



UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
Faculdade de Tecnologia

Denis Cajas Guaca

**Modelagem e simulação computacional das concentrações
de oxigênio dissolvido e da demanda bioquímica de oxigênio
usando relações cinéticas de Holling tipo III**

Limeira
2021

Denis Cajas Guaca

Modelagem e simulação computacional das concentrações de oxigênio dissolvido e da demanda bioquímica de oxigênio usando relações cinéticas de Holling tipo III

Tese apresentada à Faculdade de Tecnologia da Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutora em Tecnologia, na área de Ambiente.

Orientadora: Profa. Dra. Elaine Cristina Catapani Poletti

Este exemplar corresponde à versão final da Tese defendida por Denis Cajas Guaca e orientada pela Profa. Dra. Elaine Cristina Catapani Poletti.

Limeira
2021

Ficha catalográfica
Universidade Estadual de Campinas
Biblioteca da Faculdade de Tecnologia
Felipe de Souza Bueno - CRB 8/8577

C124m Cajas Guaca, Denis, 1983-
Modelagem e simulação computacional das concentrações de oxigênio dissolvido e da demanda bioquímica de oxigênio usando relações cinéticas de Holling tipo III / Denis Cajas Guaca. – Limeira, SP : [s.n.], 2021.

Orientador: Elaine Cristina Catapani Poletti.
Tese (doutorado) – Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Tecnologia.

1. Modelagem matemática. 2. Equação de difusão-advecção-reação. 3. Dispersão de poluentes. 4. Diferenças finitas. 5. Água - Qualidade. I. Poletti, Elaine Cristina Catapani, 1975-. II. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Tecnologia. III. Título.

Informações para Biblioteca Digital

Título em outro idioma: Modeling and computer simulation of dissolved oxygen and biochemical oxygen demand concentrations using Holling type III kinetic relationships

Palavras-chave em inglês:

Mathematical modeling

Diffusion-advection-reaction equation

Pollutant dispersion

Finite differences

Water quality

Área de concentração: Ambiente

Titulação: Doutora em Tecnologia

Banca examinadora:

Elaine Cristina Catapani Poletti [Orientador]

Roberta Regina Delboni

João Frederico da Costa Azevedo Meyer

Graciele Paraguaia Silveira

Renata Zotin Gomes de Oliveira

Data de defesa: 17-05-2021

Programa de Pós-Graduação: Tecnologia

Identificação e informações acadêmicas do(a) aluno(a)

- ORCID do autor: <https://orcid.org/0000-0003-1978-8275>

- Currículo Lattes do autor: <http://lattes.cnpq.br/7538396297375738>

FOLHA DE APROVAÇÃO

Abaixo se apresentam os membros da comissão julgadora da sessão pública de defesa de dissertação para o Título de Doutora em Tecnologia na área de concentração Ambiente, a que se submeteu a aluna Denis Cajas Guaca, em 17 de Maio de 2021 na Faculdade de Tecnologia – FT/UNICAMP, em Limeira/SP.

Profa. Dra. Elaine Cristina Catapani Poletti
Presidente da Comissão Julgadora

Prof. Dra. Roberta Regina Delboni
FT/UNICAMP

Prof. Dr. João Frederico da Costa Azevedo Meyer
IMECC/UNICAMP

Profa. Dra. Graciele Paraguaia Silveira
DFQM/UFSCAR

Profa. Dra. Renata Zotin Gomes de Oliveira
DM - IGCE - UNESP

Ata da defesa, assinada pelos membros da Comissão Examinadora, consta no SIGA/Sistema de Fluxo de Dissertação/Tese e na Secretaria de Pós Graduação da FT.

Agradecimentos

A Deus pela força espiritual e física para lutar pelos meus objetivos.

A minha orientadora Elaine, pela paciência, confiança e apoio em todas as etapas do doutorado.

Aos professores, Renata, Roberta, Graciele, e Joni pelos comentários e sugestões que ajudaram a melhorar o resultado final desta tese.

Aos meus pais e meus irmãos, pelo apoio e amor incondicional.

Ao José Carlos, pelo apoio constante, pelas longas jornadas de estudo e enriquecedoras discussões.

Aos meus amigos que direta ou indiretamente sempre mostraram seu carinho e apoio incondicional.

O presente trabalho foi realizado com apoio da Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior - Brasil (CAPES) - Código de Financiamento 001.

Resumo

Os modelos matemáticos têm sido amplamente utilizados para o estudo da qualidade da água. No tocante à poluição dos recursos hídricos por matéria orgânica, o oxigênio dissolvido (*OD*) e a demanda bioquímica de oxigênio (*DBO*) são indicadores importantes para seu monitoramento. Desta forma, esta pesquisa, apresenta um modelo matemático bidimensional no espaço que evolui no tempo, para o estudo das variações de concentrações destas variáveis, através de um sistema acoplado de equações diferenciais parciais não-lineares, do tipo difusão-advecção-reação, com reações cinéticas de Holling tipo III entre *OD* e *DBO*. Analisa-se sob algumas simplificações a estabilidade dos pontos de equilíbrio do modelo. Propõe-se uma solução aproximada utilizando-se o método de diferenças finitas centradas (DFC) para as variáveis espaciais e o método de Crank-Nicolson para a variável temporal. Devido às oscilações espúrias da solução numérica obtida através do método DFC, pela dominância do termo advectivo, foi implementado o esquema Scharfetter-Gummel, o qual tornou-se uma ferramenta útil para a obtenção dos resultados. As simulações computacionais foram realizadas no software Matlab, num domínio retangular. Para o transporte advectivo foram consideradas as influências do vento e da correnteza dada por um perfil parabólico. Foram realizadas uma série de simulações numéricas espaço - temporais e descobrimos que o modelo permite analisar as regiões com maiores e/ou menores concentrações de *OD* e *DBO*, assim como as variações temporais das concentrações em pontos específicos do domínio, e da influência do transporte difusivo - advectivo no processo de transferência de massa.

Palavras-chave: Modelagem matemática; Equação de difusão-advecção-reação; Dispersão de poluentes; Diferenças finitas; Água - Qualidade.

Abstract

Mathematical models have been widely used for the study of water quality. Regarding the pollution of water resources by organic matter, dissolved oxygen (*DO*) and biochemical oxygen demand (*BOD*) are important indicators for their monitoring. In this way, this research presents a two-dimensional mathematical model in space that evolves over time, for the study of the variations in concentrations of these variables, through a coupled system of non-linear partial differential equations, with Holling type III reaction kinetics between *DO* and *BOD*. Under some simplifications, the stability of the equilibrium points of the model is analyzed. An approximate solution is proposed using the centered finite difference (CFD) method for spatial variables and the Crank-Nicolson method for the temporal variable. Due to the spurious oscillations of the numerical solution obtained through the CFD method, by the dominance of the advective term, the Scharfetter-Gummel scheme was implemented, which has become a useful tool for obtaining the results. Computer simulations were performed using Matlab software, in a rectangular domain. For the advective transport, the influences of the wind and the current given by a parabolic profile were considered. We performed a series of numerical space-time simulations and found that the model allows the analysis of regions with higher and/or lower *DO* and *BOD* concentrations, as well as the temporal variations of concentrations at specific points in the domain, and the influence of diffusive-advective transport in the mass transfer process.

