

UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

Modelagem Tridimensional
da Dispersão de Efluentes em um Trecho de Rio
Utilizando a Fluido Dinâmica Computacional

Autor: Kelerson Modenesi

Orientador: José Roberto Nunhez

Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química como parte dos requisitos exigidos para a obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.

Campinas - São Paulo

Novembro, 2001

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL

UNICAMP
BIBLIOTECA CENTRAL
SEÇÃO CIRCULANTE

NIDADE	BC
CHAMADA	T/UNICAMP
	M72m
COMBO BC	48848
PROC	16.837/02
PREÇO	R\$ 11,00
DATA	08/05/02
Nº CPD	

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

CM00167192-6

BIB ID 239679

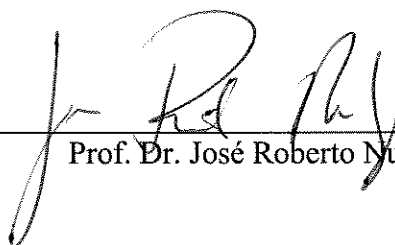
M72m Modenesi, Kelerson
Modelagem tridimensional da dispersão de efluentes em um trecho do rio utilizando a fluido dinâmica computacional / Kelerson Modenesi.--Campinas, SP: [s.n.], 2001.

Orientador: José Roberto Nunhez.

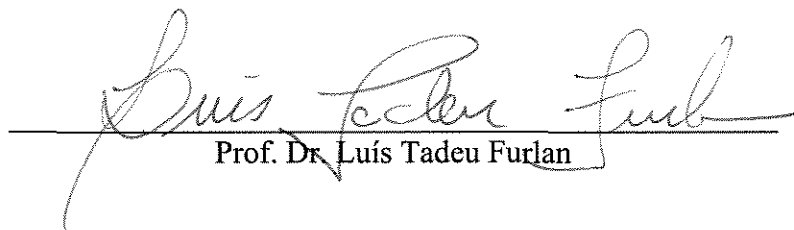
Dissertação (mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Engenharia ambiental. 2. Resíduos industriais -- Aspectos ambientais. 3. Água - poluição. 4. Dispersão. 5. Modelos matemáticos. 6. Transformação de coordenadas. I. Nunhez, José Roberto. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química.. III. Título.

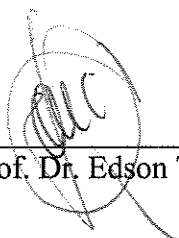
Dissertação de Mestrado defendida por Kelerson Modenesi e aprovada em 29 de Novembro de 2001 pela banca examinadora constituída pelos doutores:



Prof. Dr. José Roberto Nunhez



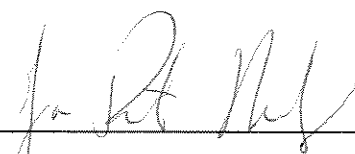
Prof. Dr. Luís Tadeu Furlan



Prof. Dr. Edson Tomaz

6746-202

Esta versão corresponde à redação final da Tese de Mestrado em Engenharia Química defendida pelo Eng. Kelerson Modenesi e aprovada pela Comissão Julgadora em 30 de Novembro de 2001.



Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Orientador

Dedico este trabalho:

à Patricia, por todo o seu apoio, carinho, amor e alegria, que me motivam todos os dias;

aos meus pais, Américo e Arlete, por toda a confiança que, em mim, depositam;

aos meus irmãos Kerliton e Keydmam, pela amizade que sempre cultivamos;

às minhas grandes amigas Dani e Dani, que mesmo hoje distantes, sempre estiveram ao meu lado.

AGRADECIMENTOS

À minha esposa Patrícia, por tudo que representa na minha vida e por tudo aquilo que dividiremos para o resto de nossas vidas.

Aos meus familiares, pelos valores de dignidade e humildade que com eles aprendi.

Ao meu orientador, Prof. Dr. José Roberto Nunhez, um grande amigo, pela oportunidade de trabalharmos juntos, pela ajuda e por toda a confiança.

À UNICAMP e à Faculdade de Engenharia Química pela estrutura que possibilitou a realização deste trabalho.

Ao CNPq e à PETROBRAS, pelo suporte financeiro ao projeto.

Aos professores e amigos Reginaldo Guirardello, Edson Tomaz e Antônio Carlos Luz Lisboa pelas discussões e pelos ensinamentos que, com estes grandes mestres, dividi.

Ao colega e pesquisador da PETROBRAS, Dr. Luís Tadeu Furlan, pela confiança e pelo empenho pessoal em divulgar e viabilizar este trabalho.

Aos amigos que comigo dividem o Laboratório de Fluido Dinâmica Computacional, Nicolas, Lucas, Simone, Pastor, Toninho, Iraí, Emerson, Antônio e Jefferson pelo ambiente descontraído e amigável que construímos.

Aos amigos, Rubão, Urso, Favinha, Cristiano, Caliane, Edwin, Richard, Celeste, Elvis, Magno, Jeferson, Édler, Luciano e Marinela, Layse, Isabele, Max, Lisanne, Nagel pelos papos e besteiras que falamos.

Ao amigo Milton, pelas alegrias que sempre me deu nas mesas de sinuca.

À dupla Dani e Dani, pelas festas e pelas saídas onde tanto nos divertimos.

Aos amigos de república, Marcelo, Joel, Eric, Sandro, Arthur e “Renatos”, pelas conversas e pelos devaneios compartilhados.

A Deus, enfim, por nada mais que tudo.

“Após ter feito a mesma coisa por dois anos, examine cuidadosamente. Depois de cinco anos, olhe com desconfiança. E depois de dez anos, jogue fora e comece tudo de novo”.

Alfred Edward Perlman

RESUMO

O rápido crescimento dos centros urbanos e da atividade industrial tem indicado uma necessidade crescente de estudar os efeitos da ação do homem nas águas, no ar e no solo. Estudos têm mostrado que a humanidade experimentará severa falta de água nas próximas décadas. Torna-se portanto primordial o desenvolvimento de novas técnicas e modelos com o objetivo de minimizar a emissão de poluentes. Também é importante avaliar, de uma maneira eficiente, qual seria o impacto ambiental causado por novas emissões de poluentes em rios. Isto é importante especialmente para o Brasil, uma vez que não há até o momento ferramentas desenvolvidas que atendam a estas necessidades. Neste contexto, este trabalho apresenta um modelo Fluidodinâmico Computacional (CFD – do inglês Computational Fluid Dynamics) tridimensional para simular a dispersão de uma substância ao longo de um rio. As equações de conservação de massa e movimento foram resolvidas pelos métodos numéricos utilizados no modelo. O leito do rio é representado por uma calha cilíndrica de seção transversal semi-elíptica, de forma que é possível representar rios de largura e profundidade quaisquer. O modelo também assume que o rio não possui curvas. Embora simples esta geometria é capaz de representar bem o comportamento real da maioria dos rios. No modelo, o perfil de velocidades axiais é calculado usando o Método das Diferenças Finitas de 4ª Ordem, e os perfis de concentração são integrados ao longo da direção axial usando o Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem. Os principais resultados obtidos revelam que a metodologia proposta, baseada em técnicas de CFD, mostra-se como uma boa ferramenta para a avaliação do impacto ambiental causado pela emissão de poluentes em rios receptores. A principal característica do programa computacional desenvolvido na Dissertação é a sua rapidez de solução, especialmente quando comparado com outros pacotes de CFD do mercado.

ABSTRACT

The fast growth of urban centers and industrial activities has shown a growing need to study the effects of the human action in water, air and soil. Studies have shown humankind will experience a severe lack of water in the next decades. It is therefore paramount to develop new techniques and models with a view to minimize pollution emission. It is also important to evaluate, in an efficient manner what will be the environmental impact of new emissions in rivers. This is especially important for Brazil because there are no tools developed at the moment addressing to these needs. In this context, this work presents a three-dimensional Computational Fluid Dynamics (CFD) model to simulate the dispersion of a substance along a river. The numerical method solves the conservation of momentum and mass equations. A half cylinder with an elliptical transversal section represents the river, so it is possible to set both the height and the width of the river. The model also assumes the river has no curves. Although simple, this geometry is able to represent the real behavior of most rivers. The CFD model calculate the axial velocities using a Fourth Order Finite Difference Scheme and the concentration profiles are integrated along the axial direction using a Fourth Order Runge-Kutta Method. The main results show that the methodology proposed, based on CFD techniques, is a good tool for the evaluation of the environmental impact caused for pollutant emissions in rivers. The main feature of the software developed from the dissertation is that it is very fast, especially when compared to other CFD packages.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Motivação pelo tema	1
1.2	Objetivos	3
1.3	Descrição deste trabalho	3
1.4	Organização desta dissertação	6
2	TRANSPORTE E DISPERSÃO DE SUBSTÂNCIAS EM RIOS E CANAIS	9
2.1	Fluxo em rios e canais	9
2.2	Dispersão de efluentes	14
3	MODELAGEM MATEMÁTICA DO PROBLEMA	19
3.1	Coordenadas curvilíneas	19
3.2	Equações do modelo num sistema generalizado de coordenadas	22
3.2.1	Equação da continuidade	22
3.2.2	Equação de movimento	23
3.2.3	Equação de transferência de massa de uma substância A	28
3.3	Aplicação do modelo ao problema da Geometria Cilíndrica	29
3.3.1	Modelo final aplicado	35
3.4	Aplicação do modelo ao problema da Geometria Elíptica	36
3.4.1	Modelo final aplicado	41
3.5	Condições de contorno	42
3.5.1	Equação de movimento	42
3.5.2	Equação de transferência de massa de uma substância A	44

4	METODOLOGIA DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DO MODELO	47
4.1	Metodologia de Solução	47
4.2	Caso A: Geometria Cilíndrica	50
4.2.1	Perfil de velocidade axial	50
4.2.2	Perfil de concentração da substância de interesse	51
4.3	Caso B: Geometria Elíptica	56
4.3.1	Perfil de velocidade axial	56
4.3.2	Perfil de concentração da substância de interesse	62
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	65
5.1	Estudo de independência da malha	65
5.2	Comparação dos modelos elíptico e cilíndrico	72
5.3	Variação de parâmetros	74
5.4	Estudo da influência do ponto de descarga na dispersão do efluente.	89
6	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	97
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	101

LISTA DE FIGURAS

Figura 1.1 – Esquema da dispersão de efluente no leito de um rio	4
Figura 2-1 – Tipos de fluxo em canais abertos.	11
Figura 3-1 – Esquema representativo da calha de seção transversal semicircular.	32
Figura 3-2 – Decomposição vetorial do vetor gravidade.	33
Figura 3-3 – Avaliação dos componentes do vetor gravidade nas direções r e θ .	33
Figura 3-4 – Coordenadas cilíndricas elípticas num plano cartesiano xy (Caso elíptico 1).	37
Figura 3-5 – Coordenadas cilíndricas elípticas num plano cartesiano xy (Caso elíptico 2).	39
Figura 4-1 Esquema explicativo da metodologia de cálculo utilizada na determinação dos perfis de velocidade e concentração.	49
Figura 4-2 – Malha tridimensional de discretização do caso cilíndrico.	52
Figura 4-3 – Malha utilizada para a discretização.	56
Figura 5-1 – Perfis de velocidade para diferentes malhas: (a) 11×31 ; (b) 15×41 ; (c) 21×51 .	67
Figura 5-2 – Perfis de veloc. na superfície (a), onde $y = 0$; e na linha de centro do rio (b), onde $x = 0$.	68
Figura 5-3 – Figura representativa de uma seção transversal do trecho de rio em estudo, onde os pontos A – F representam pontos de interesse.	69
Figura 5-4 – Perfis de concentração ao longo do rio para os pontos A – F representados na Figura 5-3.	70
Figura 5-5 - Perfis de velocidade para os três casos: (a) $W > 2h$; (b) $W = 2h$; (c) $W < 2h$.	73
Figura 5-6 - Perfis de velocidade na superfície (a), onde $y = 0$; e na linha de centro do rio (b), onde $x = 0$, para modelos próximos.	74
Figura 5-7 - Perfis de concentração [mg/l] de uma substância de interesse ao longo do trecho de rio do caso em estudo.	77
Figura 5-8 - Perfis de concentração [mg/l] na superfície do trecho de rio do caso em estudo.	78
Figura 5-9 – Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores de C_{Ae} , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.	79
Figura 5-10 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores de C_{A0} , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.	81
Figura 5-11 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores da vazão do efluente, Q_e , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.	82
Figura 5-12 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores da vazão do rio, Q_r , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.	84
Figura 5-13 – Perfis de concentração [mg/l] na seção transversal de 50 metros para diferentes valores do coeficiente global de dispersão, K_G : 0,01 (a); 0,02(b) e 0,03(c).	86

- Figura 5-14 - Perfis de concentração [mg/l] na superfície do trecho de rio para diferentes valores do coeficiente global de dispersão, K_G : 0,01 (a); 0,02(b) e 0,03(c). 88**
- Figura 5-15 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores do coeficiente global de dispersão, K_G , nos pontos A – F representados na Figura 5-3. 89**
- Figura 5-16 – Perfis de concentração [mg/l] do efluente sendo disperso ao longo do rio quando lançado no fundo do leito. 91**
- Figura 5-17 - Perfis de concentração [mg/l] do efluente sendo disperso ao longo do rio quando lançado no centro da superfície do leito. 93**
- Figura 5-18 – Comparação dos perfis de concentração na superfície do leito quando o efluente é lançado na lateral (a), no fundo (b) e na superfície do rio (c). 94**

LISTA DE TABELAS

Tabela 5-1 – Dados de entrada utilizados no caso em estudo.	66
Tabela 5-2 – Distância de diluição para cada concentração inicial no efluente em estudo.	80
Tabela 5-3 - Distância de diluição para cada concentração de poluente no rio em estudo.	81
Tabela 5-4 - Distância de diluição para cada vazão do efluente em estudo.	83
Tabela 5-5 - Distância de diluição para cada vazão do rio em estudo.	84
Tabela 5-6 – Velocidade média de escoamento e tempo de dispersão para cada vazão do rio em estudo.	85
Tabela 5-7 - Distância de diluição para cada coeficiente global de dispersão em estudo.	89

NOMENCLATURA

LETRAS LATINAS

a	foco da elipse
A_T	área da seção transversal
C_A	concentração de uma dada substância A
C_{A0}	concentração de uma dada substância no efluente
C_{Ae}	concentração de uma dada substância no rio
C_{Ai}	concentração de uma dada substância no rio em $z = 0$
$\bar{\mathbf{D}}$	tensor taxa de deformação
\mathbf{e}_i	vetor unitário numa dada direção i
$\bar{\mathbf{e}}_1$	vetor unitário na direção u_1
$\bar{\mathbf{e}}_2$	vetor unitário na direção u_2
$\bar{\mathbf{e}}_3$	vetor unitário na direção u_3
g	constante gravitacional
$\bar{\mathbf{g}}$	vetor gravidade
g_i	componente da gravidade numa dada direção i
h	altura do trecho de rio
H	cota de inclinação do leito do rio
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
h_i	fator de proporcionalidade tangencial à linha de uma dada coordenada i
$\bar{\mathbf{I}}$	matriz identidade
$\bar{\mathbf{i}}$	vetor unitário na direção x
$\bar{\mathbf{j}}$	vetor unitário na direção y
$\bar{\mathbf{k}}$	vetor unitário na direção z
K	constante de proporcionalidade

K_1	constante de proporcionalidade
K_G	coeficiente global de dispersão
L	comprimento do trecho de rio
L_C	comprimento característico
L_D	distância de diluição
\dot{m}	fluxo mássico
M	número de intervalos da malha na direção θ ou v
\bar{n}	vetor normal
N	número de intervalos da malha na direção r ou u
p	pressão
P	número de intervalos da malha na direção z
p_0	pressão inicial
p_{atm}	pressão atmosférica
P_m	perímetro molhado
Q	vazão do sistema (rio + efluente)
Q_{calc}	vazão calculada
Q_e	vazão do efluente
Q_r	vazão do rio
r	coordenada radial
\bar{r}	vetor posição
R	raio da seção transversal semicilíndrica
R_A	termo de reação do sistema
Re	número de Reynolds
t	tempo
T_r	tempo de residência
U	velocidade característica do escoamento (velocidade média)
u	coordenada cilíndrica elíptica
u_1	coordenada 1 de um sistema generalizado
u_2	coordenada 2 de um sistema generalizado
u_3	coordenada 3 de um sistema generalizado
u_p	valor máximo assumido pela variável u
v	coordenada cilíndrica elíptica

\vec{v}	vetor velocidade
v_i	componente de velocidade
v_{med}	velocidade média calculada
W	largura do trecho de rio
x	coordenada cartesiana relativa à largura do leito
y	coordenada cartesiana relativa à altura do leito
z	coordenada cartesiana axial

LETRAS GREGAS

ν	viscosidade cinemática
$\bar{\tau}$	tensor tensão
π	número pi
τ_{ij}	componente do tensor tensão
Φ	função escalar
μ	viscosidade aparente
θ	coordenada angular
ρ	massa específica
ω	ângulo de inclinação

SÍMBOLOS MATEMÁTICOS

$\frac{D}{Dt}$	derivada substantiva
----------------	----------------------

∂	derivada parcial
∇^2	operador Laplaciano
div	operador divergente
grad	operador gradiente

ABREVIACÕES

EIA	Estudo de Impacto Ambiental
RIMA	Relatório de Impacto ao Meio Ambiente
RAP	Relatório Ambiental Preliminar

CAPÍTULO 1

1 Introdução

1.1 Motivação pelo tema

Os recursos naturais são a base para o desenvolvimento da humanidade. Durante muito tempo, essa máxima não era vista com a importância que ela representa. A crença de que esses recursos seriam inesgotáveis, custou-nos 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 foi realizado de forma desordenada e sem um correto planejamento, mostra hoje suas consequências. Os efeitos da atividade humana na poluição de águas, solo e ar são, nos dias atuais, temas de discussão e estudo em diversos centros de pesquisa. Todo esse conhecimento adquirido na área gerou uma maior conscientização, por parte das pessoas, sobre os riscos que a civilização humana corre caso os recursos naturais existentes nos dias atuais não sejam adequadamente preservados.

Mais especificamente em relação aos recursos hídricos, a possibilidade de escassez de água tem se mostrado ainda mais crítica e com consequências já percebidas por parte da população do planeta. Algumas regiões convivem diariamente com a suspensão parcial do abastecimento de água potável.

O Estado de São Paulo, por exemplo, pode ter seus recursos hídricos esgotados nos próximos anos em algumas regiões específicas, especialmente quando se trata da qualidade dessas águas, embora o estado reúna bacias hidrográficas de grande extensão

territorial e elevada produção de águas. A razão disso é a distribuição desproporcional das águas entre as bacias de regiões mais e menos populosas.

A bacia do Alto do Tietê, por exemplo, que abrange a região metropolitana de São Paulo, necessitaria de quatro vezes mais água do que dispõe para atender a sua população com índices satisfatórios (URL, 2001). Essa escassez é resolvida através da transferência de água entre as bacias através do sistema Cantareira, com reversão de águas da Represa de Atibaia para o Alto Tietê.

Este problema de qualidade das águas superficiais, antes exclusivo da Grande São Paulo, está se disseminando pelo interior, dado o crescimento industrial e econômico que algumas regiões vêm apresentando. Crescimento este que é, em parte, consequência do deslocamento de uma porção da atividade econômica do estado para o interior, em busca, dentre outras coisas, de mais recursos naturais.

Um exemplo do exposto acima é a região de Campinas, que vem apresentando um desenvolvimento crescente nas últimas décadas com a implantação de indústrias de vários setores da economia. Este desenvolvimento, embora essencial, causou um crescimento desordenado da região, que já apresenta sinais claros de debilidade do sistema de abastecimento público, principalmente em épocas de estiagem.

Esta situação crítica faz com que cuidados adicionais sejam tomados na implantação de novas indústrias, especialmente para aquelas que necessitem despejar resíduos de seus processos em corpos d'água.

Na implantação de novos empreendimentos, para obter-se a licença de instalação, embora em muitos casos sejam elaborados o RAP ou o Estudo de Impacto Ambiental e seu respectivo Relatório de Impacto ao Meio Ambiente (EIA/RIMA), a abordagem a respeito da previsão de impacto ambiental de efluentes sobre os corpos d'água tem sido pouco substanciada em metodologias científicas reconhecidamente aplicáveis para cada caso. Nota-se, claramente, que faltam modelos robustos capazes de prever o impacto causado ao meio ambiente, no que diz respeito à qualidade das águas, com o novo lançamento de efluentes industriais, além da necessidade de formação de competências (incluindo profissionais especializados) no assunto.

O atual consenso sobre a preservação da qualidade da água de rios, lagos, estuários, bacias hidrográficas e demais corpos d'água, evidenciado pelas considerações acima, foi o fator motivante para a realização deste trabalho. Compreender o fluxo, a dispersão e a depuração de compostos presentes nos efluentes em canais naturais (rios, lagos, lagoas ou estuários) é de crucial importância para a solução de vários problemas presentes no despejo de efluentes industriais em corpos d'água. Entre estes problemas destacam-se a escolha do melhor ponto de emissão de um efluente industrial num rio, a determinação do tempo de dispersão e o de posterior degradação das substâncias presentes neste efluente. Entretanto, o mais importante é desenvolver ferramentas numéricas preditivas do impacto causado por novas emissões de poluentes num corpo d'água, bem como outras situações que põem em risco o equilíbrio ambiental.

1.2 Objetivos

A partir do que foi exposto e do contexto no qual o problema está inserido, este trabalho tem como principais objetivos:

1. Desenvolver um modelo fluido dinâmico tridimensional para um trecho de rio capaz de prever a dispersão de um composto inerte presente num efluente sendo lançado neste corpo d'água. As análises são feitas através de perfis tridimensionais de velocidade e concentração ao longo de todo um trecho de rio em estudo.
2. Definir uma metodologia de solução do problema que permita a obtenção dos resultados de forma rápida e precisa.
3. Desenvolver um software capaz de resolver o modelo matemático proposto.

1.3 Descrição deste trabalho

O fenômeno da dispersão de efluentes industriais em corpos d'água é mostrado esquematicamente na Figura 1.1:

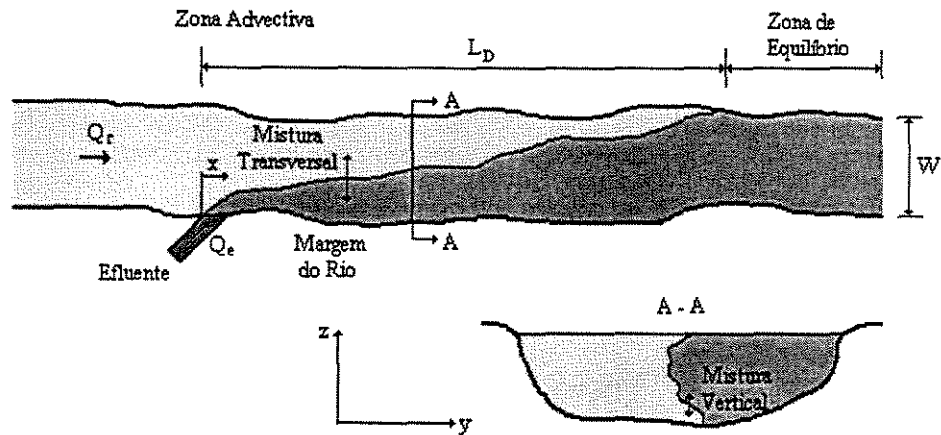


Figura 1.1 – Esquema da dispersão de efluente no leito de um rio

Neste trabalho, o problema foi modelado através da resolução das equações de Continuidade, de Conservação de Movimento e de Conservação de Massa de um dado Componente Presente no Efluente. Para a formulação deste modelo, foram assumidas as seguintes hipóteses:

- Regime laminar;
- Regime permanente;
- Superfície plana;
- Altura do leito, h , constante;
- Fluxo unidirecional e plenamente desenvolvido, muito embora tridimensional;
- Propriedades físicas constantes;
- Fluido Newtoniano.

Como forma representativa do leito de um rio foram escolhidas duas geometrias distintas. Como primeira geometria, optou-se por uma calha reta de seção transversal semicircular, que será identificada a partir de agora como Geometria Cilíndrica. Esta escolha proporcionou uma solução simples, entretanto de aplicação limitada, dada a

necessária constância da razão entre a largura e a profundidade do rio. Sendo a seção transversal do leito um semicírculo, o modelo só seria aplicado num rio de largura duas vezes superior a sua profundidade. Neste primeiro caso, o sistema de coordenadas cilíndricas foi utilizado.

Visando possibilitar a aplicação do modelo para um número maior de rios, optou-se posteriormente por uma geometria dada por uma calha reta de seção transversal semi-elíptica, que será identificada a partir de agora como Geometria Elíptica. Além da possibilidade de utilização do modelo para rios que apresentem razão largura/profundidade diferente de dois, esta geometria não tem desvantagens de apresentar cantos, que estaria presente em geometrias de base retangular ou trapezoidal, conforme encontrado na literatura.

A escolha desta geometria implica, porém, o uso de um sistema de coordenadas diferente do cilíndrico, usado no caso da Geometria Cilíndrica. O sistema de coordenadas que melhor representa a Geometria Elíptica é o cilíndrico elíptico.

Com o uso das duas geometrias e seus respectivos sistemas de coordenadas, é possível modelar rios com as mais variadas dimensões. A escolha da geometria a ser utilizada em cada caso depende da razão entre a largura, W , e a profundidade, h , do rio. Desta forma,

quando $\frac{W}{h} < 2 \rightarrow$ Geometria Elíptica.

quando $\frac{W}{h} = 2 \rightarrow$ Geometria Cilíndrica.

quando $\frac{W}{h} > 2 \rightarrow$ Geometria Elíptica.

Dadas, em geral, as baixas concentrações das substâncias presentes no efluente, os perfis de velocidade, em ambos os casos, serão obtidos desacoplados dos perfis de concentração, que são então obtidos da equação de transferência de massa. Isso é perfeitamente razoável para sistemas diluídos.

Optou-se pelo desenvolvimento de um “software” próprio, ao invés do uso dos pacotes de fluido dinâmica computacional (CFD) presentes no mercado. Esta escolha está baseada na maior flexibilidade, nos menores custos e tempo de resolução que um programa desenvolvido especialmente para o problema em estudo teria frente a um “software” comercial.

1.4 Organização desta dissertação

No Capítulo 2 – Transporte e dispersão de substâncias em rios e canais, são apresentados os conceitos relativos ao estudo do transporte e da dispersão de substâncias em rios e canais, além de uma revisão da literatura acadêmica disponível relevante para a realização deste trabalho.

