 2002.
- [4] Campolo, A.; Andreussi, P. and Soldati, A.; Water quality control in the river Arno. *Water Research*, 36 (2002) 2673-2680.
- [5] Chapra, S.C. and Runkel, R.L.; Modeling impact of storage zones on stream dissolved oxygen. *Journal of Environmental Engineering*, páginas 415-419, Maio, 1999.
- [6] Chow, V.T.; *Open-channel hydraulics*. Mcgraw-Hill Book Company, 1959.
- [7] Cifroy, P.; Moulin, C. and Gailhard, J.; A model simulating the transport of dissolved and particulate copper in the seine river. *Ecological Modelling*, 127:99-117, 2000.
- [8] Conselho Nacional de Meio Ambiente. Resolução N° 357 de 17 de março de 2005. Disponível em www.mma.gov.br/conama/res/res05/res35705.pdf. Acesso em 15 de janeiro de 2006.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [9] Cox, B.A.; A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in low-land rivers. *The Science of the Total Environment*, 314-316:335-377, 2003.
- [10] Cox, B.A.; A review of dissolved oxygen modeling techniques for low-land rivers. *The Science of the Total Environment*, 314-316:303-334, 2003.
- [11] Ferziger, J.H. and Perić, M.; *Computational Methods for Fluid Dynamics*. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2ª Edição, 1999.
- [12] Fischer, H.B.; The mechanics of dispersion in natural streams. *J. Hydr. Div.*, 93(6):187-216, 1967.
- [13] FLUENT 6.2 User's Guide. Fluent Inc., jan 2005.
- [14] Fortuna, A.O.; *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos: Conceitos Básicos e Aplicações*. Editora da Universidade de São Paulo, São Paulo, 2000.
- [15] French, H.R.; *Open-channel Hydraulics*. McGraw-Hill Book Company, 1986.
- [16] Google Earth. Disponível em <<http://earth.google.com/>>. Acesso em 14 de dezembro de 2005.
- [17] Hardy, R.J.; Bates, P.D. and Anderson, M.G.; The importance of spatial resolution in hydraulic models for floodplain environments. *Journal of Hydrology*, 216:124-136, 1999.
- [18] Jia, Y. and Wang, S.S.Y.; Numerical model for channel flow and morphological change studies. *Journal of Hydraulic Engineering*, 125(9), Setembro, 1999.
- [19] Kamal, M.M.; Malmgren-Hansen, A. and Badruzzaman, A.B.M.; Assessment of pollution of the river Buriganga, Bangladesh, using a water quality model. *Water Science Technology*, 40(2):129-136, 1999.
- [20] Lane, S.N.; Bradbrook, K.F.; Richards, K.S.; Biron, P.A. and Roy, A.G.; The application of computational fluid dynamics to natural river channels: three-dimensional versus two-dimensional approaches. *Geomorphology*, 29:1-20, Agosto, 1999.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [21] Leu, H.G.; Lee, C.D.; Ouyang, C.F. and Pai, T.Y.; A modified water quality model for predicting BOD and DO variations in a shallow polluted channel. *Environmental Technology*, 19:933-940, 1998.
- [22] Lien, H.C.; Hsieh, T.Y.; Yang, J.C. and Yeh, K.C.; Bend-flow simulation using 2D depth-averaged model. *Journal of Hydraulic Engineering*, 125, Outubro 1999.
- [23] Ma, L.; Ashworth, P.J.; Best, J.L.; Elliott, L.; Ingham, D.B. and Whitcombe, L.J., Computational fluid dynamics and the physical modeling of an upland urban river. *Geomorphology*, 44:375-391, 2002.
- [24] Maliska, C.R.; *Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional*. LTC, 2ª Edição, 2004.
- [25] Modenesi, K.; Modelagem Tridimensional de Dispersão de Efluentes em um Trecho de Rio Utilizando a Fluido Dinâmica Computacional. Dissertação de mestrado. Editora Unicamp, 2001.
- [26] Modenesi, K.; Furlan, L.T.; Tomaz, E.; Guirardello, R.; Nunhez, J.R.; A CFD model por pollutant dispersion in rivers. *Brazilian Journal of Chemical Engineering*, 21(4):557-568, outubro-dezembro, 2004.