Palavras-chave: Mathematical modeling; Diffusion-advection-reaction equation; Pollutant dispersion; Finite differences; Water quality.

Lista de Figuras

1.1	Eutrofização, Fonte CETESB 2006.	18
2.1	Volume de controle para o fluxo.	26
2.2	Fronteiras do domínio.	30
2.3	Taxas de reação da concentração de uma substância P e sua solução. . . .	32
2.4	Taxas de reação da concentração de uma substância P e sua solução. . . .	33
2.5	Respostas funcionais de Michaelis - Menten e Holling tipo III.	34
3.1	Respostas funcionais de Michaelis Menten $f_M(C) = K_1 \frac{C}{\kappa + C}$ e Holling tipo III $f_H(C) = K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2}$	39
3.2	Plano de fase: Estabilidade do ponto de equilíbrio. Parâmetros da simulação: $K_1 = 0,15/dia$, $K_2 = 0,45/dia$, $\kappa = 0,5 \text{ mg/l}$, $\alpha = 0,37/dia$ e $C_s = 9,2 \text{ mg/l}$	43
3.3	Discretização do domínio e estêncil de cinco pontos [6].	45
3.4	Tipos de fronteiras [6].	48
4.1	Variação ao longo do tempo das concentrações de DBO e OD para diferentes condições iniciais de DBO e condição inicial para OD $C_0 = 5 \text{ mg/l}$	60
4.2	Variação ao longo do tempo das concentrações de DBO e OD para diferentes fontes.	60
4.3	Distribuição das concentrações de DBO para 4, 20, e 60 <i>dias</i> de simulação com fonte $q = 20 \text{ mg/l/dia}$	62
4.4	Distribuição das concentrações de OD para 4, 20, e 60 <i>dias</i> de simulação com fonte $q = 20 \text{ mg/l/dia}$	63
4.5	Localização dos nós no domínio.	64
4.6	Comportamento ao longo do tempo de DBO e OD , em diferentes nós do domínio para $q = 20 \text{ mg/l/dia}$	64
4.7	Distribuição das concentrações de DBO para 2, 5, e 60 <i>dias</i> de simulação com fonte $q = 85 \text{ mg/l/dia}$	65
4.8	Evolução temporal da dispersão de OD para $q = 85 \text{ mg/l/dia}$	66
4.9	Comportamento ao longo do tempo de DBO e OD , em diferentes nós do domínio para $q = 85 \text{ mg/l/dia}$	67
4.10	Domínio do Cenário II	68
4.11	Evolução temporal das concentrações de DBO e OD com: vento noroeste, assoreamento nas fronteiras vertical a esquerda e a fronteira horizontal superior e três fontes no interior, tempo de simulação 60 <i>dias</i> e condições iniciais $L_0 = 10 \text{ mg/l}$ e $C_0 = 5 \text{ mg/l}$	69
4.12	Comportamento ao longo do tempo das concentrações de DBO e OD , em diferentes nós do domínio.	70

4.13	Campo de velocidade do rio dado por um perfil parabólico com $u_0 = 0,1$ m/s	71
4.14	Evolução temporal das concentrações de DBO e OD com: campo de velocidades do rio com perfil parabólico, condição de fronteira de Dirichlet na lateral esquerda, tempo de simulação 20 <i>dias</i> e condições iniciais $C_0 = 3\ mg/l$ para e $L_0 = 1\ mg/l$	72
A.1	Classificação das águas doces segundo a qualidade requerida para seus usos [2].	82
A.2	Fronteira Tipo I, [6].	83

Lista de Tabelas

4.1	Coeficiente de reaeração α ($1/dia$) [39].	58
4.2	Constante cinética de desoxigenação K_2 , para diferentes efluentes, [10]. . .	58
4.3	Parâmetros do modelo e seus valores utilizados para as simulações.	59
A.1	Valores mínimos de OD e valores máximos de DBO para cada classe de corpo hídrico, [4].	82

Lista de Símbolos

A	—	Área transversal.
α	—	Coefficiente de reaeração.
C	—	Concentração de oxigênio.
C_s	—	Constante de saturação de oxigênio.
C_0	—	Condição inicial da OD .
D	—	Coefficiente de difusão molecular.
D_l	—	Coefficiente de difusão da DBO .
D_c	—	Coefficiente de difusão do OD .
J	—	Fluxo.
J_{in}	—	Fluxo de entrada.
J_{out}	—	Fluxo de saída
J_{adv}	—	Fluxo advectivo.
J_{dif}	—	Fluxo difusivo
κ	—	Saturação média da Demanda de Oxigênio para o decaimento de DBO
L	—	Concentração de DBO .
L_0	—	Condição inicial da DBO .
\mathbf{V}	—	Campo de velocidade.
V	—	Volume o sistema.
u	—	Velocidade do Fluxo na direção do eixo x .
v	—	Velocidade do Fluxo na direção do eixo y .
M	—	Massa do sistema.
P	—	Concentração de de uma substância P .
Q	—	Vazão volumétrica.
T	—	Temperatura.
Γ_i	—	i -ésima Fronteira.
Ω	—	Domínio espacial de estudo.
$\partial\Omega$	—	Fronteira do domínio espacial Ω .
Δt	—	Tamanho da discretização do intervalo de tempo
$\Delta x, \Delta y$	—	Espaçamento de malha horizontal e vertical respectivamente.
$\frac{\partial P}{\partial \eta}$	—	Derivada direcional da variável P na direção de η .
ΔP	—	Laplaciano da função P .
∇P	—	Gradiente da concentração P .