No Capítulo 3 – Modelagem matemática do problema, são apresentadas as equações que compõem o modelo matemático utilizado neste trabalho. Nesta etapa, é mostrado como as equações de continuidade, momento e transferência de massa podem ser obtidas para um sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas. Este ponto foi importante para a obtenção destas equações no sistema de coordenadas cilíndricas elípticas utilizado no trabalho. Ao final do capítulo são apresentadas as condições de contorno do problema em estudo.

No Capítulo 4 – Metodologia de solução das equações, são apresentados todos os passos utilizados na solução das equações do modelo. Neste capítulo, procurou-se apresentar de uma forma bem clara qual a metodologia utilizada na solução do problema, incluindo nisto os métodos numéricos, as grades de discretização e as equações discretizadas utilizadas.

No Capítulo 5 – Resultados e discussão, são apresentados os resultados obtidos com a solução de um caso de estudo. A independência da malha de discretização utilizada e a influência de algumas variáveis do modelo são avaliadas. No final do capítulo, são comparados perfis de concentração de uma dada substância inerte presente no efluente quando este é lançado na margem, no fundo e na superfície do rio.

Finalmente, no Capítulo 6 – Conclusões e sugestões, são apresentadas as principais conclusões que puderam ser obtidas com os resultados deste trabalho. Além disso, são apresentadas sugestões para trabalhos futuros.

CAPÍTULO 2

2 Transporte e dispersão de substâncias em rios e canais

Os rios sempre representaram um ponto importante no desenvolvimento das atividades humanas. A maioria das civilizações antigas desenvolveu-se próxima a rios ou vales de rios. Bons exemplos do surgimento de grandes civilizações da Antigüidade estão ao longo do Rio Nilo do Egito, do Rio Amarelo na China e do Rio Hindu no oeste da Ásia. Nestas regiões, foram obtidos os primeiros avanços na construção de pontes e sistema de irrigação e no controle de enchentes (Simons e Sentürk, 1992).

Hoje, após 2000 anos de desenvolvimento, os rios ainda constituem uma enorme fonte de estudo para engenheiros e pesquisadores fascinados em entender como estes corpos d'água respondem a mudanças da natureza e a interferências humanas.

Neste capítulo são apresentados alguns conceitos relativos ao estudo do transporte e da dispersão de substâncias em rios e canais. Na literatura acadêmica, são inúmeros os trabalhos relativos a este tema. Ao longo deste capítulo, são referenciados aqueles considerados mais importantes para a realização desta pesquisa.

2.1 *Fluxo em rios e canais*

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, deve haver uma superfície livre, enquanto no fluxo em tubos não, uma vez que a água deve preencher o tubo 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, e também, pelo fato de que a profundidade do fluxo, a descarga e as inclinações da base do canal e da superfície livre são interdependentes.

Com relação às condições de fluxo em canais abertos a seguinte classificação pode ser feita (Chow, 1959):

Fluxo Permanente e fluxo não-permanente: O fluxo em um canal é dito *permanente* se a profundidade do fluxo não varia ou é considerado constante ao longo do tempo. O fluxo é *não-permanente* se a profundidade varia com o tempo. Na maioria dos problemas envolvendo o fluxo em canais, é necessário estudar o comportamento do fluxo sob condições permanentes.

Fluxo Uniforme e fluxo variado: O fluxo em canais abertos é dito *uniforme* se a profundidade do fluxo é a mesma em cada seção do canal. O fluxo é classificado *variado* se a profundidade do mesmo muda ao longo do comprimento do canal. O fluxo variado pode ainda ser dividido em *rapidamente* ou *gradualmente variado*.

No trabalho aqui exposto, o escoamento é considerado uniforme e permanente. A Figura 2-1 ilustra exemplos de vários tipos de fluxo possíveis a partir da classificação anterior:

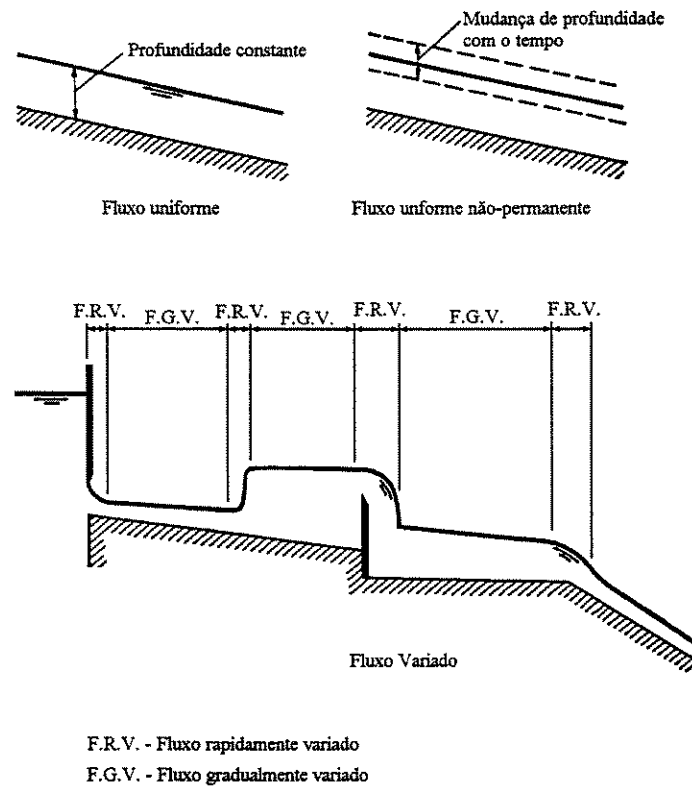


Figura 2-1 – Tipos de fluxo em canais abertos.

Assim como o escoamento em tubos, dependendo da magnitude da razão entre forças inerciais e 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), ou:

Eq 2-1
$$Re = \frac{UL_c}{\nu}$$

onde U = velocidade característica do escoamento (velocidade média).

L_c = Comprimento característico (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 .

O fluxo laminar é aquele em que as forças viscosas são predominantes sobre as forças inerciais. No fluxo turbulento, as forças inerciais predominam. A faixa de transição, por fim, é aquela onde o escoamento não pode ser classificado nem como laminar nem como turbulento. Os valores de Reynolds para os quais cada tipo de fluxo é observado são apresentados a seguir (French, 1986):

$Re \leq 500$	Laminar
$500 \leq Re \leq 12.500$	Transição
$Re \geq 12.500$	Turbulento

Apesar da existência na literatura destas faixas de números de Reynolds que definiriam se um escoamento é laminar ou turbulento, este trabalho prefere não considerar estes valores como definitivos. Acredita-se que os escoamentos em rios são de variedade e complexidade tais, que seria difícil classificá-los a partir de definições generalizadas.

Segundo Chow (1959), a maioria dos escoamentos em canais abertos se dá de forma turbulenta. O fato de a superfície de um rio parecer plana e suave para um observador não significa que o escoamento em questão seja laminar. Mais provavelmente, isso indica que a velocidade na superfície é menor que a requerida para a formação de ondas.

Entretanto neste trabalho, uma das hipóteses assumidas é a de fluxo laminar. Essa hipótese agrega ao modelo um caráter conservativo que, para estudos de previsão de impacto, não acarreta erros desfavoráveis ao meio ambiente. Os resultados obtidos com a ferramenta desenvolvida neste trabalho mostram uma dispersão mais lenta que a real, uma vez que não considera a mistura turbulenta. Desta forma, o impacto realmente causado pela descarga da substância será menor ou igual ao mostrado pelo modelo.

Mesmo simplificado e conservativo, este trabalho possibilita a obtenção de uma ferramenta de controle e previsão de impactos ambientais baseado em uma modelagem

tridimensional, com abordagens inéditas no Estado de São Paulo. Este fato assegura a importância deste estudo. O modelo, entretanto, é flexível o suficiente para que a turbulência seja considerada futuramente.

Na literatura científica, vários são os estudos focados na modelagem do escoamento em canais e rios sem a presença de substâncias que sofrem dispersão. Estes modelos são, na sua maioria, bi ou tridimensionais e em geral consideram fluxo turbulento. Num destes trabalhos, Babarutsi e Chu (1998) estudaram o fluxo através da camada de mistura turbulenta de um canal de pouca profundidade. Para isso utilizaram três variações do modelo $k-\epsilon$ padrão. O desempenho destes modelos foi avaliado através de comparação com dados experimentais obtidos em um estudo anterior dos autores.

Nadoaka e Yagi (1998) estudaram a turbulência em águas superficiais. O modelo foi aplicado para simular o desenvolvimento de vórtices horizontais de grande escala num rio contendo uma camada de vegetação em sua base e, com isso, investigar o papel destes vórtices no processo de mistura horizontal no fluxo do rio com cisalhamento transversal.

Lien et al. (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. O sistema de coordenadas utilizado foi o ortogonal curvilíneo. Para demonstrar a capacidade do modelo, os resultados obtidos foram comparados com dados experimentais.

Em outro trabalho bidimensional, Vasiliev et al. (1997) estudaram o fluxo assimétrico em um canal plano que apresentava uma depressão em sua base. Para isso, um modelo de turbulência de uma única equação foi utilizado. O sistema de coordenadas utilizado foi ortogonal curvilíneo.

Sofialidis e Prinos (1998) utilizaram modelos de turbulência $k-\epsilon$ não-lineares para baixos números de Reynolds para estudar o fluxo através de um canal composto por regiões planas alagáveis. O fluxo turbulento em canais compostos é caracterizado pela transferência de momento entre o canal principal, mais rápido, e as regiões de alagamento, de menores profundidades e menores velocidades. Essa transferência de momento gera o aparecimento de correntes secundárias e turbulência na base do canal, além de efeitos de superfície.

Visando comparar abordagens bi e tridimensionais, Lane et al. (1999) aplicaram a fluido dinâmica computacional para modelar o fluxo em rios e canais. Os resultados obtidos para ambos os modelos foram comparados com dados experimentais. As equações utilizadas são a de conservação de massa e as de momento (Navier-Stokes) para fluido incompressível. Termos de gradiente de pressão horizontal, influência do vento sobre a superfície e o termo associado ao efeito Coriolis não foram considerados. O modelo considerou superfície de água plana e livre, e foi utilizada uma lei de parede como condições de contorno.

Conforme apresentado nas referências acima, várias hipóteses simplificadoras são necessárias para a solução de problemas envolvendo o escoamento em canais. Além do que já foi mencionado, outro ponto que dificulta a solução de problemas envolvendo fluxo em canais é a variedade de formas e propriedades geométricas dos mesmos. Enquanto em tubos a seção transversal é geralmente redonda, em canais ela pode assumir as mais variadas formas – de circular e retangular até formas irregulares de rios.

Com relação ao formato longitudinal, os rios e canais variam entre os que possuem poucas curvas ao longo do leito e aqueles extremamente curvos e sinuosos. Para rios que possuem grandes raios de curvatura é comum modelá-los com o uso de canais retilíneos e com seção transversal regular como aproximação para a geometria.

Neste trabalho, a geometria utilizada para representar o leito do rio foi o de uma calha reta inclinada de seção transversal semi-elíptica. Esta escolha mostra-se interessante frente ao uso de canais de seção transversal semicircular, retangular ou trapezoidal, como foi observado no item 1.3 desta dissertação.

2.2 Dispersão de efluentes

O foco deste trabalho é o estudo da dispersão de efluentes em rios. Compreender como e quão rápido um efluente inerte se dispersa ao longo do trecho de um rio é o principal objetivo deste trabalho.

A base da compreensão destes fenômenos é o estudo dos efeitos da dispersão longitudinal. Este problema, citado por Roberts (1990) foi originalmente analisado por

Taylor (1953-54), em dois estudos clássicos de fluxo laminar e turbulento em tubos. Neles, Taylor mostra que o transporte de massa é proporcional ao gradiente de concentração na direção da velocidade de movimento do fluxo. A constante de proporcionalidade neste caso é o coeficiente de dispersão.

Fischer(1967), utilizando alguns dos resultados obtidos por Taylor, apresenta uma metodologia para predição da taxa de dispersão longitudinal em correntes naturais. No seu trabalho, o autor apresenta inúmeros valores de coeficiente de dispersão determinados em laboratório para diferentes condições de fluxo. Nordin e Sabol (1974) verificaram que para correntes naturais, o coeficiente de dispersão não se mostra constante, e que tal consideração pode afetar a confiabilidade de dados obtidos em estudos de campo.

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. Na região metropolitana de Campinas, o rio Atibaia tem sido o foco de atenção de órgãos ambientais, dada a sua alta carga de poluentes. Num projeto em parceria com a PETROBRAS/REPLAN, dados de concentração de algumas substâncias serão medidos no rio. Estes dados determinarão o valor do coeficiente de dispersão que adequa o modelo àquele trecho de rio.

A modelagem da dispersão de efluentes em rios e canais é tema de estudo de vários pesquisadores interessados em compreender melhor as características presentes neste fenômeno.

Nokes e Hughes (1994) propuseram um novo método para modelar problemas tridimensionais turbulentos de dispersão em canais abertos de seção transversal arbitrária, mas regular. Uma técnica semi-analítica foi aplicada para investigar a descarga permanente de um efluente não degenerativo num canal com distribuição de velocidade e difusividade conhecidas. O modelo assumiu a não existência de fluxo secundário, representando uma limitação do modelo matemático. Shiono e Knight (1991) e Tominaga e Nenzu (1991) mostraram que mesmo canais de geometria simples apresentam fluxos secundários. Naot e Rodi (1982), usando um modelo $k-\epsilon$, mostraram que fluxos secundários também aparecem nas proximidades das paredes de canais de seção transversal retangular.

Ye e McCorquodale (1998) utilizaram um modelo matemático tridimensional para simular os fenômenos de transferência de momento e massa num 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. Todos os resultados foram comparados com dados experimentais.

Jia e Wang (1999) utilizaram um modelo semelhante para simular o fluxo turbulento transiente em um canal aberto com transporte de sedimento. Os autores adotaram um método de elementos finitos modificado, que tem a habilidade de lidar com geometrias complexas. Os resultados obtidos para um canal de 180° de curvatura mostraram boa concordância com dados experimentais obtidos em problema semelhante. Uma limitação deste modelo é a sua incapacidade de prever o fluxo secundário.

Uma das dificuldades na modelagem da dispersão de efluentes ou sedimento em rios e a obtenção de dados experimentais precisos, dada a complexidade do fluxo em canais abertos. Porém, a calibração de um modelo matemático é feita através da obtenção de parâmetros de dispersão, difusão e reação que são determinados experimentalmente. Num destes tipos de estudo, Ciffroy, Moulin e Gailhard (2000) realizaram experimentos ao longo do rio Seine para determinar parâmetros sedimentológicos e químicos necessários para calibrar um modelo numérico previamente desenvolvido. Depois de obtidos os parâmetros, o modelo foi utilizado para simular o transporte de cobre pelo mesmo rio.

Outro estudo experimental largamente utilizado na validação de modelos foi desenvolvido por Tominaga e Nezu (1991), que realizaram medidas precisas para investigar a estrutura turbulenta do escoamento através de um canal composto. Foi estudado o efeito da razão entre a profundidade do canal superficial e a profundidade do canal principal nas correntes secundárias e na estrutura turbulenta. A interação entre os dois canais foi discutida usando-se as equações de momento. Foram obtidos dados de velocidade nas três direções, tensores de Reynolds e valores de intensidade de turbulência e energia cinética turbulenta. Os dados obtidos de velocidade secundária satisfizeram suficientemente as equações de continuidade, comprovando a consistência dos dados. Foi observado que a rugosidade não afetou muito a estrutura do fluxo secundário.

A literatura demonstra que diversos tipos de modelagem já foram desenvolvidos, analisando-se, inclusive, escoamentos complexos. A contribuição deste trabalho se insere no fato de se desenvolver um modelo tridimensional, contudo rápido, capaz de prever a dispersão de efluentes em canais abertos, o que contribui por proporcionar uma ferramenta preditiva que apoiará decisões gerenciais de caráter industrial.

CAPÍTULO 3

3 Modelagem matemática do problema

Neste capítulo, são apresentadas as equações do modelo. De acordo com o que já foi dito, estas equações foram utilizadas em dois sistemas de coordenadas distintos, o cilíndrico e o cilíndrico elíptico. Este último não é um sistema usual de coordenadas e, por isso, a obtenção das equações do modelo, neste sistema de coordenadas, não é trivial.

Optou-se, inicialmente, pela obtenção das equações do modelo para um sistema generalizado de coordenadas, através do uso de coordenadas curvilíneas. A partir destas equações e do posterior conhecimento da relação entre este novo sistema e o sistema de coordenadas de interesse, pôde-se obter o modelo matemático escrito nas coordenadas desejadas.

Na parte final deste capítulo, são apresentados os modelos aplicados ao problema de estudo, levando em consideração as equações e condições de contorno que os compõem. Antes, porém, alguns conceitos envolvidos no uso de coordenadas curvilíneas são considerados.

3.1 *Coordenadas curvilíneas*

A resolução das equações de movimento, em conjunto com as equações de continuidade e de energia representa um dos principais desafios 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, cilíndricas e esféricas, as equações supra mencionadas 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 solução para esta dificuldade é a obtenção das equações no que será chamado de *sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas*. Com as equações escritas neste sistema de coordenadas, torna-se possível obtê-las em qualquer outro sistema de coordenadas, bastando, para isso, 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:

$$\text{Eq 3-1} \quad x = x(u_1, u_2, u_3), \quad y = y(u_1, u_2, u_3), \quad z = z(u_1, u_2, u_3)$$

A solução do sistema Eq 3-1, quando possível, gera:

$$\text{Eq 3-2} \quad u_1 = u_1(x, y, z), \quad u_2 = u_2(x, y, z), \quad u_3 = u_3(x, y, z)$$

O conjunto de equações Eq 3-1 ou Eq 3-2 definem uma *transformação de coordenadas*.

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

$$\text{Eq 3-3} \quad \vec{r} = x \vec{i} + y \vec{j} + z \vec{k}$$

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

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, u_3 . As derivadas parciais do vetor \vec{r} com respeito 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 de *vetores base* ou *fatores de proporcionalidade*, sendo:

$$\text{Eq 3-4} \quad h_1 = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_1} \right| \quad h_2 = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_2} \right| \quad h_3 = \left| \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_3} \right|$$

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

$$\text{Eq 3-5} \quad \vec{e}_1 = \frac{1}{h_1} \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_1} \quad \vec{e}_2 = \frac{1}{h_2} \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_2} \quad \vec{e}_3 = \frac{1}{h_3} \frac{\partial \vec{r}}{\partial u_3}$$

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

$$\text{Eq 3-6} \quad \vec{v} = v_1 \vec{e}_1 + v_2 \vec{e}_2 + v_3 \vec{e}_3$$

De acordo com esta convenção, o operador gradiente é dado por:

$$\text{Eq 3-7} \quad \text{grad} () = \frac{\partial ()}{\partial u_1} \frac{\vec{e}_1}{h_1} + \frac{\partial ()}{\partial u_2} \frac{\vec{e}_2}{h_2} + \frac{\partial ()}{\partial u_3} \frac{\vec{e}_3}{h_3}$$

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

De forma equivalente, o operador divergente é dado por:

$$\text{Eq 3-8} \quad \text{div}(\vec{v}) = \frac{\partial(\quad)}{\partial u_1} \cdot \frac{\vec{e}_1}{h_1} + \frac{\partial(\quad)}{\partial u_2} \cdot \frac{\vec{e}_2}{h_2} + \frac{\partial(\quad)}{\partial u_3} \cdot \frac{\vec{e}_3}{h_3}$$

As equações Eq 3-1 a Eq 3-8, 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 num 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.

3.2 Equações do modelo num sistema generalizado de coordenadas

3.2.1 Equação da continuidade

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

$$\text{Eq 3-9} \quad \frac{\partial \rho}{\partial t} + \text{div}(\rho \vec{v}) = 0$$

No problema em estudo, o escoamento é incompressível, logo, ρ é constante. Para esta situação a equação da continuidade passa a:

$$\text{Eq 3-10} \quad \text{div} \vec{v} = 0$$

A equação Eq 3-10, escrita num sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, é obtida das equações Eq 3-1 a Eq 3-8 após algum desenvolvimento,

$$\text{Eq 3-11} \quad \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial u_1} (h_2 h_3 v_1) + \frac{\partial}{\partial u_2} (h_1 h_3 v_2) + \frac{\partial}{\partial u_3} (h_1 h_2 v_3) \right] = 0$$

3.2.2 Equação de movimento

A equação do movimento, derivada da Segunda Lei de Newton, tem, na sua forma vetorial a seguinte expressão:

$$\text{Eq 3-12} \quad \rho \frac{D\vec{v}}{Dt} = \rho \vec{g} - \text{grad } p + \text{div } \vec{\tau}$$

Esta expressão é válida para todos os tipos de fluidos e pode ser aplicada para qualquer sistema de coordenadas. Na equação Eq 3-12, $\vec{\tau}$ é o Tensor tensão que representa o campo de forças formado pela resistência dos elementos de fluido à taxa de deformação (Warsi, 1993). No problema em estudo, o fluido é Newtoniano, de forma que o tensor tensão é dado por:

$$\text{Eq 3-13} \quad \vec{\tau} = \lambda (\text{div } \vec{v}) \vec{I} + 2\mu \vec{D}$$

Além disso, como já foi mencionado, o fluido é incompressível, de forma que o tensor $\vec{\tau}$ passa a:

$$\text{Eq 3-14} \quad \vec{\tau} = 2\mu \vec{D}$$

Para a determinação da equação Eq 3-12 num sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, primeiro são determinados cada termo separadamente, com exceção do termo $\rho \vec{g}$ que é obtido diretamente.

Determinação de $\frac{D\vec{v}}{Dt}$

O termo de derivada substantiva pode também ser expresso como segue:

$$\text{Eq 3-15} \quad \frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{\partial \vec{v}}{\partial t} + (\vec{v} \cdot \text{grad})\vec{v}$$

A equação Eq 3-15, escrita num sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, é obtida das equações Eq 3-1 a Eq 3-7.

Direção u_1 :

$$\text{Eq 3-16} \quad \frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{\partial v_1}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial v_1}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial v_1}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial v_1}{\partial u_3} +$$

$$+ \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} - \frac{v_2^2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{v_3^2}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1}$$

Direção u_2 :

$$\text{Eq 3-17} \quad \frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{\partial v_2}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial v_2}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial v_2}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial v_2}{\partial u_3} +$$

$$+ \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} - \frac{v_3^2}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2}$$

Direção u_3 :

$$\text{Eq 3-18} \quad \frac{D\vec{v}}{Dt} = \frac{\partial v_3}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial v_3}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial v_3}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial v_3}{\partial u_3} +$$

$$+ \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} - \frac{v_2^2}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3}$$

Determinação de grad p

O termo de gradiente de pressão é obtido diretamente da equação Eq 3-7

Direção u_1 :

Eq 3-19
$$\text{grad } p = \frac{1}{h_1} \frac{\partial p}{\partial u_1}$$

Direção u_2 :

Eq 3-20
$$\text{grad } p = \frac{1}{h_2} \frac{\partial p}{\partial u_2}$$

Direção u_3 :

Eq 3-21
$$\text{grad } p = \frac{1}{h_3} \frac{\partial p}{\partial u_3}$$

Determinação de div $\vec{\tau}$

A expressão do divergente do tensor tensão num sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, é obtida das equações Eq 3-1 a Eq 3-8.

Direção u_1 :

Eq 3-22
$$\begin{aligned} \text{div } \vec{\tau} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} & \left[\frac{\partial(h_2 h_3 \tau_{11})}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 \tau_{12})}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 \tau_{13})}{\partial u_3} \right] + \\ & + \frac{\tau_{21}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} + \frac{\tau_{31}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} - \frac{\tau_{33}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} \end{aligned}$$

Direção u_2 :

Eq 3-23

$$\text{div } \vec{\tau} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial(h_2 h_3 \tau_{21})}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 \tau_{22})}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 \tau_{23})}{\partial u_3} \right] +$$

$$+ \frac{\tau_{12}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} + \frac{\tau_{32}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} - \frac{\tau_{33}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2}$$

Direção u_3 :

Eq 3-24

$$\text{div } \vec{\tau} = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial(h_2 h_3 \tau_{31})}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 \tau_{32})}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 \tau_{33})}{\partial u_3} \right] +$$

$$+ \frac{\tau_{13}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} + \frac{\tau_{23}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3}$$

Com todos os termos definidos, é possível escrever a equação do movimento para um fluido Newtoniano e incompressível num sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas, como segue:

Direção u_1 :

Eq 3-25

$$\rho \left(\frac{\partial v_1}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial v_1}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial v_1}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial v_1}{\partial u_3} + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} - \frac{v_2^2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{v_3^2}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} \right) = -\frac{1}{h_1} \frac{\partial p}{\partial u_1} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial(h_2 h_3 \tau_{11})}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 \tau_{12})}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 \tau_{13})}{\partial u_3} \right] +$$

$$+ \frac{\tau_{21}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} + \frac{\tau_{31}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} - \frac{\tau_{33}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} + \rho g_{u_1}$$

Direção u_2 :

Eq 3-26

$$\rho \left(\frac{\partial v_2}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial v_2}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial v_2}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial v_2}{\partial u_3} + \frac{v_1 v_2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} - \frac{v_3^2}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} \right) = -\frac{1}{h_2} \frac{\partial p}{\partial u_2} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial(h_2 h_3 \tau_{21})}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 \tau_{22})}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 \tau_{23})}{\partial u_3} \right] +$$

$$+ \frac{\tau_{12}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} + \frac{\tau_{32}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} - \frac{\tau_{33}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} + \rho g_{u_2}$$

Direção u_3 :

$$\text{Eq 3-27} \quad \rho \left(\frac{\partial v_3}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial v_3}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial v_3}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial v_3}{\partial u_3} + \frac{v_1 v_3}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} - \frac{v_1^2}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} + \frac{v_2 v_3}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} - \frac{v_2^2}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} \right) = -\frac{1}{h_3} \frac{\partial p}{\partial u_3} + \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial(h_2 h_3 \tau_{31})}{\partial u_1} + \frac{\partial(h_1 h_3 \tau_{32})}{\partial u_2} + \frac{\partial(h_1 h_2 \tau_{33})}{\partial u_3} \right] + \frac{\tau_{13}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} + \frac{\tau_{23}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} - \frac{\tau_{11}}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{\tau_{22}}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} + \rho g_{u_3}$$

Os componentes do tensor $\bar{\tau}$, presentes nas equações Eq 3-25, Eq 3-26 e Eq 3-27, são obtidos da equação Eq 3-14, e são dados por:

$$\text{Eq 3-28} \quad \tau_{11} = 2\mu \left(\frac{1}{h_1} \frac{\partial v_1}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} \right)$$

$$\text{Eq 3-29} \quad \tau_{22} = 2\mu \left(\frac{1}{h_2} \frac{\partial v_2}{\partial u_2} + \frac{v_1}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} + \frac{v_3}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} \right)$$

$$\text{Eq 3-30} \quad \tau_{33} = 2\mu \left(\frac{1}{h_3} \frac{\partial v_3}{\partial u_3} + \frac{v_1}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} \right)$$

$$\text{Eq 3-31} \quad \tau_{12} = \tau_{21} = \mu \left(\frac{1}{h_2} \frac{\partial v_1}{\partial u_2} + \frac{1}{h_1} \frac{\partial v_2}{\partial u_1} - \frac{v_1}{h_1 h_2} \frac{\partial h_1}{\partial u_2} - \frac{v_2}{h_1 h_2} \frac{\partial h_2}{\partial u_1} \right)$$

$$\text{Eq 3-32} \quad \tau_{13} = \tau_{31} = \mu \left(\frac{1}{h_3} \frac{\partial v_1}{\partial u_3} + \frac{1}{h_1} \frac{\partial v_3}{\partial u_1} - \frac{v_1}{h_1 h_3} \frac{\partial h_1}{\partial u_3} - \frac{v_3}{h_1 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_1} \right)$$

$$\text{Eq 3-33} \quad \tau_{23} = \tau_{32} = \mu \left(\frac{1}{h_3} \frac{\partial v_2}{\partial u_3} + \frac{1}{h_2} \frac{\partial v_3}{\partial u_2} - \frac{v_2}{h_2 h_3} \frac{\partial h_2}{\partial u_3} - \frac{v_3}{h_2 h_3} \frac{\partial h_3}{\partial u_2} \right)$$

3.2.3 Equação de transferência de massa de uma substância A

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

$$\text{Eq 3-34} \quad \frac{DC_A}{Dt} = K_G \nabla^2 C_A + R_A$$

onde R_A denota o termo de reação do sistema.