- [27] Naot, D. and Rodi, W.; Numerical simulation of secondary currents in a channel flow. *J. Hydr. Div.*, 198(8):948-968, 1982.
- [28] Nokes, R.I. and Hughes, G.O.; Turbulent mixing in uniform channels of irregular cross-section. *Journal of Hydraulic Research*, 32(1):948-968, 1994.
- [29] Nordin, C.F. and Sabol, B.V.; Empirical data on longitudinal dispersion in rivers. *Geological Survey Water Res. Invest.*, páginas 20-74, 1974.
- [30] Padgett, W.J. and Rao, A.N.V.; Estimation of bod and do probability distribution. *Journal of the Environmental Engineering Division*, páginas 525-533, Junho, 1979.
- [31] Pimenta, C.F.; *Curso de Hidráulica Geral*. 4ª Edição, Rio de Janeiro, Ed. Guanabara Dois, 1981.
- [32] Rinaldi, S.; Romano, P. and Soncini-Sessa, R.; Parameter estimation of Streeter-Phelps models. *Journal of the Environmental Engineering Division*, páginas 75-88, Fevereiro, 1979.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [33] Rodi, W.; Turbulence Models and their Application in Hydraulics. IAHR Monograph Series, 3^a Edição, 1993.
- [34] Schnoor, J.L.; Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in Water, Air, and Soil. Willey-Interscience Publication, 1996.
- [35] Schreck, E. and Schäfer, M.; Numerical study of bifurcation in three-dimensional sudden channel expansions. *Computers and Fluids*, 29:583-593, 2000.
- [36] Shiklomanov, I.A.; *Comprehensive assessment of fresh resources of world; assessment of water resources and water availability in the world*. WMO/SEI, 1997.
- [37] Shiono, K. and Knight, D.W.; Turbulent open-channel flows with variable depth across the channel. *J. Fluid Mech.*, 222:617-646, 1991.
- [38] Sinha, S.K.; Sotiropoulos, F. and Odgaard, A.J.; Three-dimensional numerical model for flow through natural rivers. *Journal of Hydraulic Engineering*, 124(1), Janeiro, 1998.
- [39] Spalding, D.B.; A single formula for the law of the wall. *Journal of Applied Mechanics*, 28(3), Setembro, 1991.
- [40] Spiegel, M.R.; *Análise vetorial-com introdução à análise tensorial*. Editora McGraw-Hill do Brasil Ltda, 1972.
- [41] Tominaga, A. and Nezu, I.; Turbulent structure in compound open-channel flows. *Journal of Hydraulic Engineering*, 117(1), 1991.
- [42] Vasiliev, V.I.; Volkov, D.V.; Zaitsev, S.A. and Lyubimov, D.A.; Numerical simulation of channel flows by a one-equation turbulence model. *ASME Journal of Fluid Engineering*, 119:885-892, 1997.
- [43] Venutelli, M.; A third-order Taylor-Galerkin model for the simulation of two-dimensional unsteady free surface flows. *Applied Mathematical Modelling*, 22:641-656, 1998.
- [44] Warsi, Z.U.A.; Fluid Dynamics: Theoretical and Computational Approches. CRC Press, 1992.
- [45] White, F.; Viscous Flow. Mc Graw Hill, 2^a Edição, 1992.
- [46] Yakowitz, S. and Szidarovszky, F.; *An Introduction to Numerical Computations*. Macmillan, New York - London, 1989.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [47] Yamamoto, Y.; Kunugi, T. and Serizawa, A.; Turbulence statistics and scalar transport in an open-channel Flow. *Journal of Turbulence*, 2(010), 2001.
- [48] Ye, J. and McCorquodale, J.A.; Simulation of curved open channel flows by 3D hydrodynamic model. *Journal of Hydraulic Engineering*, 124(7), 1998.

Apêndice A



Figura A.1: Imagem fotográfica do local de lançamento dos efluentes da Rhodiaco.



Figura A.2: Imagem fotográfica do local de lançamento da Caixa 007.

Apêndice B



Figura B.1: Imagem aérea georreferenciada da área estudada no rio Atibaia nas imediações da Rhodiaco. Fonte: *Google Earth* (16)