Lista de Abreviaturas e Siglas

<i>DBO</i>	Demanda bioquímica de oxigênio
<i>DFC</i>	Diferenças finitas centradas
<i>EF</i>	Elementos finitos
<i>MDF</i>	Método de diferenças finitas
<i>MEF</i>	Método de elementos finitos
<i>OD</i>	Oxigênio dissolvido
<i>OD</i>	oxigênio dissolvido
<i>SG</i>	Scharfetter-Gummel
<i>SP</i>	Streeter e Phelps
<i>VF</i>	Volumes finitos

Sumário

Introdução	15
1 Modelagem Matemática: a poluição de recursos hídricos	17
2 Modelagem: Processos Físicos da Equação de Difusão–Advecção	24
2.1 Equações do Transporte	24
2.1.1 Fluxo Advectivo	26
2.1.2 Fluxo Difusivo	28
2.2 Condições Iniciais e de Contorno	30
2.2.1 Condição de Contorno de Dirichlet	31
2.2.2 Condição de Contorno de Neumann	31
2.2.3 Condição de Contorno de Robin	31
2.3 Equações Complementares de Estudo	32
2.3.1 Equações de Reação	32
2.3.2 Equações de Balanço de Massa de <i>DBO</i> e <i>OD</i>	35
3 Modelo Proposto	38
3.1 Modelo Acoplado para <i>DBO</i> e <i>OD</i>	38
3.2 Estudo de Estabilidade	41
3.3 Tratamento Numérico do Modelo	44
3.3.1 Discretização do Domínio	45
3.3.2 Discretização das Derivadas	49
3.3.3 Discretização do Modelo	50
3.4 Difusão Artificial	54
3.4.1 Método Upwind	54
3.4.2 Método Scharfetter - Gummel	55
4 Simulações e Análise dos Resultados	57
4.1 Simulações do Modelo Não Espacial	57
4.2 Simulações do Modelo Proposto	61
4.2.1 Cenário 1	61
4.2.2 Cenário 2	67
4.2.3 Cenário 3	70
Conclusões	73
Referências bibliográficas	75

A	Modelagem de Streeter e Phelps	80
A.1	Hipóteses para a Modelagem de Streeter e Phelps	80
A.2	Modelo de Streeter e Phelps	80
A.3	Valores de OD e DBO Permissíveis	81
A.4	Discretização das Condições de Fronteira	82
B	Código computacional	85

Introdução

A água é um recurso de grande valia para a manutenção da vida e para o desenvolvimento de uma nação. À medida que a população cresce, aumenta a demanda por água e, também, muitos problemas de impacto ambiental dos recursos hídricos.

Muitos são os problemas de poluição dos recursos hídricos que afetam a qualidade da água: os despejos de efluentes industriais e domésticos não tratados, acidentes com derramamentos de óleo e outros resíduos, problemas de assoreamento e de contaminações diversas, entre outros, além daquelas de causas naturais que também alteram as características físicas, químicas e biológicas dos rios, que acarretam na deterioração dos corpos hídricos.

Essa deterioração compromete não só a qualidade dos mananciais, mas, também, os volumes de reserva de água doce com reflexos em todas as instâncias.

No que se refere à qualidade de vida, a qualidade e a quantidade da água estão relacionadas a questões de saúde pública e condições de saneamento de uma dada região. Segundo a Organização Mundial da Saúde (OMS), o saneamento básico é fundamental à saúde e bem-estar.

Problemas com os mananciais e com a qualidade da água podem estar atrelados à doenças tais como a diarreia, disenteria, leptospirose, cólera, dengue, dentre outras, que se constituem num grande problema de saúde pública e uma das principais causas de doenças e morte de pessoas.

Dentre as principais fontes de poluição dos recursos hídricos, destaca-se a poluição por matéria orgânica. A poluição por matéria orgânica está relacionada ao despejo de esgotos domésticos e industriais na água dos rios e, com carga excessiva dos esgotos lançados nos corpos hídricos, a capacidade de autodepuração dos rios fica comprometida: o aumento da matéria orgânica influencia a *DBO* da água, que aumenta pela atividade dos micro-organismos na decomposição da matéria. Quanto maior a atividade microbiana no meio,

maior o consumo do oxigênio pelos micro-organismos e, portanto, menor a quantidade de OD , disponível.

Com isso, o monitoramento e o controle das concentrações de DBO e OD presentes na água são imprescindíveis para o monitoramento e controle da qualidade das águas dos rios e para a manutenção da vida. Portanto, voltados para a modelagem matemática de análises de impactos ambientais em recursos hídricos, esta pesquisa se propõe a considerar um estudo numa ordem gradativa de complexidade dos modelos matemáticos e apresentar um modelo de abordagem bidimensional, evolutivo no tempo, de análise do comportamento das variáveis DBO e OD ligadas à condições iniciais e de contorno bem definidas, levando-se em consideração processos físicos de transporte advectivo e difusivo na geração de cenários que subsidiam discussões e entendimentos sobre impactos ambientais de recursos hídricos.

O inédito deste estudo está na consideração de reações cinéticas não lineares de Holling Tipo III na modelagem da DBO e do OD numa abordagem bidimensional do domínio, evolutivo no tempo.

Assim, este trabalho segue organizado em 4 Capítulos: O Capítulo 1 apresenta uma revisão de literatura sobre estudos de modelagem matemática de impactos em recursos hídricos. O Capítulo 2 discursa sobre os fenômenos estudados e embasa o modelo proposto que é apresentado no Capítulo 3, juntamente com a análise de estabilidade, apresentamos o tratamento numérico com o método de diferenças finitas, Crank-Nicolson e um esquema Upwind para a construção de solução aproximada. Na sequência, no Capítulo 4, seguem as simulações realizadas e os cenários gerados juntamente com a discussões dos resultados e, por fim, seguem as conclusões tecidas sobre a modelagem realizada e impactos de recursos hídricos.

Capítulo 1

Modelagem Matemática: a poluição de recursos hídricos

A demanda por água *per capita* tem aumentado em todo o mundo e verifica-se em diversos estudos o impacto da evolução temporal do crescimento da população sobre a mesma [9]. À medida que cresce a população, cresce a demanda pela água e, também, a deterioração dos corpos hídricos que compromete os volumes de reserva de água doce em qualidade e quantidade [33, 43].

Os recursos hídricos são limitados e destinados a uma grande variedade de usos, seja na agricultura, na indústria, no consumo humano, no transporte, na recreação, entre outros. Para satisfazer tais demandas muitos dos corpos de água sofrem alterações geográficas por estruturas artificiais, tais como a construção de reservatórios, canais, desvios, etc, além das alterações da composição físico-química-biológica [2] que acentuam impactos da qualidade da água e podem, até, influenciar a diminuição de volumes e de vazão [5, 6].

A poluição ambiental, pela interferência antrópica, direta ou indireta, dos recursos aquáticos, tem sido foco de diversos estudos abordados por diferentes especialistas e em diferentes áreas de pesquisa. Dentre estas, a modelagem matemática coloca-se como uma ferramenta importante e cada vez mais desenvolvida para a gestão e avaliação da qualidade da água.

A modelagem matemática, acompanhada de simulação computacional, permite análises qualitativas e quantitativas e, além disso, possibilitam a geração de cenários para estudos preditivos que auxiliam entendimentos e subsidiam a tomada de decisões que podem estar ligadas à ações de preservação e recuperação dos ecossistemas.

Em relação à poluição dos recursos hídricos, a contaminação por matéria orgânica é um fator preocupante, tendo em vista que altera toda a dinâmica do ecossistema e está ligada tanto aos despejos de esgotos nos rios, quanto aos problemas de eutrofização da água.

Os problemas de eutrofização da água estão relacionados à redução da quantidade de oxigênio dissolvido que influencia a mortalidade de espécies aquáticas, gerando toxinas e alterando o pH da água e de toda biodiversidade existente.