K_G é o coeficiente global de difusão da substância A no meio em questão.

C_A é concentração de uma dada substância A.

Como foi mostrado na equação Eq 3-15, o termo de derivada substantiva pode ser também escrito na forma,

$$\frac{DC_A}{Dt} = \frac{\partial C_A}{\partial t} + \vec{v} \cdot \text{grad } C_A$$

Considerando as equações Eq 3-6 e Eq 3-7, a derivada substantiva da função escalar, C_A , é dada por:

$$\text{Eq 3-35} \quad \frac{DC_A}{Dt} = \frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial C_A}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial C_A}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial C_A}{\partial u_3}$$

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

$$\text{Eq 3-36} \quad \nabla^2 \Phi = \frac{1}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial \Phi}{\partial u_1} \right) + \frac{\partial}{\partial u_2} \left(\frac{h_1 h_3}{h_2} \frac{\partial \Phi}{\partial u_2} \right) + \frac{\partial}{\partial u_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial \Phi}{\partial u_3} \right) \right]$$

Neste caso, para o problema em estudo onde não há reação química, considerando as equações Eq 3-35 e Eq 3-36, a equação Eq 3-34 pode ser escrita num sistema ortogonal generalizado de coordenadas curvilíneas como:

$$\text{Eq 3-37} \quad \boxed{\begin{aligned} & \frac{\partial C_A}{\partial t} + \frac{v_1}{h_1} \frac{\partial C_A}{\partial u_1} + \frac{v_2}{h_2} \frac{\partial C_A}{\partial u_2} + \frac{v_3}{h_3} \frac{\partial C_A}{\partial u_3} = \\ & = \frac{K_G}{h_1 h_2 h_3} \left[\frac{\partial}{\partial u_1} \left(\frac{h_2 h_3}{h_1} \frac{\partial C_A}{\partial u_1} \right) + \frac{\partial}{\partial u_2} \left(\frac{h_3 h_1}{h_2} \frac{\partial C_A}{\partial u_2} \right) + \frac{\partial}{\partial u_3} \left(\frac{h_1 h_2}{h_3} \frac{\partial C_A}{\partial u_3} \right) \right] \end{aligned}}$$

3.3 Aplicação do modelo ao problema da Geometria Cilíndrica

Para o caso da Geometria Cilíndrica, as equações do modelo foram expressas em coordenadas cilíndricas. Para este sistema de coordenadas, as seguintes relações são válidas (Spiegel, 1972):

$$\text{Eq 3-38} \quad x = r \cos \theta, \quad y = r \sin \theta, \quad z = z$$

$$\text{Eq 3-39} \quad h_r = 1, \quad h_\theta = r, \quad h_z = 1$$

$$\text{onde} \quad r \geq 0, \quad 0 \leq \theta \leq 2\pi, \quad -\infty \leq z \leq \infty$$

Assim fazendo $u_1 = r$, $u_2 = \theta$ e $u_3 = z$, e substituindo as equações Eq 3-39, para as três variáveis, nas equações Eq 3-11, Eq 3-25 a Eq 3-27 e Eq 3-37, pode-se escrever as equações do modelo em coordenadas cilíndricas.

Equação da continuidade

Eq 3-40
$$\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) + \frac{1}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$

Equação de movimento

Direção r

Eq 3-41
$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v_r}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_r}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_r}{\partial z} - \frac{v_\theta^2}{r} \right) = \\ = \rho g_r - \frac{\partial p}{\partial r} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_r) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_r}{\partial \theta^2} - \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_r}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

Direção θ

Eq 3-42
$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v_\theta}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_\theta}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_\theta}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_\theta}{\partial z} + \frac{v_r v_\theta}{r} \right) = \\ = \rho g_\theta - \frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \mu \left[\frac{\partial}{\partial r} \left(\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} (r v_\theta) \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial \theta^2} + \frac{2}{r^2} \frac{\partial v_r}{\partial \theta} + \frac{\partial^2 v_\theta}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

Direção z

Eq 3-43
$$\begin{aligned} \rho \left(\frac{\partial v_z}{\partial t} + v_r \frac{\partial v_z}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial v_z}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial v_z}{\partial z} \right) = \\ = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

Equação de transferência de massa de uma substância A

$$\begin{aligned} \text{Eq 3-44} \quad \frac{\partial C_A}{\partial t} + v_r \frac{\partial C_A}{\partial r} + \frac{v_\theta}{r} \frac{\partial C_A}{\partial \theta} + v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = \\ = K_G \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

As equações Eq 3-40 a Eq 3-44 serão simplificadas, dadas as hipóteses assumidas no capítulo 1. Uma destas hipóteses considera-se o fluxo unidirecional. Esta hipótese é válida uma vez que o comprimento da calha, L , é muitas vezes maior que o raio da mesma, R . Nestas condições, as componentes de velocidade nas direções radial e angular, são muito pequenas, a ponto de poderem ser desprezadas. Assim:

$$v_r = v_\theta \cong 0$$

Outra hipótese assumida foi que a altura do leito, h , permanece constante. Esta hipótese assegura que o escoamento é desenvolvido, desta forma:

$$\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$

Nestas condições e lembrando que o escoamento é permanente, as equações Eq 3-41 a Eq 3-43 passam a:

Direção r :

$$\text{Eq 3-45} \quad 0 = -\frac{\partial p}{\partial r} + \rho g_r$$

Direção θ :

$$\text{Eq 3-46} \quad 0 = -\frac{1}{r} \frac{\partial p}{\partial \theta} + \rho g_\theta$$

Direção z:

$$\text{Eq 3-47} \quad 0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} \right]$$

Para o tratamento da pressão nas equações acima, a geometria utilizada deve ser considerada:

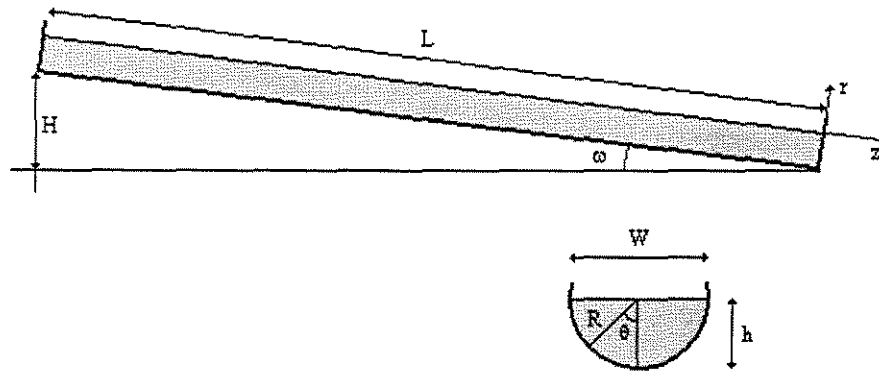


Figura 3-1 – Esquema representativo da calha de seção transversal semicircular.

Da Figura 3-1 acima, tem-se:

$$\text{Eq 3-48} \quad \text{sen } \omega = \frac{H}{L}$$

A força motriz do escoamento em rios é a gravidade. A ação da gravidade é representada pelo conjunto vetorial da Figura 3-2:

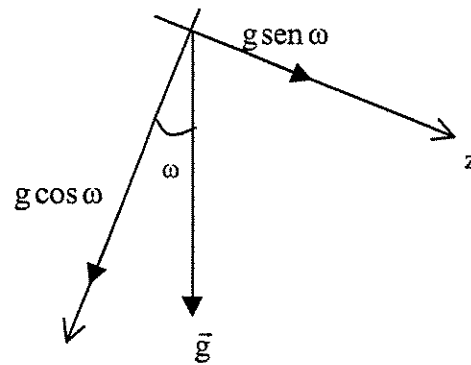


Figura 3-2 – Decomposição vetorial do vetor gravidade.

Assim a componente da gravidade na direção z é dada por:

Eq 3-49 $g_z = g \sin \omega$

O outro componente do vetor gravidade é formado pela soma dos vetores na direção r e θ , Figura 3-3. Para um ponto qualquer de fluido:

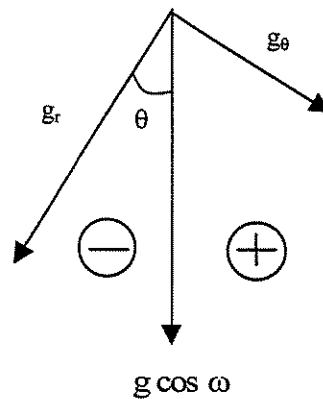


Figura 3-3 – Avaliação dos componentes do vetor gravidade nas direções r e θ .

Desta forma, os componentes do vetor gravidade na direção r e θ , são dados por:

$$\text{Eq 3-50} \quad g_r = g \cos(\omega) \cos(-\theta) = g \cos(\omega) \cos(\theta)$$

$$\text{Eq 3-51} \quad g_\theta = g \cos(\omega) \sin(-\theta) = -g \cos(\omega) \sin(\theta)$$

A partir das equações Eq 3-50 e Eq 3-51 e das equações Eq 3-45 e Eq 3-46 pode-se afirmar que

$$\text{Eq 3-52} \quad p = p_0 + \rho \cdot g \cdot r \cdot \cos \omega \cdot \cos \theta + f(z)$$

Da equação Eq 3-47, vê-se que:

$$\text{Eq 3-53} \quad \frac{\partial p}{\partial z} = g(r, \theta) \Rightarrow \frac{\partial^2 p}{\partial z^2} = 0$$

Sendo nula a derivada segunda da pressão com relação z , a função $f(z)$ é uma reta, onde a constante já foi incorporada no termo p_0 . Desta forma, tem-se:

$$f(z) = Kz$$

Portanto, a equação Eq 3-52 passa a:

$$\text{Eq 3-54} \quad p = p_0 + \rho \cdot g \cdot r \cdot \cos \omega \cdot \cos \theta + Kz$$

Desta forma,

$$K = \frac{\partial p}{\partial z}$$

Para um z qualquer, sendo a pressão na superfície ($\theta = \pm\pi/2$) igual a atmosférica e considerando a equação Eq 3-54, tem-se:

$$\text{Eq 3-55} \quad p_{\text{atm}} = p_0 + \frac{\partial p}{\partial z} z$$

Mas da equação Eq 3-53, a derivada de p em relação a z não é função de z , logo pode-se afirmar:

$$\text{Eq 3-56} \quad \frac{\partial p}{\partial z} = 0$$

Com relação à equação de transferência de massa, outra hipótese assumida é que a pluma de dispersão é longa e fina, de forma que a dispersão difusiva na direção z é desprezível em comparação a dispersão convectiva da pluma na mesma direção. Desta forma,

$$\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \cong 0$$

3.3.1 Modelo final aplicado

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

Equação da continuidade

$$\text{Eq 3-57} \quad \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$

Equação de movimento

$$\text{Eq 3-58} \quad 0 = \frac{\rho g H}{L} + \mu \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial v_z}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 v_z}{\partial \theta^2} \right]$$

Equação de transferência de massa de uma substância A

$$\text{Eq 3-59} \quad v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = K_G \left[\frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \left(r \frac{\partial C_A}{\partial r} \right) + \frac{1}{r^2} \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} \right]$$

3.4 Aplicação do modelo ao problema da Geometria Elíptica

Para o caso da Geometria Elíptica, as equações do modelo foram expressas em coordenadas cilíndricas elípticas. Para este sistema de coordenadas, as relações de transformação de coordenadas são distintas para os casos em que a razão entre a largura e a profundidade do rio são maior ou menor que 2.

Caso Elíptico 1: $W / h > 2$

Para este caso, onde a geometria representa um rio em geral largo e raso, as seguintes expressões são válidas (Spiegel, 1972):

$$\text{Eq 3-60} \quad x = a \cdot \cosh u \cdot \cos v, \quad y = a \cdot \sinh u \cdot \sin v, \quad z = z$$

$$\text{Eq 3-61} \quad h_u = h_v = a \sqrt{\sinh^2 u + \sin^2 v}, \quad h_z = 1$$

$$\text{onde} \quad u \geq 0, \quad 0 \leq v \leq 2\pi, \quad -\infty \leq z \leq \infty$$

A relação entre as variáveis u e v e as variáveis cartesianas x e y é mostrada na Figura 3-4:

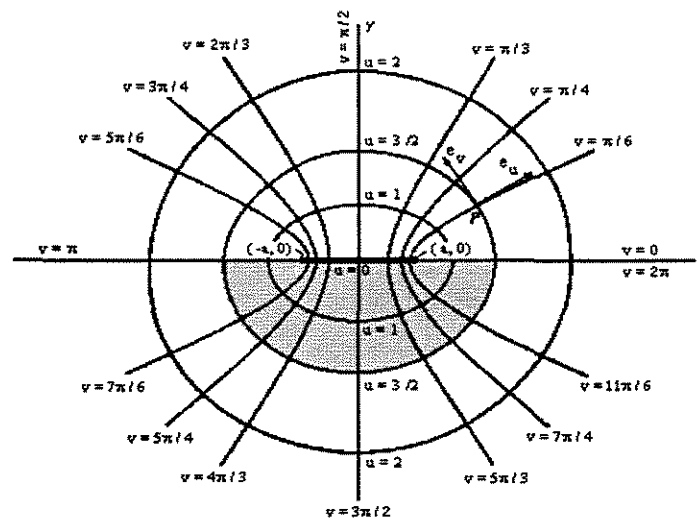


Figura 3-4 - Coordenadas cilíndricas elípticas num plano cartesiano xy (Caso elíptico 1).

Para este caso de estudo, o domínio de interesse é tal que u varia de zero a um valor máximo u_p , e v varia de π a 2π . Este valor máximo da variável u é característico de cada rio que está sendo representado pela calha cilíndrica de seção transversal semi-elíptica. Seu valor é dependente da relação entre a largura, W , e a profundidade do leito, h , e pode ser obtido das relações Eq 3-60,

$$\text{Eq 3-62} \quad u_p = \operatorname{arctan} h \left[\frac{2h}{W} \right]$$

As dimensões reais de h e W são asseguradas através da constante a . A expressão para a determinação desta constante também é obtida das relações Eq 3-60,

$$\text{Eq 3-63} \quad a = \frac{W}{2 \cdot \cosh(u_p)}$$

Caso Elíptico 2: $W / h < 2$

Para este caso, as equações de transformação de variáveis são diferentes das mostradas no Caso Elíptico 1, sendo válidas a seguintes expressões (Spiegel, 1972):

$$\text{Eq 3-64} \quad x = a \cdot \sinh u \cdot \sin v, \quad y = -a \cdot \cosh u \cdot \cos v, \quad z = z$$

$$\text{Eq 3-65} \quad h_u = h_v = a \sqrt{\sinh^2 u + \sin^2 v}, \quad h_z = 1$$

$$\text{onde} \quad u \geq 0, \quad -\pi \leq v \leq \pi, \quad -\infty \leq z \leq \infty$$

A relação entre as variáveis u e v e as variáveis cartesianas x e y é mostrada na Figura 3-5:

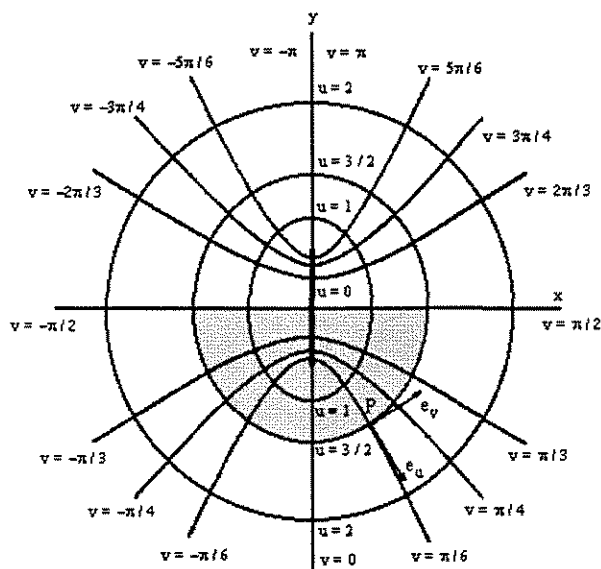


Figura 3-5 – Coordenadas cilíndricas elípticas num plano cartesiano xy (Caso elíptico 2).

Para este caso, a variável u também varia de zero até um valor máximo, u_p , mas a v varia de $-\pi/2$ a $\pi/2$. As expressões para o cálculo de u_p e da constante a são determinadas a partir das expressões apresentadas em Eq 3-64, sendo:

$$\text{Eq 3-66} \quad u_p = \arctan h \left[\frac{W}{2h} \right]$$

$$\text{Eq 3-67} \quad a = \frac{W}{2 \cdot \sinh(u_p)}$$

As diferenças entre os casos elípticos 1 e 2 são consequência dos diferentes domínios de cada caso. Tratando-se, entretanto, ambos os casos de um único sistema de coordenada, as equações de continuidade, momento e transferência de massa são as mesmas para os dois casos. Para a obtenção destas equações as hipóteses do modelo devem ser aplicadas:

Escoamento permanente: $\frac{\partial v}{\partial t} = 0$

Escoamento desenvolvido: $\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$

Escoamento unidirecional: $v_u = v_v \cong 0$

Escoamento convectivo na direção do escoamento: $\frac{\partial^2 C_A}{\partial z^2} \cong 0$

Considerando as hipóteses acima, fazendo $u_1 = u$, $u_2 = v$ e $u_3 = z$, e substituindo as equações Eq 3-651 ou Eq 3-65, para as três variáveis, nas equações Eq 3-11, Eq 3-25 a Eq 3-27 e Eq 3-37, tem-se:

Equação da continuidade

Eq 3-68 $\frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$

Equação de movimento

Direção u

Eq 3-69 $0 = -\frac{1}{a\sqrt{\sinh^2 u + \sin^2 v}} \frac{\partial p}{\partial u} + \rho g_u$

Direção v

Eq 3-70 $0 = -\frac{1}{a\sqrt{\sinh^2 u + \sin^2 v}} \frac{\partial p}{\partial v} + \rho g_v$

Direção z

$$\text{Eq 3-71} \quad 0 = -\frac{\partial p}{\partial z} + \rho g_z + \frac{\mu}{a^2 (\sinh^2 u + \sin^2 v)} \left[\frac{\partial^2 v_z}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial v^2} \right]$$

Equação de transferência de massa de uma substância A

$$\text{Eq 3-72} \quad v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = K_G \left[\frac{1}{a^2 (\sinh^2 u + \sin^2 v)} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial v^2} \right) \right]$$

Foi visto no item 3.3 que a pressão não varia com a direção de fluxo z. Esta condição também é válida para este caso, em que a altura do leito não varia. Desta forma, o termo de derivada da pressão com relação a direção z, na Eq 3-71, é nulo.

3.4.1 Modelo final aplicado

É apresentado a seguir, de uma forma sintetizada, o sistema de equações em coordenadas cilíndricas elípticas que descrevem o modelo matemático do escoamento em um canal de seção transversal semi-elíptica, levando em consideração as hipóteses do modelo.

Equação da continuidade

$$\text{Eq 3-73} \quad \frac{\partial v_z}{\partial z} = 0$$

Equação de movimento

$$\text{Eq 3-74} \quad 0 = \frac{\rho g H}{L} + \frac{\mu}{a^2 (\sinh^2 u + \sin^2 v)} \left[\frac{\partial^2 v_z}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial v^2} \right]$$

Equação de transferência de massa de uma substância A

$$\text{Eq 3-75} \quad v_z \frac{\partial C_A}{\partial z} = K_G \left[\frac{1}{a^2 (\sinh^2 u + \sin^2 v)} \left(\frac{\partial^2 C_A}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 C_A}{\partial v^2} \right) \right]$$

3.5 Condições de contorno**3.5.1 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 efeitos de atrito com o ar. Assim:

- Na parede:

$$\text{Eq 3-76} \quad v_z = 0$$

- Na superfície:

$$\text{Eq 3-77} \quad \vec{\tau} \cdot \vec{n} = 0$$

onde \vec{n} é o vetor normal à superfície

De acordo com estas equações, as condições de contorno para a equação de movimento são dadas para cada um dos casos.

Geometria Cilíndrica

Na parede	$r = R$ $-\pi/2 < \theta < +\pi/2$	$v_z = 0$
Na superfície	$\theta = \pm \frac{\pi}{2}$ $0 < r < R$	$\frac{\partial v_z}{\partial \theta} = 0$
Na superfície	$r = 0$ $-\pi/2 < \theta < +\pi/2$	$\left. \frac{\partial v_z}{\partial r} \right _{\theta=0} = 0$

Geometria Elíptica – Caso 1

Na parede	$u = u_p$ $\pi < v < 2\pi$	$v_z = 0$
Na superfície	$u = 0$ $\pi < v < 2\pi$	$\frac{\partial v_z}{\partial u} = 0$
Na superfície	$v = \pi, \quad v = 2\pi$ $0 < u < u_p$	$\frac{\partial v_z}{\partial v} = 0$

Geometria Elíptica – Caso 2

Na parede	$u = u_p$ $-\pi/2 < v < \pi/2$	$v_z = 0$
-----------	-----------------------------------	-----------

Na superfície	$v = -\pi/2, v = \pi/2$ $0 \leq u < u_p$	$\frac{\partial v_z}{\partial v} = 0$
---------------	---	---------------------------------------

3.5.2 Equação de transferência de massa de uma substância A

As condições de contorno para a equação de transferência de massa são a de concentração conhecida no início do domínio e a de fluxo de massa nulo 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 soluto para o ar. Assim:

- No início do domínio:

Eq 3-78 $C_A = C_{Ai}$

- Na parede e na superfície, ao longo do domínio:

$$\frac{\partial C_A}{\partial n} = 0$$

onde $\partial/\partial n$ representa a derivada na direção normal à superfície do domínio.

De acordo com estas equações, as condições de contorno para a equação de transferência de massa são dadas para cada um dos casos.

Geometria Cilíndrica

Na entrada	$z = 0$ $0 \leq r \leq R$ $-\pi/2 \leq \theta \leq +\pi/2$	$C_A(0, u, v) = C_{Ai}(u, v)$
Na parede	$r = R$ $-\pi/2 < \theta < +\pi/2$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial r} = 0$
Na superfície	$r = 0$ $-\pi/2 < \theta < +\pi/2$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial r} = 0$
Na superfície	$\theta = \pm \frac{\pi}{2}$ $0 < r < R$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial \theta} = 0$

Geometria Elíptica – Caso 1

Na entrada	$z = 0$ $0 \leq u \leq u_p$ $\pi \leq v \leq 2\pi$	$C_A(0, u, v) = C_{Ai}(u, v)$
Na parede	$u = u_p$ $\pi < v < 2\pi$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial u} = 0$

Na superfície	$u = 0$ $\pi < v < 2\pi$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial u} = 0$
Na superfície	$v = \pi, \quad v = 2\pi$ $0 < u < u_p$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial v} = 0$

Geometria Elíptica – Caso 2

Na entrada	$z = 0$ $0 \leq u \leq u_p$ $-\pi/2 \leq v \leq \pi/2$	$C_A(0, u, v) = C_{Ai}(u, v)$
Na parede	$u = u_p$ $-\pi/2 < v < \pi/2$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial u} = 0$
Na superfície	$v = -\pi/2, v = \pi/2$ $0 \leq u < u_p$ $0 < z < L$	$\frac{\partial C_A}{\partial v} = 0$

CAPÍTULO 4

4 Metodologia de solução das equações do modelo

Neste capítulo, são apresentadas a metodologia e as ferramentas matemáticas utilizadas na solução das equações do modelo desenvolvidas no capítulo anterior. Inicialmente, são descritas as metodologias de solução dos perfis de velocidade e concentração para o problema da Geometria Cilíndrica. Posteriormente, são mostradas as metodologias de solução para o problema da Geometria Elíptica. Dada a semelhança de solução dos casos elípticos 1 e 2 descritos no Capítulo 3, apenas os procedimentos de solução do caso elíptico 1 serão apresentados.

Os métodos numéricos utilizados neste trabalho constituem elementos de solução matemática amplamente difundidos no meio acadêmico. Por esta razão, decidiu-se não apresentar sua fundamentação teórica completa nesta dissertação. Acredita-se que uma maior ênfase à metodologia utilizada agregue maior conhecimento a um futuro leitor deste trabalho.

4.1 Metodologia de Solução

A solução do problema em estudo consiste basicamente de duas etapas: a de determinação dos perfis de velocidades e, a partir destes resultados, a de determinação dos perfis de concentração da substância presente no efluente em cada caso de estudo. O fluxograma apresentado na Figura 4-1 mostra, de uma forma geral, a metodologia de solução das equações adotada neste trabalho.

Na Figura 4-1, a caixa de Dados de Entrada representa o conjunto de dados necessários para o cálculo dos perfis de velocidade e concentração. Entre estes dados estão

inclusas as dimensões e a vazão do rio, a concentração da substância de interesse no rio, a carga de efluente sendo despejada no corpo d'água e o coeficiente global de dispersão desta substância na água do rio.