Figura 1.1: Eutrofização. Fonte: CETESB 2006. ¹

Para o monitoramento da quantidade de matéria orgânica na água, dentre os indicadores mais importantes encontram-se os índices de *OD* e de *DBO*.

O *OD* é a concentração de oxigênio dissolvido, O_2 , presente na água e trata-se de um dos mais importantes indicadores da qualidade da água para se ter um sistema aquático saudável, fundamental para a manutenção da vida aquática e para a constituição de um ecossistema benéfico [27].

Níveis baixos de *OD* indicam que o corpo aquático está comprometido e colocam em risco muitas formas de vida aquática presentes no meio [27]. A resolução CONAMA 357/2005 [4] estabelece um valor mínimo da concentração de *OD* para diferentes classes de corpos hídricos (ver Anexo A.3). Os impactos das baixas concentrações dependem do organismo e da espécie, em virtude da variação de tolerância que existe e oscila de espécie para espécie. Entretanto concentrações reduzidas submetem a vida aquática ao estresse e podem levar organismos à morte [18, 27].

Um dos principais fatores que deteriora os corpos aquáticos é o despejo de esgoto com altas concentrações de matéria orgânica e que provocam a redução de *OD*. Na gestão de qualidade de água é importante a preservação do meio e o controle do despejo de poluentes

¹<https://blogdoenem.com.br>. Acesso em 07/2020

com o intuito de manter os níveis mínimos de OD para a manutenção da vida aquática, sendo necessário o monitoramento regular da qualidade dos recursos.

A substância mais predominante nos corpos aquáticos naturais, oxidada pela decomposição microbiana, é a matéria orgânica que é constituída por matéria de origem vegetal, resíduos de animais produzidos pelo próprio meio aquático e por arrastes ocasionados pelas chuvas ou pela intervenção antrópica de esgotos e outros rejeitos [18]. Estudos registram despejos de esgoto e/ou efluentes industriais orgânicos, por exemplo, provenientes de plantas de processamento de alimentos, bebidas, da indústria de couro e madeira entre outras [55], que carregam grandes quantidades de nutrientes para dentro dos rios, gerando um aumento de detritos e uma proliferação de macrófitas que levam à diminuição do oxigênio dissolvido dos recursos [31, 46, 48].

A quantidade de oxigênio que demandam as bactérias na sua respiração para oxidação da matéria orgânica dissolvida numa amostra de água, durante um intervalo de tempo, numa temperatura de incubação determinada, é conhecida como DBO [55]. As bactérias transformam a matéria orgânica em compostos simples como água e gás carbônico, resultado das atividades biológicas. A DBO representa tanto o consumo de oxigênio quanto a concentração de matéria orgânica remanescente a ser oxidada [55].

A oxidação da matéria orgânica é uma reação importante para a depuração dos corpos naturais de água e nas estações de tratamento de esgotos. Desta forma, a DBO também representa um índice importante de avaliação da qualidade de água: altas concentrações de DBO indicam baixas concentrações de OD que podem comprometer a respiração dos seres vivos aquáticos e cuja mortalidade aumenta a concentração de DBO , como num ciclo vicioso.

Na literatura são apresentados diversos estudos e modelos matemáticos que possibilitam a análise da qualidade da água, utilizando-se dos índices de DBO e OD , tanto em rios, lagoas quanto reservatórios.

A Modelagem matemática é uma representação abstrata de um fenômeno, dada por uma equação, ou um conjunto delas, envolvendo variáveis e parâmetros baseados em uma simplificação do fenômeno natural [3], objeto de estudo, com intuito de se reproduzir cenários e prever resultados que levem ao entendimento de comportamentos diversos e favoreçam a tomada de decisões.

Comumente, as expectativas quanto à modelagem matemática aplicada a fenômenos naturais são ambiciosas e, introduzir muitos aspectos reais em um modelo, de acordo com [3], pode gerar uma estrutura excessivamente complexa de resolução. Assim, ressalta-se, que a reprodução exata de um fenômeno natural é muito difícil e até impossível, em muitos casos de se realizar, dada a quantidade de variáveis e parâmetros que podem estar envolvidos direta ou indiretamente ao fenômeno, bem como suas variações múltiplas [3]. Além disso, muitas destas variáveis e/ou parâmetros são difíceis de se observar, registrar e avaliar o quanto estão relacionados uns com os outros.

Segundo [26], à medida que um modelo matemático se torna mais complexo em relação ao número de variáveis e parâmetros, verifica-se uma melhor representação do sistema real, mas, em contraponto, a sensibilidade geral do modelo também aumenta, além da dificuldade de explicitar a solução exata do problema e de se conseguir dados reais que alimentem o sistema.

O aumento da complexidade do modelo traz consigo mais procedimentos e interações entre parâmetros e/ou variáveis a serem representadas no sistema matemático [26, 53]. A consequência desse aumento pode ser um modelo intratável, do ponto de vista matemático, com grandes dificuldades de se obter uma solução analítica.

Outro ponto está relacionado à dificuldade de calibração do modelo e controle de sensibilidade [26]. Isto significa que, para pequenas mudanças nas condições de entrada e/ou nas condições de contorno, a solução pode sofrer grandes alterações e tornar-se numericamente inviável, levando o modelo à perda de eficácia no sentido de aplicação como ferramenta preditiva.

Atrelado a tudo isso, uma modelagem complexa requer uma grande quantidade de dados o que não é fácil de se obter, tendo em vista as dificuldades de acesso aos sistemas, de monitoramentos e coletas de informações com o rigor, quantidade e frequência necessárias [26, 35, 53].

Desta forma, pesquisadores defendem o equilíbrio de representação de modelos, de acordo com as ferramentas e informações disponíveis, fazendo uma escolha das variáveis e/ou parâmetros essenciais que representem o fenômeno, de tal maneira que ao fazer a formalização e simplificação do problema em um modelo matemático, este possa ser resolvido e cujos resultados possam ser analisados, interpretados de modo satisfatório para entendimento e representação do fenômeno [3, 38].

No tocante aos modelos de estudo dos impactos ambientais em recursos hídricos, via modelagem matemática, as ferramentas têm se desenvolvido de diferentes formas. Não existe um modelo único e universal que possa avaliar a qualidade da água, mas sim diferentes modelos matemáticos hidrodinâmicos que atendem diferentes necessidades influenciadas por diferentes problemas e objetivos particulares.

São diversos os modelos matemáticos existentes. Estes podem, inclusive, estar relacionados ou serem complementares [18]. Dentre os principais modelos, ressalta-se os modelos empíricos ou teóricos, os estocásticos ou determinísticos, os estacionários ou dinâmicos, os contínuos ou discretos, os lineares ou não-lineares, os analíticos ou numéricos [18, 20, 35].

Os modelos empíricos são aqueles que estimam as variáveis mediante experimentação, observação do fenômeno e coleta de dados em campo e/ou laboratório. Já os teóricos consistem em generalizações concebidas a partir de percepção e padrões.

Os modelos estocásticos (ou estatísticos) envolvem variações aleatórias, cujos valores previstos dependem de distribuições de probabilidade e nos determinísticos os valores previstos são calculados exatamente através de um conjunto de dados conhecido.

Os modelos estacionários são aqueles que são invariantes ao longo do tempo, em contraponto aos modelos dinâmicos que evoluem em função do tempo.

Os modelos contínuos são os modelos cujas variáveis assumem valores no conjunto dos números reais e os discretos são aqueles cujas variáveis assumem valores em um conjunto discreto.

Um modelo linear é aquele cujas equações das variáveis envolvidas são de primeiro grau, não há produtos entre a mesma variável e/ou suas derivadas; já os modelos não-lineares são aqueles em que uma ou mais equações não são de primeiro grau.

Um modelo analítico é aquele que possui uma solução exata explícita, já os modelos numéricos são usados para aqueles modelos que não podem ser resolvidos analiticamente ou que possuem uma solução que é de difícil obtenção. Estes modelos são tratados numericamente, possuem solução aproximada e comumente são desenvolvidos com o uso de computação científica.

É importante ressaltar que cada modelo tem suas vantagens, desvantagens e limitações.

Na pesquisa sobre as reações e processos biológicos, muitos estudos que descrevem processos químicos, bioquímicos e biológicos se baseiam em modelos de respostas

funcionais [38]. As taxas de reação cinética de uma substância, ao longo do tempo, são frequentemente modeladas por respostas funcionais que dependem da concentração da mesma, tal como na equação de reação de n -ésima ordem [18].

Estas reações podem ser de ordem zero, permanecendo constante no tempo e apresentando um comportamento linear da concentração estudada; podem ser de primeira ordem, indicando um comportamento de crescimento exponencial da substância ou, ainda, ser não-lineares [18, 19, 21, 22, 27, 44].

Em geral a variação temporal da quantidade de uma dada substância é uma função não-linear: dentre elas, uma muito conhecida é a formulação Michaelis e Menten, também conhecida como resposta funcional de Holling tipo II, originalmente definida para cinética bioquímica de enzimas [18, 38, 46], indicando uma taxa de reação que acelera inicialmente e depois desacelera até atingir a taxa máxima. Na modelagem de *DBO-OD*, alguns autores usam Michaelis-Menten para representar a relação entre estas duas variáveis mas, neste estudo, a modelagem será realizada utilizando-se a resposta funcional de Holling tipo III, que considera que, inicialmente, quando as concentrações de oxigênio são muito baixas a taxa de degradação de matéria orgânica também é menor.

No tocante aos modelos bioquímicos de poluição de rios, o destaque é o trabalho de Streeter e Phelps (SP) de 1925, [50], cujos esforços referem-se às medições da *DBO* e *OD*, bem como do potencial de autodepuração de rios. Trata-se de um modelo amplamente utilizado por pesquisadores com possibilidade de fáceis adaptações que enriquecem os estudos de modelagem na área [27].

Baseado nas equações de balanço de massa, a modelagem de SP leva em consideração dois processos importantes que são a reaeração e a desoxigenação [20]. No Apêndice A, são apresentadas as hipóteses sobre as quais se estabelece a modelagem destes autores [19].

O processo de reaeração, na água, está relacionado à reposição de oxigênio dissolvido e a desoxigenação relaciona-se ao fenômeno de eliminar ou reduzir o oxigênio do meio.

De acordo com a literatura, o modelo de SP tem conseguido simular as concentrações de *DBO* e *OD* satisfatoriamente, mas considera relações cinéticas de primeira ordem, ignorando efeitos relevantes tais como o transporte difusivo, advectivo, considerando apenas uma fonte [14, 29].

Assim, vários estudos surgem com adaptações do modelo SP, tal como em [14], onde estuda-se o déficit de OD com uma equação diferencial ordinária (EDO) acrescentando o transporte advectivo e tomando a degradação da matéria orgânica com reações não-lineares em função do OD , com soluções analíticas em um estudo de caso.

Em [16], o autor também modifica o modelo de SP alterando o coeficiente de desoxigenação que deixa de ser constante, como proposto originalmente. Em [51] é estudado mediante o método de diferenças finitas explícito uma equação diferencial parcial (EDP) para DBO considerando o transporte difusivo-advectivo. Em [23], o autor segue o esquema de SP e apresenta um modelo unidimensional no espaço, para a dinâmica do OD com uma EDP com reações cinéticas de primeira ordem, acrescentando o transporte advectivo.

Os modelos com relações cinéticas não-lineares de Michaelis e Menten têm sido comparados com modelos cinéticos de primeira ordem e as observações que se fazem é que eles se ajustam melhor aos dados observados. No entanto, isto depende do problema e do domínio a ser modelado, como da disposição de dados [38].

O modelo unidimensional proposto em [40] foi formulado mediante um sistema de duas EDPs, onde as reações cinéticas para a degradação do poluente e a desoxigenação são dadas pelas respostas funcionais de Michaelis-Menten, levando em consideração o transporte difusivo-advectivo. Os autores consideraram o estado estacionário e algumas simplificações do sistema, obtendo assim, diferentes submodelos, soluções analíticas, aproximações numéricas e simulações em estudo de caso. Em [28], os autores estudaram o modelo em [40] considerando a saturação média de DBO nula para obter a solução analítica da equação unidimensional usando o método da transformada de Laplace e este método também é usado por [17] para obter uma solução analítica da EDP unidimensional para a concentração OD generalizando algumas das soluções obtidas por [40].

Assim, as equações de difusão, advecção e reação fornecem bases importantes de modelagem matemática para o estudo da concentração de poluentes e todas estas pesquisas têm contribuído para o enriquecimento de modelagens e para os estudos de impactos ambientais.

Capítulo 2

Modelagem: Processos Físicos da Equação de Difusão–Advecção

Cada corpo aquático seja um rio, um lago ou reservatório possui características inerentes ao meio. Entretanto, alguns processos são de importante consideração, pois alteram a dispersão e a variação de concentrações de DBO e OD no meio. São processos hidrodinâmicos e as reações biológicas e/ou químicas [18], estudados pelas equações:

- Equações do transporte.
- Condições iniciais e de contorno.
- Equações do processo para reações e de balanço de massa.

Assim, apresentaremos algumas definições e noções dos princípios físicos, químicos e biológicos fundamentais para a modelagem, descrevendo as variações espaciais e temporais de um sistema de água mediante equações matemáticas.