Para o cálculo dos perfis de velocidade e concentração são utilizadas as equações de movimento e transferência de massa, respectivamente. A solução destas equações quando possível é analítica. Neste estudo, apenas o perfil de velocidade do caso cilíndrico foi obtido analiticamente. Para o caso elíptico, utilizou-se o método das Diferenças Finitas de 4ª ordem para se determinar o perfil de velocidade.

O perfil de velocidade também é um dado de entrada para o cálculo do perfil de concentração. Este perfil, em todas os casos estudados neste trabalho, foi determinado através dos métodos numéricos de Diferenças Finitas de 2ª ordem e Runge-Kutta de 4ª ordem. Para uma melhor visualização dos perfis, aplica-se a mudança de coordenadas para o sistema de coordenadas cartesianas por meio de interpolação numérica.

Uma descrição mais detalhada da metodologia de solução é dada ao longo do capítulo.

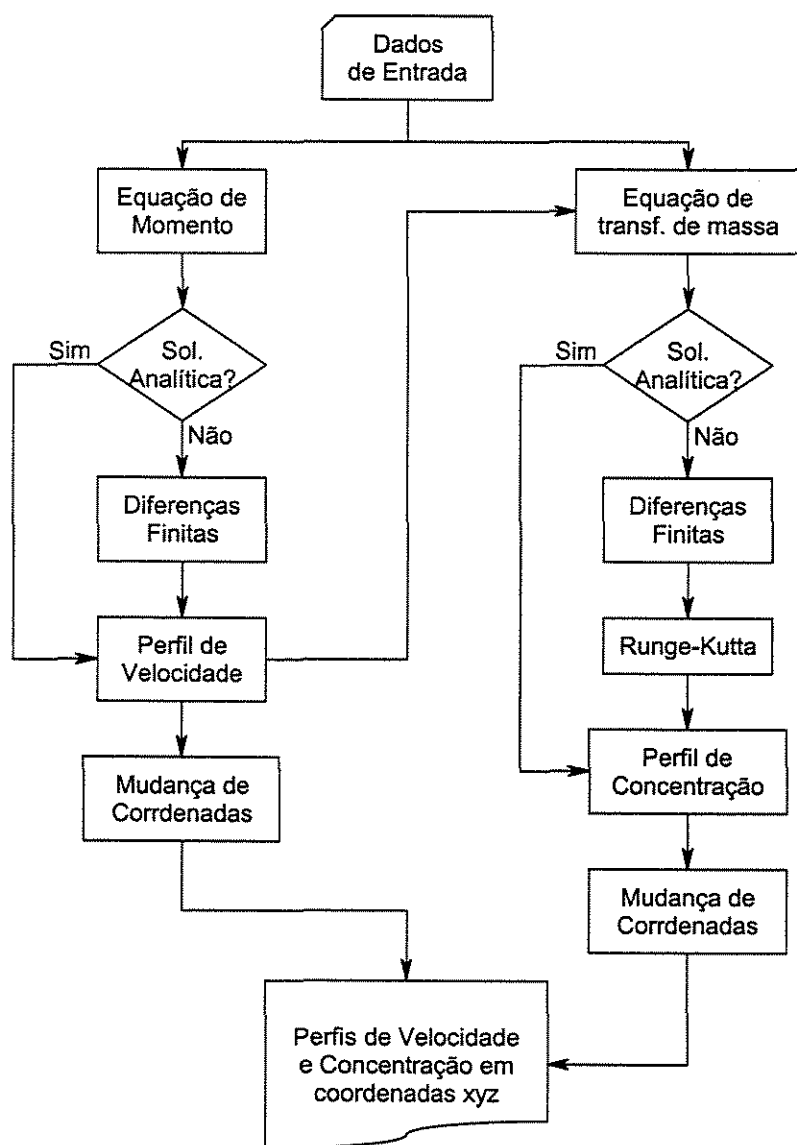


Figura 4-1 Esquema explicativo da metodologia de cálculo utilizada na determinação dos perfis de velocidade e concentração.

4.2 Caso A: Geometria Cilíndrica

4.2.1 Perfil de velocidade axial

A equação Eq 3-58 tem solução analítica. Considerando as condições de contorno do problema, sua solução é dada por:

$$\text{Eq 4-1} \quad v_z = \frac{KR^2}{4\mu} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

$$\text{onde} \quad K = \frac{\rho \cdot g \cdot H}{L}$$

Como o valor de H não será um dado do problema, a melhor forma de determinar a constante K será a partir da vazão do sistema (rio + efluente), que é um dado conhecido. Para isso deve-se lembrar que:

$$\text{Eq 4-2} \quad Q = \int_{A(z)} \vec{v} \cdot \vec{n} \, dA$$

$$\text{onde} \quad \begin{aligned} \vec{v} \cdot \vec{n} &= v_z \\ dA &= r \cdot dr \cdot d\theta \end{aligned}$$

Portanto,

$$\text{Eq 4-3} \quad Q = \frac{\pi KR^4}{16\mu}$$

Desta forma, tem-se a expressão do perfil de velocidade do fluxo num trecho de rio, representado por uma calha semicilíndrica, em função da sua vazão de escoamento.

Eq 4-4

$$v_z = 4 \frac{Q}{\pi R^2} \left[1 - \left(\frac{r}{R} \right)^2 \right]$$

O resultado expresso pela equação Eq 4-4 será utilizado posteriormente no cálculo do perfil de concentração.

4.2.2 Perfil de concentração da substância de interesse

Diferentemente do caso da velocidade, o cálculo do perfil de concentração não pode ser realizado analiticamente. Para a solução da Eq 3-59, foi utilizado o método de Runge-Kutta de 4ª ordem associado ao método de Diferenças Finitas de 2ª ordem. Na malha de discretização, utilizada para a determinação do perfil de concentração, o domínio da variável r foi dividido em N intervalos de tamanho Δr , gerando com isso, um total de $(N+1)$ pontos igualmente espaçados. A variável θ teve seu domínio dividido em M intervalos de tamanho $\Delta\theta$, gerando com isso, um total de $(M+1)$ pontos igualmente espaçados entre si. A variável z teve seu domínio dividido em P intervalos de tamanho Δz , gerando assim, um total de $(P+1)$ pontos igualmente espaçados nesta direção. Esta malha tridimensional é mostrada a seguir:

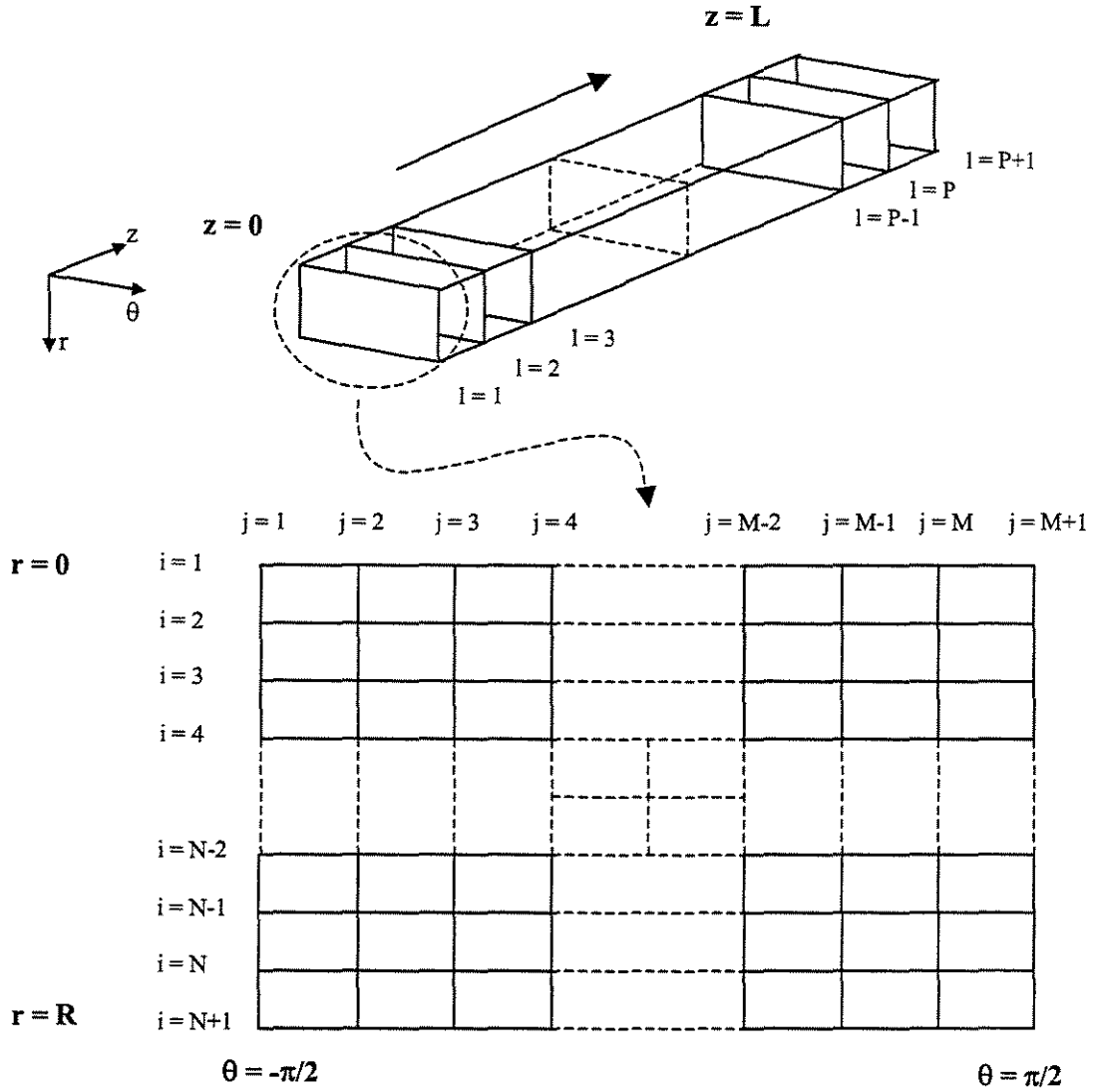


Figura 4-2 – Malha tridimensional de discretização do caso cilíndrico.

O tamanho de cada intervalo é dado a seguir:

Eq 4-5
$$\Delta r = \frac{R - 0}{N} = \frac{h}{N}$$

Eq 4-6
$$\Delta \theta = \frac{\pi/2 - (-\pi/2)}{M} = \frac{\pi}{M}$$

$$\text{Eq 4-7} \quad \Delta z = \frac{L-0}{P} = \frac{L}{P}$$

A solução do problema passa pela discretização da equação Eq 3-59, na malha mostrada na Figura 4-2. Esta equação, discretizada, tem a forma:

$$\text{Eq 4-8} \quad \left. \frac{\partial C_A}{\partial z} \right|_{z_i} = \frac{K_G}{v_z|_{r_i}} \left[\frac{1}{r_i} \left. \frac{\partial C_A}{\partial r} \right|_{r_i} + \left. \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} \right|_{r_i} + \frac{1}{r_i^2} \left. \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_j} \right]$$

A equação Eq 4-8 é aplicada para os pontos internos da malha. Na fronteira, as condições de contorno são aplicadas. A equação acima é resolvida em dois passos. Inicialmente, determinam-se as derivadas da função concentração com relação às variáveis r e θ , pelo método de Diferenças Finitas.

Aplicando-se, então o método de Diferenças Finitas de 2ª ordem para calcular as derivadas com relação a r e θ , a equação Eq 4-8 passa a um sistema de equações diferenciais, com uma equação para cada ponto interno da malha.

$$\text{Eq 4-9} \quad \left. \frac{dC_A}{dz} \right|_{i,j} = \frac{K_G}{v_z|_{r_i}} \left[\frac{1}{r_i} \left. \frac{\partial C_A}{\partial r} \right|_{r_i} + \left. \frac{\partial^2 C_A}{\partial r^2} \right|_{r_i} + \frac{1}{r_i^2} \left. \frac{\partial^2 C_A}{\partial \theta^2} \right|_{\theta_j} \right]$$

$$r_i = (i-1)\Delta r, \quad \theta_j = -\frac{\pi}{2} + (j-1)\Delta\theta$$

As equações obtidas da discretização em cada ponto (i, j) são descritas a seguir.

$$i = 1$$

$$j = 1, 2, \dots, M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-10} \quad C_A|_{1,j} = \frac{4 \cdot C_A|_{2,(M/2)+1} - C_A|_{3,(M/2)+1}}{3}$$

$$i = N+1$$

$$j = 1, 2, \dots, M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-11} \quad C_A|_{N+1,j} = \frac{4 \cdot C_A|_{N,j} - C_A|_{N-1,j}}{3}$$

$$i = 2, \dots, N$$

$$j = 1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-12} \quad C_A|_{i,1} = \frac{4 \cdot C_A|_{i,2} - C_A|_{i,3}}{3}$$

$$i = 2, \dots, N$$

$$j = M+1$$

Das condições de contorno,

Eq 4-13
$$C_A|_{i,M+1} = \frac{4 \cdot C_A|_{i,M} - C_A|_{i,M-1}}{3}$$

$$i = 2, \dots, N$$

$$j = 2, \dots, M$$

Eq 4-14
$$\frac{dC_A|_{i,j}}{dz} = \frac{K_G}{v_z|_i} \left[\frac{1}{(i-1)\Delta r} \left(\frac{C_A|_{i+1,j} - C_A|_{i-1,j}}{2\Delta r} \right) + \frac{C_A|_{i+1,j} - 2 \cdot C_A|_{i,j} + C_A|_{i-1,j}}{\Delta r^2} \right. \\ \left. + \frac{1}{(i-1)^2 \Delta r^2} \left(\frac{C_A|_{i,j+1} - 2 \cdot C_A|_{i,j} + C_A|_{i,j-1}}{\Delta \theta^2} \right) \right]$$

Com isso são geradas $(N+1) \times (M+1)$ equações. Deste total de equações, $2 \cdot (M+N-1)$ são equações algébricas obtidas a partir das equações Eq 4-10 a Eq 4-13. As demais equações são equações diferenciais de primeira ordem. Quando as equações algébricas são substituídas nas equações diferenciais, forma-se um sistema de $(N-1) \times (M-1)$ equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, com um número igual de concentrações pontuais a serem determinadas.

A solução deste sistema é obtida utilizando-se o método clássico de Runge-Kutta de 4ª ordem. O método mostrou-se eficiente na solução do problema.

Dada a condição de contorno em $z = 0$, os valores de concentração para os pontos internos da malha são calculados para cada passo de integração Δz . A partir dos valores de concentração dos pontos internos da malha num dado z , calcula-se os valores de concentração nas fronteiras da malha a partir das equações Eq 4-10 a Eq 4-13. A solução final é obtida quando a concentração de diluição total é obtida para todos os pontos.

4.3 Caso B: Geometria Elíptica

4.3.1 Perfil de velocidade axial

Neste caso, a solução da equação de movimento não pode ser obtida analiticamente. Partiu-se para uma solução numérica com o uso do Método de Diferenças Finitas de 4ª ordem. Na malha utilizada, o domínio da variável u foi dividido em N intervalos de tamanho Δu , gerando com isso, um total de $(N+1)$ pontos igualmente espaçados. A variável v teve seu domínio dividido em M intervalos de tamanho Δv , gerando com isso, um total de $(M+1)$ pontos igualmente espaçados entre si. Esta malha é mostrada a seguir:

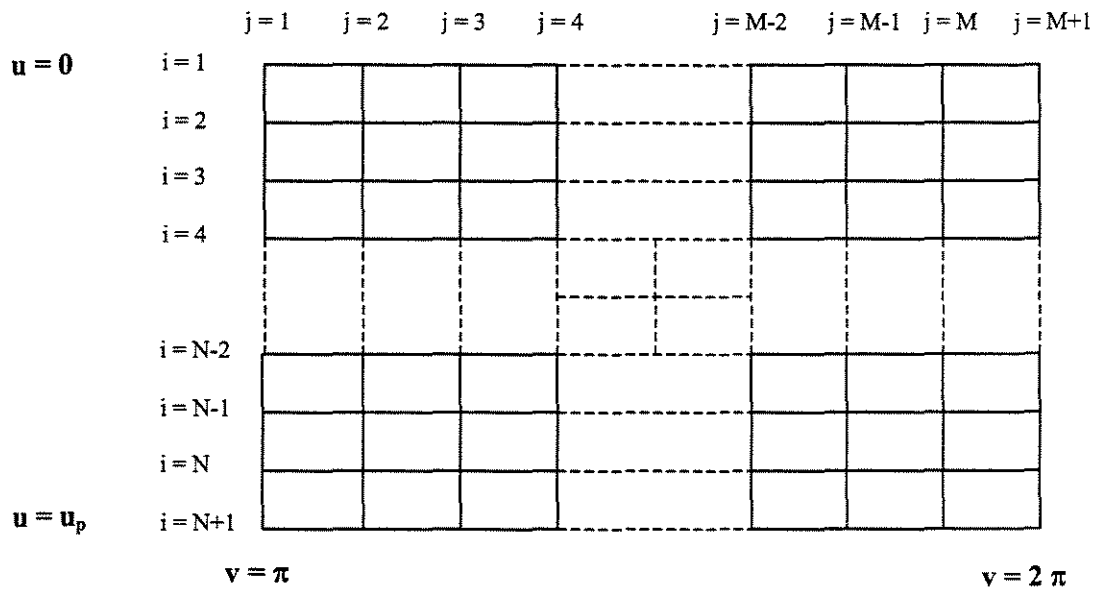


Figura 4-3 – Malha utilizada para a discretização.

O tamanho dos intervalos é dado pelas expressões

$$\text{Eq 4-15} \quad \Delta u = \frac{u_p - 0}{N} = \frac{u_p}{N}$$

$$\text{Eq 4-16} \quad \Delta v = \frac{2\pi - \pi}{M} = \frac{\pi}{M}$$

A malha mostrada na Figura 4-3 é utilizada na solução da equação Eq 3-74. Esta equação pode ser escrita como segue,

$$\text{Eq 4-17} \quad \left[\frac{\partial^2 v_z}{\partial u^2} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial v^2} \right] = K_1 \cdot F(u, v)$$

onde

$$\text{Eq 4-18} \quad K_1 = \frac{\rho \cdot g \cdot H}{\mu L}$$

$$\text{Eq 4-19} \quad F(u, v) = -a^2 (\sinh^2 u + \sin^2 v)$$

A equação Eq 4-17 discretizada tem a forma:

$$\text{Eq 4-20} \quad \left[\frac{\partial^2 v_z}{\partial u^2} \Big|_{u_i} + \frac{\partial^2 v_z}{\partial v^2} \Big|_{v_j} \right] = K_1 \cdot F(u_i, v_j); \quad u_i = (i-1)\Delta u; \quad v_j = \pi + (j-1)\Delta v$$

Esta equação será aplicada em todo o domínio, exceto na sua fronteira, onde as condições de contorno serão aplicadas. A seguir são descritas as equações obtidas da discretização em cada ponto (i, j).

$$i = 1$$

$$j = 1, 2, \dots, M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-21} \quad -25 \cdot Vz_{1,j} + 48 \cdot Vz_{2,j} - 36 \cdot Vz_{3,j} + 16 \cdot Vz_{4,j} - 3 \cdot Vz_{5,j} = 0$$

$$i = N+1$$

$$j = 1, 2, \dots, M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-22} \quad Vz_{N+1,j} = 0$$

$$i = 2, 3, \dots, N$$

$$j = 1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-23} \quad -25 \cdot Vz_{i,1} + 48 \cdot Vz_{i,2} - 36 \cdot Vz_{i,3} + 16 \cdot Vz_{i,4} - 3 \cdot Vz_{i,5} = 0$$

$$i = 2, 3, \dots, N$$

$$j = M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-24} \quad 3 \cdot Vz_{i,M-3} - 16 \cdot Vz_{i,M-2} + 36 \cdot Vz_{i,M-1} - 48 \cdot Vz_{i,M} + 25 \cdot Vz_{i,M+1} = 0$$

$$i = 2$$

$$j = 2$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

$$\text{Eq 4-25} \quad \frac{11 \cdot Vz_{1,2} - 20 \cdot Vz_{2,2} + 6 \cdot Vz_{3,2} + 4 \cdot Vz_{4,2} - Vz_{5,2}}{12\Delta u^2} + \frac{11 \cdot Vz_{2,1} - 20 \cdot Vz_{2,2} + 6 \cdot Vz_{2,3} + 4 \cdot Vz_{2,4} - Vz_{2,5}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_2, v_2)$$

$$i = 2$$

$$j = 3, 4, \dots, M-1$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

$$\text{Eq 4-26} \quad \frac{11 \cdot Vz_{1,j} - 20 \cdot Vz_{2,j} + 6 \cdot Vz_{3,j} + 4 \cdot Vz_{4,j} - Vz_{5,j}}{12\Delta u^2} + \frac{-Vz_{2,j-2} + 16 \cdot Vz_{2,j-1} - 30 \cdot Vz_{2,j} + 16 \cdot Vz_{2,j+1} - Vz_{2,j+2}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_2, v_j)$$

$$i = 2$$

$$j = M$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

$$\text{Eq 4-27} \quad \frac{11 \cdot Vz_{1,M-1} - 20 \cdot Vz_{2,M-1} + 6 \cdot Vz_{3,M-1} + 4 \cdot Vz_{4,M-1} - Vz_{5,M-1}}{12\Delta u^2} + \frac{-Vz_{2,M-3} + 4 \cdot Vz_{2,M-2} + 6 \cdot Vz_{2,M-1} - 20 \cdot Vz_{2,M} + 11 \cdot Vz_{2,M+1}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_2, v_M)$$

$$i = 3, 4, \dots, N-1$$

$$j = 2$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

Eq 4-28

$$\frac{-Vz_{i-2,2} + 16 \cdot Vz_{i-1,2} - 30 \cdot Vz_{i,2} + 16 \cdot Vz_{i+1,2} - Vz_{i+2,2}}{12\Delta u^2} + \frac{11 \cdot Vz_{i,1} - 20 \cdot Vz_{i,2} + 6 \cdot Vz_{i,3} + 4 \cdot Vz_{i,4} - Vz_{i,5}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_i, v_2)$$

$$i = 3, 4, \dots, N-1$$

$$j = 3, 4, \dots, M-1$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

Eq 4-29

$$\frac{-Vz_{i-2,j} + 16 \cdot Vz_{i-1,j} - 30 \cdot Vz_{i,j} + 16 \cdot Vz_{i+1,j} - Vz_{i+2,j}}{12\Delta u^2} + \frac{-Vz_{i,j-2} + 16 \cdot Vz_{i,j-1} - 30 \cdot Vz_{i,j} + 16 \cdot Vz_{i,j+1} - Vz_{i,j+2}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_i, v_j)$$

$$i = 3, 4, \dots, N-1$$

$$j = M$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

Eq 4-30

$$\frac{-Vz_{i-2,M} + 16 \cdot Vz_{i-1,M} - 30 \cdot Vz_{i,M} + 16 \cdot Vz_{i+1,M} - Vz_{i+2,M}}{12\Delta u^2} + \frac{-Vz_{i,M-3} + 4 \cdot Vz_{i,M-2} + 6 \cdot Vz_{i,M-1} - 20 \cdot Vz_{i,M} + 11 \cdot Vz_{i,M+1}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_i, v_M)$$

$$i = N$$

$$j = 2$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

Eq 4-31

$$\frac{-Vz_{N-3,2} + 4 \cdot Vz_{N-2,2} + 6 \cdot Vz_{N-1,2} - 20 \cdot Vz_{N,2} + 11 \cdot Vz_{N+1,2}}{12\Delta u^2} + \frac{11 \cdot Vz_{N,1} - 20 \cdot Vz_{N,2} + 6 \cdot Vz_{N,3} + 4 \cdot Vz_{N,4} - Vz_{N,5}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_N, v_2)$$

$$i = N$$

$$j = 3, 4, \dots, M-1$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

$$\text{Eq 4-32} \quad \frac{-V_{z_{N-3,j}} + 4 \cdot V_{z_{N-2,j}} + 6 \cdot V_{z_{N-1,j}} - 20 \cdot V_{z_{N,j}} + 11 \cdot V_{z_{N+1,j}}}{12\Delta u^2} + \frac{-V_{z_{N,j-2}} + 16 \cdot V_{z_{N,j-1}} - 30 \cdot V_{z_{N,j}} + 16 \cdot V_{z_{N,j+1}} - V_{z_{N,j+2}}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_N, v_j)$$

$$i = N$$

$$j = M$$

Da equação discretizada Eq 4-20,

$$\text{Eq 4-33} \quad \frac{-V_{z_{N-3,M}} + 4 \cdot V_{z_{N-2,M}} + 6 \cdot V_{z_{N-1,M}} - 20 \cdot V_{z_{N,M}} + 11 \cdot V_{z_{N+1,M}}}{12\Delta u^2} + \frac{-V_{z_{N,M-3}} + 4 \cdot V_{z_{N,M-2}} + 6 \cdot V_{z_{N,M-1}} - 20 \cdot V_{z_{N,M}} + 11 \cdot V_{z_{N,M+1}}}{12\Delta v^2} = K_1 \cdot F(u_N, v_M)$$

O sistema de equações gerados pode ser representado na forma matricial, $A \cdot x = B$, sendo:

A matriz de coeficientes de dimensão $[(N+1) \cdot (M+1)] \times [(N+1) \cdot (M+1)]$

x vetor de variáveis $V_{z_{i,j}}$ de dimensão $[(N+1) \cdot (M+1)]$

B vetor força de dimensão $[(N+1) \cdot (M+1)]$

O sistema gerado possui $[(N+1) \cdot (M+1)]$ equações, com um número igual de velocidades pontuais a serem determinadas, mais a constante K_1 . Para a determinação desta constante foi proposto um valor inicial igual a 1. Com este 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 de uma seção transversal semi-elíptica, A_T , é dada por:

$$\text{Eq 4-34} \quad A_T = \pi \frac{h(W/2)}{2}$$

Com a velocidade média e a área da seção transversal, calculou-se a vazão para este valor de K_1 .

$$\text{Eq 4-35} \quad Q_{\text{calc}}|_{K_1=1} = v_{\text{med}} \cdot A_T$$

Foi verificado, por resolução numérica, que quando $K_1 = 0$, $Q_{\text{calc}} = 0$. Além disso, foi observada uma relação linear entre K_1 e a vazão calculada. Isso pode ser verificado, uma vez que o sistema linear $A \cdot x = B$ pode ser escrito como $A \cdot x = K_1 \cdot B^*$, sendo $B = K_1 \cdot B^*$.

Desta forma o valor de K_1 para qualquer vazão pôde ser obtido pela relação:

$$\text{Eq 4-36} \quad K_1 = \frac{Q}{Q_{\text{calc}}|_{K_1=1}}$$

onde Q , vazão volumétrica, é um dado do problema.

4.3.2 Perfil de concentração da substância de interesse

A metodologia de solução do perfil de concentração para o caso elíptico é semelhante à utilizada para a determinação do mesmo perfil no caso cilíndrico. Os métodos numéricos utilizados são os mesmos. A malha tridimensional utilizada é análoga a apresentada na Figura 4-2, porém para cada valor de z a malha de discretização é dada pela Figura 4-3. As equações Eq 4-7, Eq 4-15 e Eq 4-16 são utilizadas para o cálculo de Δz , Δu e Δv respectivamente.

A diferença de solução está na equação de transferência de massa, que para este caso é dada pela equação Eq 3-75. Esta equação e suas respectivas condições de contorno determinam as equações discretizadas a serem utilizadas na solução do problema. Estas equações são apresentadas a seguir:

$$i = 1$$

$$j = 1, 2, \dots, M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-37} \quad C_A|_{1,j} = \frac{4 \cdot C_A|_{2,j} - C_A|_{3,j}}{3}$$

$$i = N+1$$

$$j = 1, 2, \dots, M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-38} \quad C_A|_{N+1,j} = \frac{4 \cdot C_A|_{N,j} - C_A|_{N-1,j}}{3}$$

$$i = 2, \dots, N$$

$$j = 1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-39} \quad C_A|_{i,1} = \frac{4 \cdot C_A|_{i,2} - C_A|_{i,3}}{3}$$

$$i = 2, \dots, N$$

$$j = M+1$$

Das condições de contorno,

$$\text{Eq 4-40} \quad C_A|_{i,M+1} = \frac{4 \cdot C_A|_{i,M} - C_A|_{i,M-1}}{3}$$

$$i = 2, \dots, N$$

$$j = 2, \dots, M$$

$$\text{Eq 4-41} \quad \frac{dC_A|_{i,j}}{dz} = \frac{\frac{K_G}{v_z|_{i,j}} \left(\frac{C_A|_{i+1,j} - 2 \cdot C_A|_{i,j} + C_A|_{i-1,j}}{\Delta u^2} + \frac{C_A|_{i,j+1} - 2 \cdot C_A|_{i,j} + C_A|_{i,j-1}}{\Delta v^2} \right)}{a^2 \{ \sinh^2[(i-1)\Delta u] + \sin^2[\pi + (i-1)\Delta v] \}}$$

A solução das equações Eq 4-37 a Eq 4-41 é obtida com o uso do método de Runge-Kutta de 4ª ordem, conforme feito no cálculo do perfil de concentração para o caso cilíndrico.

CAPÍTULO 5

5 Resultados e Discussão

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com a modelagem e a simulação do problema de dispersão de efluentes. Inicialmente, é realizado um estudo para assegurar independência da malha nas três direções espaciais. Em seguida, são comparados os perfis de velocidade para o escoamento na Geometria Cilíndrica, de solução analítica, com os perfis de velocidade para escoamento na Geometria Elíptica quando a semi-elipse que forma a base da calha aproxima-se de um semicírculo. Este estudo tem como objetivo assegurar a eficiência da solução numérica para o perfil de velocidade.

Em seguida, são estudadas as influências de alguns parâmetros do modelo na dispersão de uma dada substância do efluente num trecho de rio. Terminando o capítulo, é apresentado um estudo comparativo da dispersão da substância quando o efluente é lançado na região lateral do rio, na superfície da sua região central ou no fundo da mesma região.

5.1 *Estudo de independência da malha*

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 de escoamento, z .

Para garantir a independência da malha na direção z , são comparados perfis de concentração para malhas com número de elementos distintos.

Os resultados apresentados neste trabalho foram obtidos através do estudo de um exemplo de dispersão de uma substância inerte presente num efluente sendo despejado na lateral do rio. Este é apenas um exemplo ilustrativo, porém o modelo está apto a resolver problemas reais de interesse. Os dados que caracterizam este exemplo são mostrados na tabela a seguir:

Tabela 5-1 – Dados de entrada utilizados no caso em estudo.

h [m]	3,00
W [m]	10,00
L [m]	1.000,00
Q_r [m ³ /s]	10,00
Q_e [m ³ /s]	0,10
K_G [m ² /s]	0,02
C_{A0} (Rio) [mg/l]	0,50
C_{Ae} (Efluente) [mg/l]	5,00

Segundo os valores de largura, comprimento e profundidade mostrados na Tabela 5-1, o rio é representado pela Geometria Elíptica. Para esta geometria, o sistema de coordenadas utilizado é o cilíndrico elíptico.

A seguir, são apresentados os perfis de velocidade obtidos para o caso em estudo com os dados da Tabela 5-1, e com malhas de dimensões, nas direções u , v e z , dadas, respectivamente, por:

- $11 \times 31 \times 200.001$
- $15 \times 41 \times 200.001$
- $21 \times 51 \times 200.001$

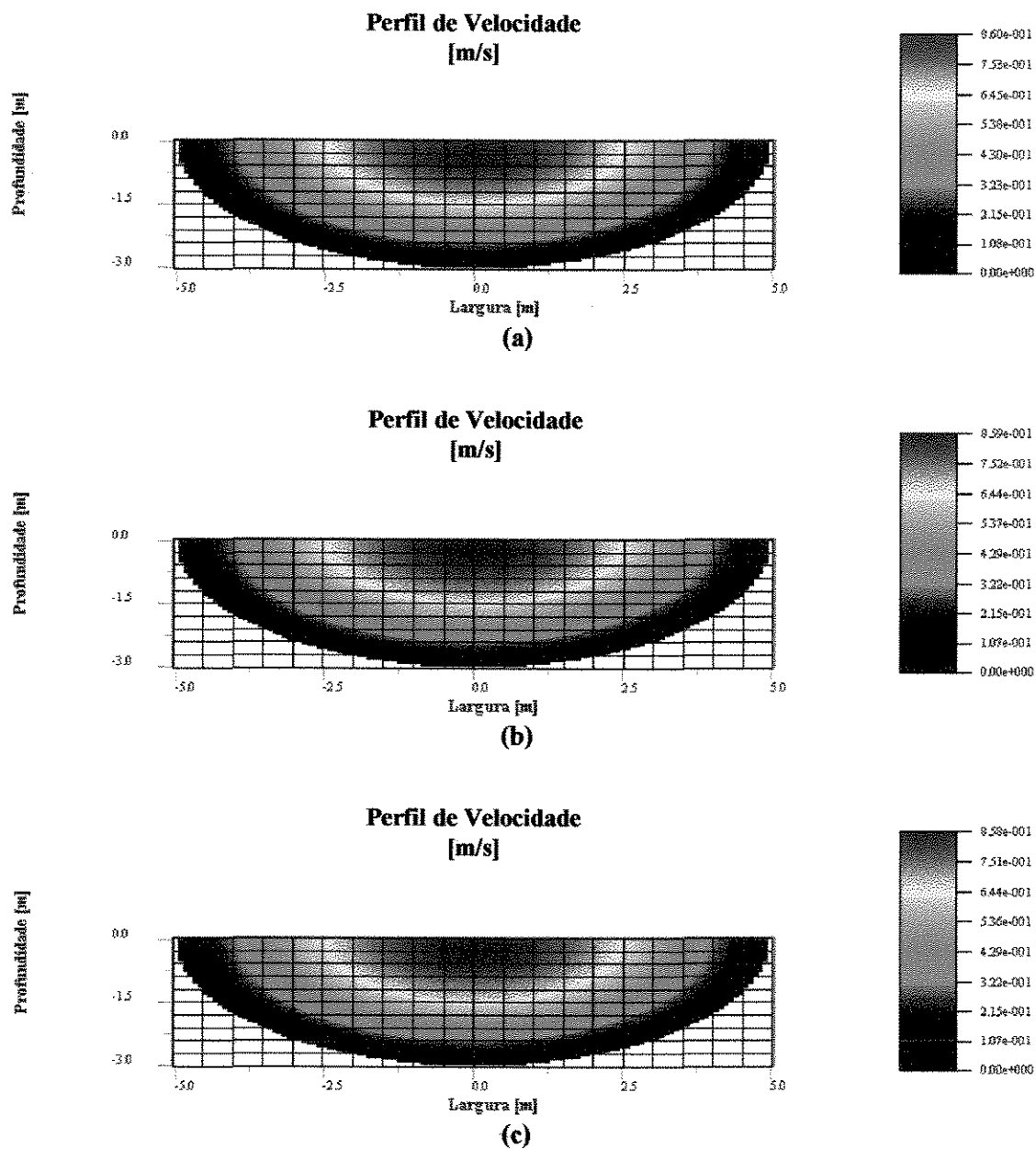


Figura 5-1 – Perfis de velocidade para diferentes malhas: (a) 11 x 31; (b) 15 x 41; (c) 21 x 51.

A Figura 5-1 mostra perfis de velocidade muito próximos uns dos outros para diferentes malhas de discretização. Estes resultados mostram que o cálculo do perfil de velocidade é independente do tamanho da malha nas direções transversais ao escoamento.

Com relação à direção axial, não há necessidade de fazer o estudo de independência, uma vez que, como já foi dito, a velocidade não varia com z .

Nos gráficos da Figura 5-1, pode ser notado através de sua legenda, pequenas diferenças, da ordem de 0,001 m/s, nos valores de velocidade máxima dos três perfis. Esta pequena diferença era esperada, uma vez que o cálculo do perfil de velocidade envolve, entre outras coisas, a determinação da velocidade média do escoamento a partir de seu perfil tridimensional. Este cálculo é feito numericamente e, por isso, uma malha mais refinada gera perfis ligeiramente diferentes dos obtidos para malhas mais grosseiras. Porém este erro é insignificante.

Para uma melhor visualização da proximidade dos resultados, são mostrados nas figuras a seguir, os perfis de velocidade, na superfície e na linha de centro do rio, obtidos para as três diferentes malhas.

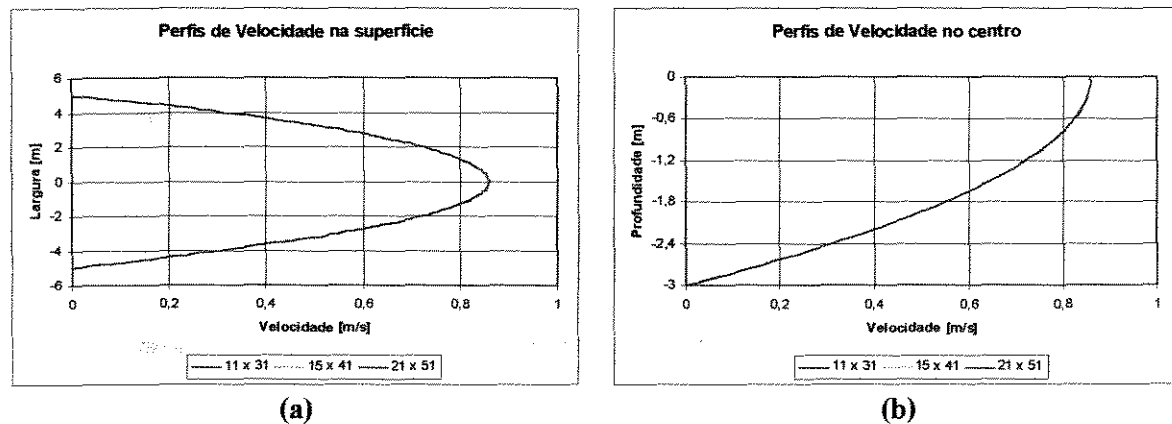


Figura 5-2 – Perfis de veloc. na superfície (a), onde $y = 0$; e na linha de centro do rio (b), onde $x = 0$.

Os gráficos da Figura 5-2 mostram mais claramente o que já havia sido afirmado. De fato, os perfis de velocidade para as diferentes malhas são idênticos para propósitos práticos, assegurando assim a independência entre o modelo utilizado para cálculo do perfil de velocidade e o tamanho da malha.

A verificação de independência da malha na direção do escoamento foi realizada comparando-se perfis de concentração obtidos para malhas com números de elementos distintos. Os dados de vazão e concentração inicial da substância no rio e no efluente, bem como, as dimensões do trecho de rio representado, e o coeficiente global de dispersão da substância são os mesmos dos mostrados na Tabela 5-1. A seguir são apresentados os perfis de concentração ao longo do trecho de rio, para diferentes pontos de coordenadas (x,y) internos à malha, obtidos com estes dados de entrada, para três malhas de número de elementos distintos:

- $11 \times 41 \times 150.001$
- $15 \times 51 \times 150.001$
- $15 \times 51 \times 300.001$

Os pontos para os quais foram construídos os perfis de concentração são representados na figura a seguir:

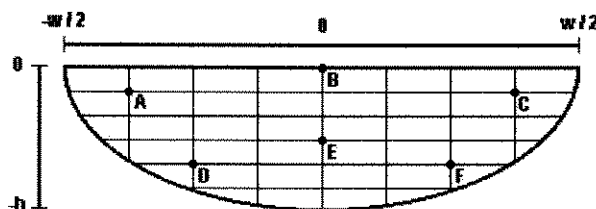


Figura 5-3 – Figura representativa de uma seção transversal do trecho de rio em estudo, onde os pontos A – F representam pontos de interesse.

Os perfis de concentração nos pontos A – F ao longo do trecho de rio de 1 km são apresentados a seguir:

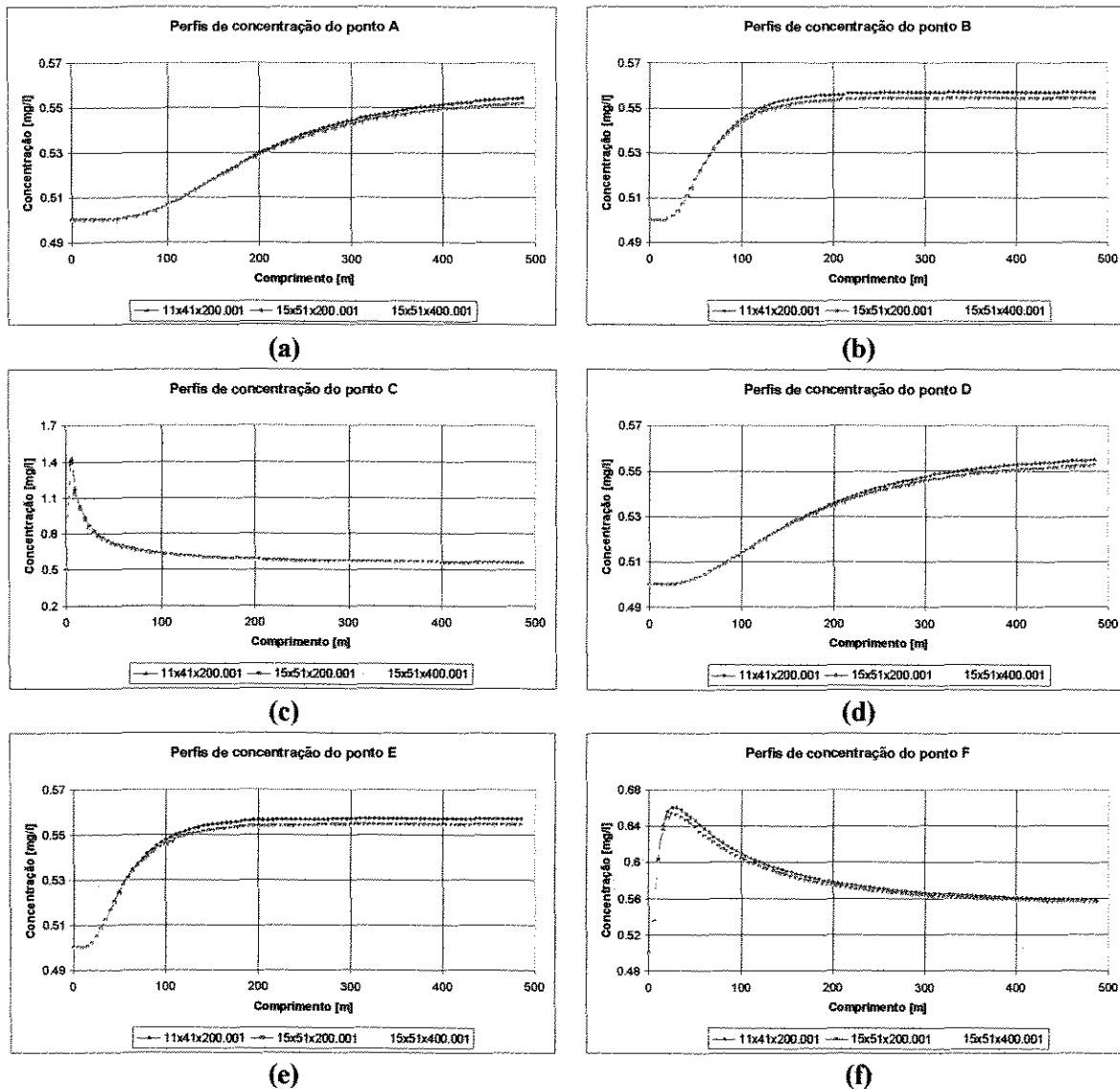


Figura 5-4 – Perfis de concentração ao longo do rio para os pontos A – F representados na Figura 5-3.

Os resultados apresentados na Figura 5-4 mostram que quando as malhas diferem no número de elementos na direção do escoamento, z , os resultados obtidos são idênticos. Os gráficos para estes casos são representados na figura acima com as cores vermelha e amarela.

Foi observado, durante a execução do programa desenvolvido para a solução do modelo, que a convergência dos resultados era obtida a partir de um determinado número

de elementos da malha na direção z. Esse número de elementos permite a utilização do valor máximo do passo de integração para o qual a convergência dos resultados ainda é garantida pelo método de Runge-Kutta utilizado. Foi observado ainda que este valor é dependente também do coeficiente global de dispersão e da vazão total do sistema.

Quando os resultados obtidos pelas diferentes malhas nas direções transversais são confrontados, os perfis de concentração não apresentam igualdade absoluta. Apesar da diferença ser pouco significativa, a independência de malha não é assegurada neste caso. Uma malha mais refinada asseguraria resultados mais precisos. Entretanto, para propósitos práticos, esse refinamento exigiria um custo computacional muito grande, para um pequeno ganho de precisão.

Um outro estudo que mostra a necessidade de uma malha mais refinada na direção transversal ao escoamento, é o balanço global de massa. A partir dos dados da Tabela 5-1, pode-se determinar o fluxo mássico entrando no sistema.

$$\dot{m} = 5,500 \text{ g/s}$$

Quando calculados os fluxos mássicos ao final do trecho de rio os seguintes valores são obtidos:

$$\dot{m} = 5,626 \text{ g/s} \quad \text{para a malha } 11 \times 41 \times 200.001$$

$$\dot{m} = 5,599 \text{ g/s} \quad \text{paras as malhas } 15 \times 51 \times 200.001 \text{ e } 15 \times 51 \times 400.001$$

Como pode ser visto, o erro é minimizado quando a malha é refinada. O principal motivo deste desvio, entretanto, é a utilização de um método numérico não conservativo na seção transversal.

5.2 Comparação dos modelos elíptico e cilíndrico

Sempre que possível, qualquer modelo numérico deve ser comparado com resultados analíticos. Neste trabalho aqui desenvolvido isto é possível. Quando a geometria do rio é modelada em coordenadas cilíndricas, através de uma calha cilíndrica de seção transversal semicircular, o perfil de velocidade pode ser obtido analiticamente, conforme dado pela Eq – 4.4. Desta maneira, uma validação do modelo numérico elíptico, para o caso onde os centros da elipse aproximam-se, é possível.

Os dados de entrada comuns aos três casos em estudo são os mesmos dos apresentados na Tabela 5-1, com exceção da profundidade do leito, h . Esta variável determinará se o modelo a ser utilizado é analítico ou numérico, sendo que:

- Se $h < W/2$ ou $h > W/2$, tem-se uma semi-elipse como base da calha. Neste caso o modelo numérico é utilizado.
- Se $h = W/2$, tem-se um semicírculo como base da calha. Neste caso o modelo analítico é utilizado.

Os valores de h utilizados em cada caso são apresentados a seguir:

Caso 1: $W > 2h$: Neste caso, $h = 4,999 \text{ m}$ (numérico e elíptico)

Caso 2: $W = 2h$: Neste caso, $h = 5,0 \text{ m}$ (analítico)

Caso 3: $W < 2h$: Neste caso, $h = 5,001 \text{ m}$ (numérico e elíptico)

Os perfis de velocidade para os três casos são mostrados a seguir

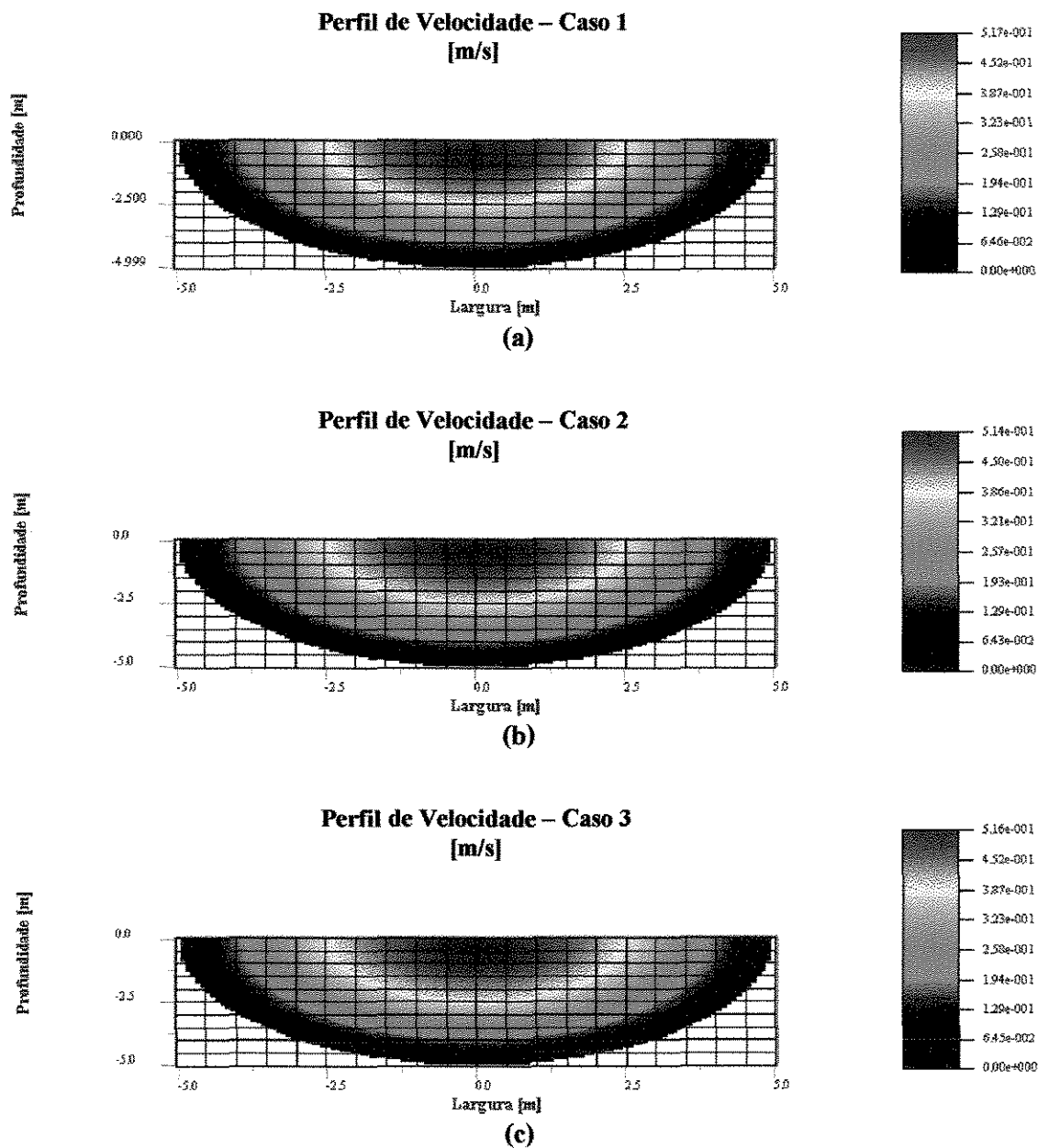


Figura 5-5 - Perfis de velocidade para os três casos: (a) $W > 2h$; (b) $W = 2h$; (c) $W < 2h$.

Como pode ser visto na Figura 5-5, os perfis de velocidade são praticamente iguais quando os modelos se aproximam. Para uma melhor visualização da proximidade dos resultados, são mostrados nas figuras a seguir, os perfis de velocidade, na superfície e na linha de centro do rio, obtidos para três casos.

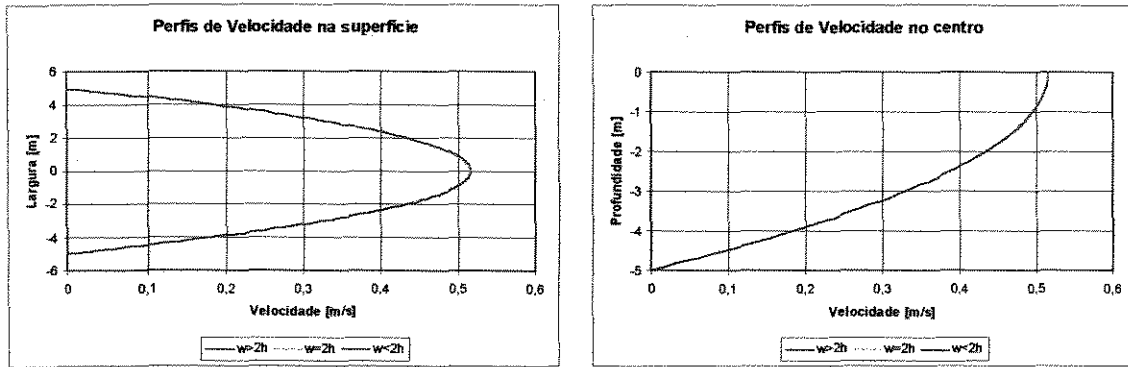


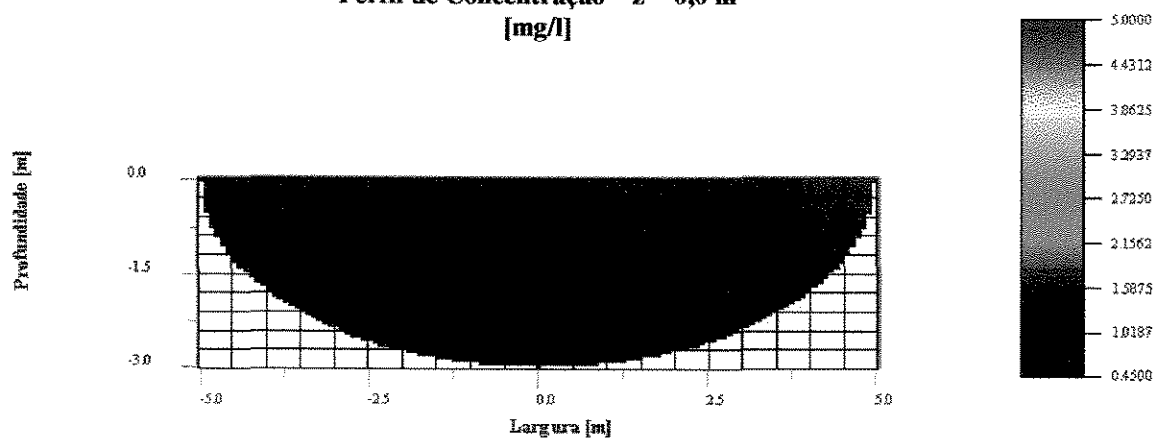
Figura 5-6 - Perfis de velocidade na superfície (a), onde $y = 0$; e na linha de centro do rio (b), onde $x = 0$, para modelos próximos.