2.1 Equações do Transporte

Muitos fenômenos ambientais são modelados utilizando-se o princípio de conservação de momento e de massa [20], considerando que não há geração, nem perda de massa no meio contínuo. Assim o acúmulo de massa M em um sistema, em um intervalo de tempo Δt , é dado pelo ‘*que entra, m_{in} , menos o que sai, m_{out}* ’ que pode ser expresso

matematicamente pela Equação (2.1):

$$\text{Acúmulo} = \frac{\Delta M}{\Delta t} = m_{in} - m_{out}. \quad (2.1)$$

A lei de conservação de massa para compostos químicos, que serão transformados em um produto ou em outros compostos químicos, é modificada, sendo dada pela Equação (2.2):

$$\frac{\Delta M}{\Delta t} = m_{in} - m_{out} + m_r, \quad (2.2)$$

onde m_r é a massa resultante das possíveis reações com fontes e/ou sumidouros [18].

Define-se a função concentração de uma substância que varia no espaço $x \in \Omega$ e no tempo $t \in (0, t_f]$ por $P(x, t)$, cujo domínio é um conjunto bidimensional convexo $\Omega \subseteq \mathbb{R}^2$, com fronteira $\partial\Omega$ suave. Sem perda de generalidade, a concentração da substância será denotada por P .

Assim, suponha um sistema homogêneo cuja concentração P é uniformemente distribuída em um volume V . Logo, a massa é definida como $M = VP$.

Supondo o volume constante em relação ao tempo, a Equação (2.2) pode ser reescrita como exposto na Equação (2.3)¹:

$$V \frac{\Delta P}{\Delta t} = m_{in} - m_{out} + m_r, \quad (2.3)$$

onde: m_{in}, m_{out}, m_r representam a massa que entra, que sai e a massa resultante de reações; P indica a concentração de uma substância e V representa o volume.

O fluxo existente, denominado por J , é dado pela Equação (2.4) e refere-se à dispersão de uma substância em um determinado meio que, no meio aquático, está relacionado à ação conjunta de dois processos: o fluxo advectivo J_{adv} e o fluxo difusivo J_{dif} [18, 33].

$$J = J_{adv} + J_{dif}. \quad (2.4)$$

¹ ΔP representa a variação da concentração da substância P .

2.1.1 Fluxo Advectivo

O fluxo advectivo é entendido, aqui, como o movimento de massa de um ponto a outro, causado por agentes externos, como o campo de velocidades do meio: ventos, correntes, entre outros. Em geral o fluxo advectivo é denominado campo de velocidades [33].

Considerando uma análise unidimensional em x (ressalta-se que o fluxo nas direções y e z é análogo), o fluxo advectivo J_{adv} na direção x transporta uma substância conservativa com concentração P , através da área transversal A , a uma velocidade u , em um determinado tempo t (Figura 2.1), e pode ser dado pela Equação (2.5):

$$J_{adv} = uAP = QP, \quad (2.5)$$

onde: J_{adv} é o fluxo advectivo, u é a velocidade do fluxo na direção do eixo x , $A = \Delta y \Delta z$ é a área transversal perpendicular ao fluxo e $Q = uA$ é a vazão volumétrica.

Na Figura 2.1, consideramos o fluxo na direção do eixo x através do volume de controle $V = \Delta x \Delta y \Delta z$ onde, J_{in} é o fluxo de entrada pela face lateral esquerda e J_{out} é o fluxo de saída pela face lateral direita.

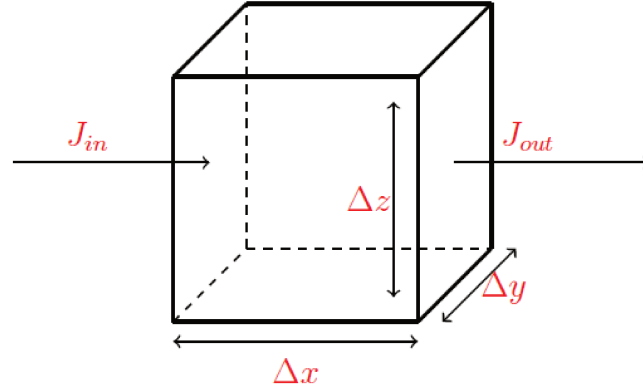


Figura 2.1: Volume de controle para o fluxo.

Considerando o fluxo uniforme, de modo que sua velocidade na direção do eixo x e o volume permanecem constantes, o fluxo de entrada, no instante t_0 , que transporta $P(x_0, t_0) = P_0$ [20, 22], é dado pela Equação (2.6):

$$J_{in} = QP_0 = uAP_0. \quad (2.6)$$

Sejam $x_1 = x_0 + \Delta x$, $t_1 = t_0 + \Delta t$ e $P_1 = P(x_1, t_1)$, o fluxo de saída $J_{out} = QP_1$ é dado pelo fluxo que entra mais a taxa de variação do fluxo no interior do volume de controle, $\frac{\partial J_{adv}}{\partial x}$, conforme a Equação (2.7):

$$J_{out} = QP_0 + \frac{\partial J_{adv}}{\partial x} \Delta x. \quad (2.7)$$

Substituindo as Equações (2.6) e (2.7) na Equação (2.3) para os fluxos advectivos de entrada e saída no volume de controle temos a Equação (2.9):

$$V \frac{\Delta P}{\Delta t} = J_{in} - J_{out}, \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} &= QP_0 - \left(QP_0 + \frac{\partial J_{adv}}{\partial x} \Delta x \right) \\ &= -\frac{\partial J_{adv}}{\partial x} \Delta x. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Dado que o fluxo é uniforme no volume de controle, substituindo (2.5) em (2.9) temos:

$$V \frac{\Delta P}{\Delta t} = -\frac{\partial(uAP)}{\partial x} \Delta x = -u \frac{\partial P}{\partial x} V.$$

Daí, tomando-se o limite quando $\Delta t \rightarrow 0$, tem-se a Equação (2.10):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -u \frac{\partial P}{\partial x}, \quad (2.10)$$

que representa o fluxo na direção do eixo x , ou seja, a variação da concentração da substância $P(x, t)$ no tempo pelo fluxo advectivo na direção do eixo x .

De forma análoga, tomando-se o fluxo advectivo na direção do eixo y com $J = vAP$, tem-se a Equação (2.11):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = -v \frac{\partial P}{\partial y}. \quad (2.11)$$

Para sistemas aquáticos bidimensionais rasos, a variação da concentração da substância por transporte advectivo nas direções x e y é dada pela Equação (2.12):

$$\begin{aligned} \frac{\partial P}{\partial t}(x, y, t) &= -u \frac{\partial P}{\partial x} - v \frac{\partial P}{\partial y} \\ \frac{\partial P}{\partial t} &= -\mathbf{V} \cdot \nabla P, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde: $\mathbf{V} = (u, v)$ indica o campo de velocidade do fluxo nas direções x e y , $\nabla P = (\partial P/\partial x, \partial P/\partial y)$ o gradiente da concentração P e $\partial P/\partial t$ representa a taxa de variação da concentração da substância P no ponto (x, y) no instante t .

2.1.2 Fluxo Difusivo

A difusão é um processo de transporte microscópico de um soluto em um fluido, produzido pela dispersão de partículas e pelo movimento aleatório das moléculas (também existe difusão turbulenta que não é objetivo deste estudo).