Os gráficos mostrados na Figura 5-5 e na Figura 5-6, validam o modelo numérico neste caso limite, uma vez que os resultados numéricos aproximaram-se dos resultados analíticos quando os centros da elipse tendem a se sobrepor. A pequena diferença, observada nos gráficos da Figura 5-6, é decorrente, mais uma vez, de erros de precisão no cálculo numérico da velocidade média do escoamento, que, como já foi mencionado, é uma das etapas necessárias para a determinação do perfil de velocidade.

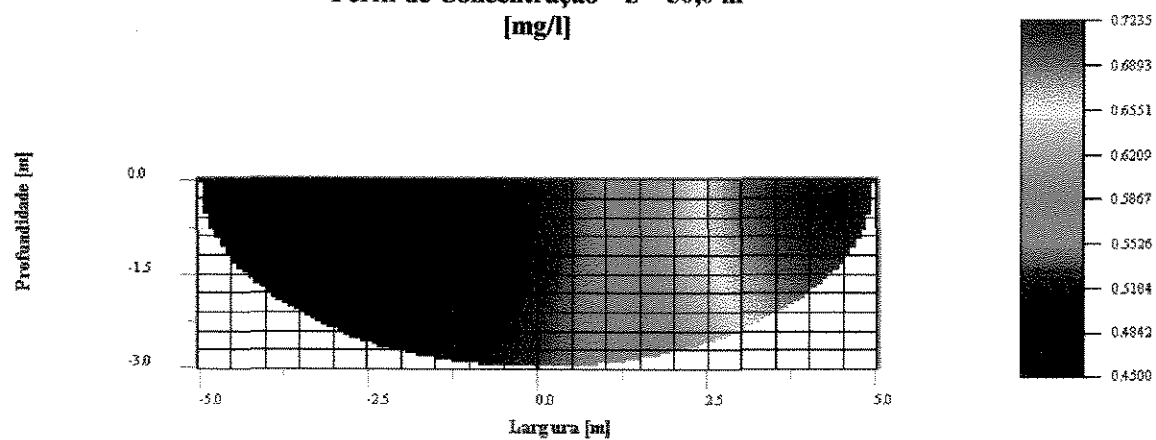
5.3 Variação de parâmetros

Neste tópico são apresentados resultados que avaliam a relação entre dispersão da substância num trecho de rio e algumas variáveis do modelo. Antes da comparação dos modelos, entretanto, são apresentados os perfis de concentração obtidos para o caso em estudo, caracterizado pelos dados da Tabela 5-1.

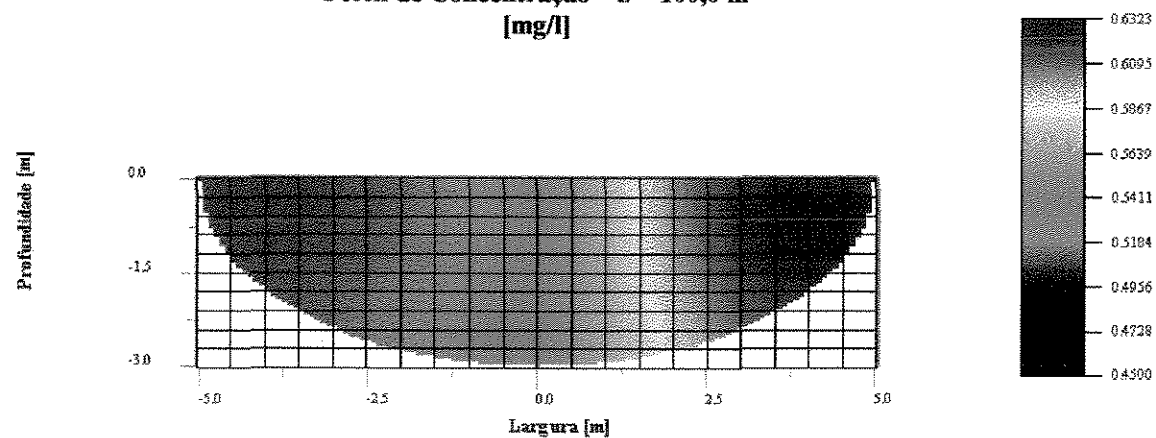
Perfil de Concentração – $z = 0,0$ m
[mg/l]



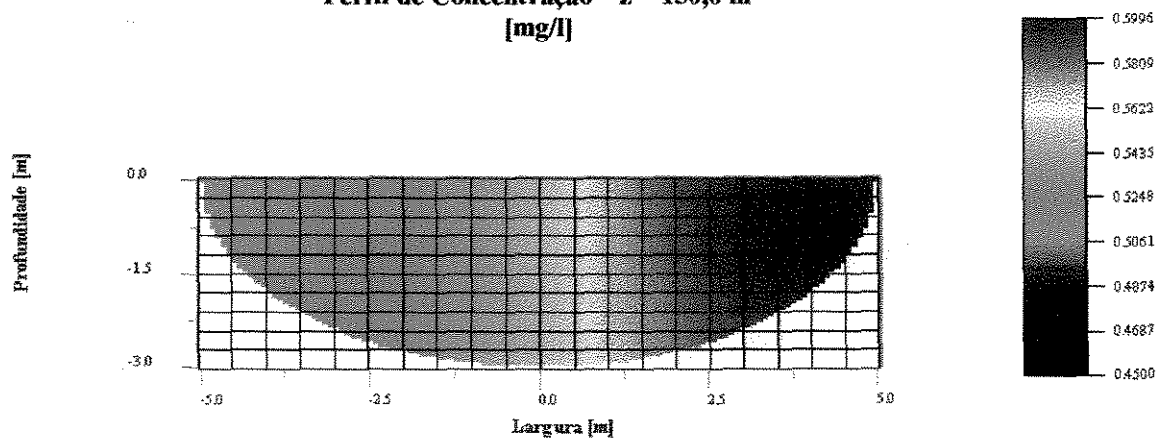
Perfil de Concentração – $z = 50,0$ m
[mg/l]



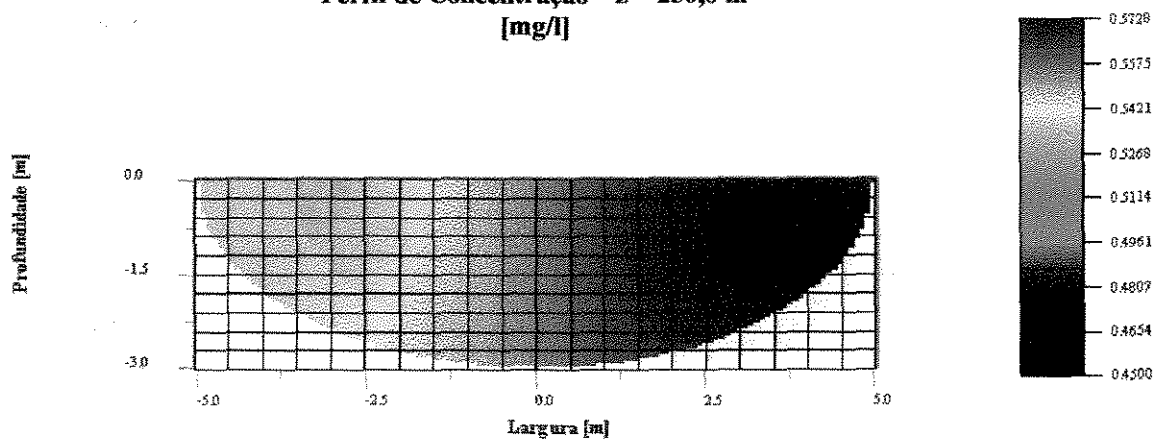
Perfil de Concentração – $z = 100,0$ m
[mg/l]



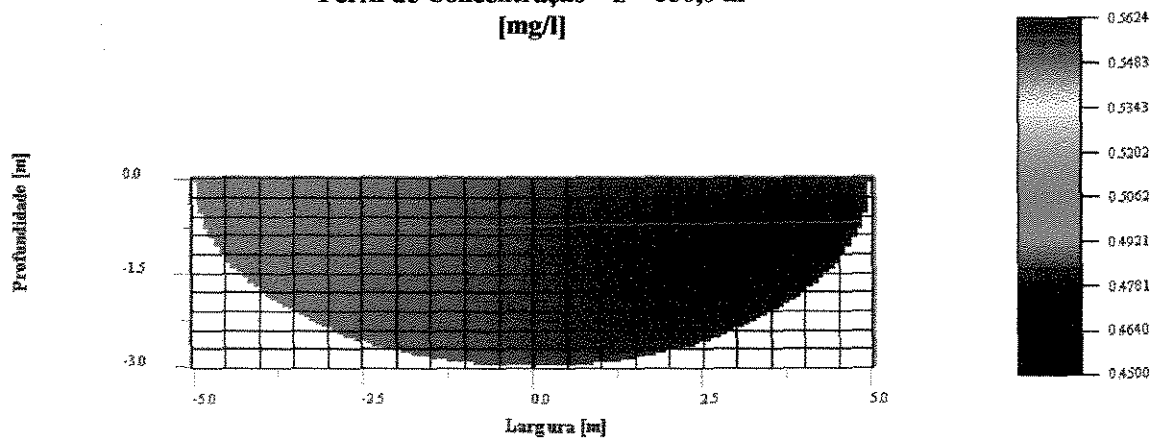
Perfil de Concentração – $z = 150,0$ m
[mg/l]



Perfil de Concentração – $z = 250,0$ m
[mg/l]



Perfil de Concentração – $z = 350,0$ m
[mg/l]



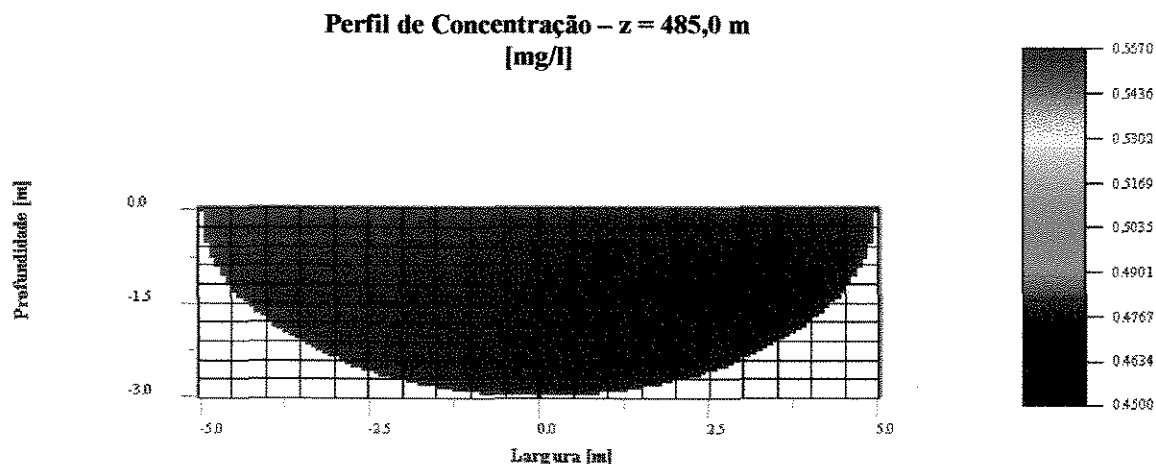


Figura 5-7 - Perfis de concentração [mg/l] de uma substância de interesse ao longo do trecho de rio do caso em estudo.

Os perfis de concentração em seções transversais ao longo do trecho de rio mostram o efluente, que foi lançado na margem do rio, sendo disperso. O último dos perfis indica a distância do ponto de lançamento onde a concentração de diluição ($0,554 \text{ mg/l} \pm 0,5\%$) foi atingida em qualquer ponto da seção. Esta distância será a partir de agora chamada de distância de diluição, L_D .

A figura a seguir ilustra o efluente sendo disperso ao longo da superfície do rio. É importante salientar que no gráfico da figura abaixo a concentração da substância no rio varia de 0,5 a 5 mg/l. A escolha da faixa apresentada na legenda do gráfico é justificada por uma melhor visualização dos resultados. Valores superiores ao apresentado na legenda são mostrados na mesma cor deste.

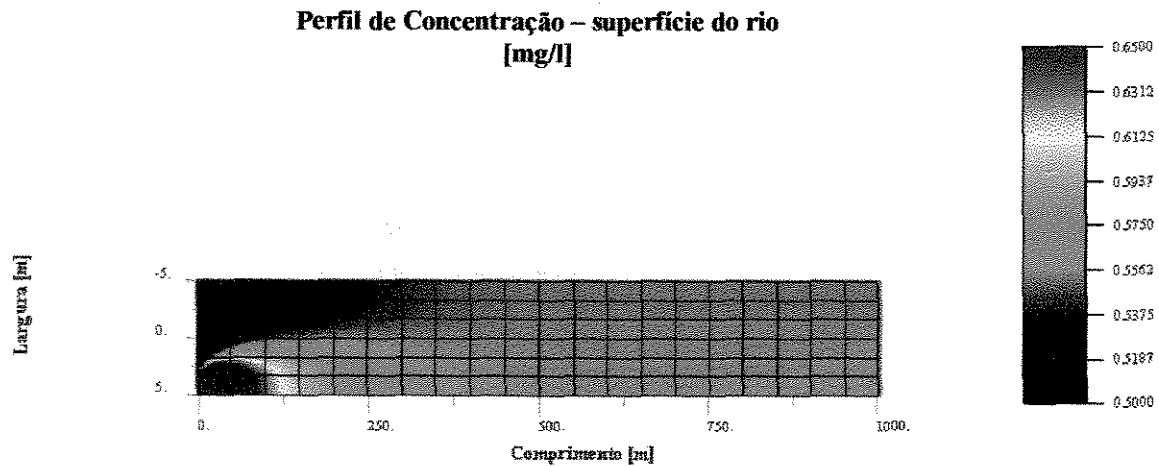


Figura 5-8 - Perfis de concentração [mg/l] na superfície do trecho de rio do caso em estudo.

Como mostravam os gráficos da Figura 5-7, o gráfico acima indica que, a partir da região de 500 metros, não há mais variação significativa na concentração da substância de interesse no rio, caracterizando a dispersão total do efluente.

A partir deste caso de estudo, a influência das variáveis C_{Ae} , C_{A0} , Q_e , Q_r e K_G no modelo foi avaliada comparando-se os resultados do caso de estudo com os obtidos quando uma destas variáveis era alterada em $\pm 50\%$ e as demais eram mantidas fixas.

Concentração de uma dada substância no efluente

A seguir são apresentados perfis de concentração ao longo dos pontos A a F mostrados na Figura 5-3, quando a concentração inicial da substância no efluente é alterada em $\pm 50\%$.

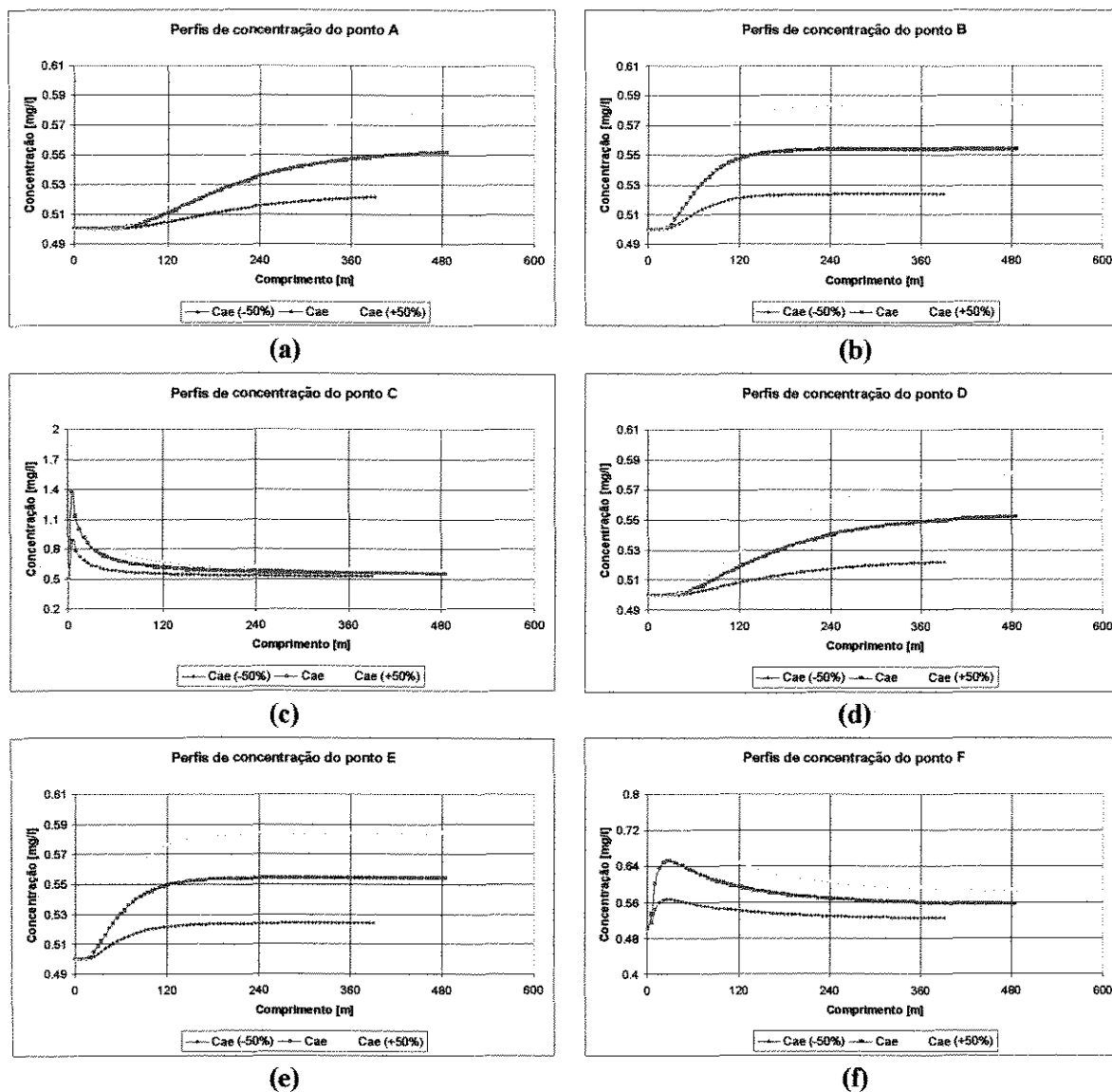


Figura 5-9 – Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores de C_{Ae} , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.

Os gráficos da figura acima mostram, como era esperado, que quanto maior a concentração inicial da substância de interesse no efluente, maior a distância necessária para a sua dispersão. Isso porque a carga de poluente entrando no rio torna-se maior. A tabela a seguir relaciona as concentrações da substância no efluente utilizadas com suas respectivas distâncias de diluição:

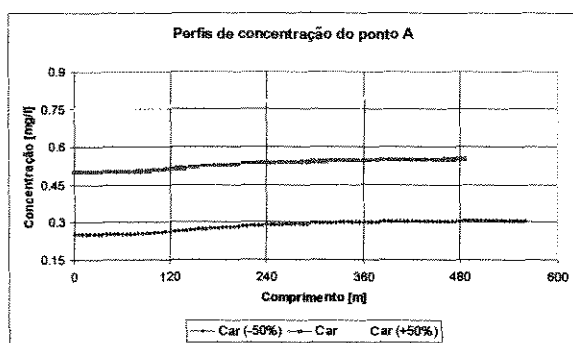
Tabela 5-2 – Distância de diluição para cada concentração inicial no efluente em estudo.

C_{Ae} [mg/l]	2,5	5,0	7,5
L_D [m]	390,0	485,0	530,0

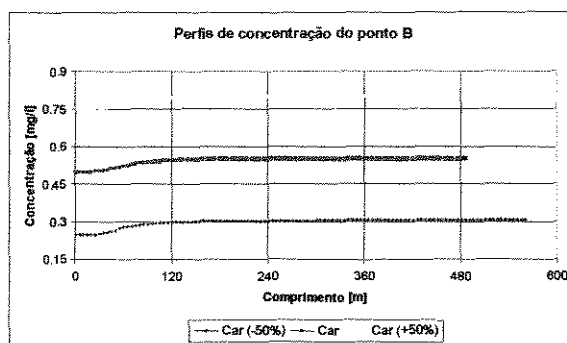
Os gráficos da Figura 5-9 mostram ainda as diferenças entre os perfis de concentração para os pontos mais próximos (C e F) e os mais distantes (A e D) do ponto de emissão do efluente. No ponto A, por exemplo o efeito da pluma de poluente só é percebido cerca de 60 metros do ponto de emissão. Já para no ponto C, a concentração é imediatamente aumentada, no momento em que a pluma de poluente é alcançada, reduzindo posteriormente à medida que a pluma é dispersa.

Concentração de uma dada substância no rio

A seguir são apresentados os perfis de concentração ao longo dos pontos A a F mostrados na Figura 5-3, quando o efluente é lançado em rios com diferentes concentrações da substância de interesse. Para isso a concentração do poluente de interesse no rio foi alterada em $\pm 50\%$.



(a)



(b)

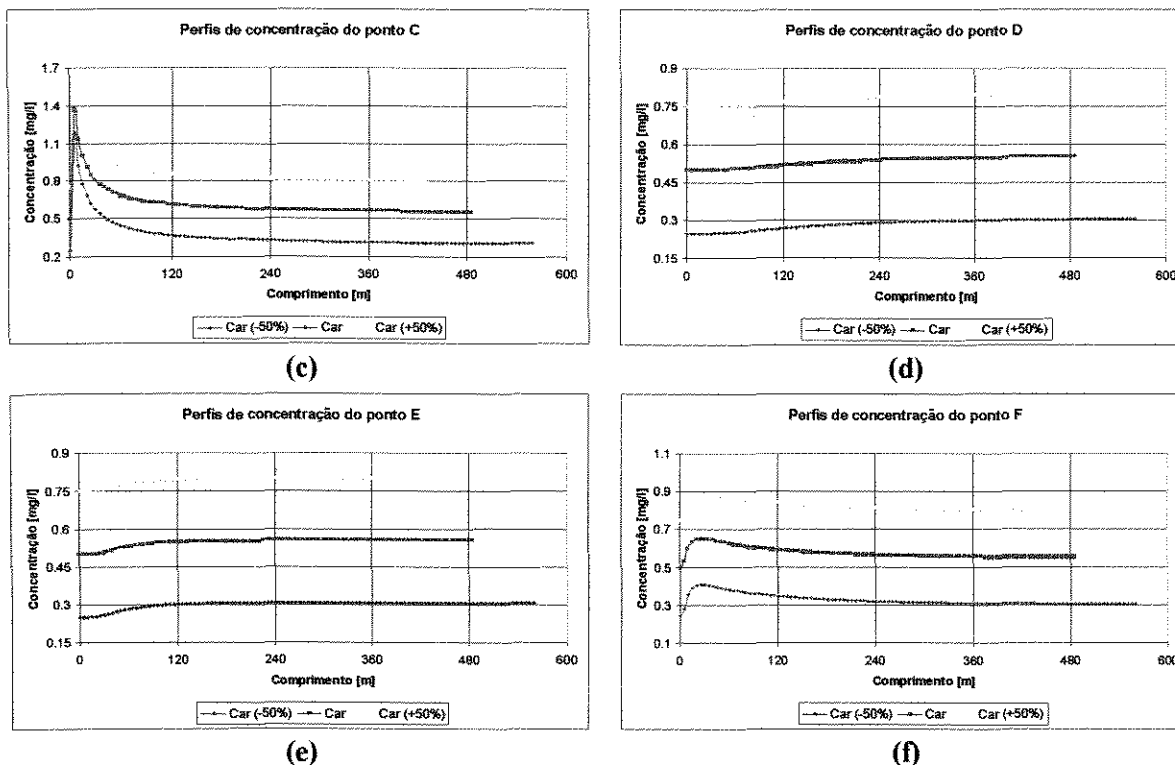


Figura 5-10 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores de C_{A0} , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.

Os resultados apresentados na Figura 5-10 mostram que a relação entre a concentração da substância no rio e a dispersão do efluente é contrária a observada para a concentração da substância no efluente, ou seja, quanto maior a concentração no rio mais rápida a dispersão da pluma de poluente. De fato isto era esperado, uma vez que uma maior concentração no rio representa uma concentração da substância no efluente relativamente menor.

A tabela a seguir apresenta a distância necessária para a diluição do sistema em cada caso:

Tabela 5-3 - Distância de diluição para cada concentração de poluente no rio em estudo.