Pela lei de Fick para difusão molecular, a matéria se movimenta de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração. Assim, a velocidade de movimento da massa resultante por difusão molecular é inversamente proporcional ao gradiente da concentração de massa, [18, 20, 33, 49], e portanto, o fluxo difusivo na direção do eixo x é dado pela Equação (2.13):

$$J_{dif} = -D\nabla P = -D\frac{\partial P}{\partial x}. \quad (2.13)$$

De forma análoga, para o sistema aquático raso bidimensional, tem-se:

$$J_{dif} = -D\nabla P(x, y, t) = -D\left(\frac{\partial P}{\partial x}, \frac{\partial P}{\partial y}\right).$$

Desta forma, a difusão tem uma tendência a minimizar os gradientes de concentração da substância no meio. Trata-se de um fenômeno que move a substância de uma região de alta concentração para a de baixa concentração, indicado pelo sinal negativo. Neste modelamento, D é o coeficiente de difusão molecular de massa e, sempre que não houver fontes e/ou sumidouros, sua variação ocorre de acordo com as propriedades moleculares inerentes do soluto e do fluido, independente da posição [33].

Os fluxos de massa difusivos de entrada e saída, J_{in} e J_{out} , na direção do eixo x por unidade de área no volume de controle (ver Figura 2.1), serão utilizados para se obter a equação de difusão da substância P e estes são dados pela lei de Fick (2.13)

$$J_{in} = -D\frac{\partial P_0}{\partial x} \quad e \quad J_{out} = -D\frac{\partial P_1}{\partial x}. \quad (2.14)$$

A massa total por fluxo difusivo, dada por (2.8), é obtida pelo produto dos fluxos (2.14) pela área transversal $A = \Delta y \Delta z$, tomando-se o limite quando $\Delta t \rightarrow 0$, resulta na Equação (2.15):

$$V \frac{\partial P}{\partial t} = -DA \left(\frac{\partial P_0}{\partial x} - \frac{\partial P_1}{\partial x} \right). \quad (2.15)$$

Considerando P e $\partial P / \partial x$ contínuas em x , podemos encontrar a expansão linear em série de Taylor para cada x [11, 25], em função de x_0 como segue na Equação (2.16):

$$\frac{\partial P_1}{\partial x} = \frac{\partial P_0}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial P_0}{\partial x} \right) \Delta x + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (2.16)$$

onde $\mathcal{O}(\Delta x^2)$ é o erro de truncamento da série de Taylor. Sem perda de generalidade, supondo $x_0 = x$ e substituindo a Equação (2.16) na Equação (2.15) do fluxo total, temos a Equação (2.17):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} = D \Delta P, \quad (2.17)$$

onde ΔP é o Laplaciano de P . No caso bidimensional, pode ser representado pela Equação (2.18):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 P}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} \right). \quad (2.18)$$

As discussões anteriores descrevem os termos individuais de advecção e difusão. Entretanto, considerando que ambos os fenômenos ocorrem simultaneamente (e são linearmente independentes), pelo princípio de superposição, eles podem ser somados [22, 49]. Desta forma, o transporte da concentração da substância P ocorre através da combinação das equações de transporte difusivo e advectivo (2.12) e (2.17), resultando:

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \Delta P - \mathbf{V} \cdot \nabla P. \quad (2.19)$$

A Equação (2.19) é conhecida como a equação de difusão-advectação. No caso unidimensional, é representada pela Equação (2.20):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \frac{\partial^2 P}{\partial x^2} - u \frac{\partial P}{\partial x}, \quad (2.20)$$

e no caso bidimensional, ela pode ser representada pela Equação (2.21):

$$\frac{\partial P}{\partial t} = D \left(\frac{\partial^2 P}{\partial X^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial Y^2} \right) - (u, v) \cdot \left(\frac{\partial P}{\partial x}, \frac{\partial P}{\partial y} \right). \quad (2.21)$$

Para resolver as equações impõe-se algumas condições sobre as variáveis e fronteiras do domínio de modo a garantir a existência de solução única e interpretação física.

2.2 Condições Iniciais e de Contorno

A modelagem com fins práticos, que descreve algum fenômeno, deve atender a condições específicas do meio. Nos modelos que envolvem equações diferenciais é muito importante definir as condições de contorno e as condições iniciais, as quais estão fortemente ligadas a cada problema que está sendo modelado [3].

A condição inicial representa o estado inicial das variáveis do sistema no tempo t_0 , a partir do momento em que o fenômeno começou a ser observado. O comportamento de cada variável é completamente determinado pelas equações que a governam e pelas condições iniciais das variáveis [18].

As condições de contorno representam a interação do sistema com a fronteira de seu domínio. Algumas destas fronteiras podem ter variações nas concentrações, gerando perda ou ganho nas concentrações das variáveis estudadas.

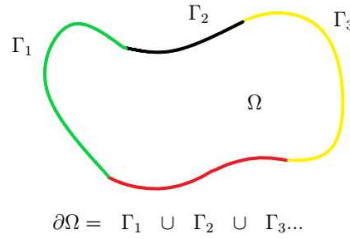


Figura 2.2: Fronteiras do domínio.

Assim, suponhamos um domínio espacial Ω como na Figura 2.2, limitado por uma fronteira suave $\partial\Omega$, formada por n subdivisões Γ_i , com $i = 1, \dots, n$ nas quais o comportamento da função P pode ter variações significativas pelas características específicas do meio. Assim,

$$\partial\Omega = \cup_{i=1}^n \Gamma_i.$$

As condições de contorno podem ser classificadas como: condição de Dirichlet, condição de Neumann e condição de Robin, conforme veremos nas próximas subseções.

2.2.1 Condição de Contorno de Dirichlet

Dada a fronteira $\Gamma_i \subset \partial\Omega$ para algum $i = 1, \dots, n$, a condição de contorno de Dirichlet determina que os valores da solução P , da equação diferencial parcial, são conhecidos em cada ponto da fronteira Γ_i por meio de uma função $g_1(x, y, t)$ e pode ser dada pela Equação (2.22):

$$P(x, y, t) \big|_{\Gamma_i} = g_1(x, y, t) \quad \text{onde} \quad (x, y) \in \Gamma_i \subseteq \partial\Omega, \quad t \in I. \quad (2.22)$$

Quando $g_1(x, y, t) = 0$ dizemos que é uma condição homogênea, ou seja, que a concentração da substância P nesta fronteira é nula, o que representa que a fronteira absorve efetivamente toda a substância que se encontra ou chega até ela [8].