C_{A0} [mg/l]	0,25	0,50	0,75
L_D [m]	560,0	485,0	430,0

Vazão do efluente

O estudo da influência da vazão do efluente na dispersão do mesmo é apresentado a seguir:

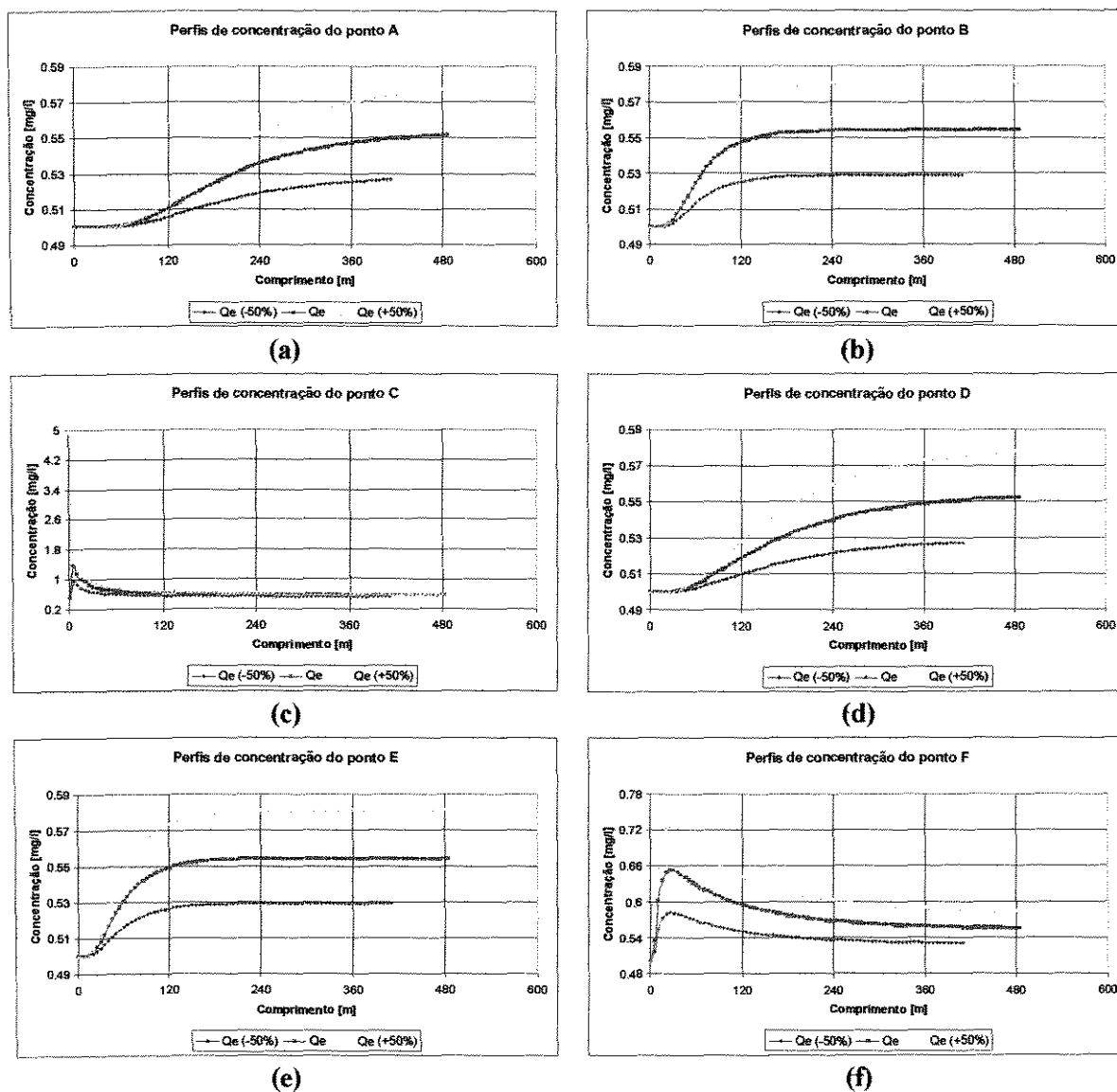


Figura 5-11 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores da vazão do efluente, Q_e , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.

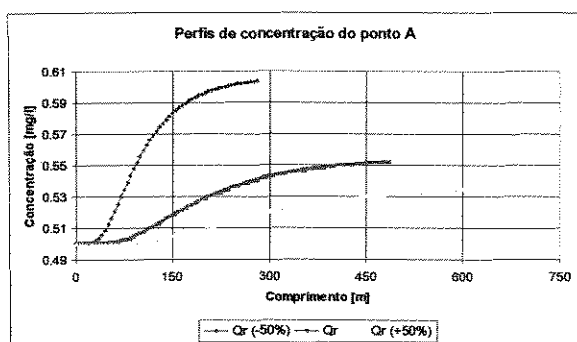
Como a vazão do efluente é muito baixa ($0,05 - 0,15 \text{ m}^3/\text{s}$) em relação à vazão do rio ($10 \text{ m}^3/\text{s}$), sua influência na dispersão da pluma do poluente está ligada apenas à carga de poluente presente no efluente e não à vazão total do sistema. Desta forma, os gráficos apresentados na Figura 5-11 são muito parecidos com os mostrados na Figura 5-9. A relação entre a vazão do efluente e a dispersão da pluma é, então, a mesma que a relação entre a concentração no efluente e a dispersão da pluma. A distância de diluição para cada vazão do efluente é mostrada na tabela abaixo:

Tabela 5-4 - Distância de diluição para cada vazão do efluente em estudo.

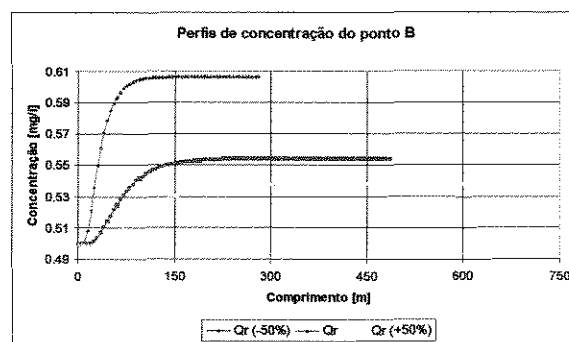
$Q_e \text{ [m}^3/\text{s]}$	0,05	0,10	0,15
$L_D \text{ [m]}$	410,0	485,0	530,0

Vazão do rio

O estudo da influência da vazão do rio na dispersão do efluente é apresentado a seguir:



(a)



(b)

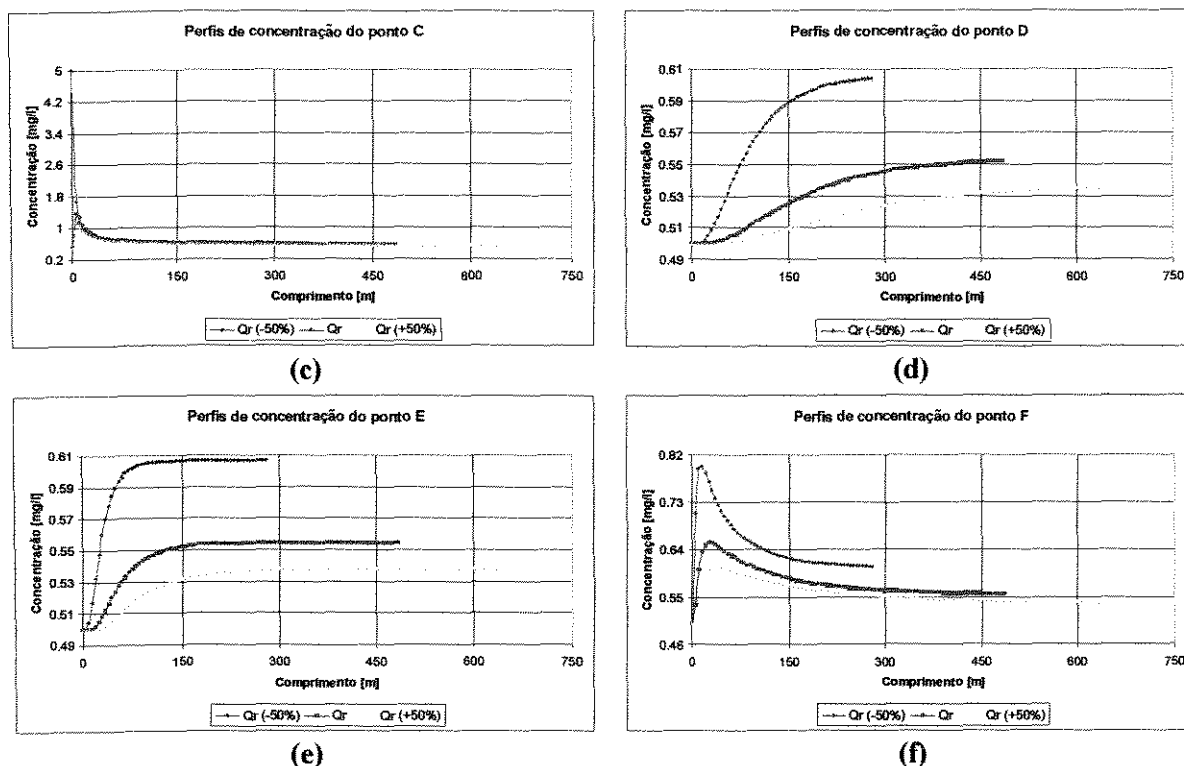


Figura 5-12 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores da vazão do rio, Q_r , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.

Os gráficos da Figura 5-12 mostram que, quanto maior a vazão do rio, maior é a distância necessária para a dispersão do efluente. Esta relação era esperada, uma vez que uma maior vazão do rio confere ao escoamento um caráter mais convectivo, caracterizando uma forte dispersão longitudinal. Como o escoamento no modelo utilizado é considerado unidirecional e laminar, a dispersão nas direções transversais ao fluxo ocorre por meio de difusão que, para este caso, é menor se comparada à convecção. Já num escoamento de menor vazão, a dispersão por convecção é menor, favorecendo a difusão nas outras direções. A distância de diluição para cada vazão do efluente é mostrada na tabela abaixo:

Tabela 5-5 - Distância de diluição para cada vazão do rio em estudo.

Q_r [m^3/s]	5,0	10,0	15,0
L_D [m]	280,0	485,0	660,0

Apesar destes resultados, a dispersão é mais bem analisada, neste caso, através de um estudo de tempo de residência do efluente no rio. Para isso, considera-se a velocidade média do escoamento em cada caso e, a partir destes valores, calcula-se o tempo que o efluente leva para ser disperso. Os resultados obtidos são mostrados na tabela a seguir:

Tabela 5-6 – Velocidade média de escoamento e tempo de dispersão para cada vazão do rio em estudo.

Q_r [m^3/s]	5,0	10,0	15,0
v_{med} [m/s]	0,212	0,424	0,636
T_r [s]	1319,4	1142,8	1036,7

Como pode ser notado, o escoamento de maior velocidade e, por isso, mais convectivo, é o que proporciona a dispersão do efluente mais rapidamente.

Coeficiente global de dispersão

Neste modelo, o coeficiente global de dispersão é considerado um parâmetro de ajuste. Ele é, dentre as variáveis em estudo, o único parâmetro que pode ser ajustado de acordo com o problema. Nos resultados a seguir é mostrada a relação entre o seu valor e a dispersão da pluma de efluente.

Inicialmente são comparados perfis de concentração para seções do rio distantes de 50 metros do ponto de emissão do efluente, quando três valores do coeficiente são utilizados.

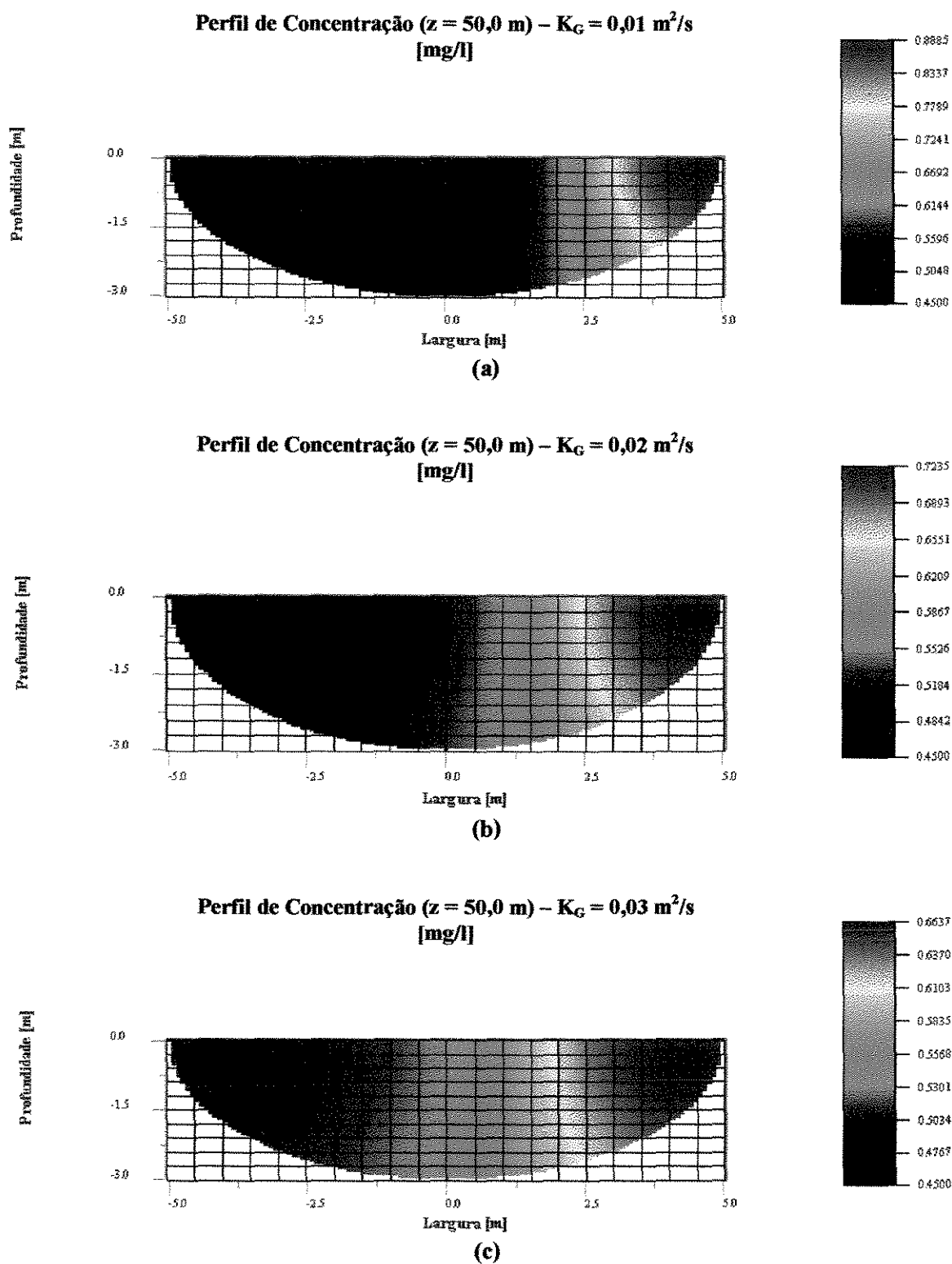
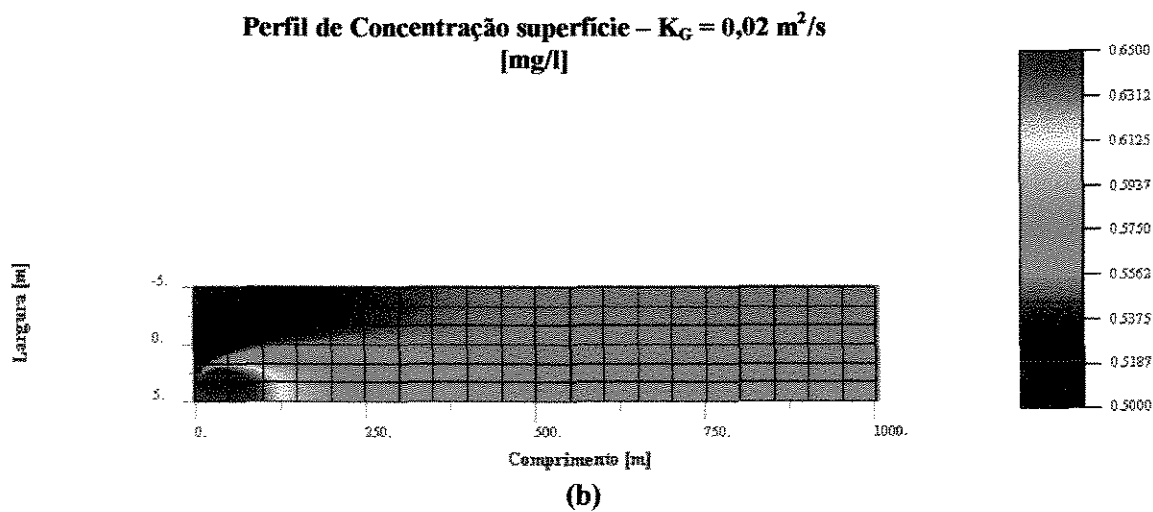
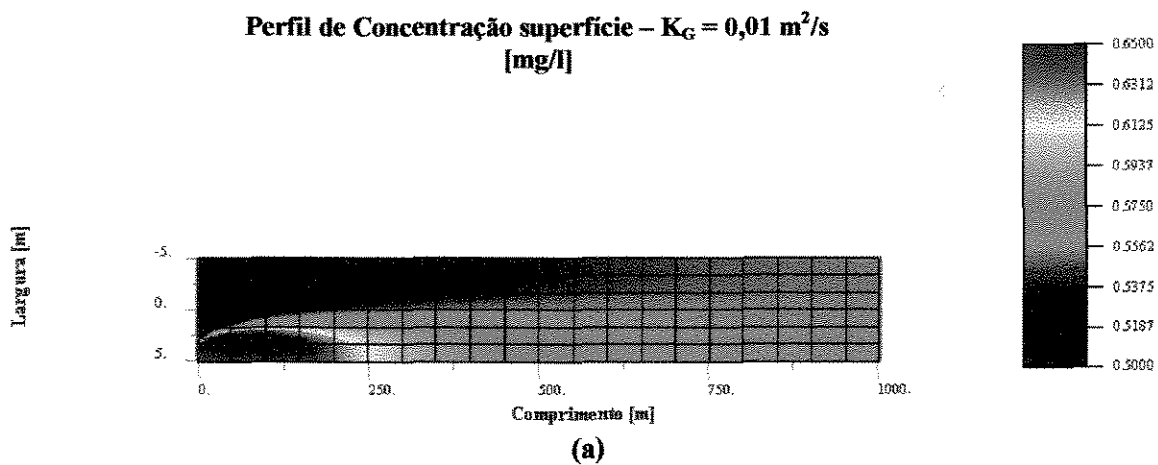


Figura 5-13 – Perfis de concentração [mg/l] na seção transversal de 50 metros para diferentes valores do coeficiente global de dispersão, K_G :0,01 (a); 0,02(b) e 0,03(c).

A maior dispersão do efluente quando o coeficiente global de dispersão é de $0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ pode também ser observada nos gráficos a seguir de perfis de concentração na superfície do rio.



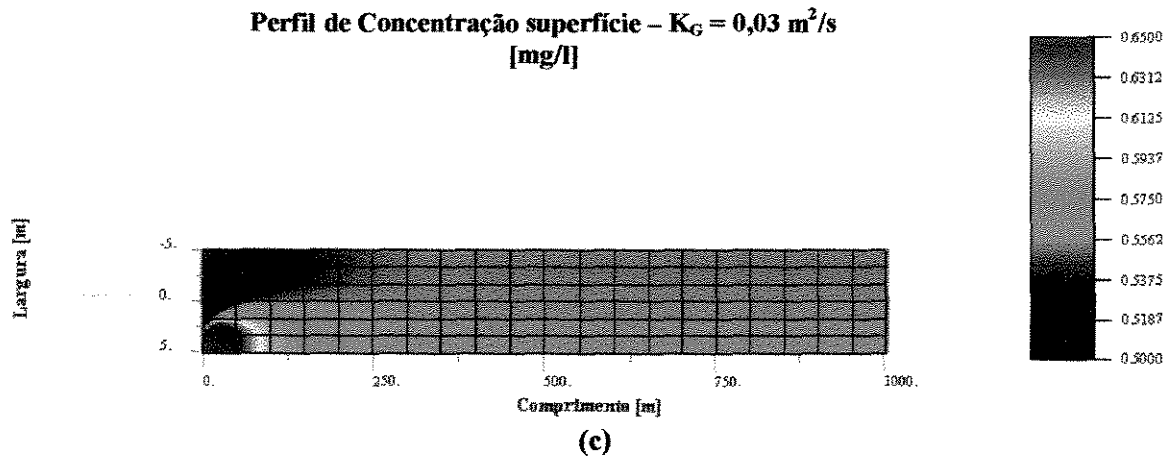
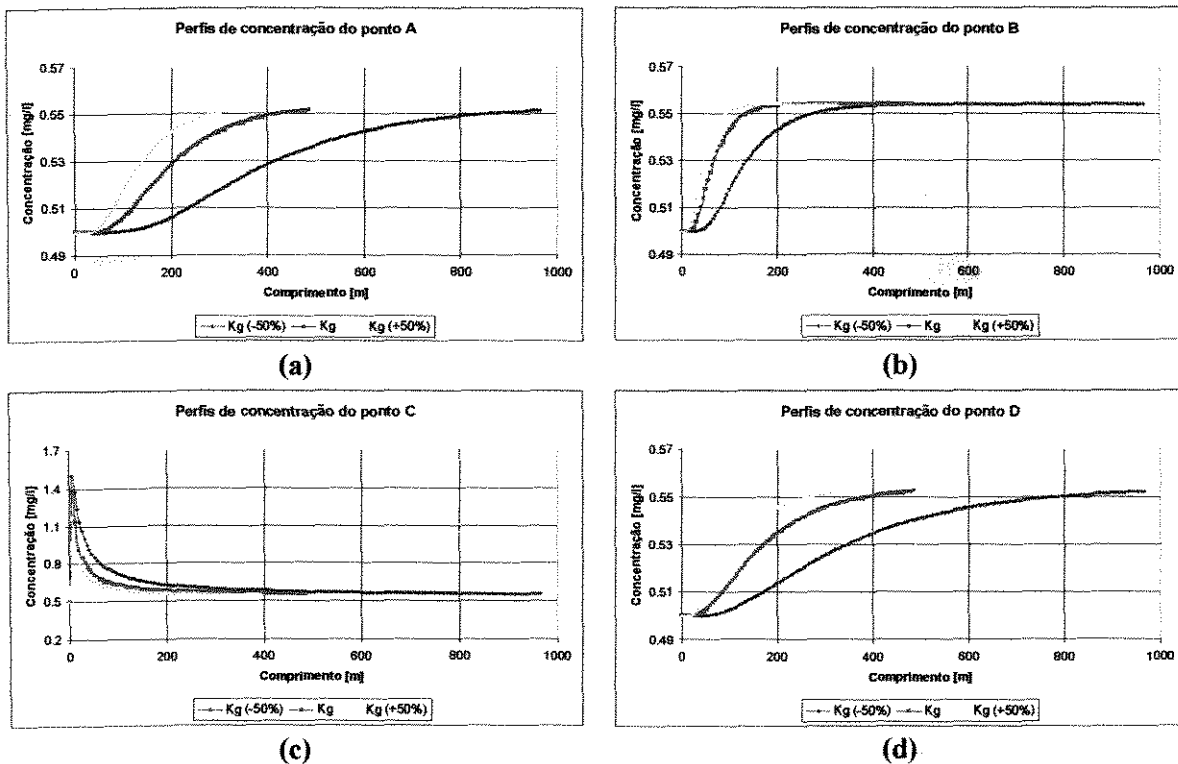


Figura 5-14 - Perfis de concentração [mg/l] na superfície do trecho de rio para diferentes valores do coeficiente global de dispersão, K_G : 0,01 (a); 0,02 (b) e 0,03 (c).

A relação entre o coeficiente global de dispersão e a distância necessária para a total diluição do mesmo pode ser melhor visualizada nos perfis obtidos para os pontos A – F representados na Figura 5-3.



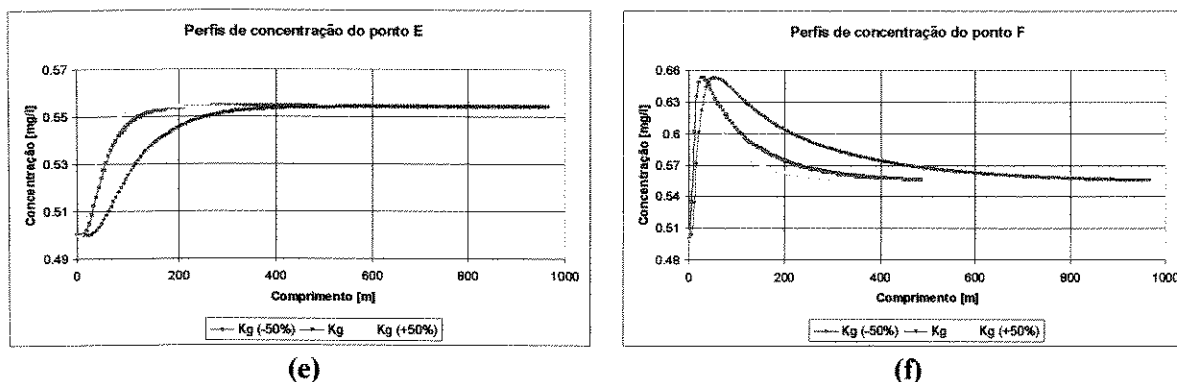


Figura 5-15 - Comparação dos perfis de concentração ao longo do rio para diferentes valores do coeficiente global de dispersão, K_G , nos pontos A – F representados na Figura 5-3.

Os resultados mostram que, a partir de dados de campo, seria possível determinar o coeficiente global de dispersão que melhor representasse um determinado problema, de modo que, para o caso específico, este coeficiente seria utilizado para prever outros lançamentos do mesmo efluente.

Um estudo mais completo do modelo não utilizaria o valor de K_G como sendo um parâmetro de ajuste, visto que o mesmo pode ser obtido experimentalmente.

Para os coeficientes estudados, as distâncias de diluição são apresentadas na tabela a seguir:

Tabela 5-7 - Distância de diluição para cada coeficiente global de dispersão em estudo.

K_G [m^2/s]	0,01	0,02	0,03
L_D [m]	965,0	485,0	325,0

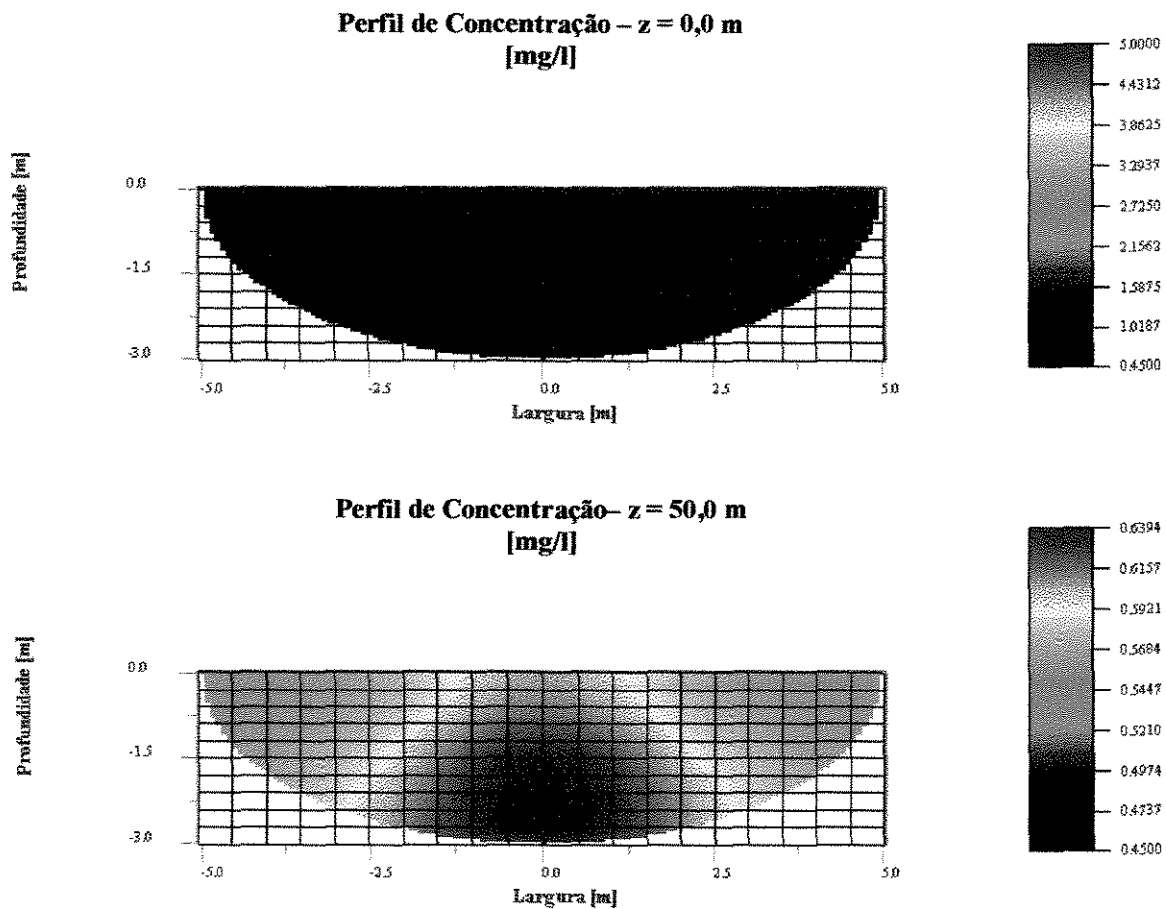
5.4 Estudo da influência do ponto de descarga na dispersão do efluente.

Outra variável importante na eficiência de dispersão do efluente no rio é o ponto de descarga destas substâncias no leito. Para efeitos acadêmicos, e não levando em consideração a possibilidade real de aplicação dos resultados, serão comparados os resultados da dispersão de uma dada substância presente no efluente quando este é lançado

no rio em três pontos distintos: na lateral, na superfície ao centro e no fundo do rio, também ao centro.

Os resultados obtidos para o lançamento na lateral apresentados na Figura 5-7 serão utilizados. Os dados que caracterizam o escoamento, em ambos os resultados mostrados a seguir, são os mesmos dos apresentados na Tabela 5-1.

Para o efluente sendo lançado no fundo do rio, os perfis de concentração obtidos, são apresentados na Figura 5-16:



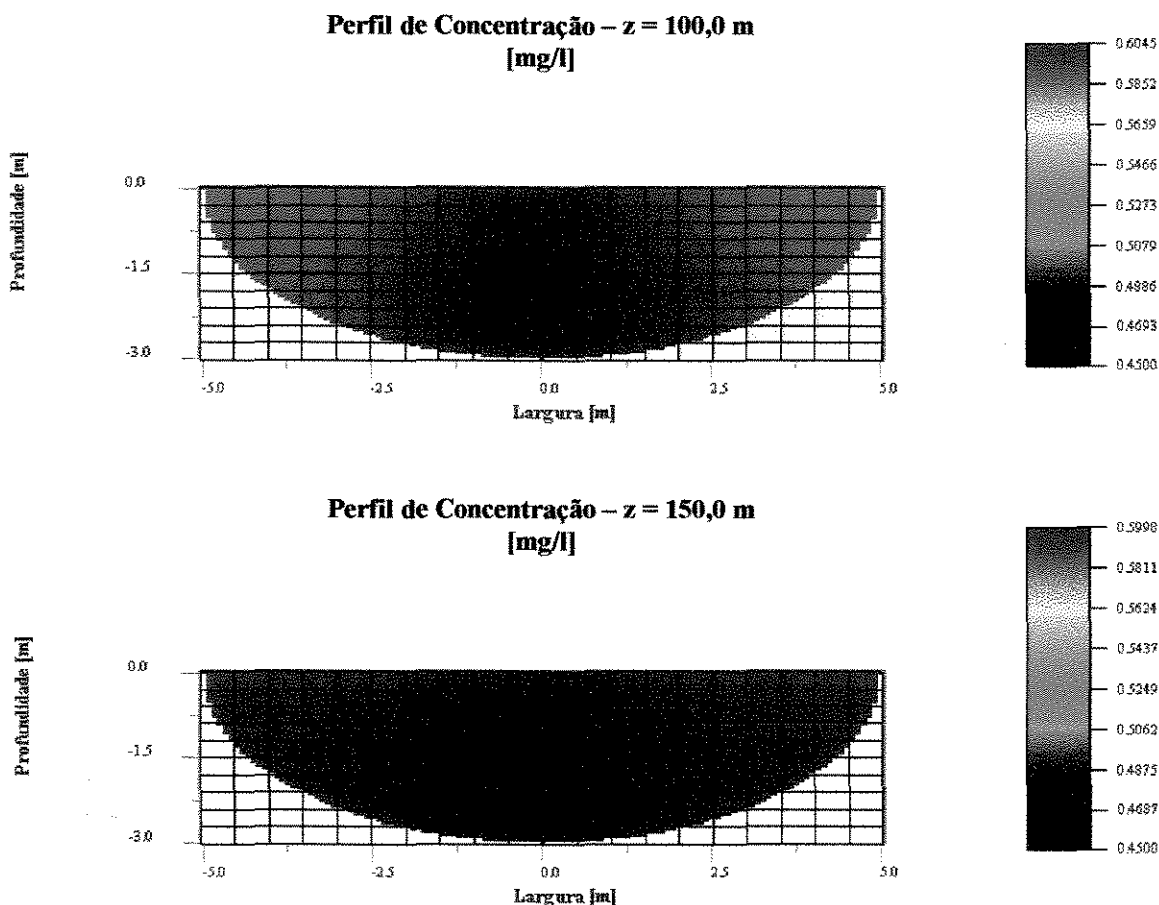
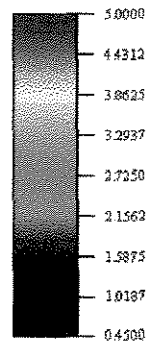
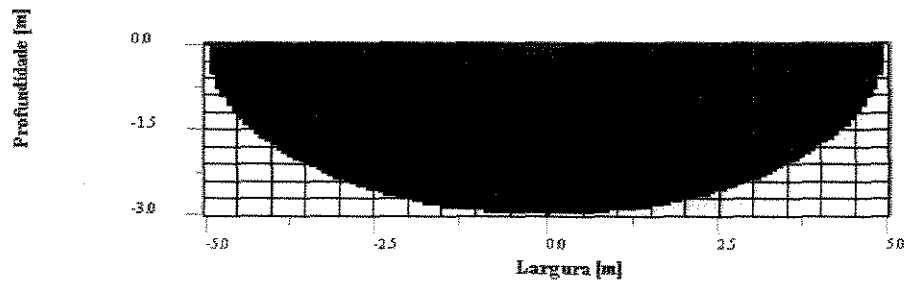


Figura 5-16 – Perfis de concentração [mg/l] do efluente sendo disperso ao longo do rio quando lançado no fundo do leito.

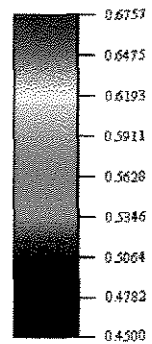
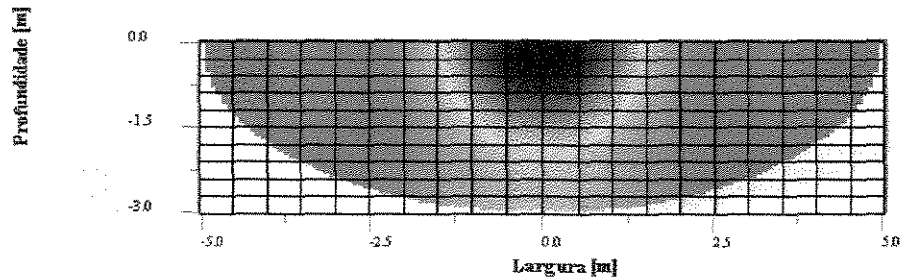
Como mostram os gráficos da Figura 5-16, a dispersão do efluente, quando lançado no fundo do rio, se dá de forma mais rápida, sendo alcançada a diluição total do efluente, depois de 150 metros do ponto de despejo.

Com o efluente sendo lançado na superfície da região central do rio, os perfis de concentração obtidos são apresentados na Figura 5-17, a seguir:

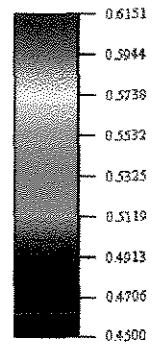
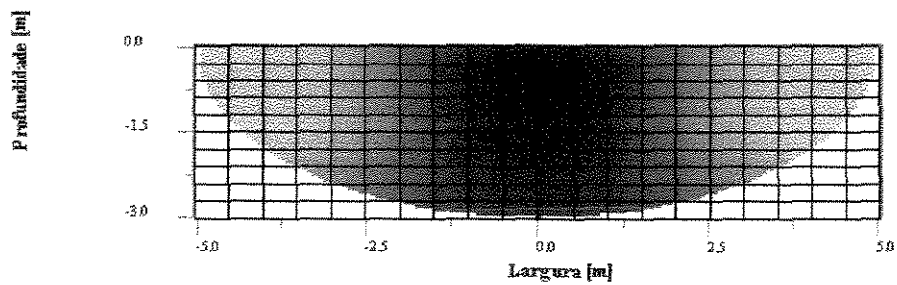
Perfil de Concentração – $z = 0,0$ m
[mg/l]



Perfil de Concentração – $z = 50,0$ m
[mg/l]



Perfil de Concentração – $z = 100,0$ m
[mg/l]



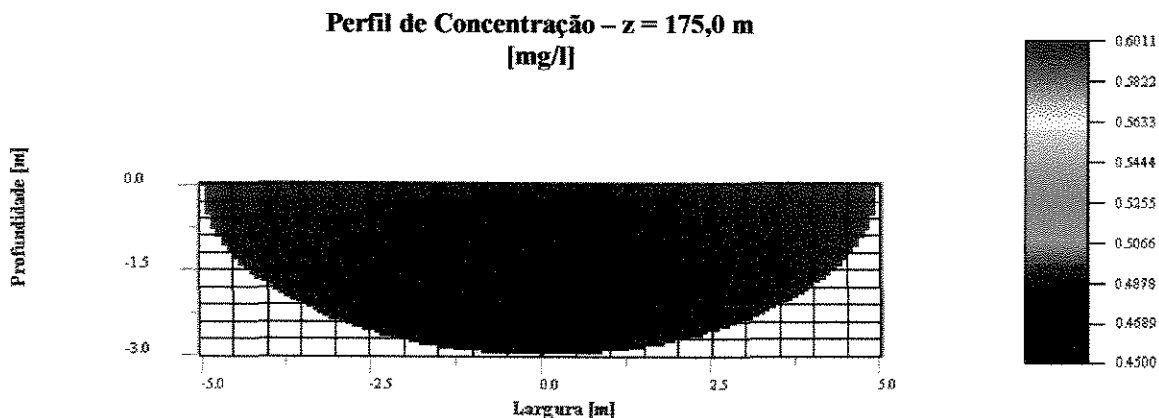
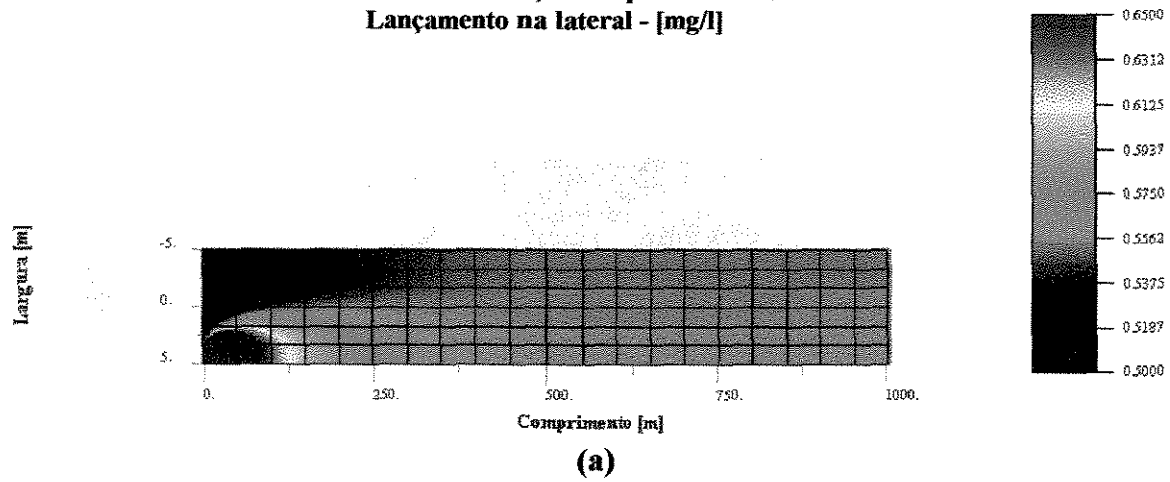


Figura 5-17 - Perfis de concentração [mg/l] do efluente sendo disperso ao longo do rio quando lançado no centro da superfície do leito.

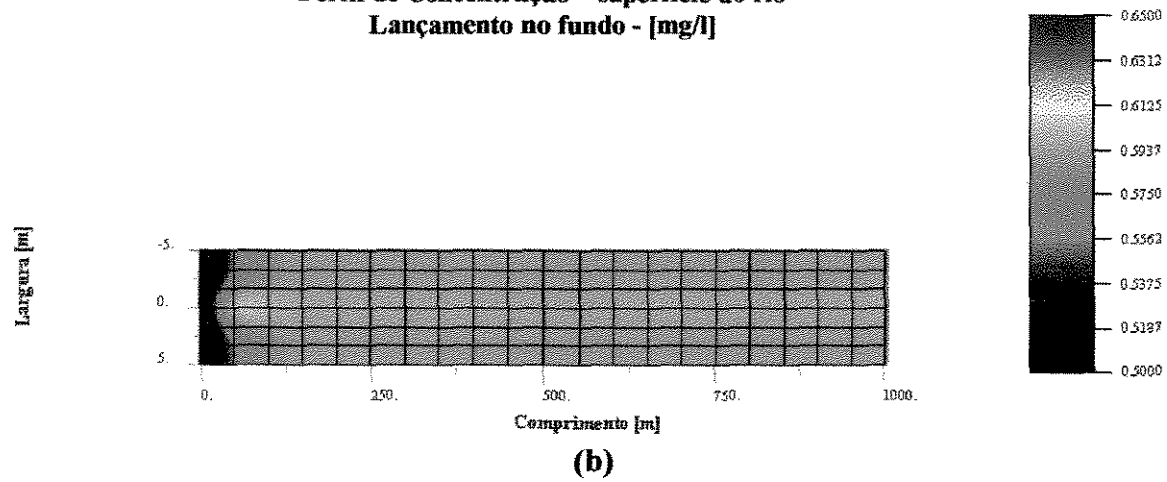
Neste caso, a dispersão também ocorre mais rapidamente que quando o lançamento dá-se na lateral do rio. Entretanto, a dispersão total ocorre numa distância maior que a obtida para o caso de despejo no fundo do rio. Depois de 175 metros do ponto de lançamento a dispersão total é alcançada.

Antes de comentar os resultados obtidos para os dois casos, são apresentados, para efeito de comparação, os perfis de concentração na superfície de todo o trecho de rio para os casos de lançamento nos três pontos distintos:

**Perfil de Concentração – superfície do rio
Lançamento na lateral - [mg/l]**



**Perfil de Concentração – superfície do rio
Lançamento no fundo - [mg/l]**



**Perfil de Concentração – superfície do rio
Lançamento na superfície - [mg/l]**

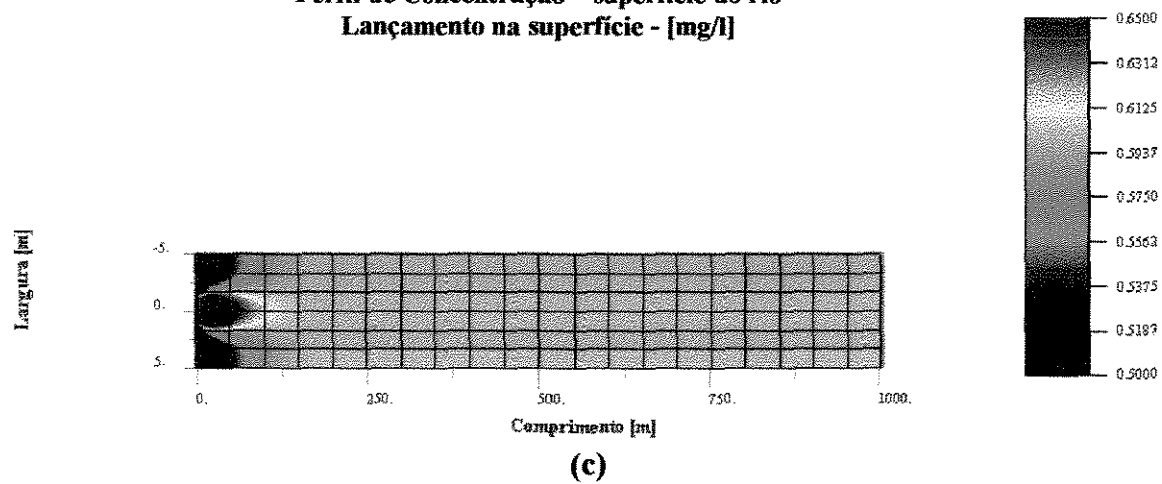


Figura 5-18 – Comparação dos perfis de concentração na superfície do leito quando o efluente é lançado na lateral (a), no fundo (b) e na superfície do rio (c).

Os gráficos da Figura 5-18 mostram a dispersão do poluente na superfície do rio. Como já havia sido observado, quando o lançamento do efluente é feito na lateral do rio, a dispersão é mais lenta que a observada nos outros casos. A dispersão mais rápida, quando o efluente é despejado no centro do rio, era esperada, pois neste caso, a difusão é bilateral, enquanto na margem é unilateral.

Se comparados os perfis de concentração da substância presente no efluente, quando este é lançado no fundo e na superfície da região central do rio, vemos que a dispersão é ligeiramente mais rápida quando o despejo é feito no fundo. Esta pequena diferença pode ser explicada pelo fato de que quando lançado no fundo, o efluente está numa região de baixas velocidades, onde a dispersão por difusão é favorecida. Por outro lado, quando lançado na superfície, o efluente encontra-se na região de maior velocidade. Nesta região, a convecção é favorecida, de forma que a pluma de efluente é arrastada antes de iniciar a sua dispersão.

CAPÍTULO 6

6 Conclusões e sugestões

A fluido dinâmica computacional é uma importante ferramenta na simulação da dispersão de efluentes em corpos d'água. A solução conjunta das equações de continuidade, movimento e transferência de massa no modelo proposto permitem a solução rápida e precisa do problema, como foi observado nos resultados apresentados neste trabalho.

Os perfis de velocidade para o escoamento em canais de base semi-elíptica, obtidos pelo método das Diferenças Finitas de 4ª ordem, mostraram-se precisos, como foi comprovado pelas análises de independência da malha e comparação dos modelos cilíndrico (analítico) e elíptico (numérico) apresentadas no Capítulo 5. A solução do perfil de velocidade separadamente do perfil de concentração, possibilitada pela característica de solução diluída do sistema, garantiu uma solução simples do perfil de velocidade do escoamento.

Para o cálculo dos perfis de concentração, a escolha dos métodos de Diferenças Finitas de 2ª ordem e Runge-Kutta de 4ª ordem, mostrou-se eficiente e o modelo apresentou rápida solução. A desvantagem apresentada por estes métodos é o caráter não conservativo dos mesmos. Por este motivo, não foi possível garantir o fechamento preciso do balanço de massa global do sistema, que apresentou pequenos erros que eram minimizados quando a malha era mais refinada. O modelo foi desenvolvido para ser eficiente em termos de tempo de solução. De fato, para o caso em estudo, apresentado no Capítulo 5, foram necessários apenas cerca de vinte minutos de execução do software desenvolvido, utilizando um PC Pentium III de 700 MHz e 128 Mb de memória RAM, lembrando que o trecho de rio é de 1

Km de extensão. Os softwares computacionais disponíveis no mercado não possibilitam uma solução tão rápida.

As hipóteses assumidas pelo modelo, dentre elas a de fluxo laminar, tornaram-no mais conservador. Esta condição não prejudica o compromisso ambiental deste trabalho, uma vez que retrata um quadro do impacto ambiental causado pela emissão de um poluente num rio ligeiramente mais drástico que o real. Um modelo turbulento, que melhor se adequa ao escoamento da maioria dos rios, será uma etapa posterior deste trabalho, conforme é sugerido nos trabalhos futuros. Entretanto, pelo exposto nesta dissertação, o modelo já preparado contribui muito no estudo da dispersão de efluentes em rios.

Finalmente, concluiu-se que o objetivo principal deste trabalho foi alcançado. Este estudo permitiu o desenvolvimento de um software capaz de prever a dispersão de um efluente sendo lançado num rio. Porém, sendo este um trabalho de base para trabalhos futuros, fica óbvio que muito ainda pode ser feito nesta área. Dentre os trabalhos que podem ser realizados nesta área de estudo, seguem as sugestões para trabalhos futuros:

- O estudo da dispersão de efluentes não inertes em rios considerando o caráter turbulento deste escoamento. Com as considerações de efluente não inerte e fluxo turbulento, o problema abrangeria uma maior quantidade de casos de interesse, tornando o software uma ferramenta de previsão de impacto ambiental mais robusta. A depuração natural dos poluentes por meio de agentes biológicos ao longo do rio pode ser inserida considerando-se esse efeito nos termos de reação das equações do modelo.
- Abranger o estudo da dispersão de efluentes para trechos de rio que possuam vários pontos de emissão ao longo de seu leito. Com o software ajustado para prever a dispersão de efluentes em toda uma região de interesse, seria possível prever com grande confiança o real impacto do lançamento de uma nova fonte poluidora.

- Em termos de solução do modelo, uma sugestão é partir para a solução do mesmo através da utilização de um método numérico conservativo, como o Método dos Volumes Finitos, que garantiria a conservação de massa do sistema.
- Por fim, sugere-se que todos estes trabalhos sejam acompanhados de estudos experimentais que possibilitem a comparação dos mesmos com os resultados teóricos obtidos.

CAPÍTULO 7

7 Referências Bibliográficas

1 - Babarutsi, S., Chu, V. H., Modeling transverse mixing layer in shallow open-channel flows, *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 124, N° 7, Julho, 1998.

2 – Ciffroy, P., Moulin, C., Gailhard, J., A model simulating the transport of dissolved and particulate copper in the Seine River, *Ecological Modelling*, 127, 99-117, 2000.

3 – Chow, V. T., 1959. *Open-channel hydraulics*, McGraw-Hill Book Company, 1959.

4 – Fischer, H. B., The mechanics of dispersion in natural streams, *J. Hydr. Div.*, 93 (6), 187-216, 1967

5 – French, H. R., *Open-channel hydraulics*, McGraw-Hill Book Company, 1986.

6 - Jia, Y., Wang, S. S. Y., Numerical model for channel flow and morphological change studies, *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 125, N° 9, Setembro, 1999.

- 7 - Lane et al., The application of computational fluid dynamics to natural river channels: three-dimensional versus two-dimensional approaches, *Geomorphology*, vol. 29, 1-20, Agosto, 1999.
- 8 - Lien, H. C. et al. Bend-flow simulation using 2d depth-averaged model. *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 125 N° 10, Outubro, 1999
- 9 - Nadoaka, K., Yagi, H., Shallow-water turbulence modeling and horizontal large-eddy computation of river flow. *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 124, N° 5, Maio, 1998
- 10 - Naot, D., Rodi, W., Numerical simulation of secondary currents in a channel flow, *J. Hydr. Div.*, 108 (8), 948-968, 1982.
- 11 - Nokes, R. I., Hughes, G. O., Turbulent mixing in uniform channels of irregular cross-section, *Journal of Hydraulic Research*, vol. 32, N° 1, 1994.
- 12 - Nordin, C. F., Sabol, B. V., Empirical data on longitudinal dispersion in rivers, U.S. Geological Survey Water Res. Invest. 20-74, Open File Report, 1974.
- 13 - Roberts, P. J. W., Mixing and transport in natural streams, School of Civil Engineering, Georgia Institute of Technology, Atlanta, Georgia, USA, 1990.

- 14 - Shiono, K., Knight, D. W., Turbulent open-channel flows with variable depth across the channel, *J. Fluid Mech.*, 222, 617-646, 1991.
- 15 - Simons, D. B., Sentürk, F., *Sediment Transport Technology – Water and sediment dynamics*, Water Resources Publications, 1992.
- 16 - Sofialidis, D., Prinos, P., Compound open-channel flow modeling with nonlinear low-Reynolds $k-\epsilon$ models, *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 124, N° 3, Março, 1998.
- 17 - Spiegel M. R., *Análise Vetorial – com introdução à análise tensorial*, Editora McGraw-Hill do Brasil Ltda, 1972.
- 18 - Taylor, G. I., Dispersion of soluble matter in solvent flowing slowly through a pipe, *Proc. Royal Soc. of London*, A219, 186, 1953.
- 19 - Taylor, G. I., The dispersion of matter in turbulent flow through a pipe, *Proc. Royal Soc. of London*, A223, 446, 1954.
- 20 - Tominaga, A., Nezu, I., Turbulent structure in compound open-channel flows, *Journal of Hydraulic Engineering*, vol. 117, N° 1, January, 1991.
- 21 - Vasiliev, V. I. et al. Numerical simulation of channel flows by a one-equation turbulence model. *Journal of Fluid Engineering*, Vol. 119, Dezembro, 1997.

22 - Warsi, Z. U. A., Fluid Dynamics – Theoretical and computational approaches, CRC Press, 1993

23 - Ye, J., McCorquodale, J. A., Simulation of curved open channel flows by 3D hydrodynamic model, Journal of Hydraulic Engineering, vol. 124, N° 7, Julho, 1998.

24 – URL, http://www.rededasaguas.org.br/bacia/bacia_03.asp, Rede das Águas, 2001.