2.2.2 Condição de Contorno de Neumann

A condição de Neumann é frequentemente utilizada para descrever variações das concentrações de P na fronteira, dada na Equação (2.23), onde a derivada direcional da função P é especificada por uma função $g_2(x, y, t)$ em cada ponto da fronteira Γ_i , para algum $i = 1, \dots, n$, conforme:

$$\left. \frac{\partial P}{\partial \eta}(x, y, t) \right|_{\Gamma_i} = g_2(x, y, t) \quad \text{onde} \quad (x, y, t) \in \Gamma_i \times I, \quad (2.23)$$

onde η é a normal à fronteira Γ_i . Quando $g_2(x, y, t) = 0$ dizemos que a condição é homogênea, isto é a concentração da substância P é refletida nesta fronteira levando de volta a substância para o interior de Ω , ou podemos interpretar como uma condição de fronteira de não fluxo, sempre $\mathbf{V} = 0$ [8].

2.2.3 Condição de Contorno de Robin

As condições de Robin são consideradas condições de fronteiras mistas e são obtidas pela combinação linear das condições de Dirichlet e Neumann, tal como representado na Equação (2.24):

$$\left(\gamma P + \beta \frac{\partial P}{\partial \eta} \right) (x, y, t) \bigg|_{\Gamma_i} = g(x, y, t) \quad \text{onde} \quad (x, y, t) \in \Gamma_i \times I, \quad (2.24)$$

γ e β são constantes² e η é o vetor normal à fronteira Γ_i .

Se $g(x, y, t) = 0$, e dependendo dos sinais das constantes γ e β , a fronteira (2.24) representa a variação da concentração P , seja por perda ou ganho de concentração, de forma proporcional à concentração presente nesta fronteira. A taxa de proporcionalidade é dada por γ/β , com uma relação de primeira ordem. Quando $g = 0$ e não houver variação consideramos a condição de Neumann Homogênea.

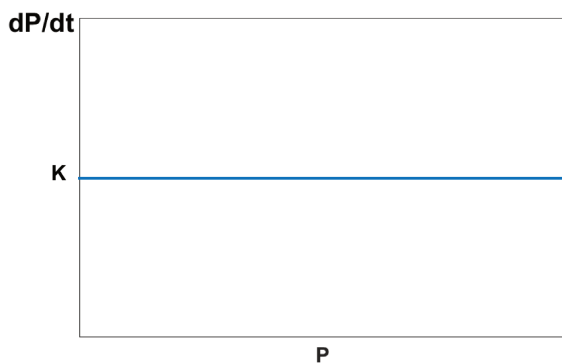
2.3 Equações Complementares de Estudo

2.3.1 Equações de Reação

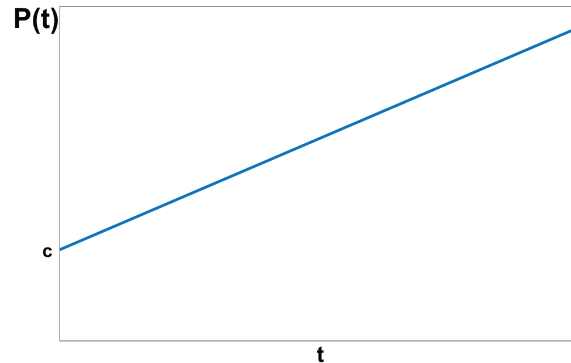
Muitos estudos que descrevem as reações e os processos químicos, bioquímicos e biológicos se baseiam em modelos de respostas funcionais [38] em que as taxas de reação cinética de uma substância P , ao longo do tempo, são modeladas por respostas funcionais que dependem da concentração das mesmas denotadas como $f(P)$, tal como na equação de reação de n -ésima ordem, dada pela Equação (2.25):

$$\frac{dP}{dt} = KP^n, \quad (2.25)$$

onde dP/dt representa a taxa de variação temporal da concentração de P e K representa a velocidade máxima de reação [18].



(a) Resposta funcional de ordem zero, $dP/dt = K$, com $K > 0$.

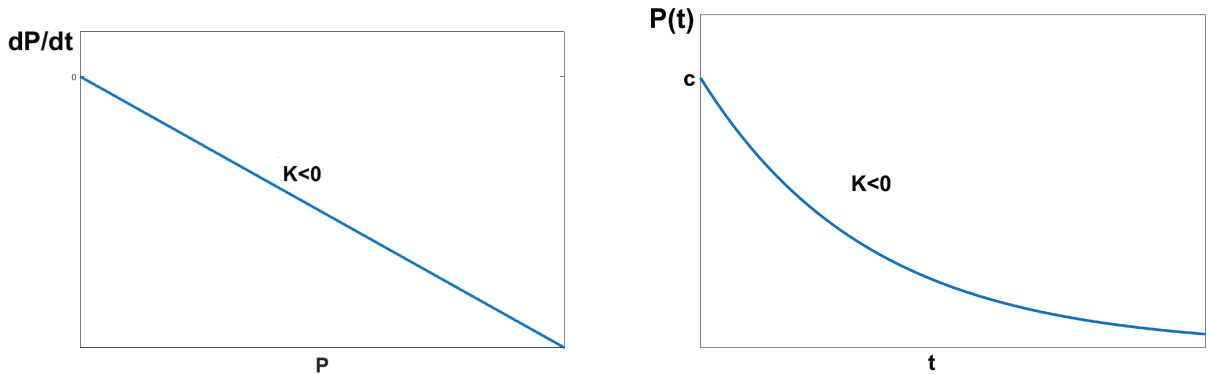


(b) Solução P , $P(t) = Kt + c$ para a reação de ordem zero, com $K > 0$.

Figura 2.3: Taxas de reação da concentração de uma substância P e sua solução.

²A constante β , no caso da equação de difusão-advecção, é o coeficiente de difusão.

Se $n = 0$, temos uma reação de ordem zero (ver Figura 2.3(a)), com variação da concentração de P ao longo do tempo independente de P , isto é, a velocidade de reação permanece constante no tempo $f(P) = K$, apresentando um comportamento linear da concentração estudada P [18, 38].



(a) Resposta funcional de primeira ordem, $dP/dt = KP$, com $K < 0$.

(b) Solução $P(t) = ce^{Kt}$, para a reação de primeira ordem, com $K < 0$.

Figura 2.4: Taxas de reação da concentração de uma substância P e sua solução.

Se $n = 1$, a reação é de primeira ordem ³, dada pela Figura 2.4(a). Se $K < 0$ ($K > 0$) a taxa de decaimento (crescimento) da substância P é diretamente proporcional à concentração da substância P . A cinética de primeira ordem é um processo dependente da concentração P e é comumente utilizada para descrever um comportamento exponencial da substância P [22, 27].

Se $n \neq 0$ e $n \neq 1$, na Equação (2.25) temos respostas funcionais não-lineares. Ressalta-se que, em geral a variação temporal de P é uma função não-linear em P . Dentre as respostas funcionais não-lineares, temos em destaque as respostas funcionais de Michaelis-Menten ⁴ e de Holling Tipo III.

A resposta funcional não-linear de Michaelis - Menten é dada pela Equação (2.26) e é representada na Figura 2.5(a), onde $K > 0$ é a taxa de crescimento máxima e κ refere-se à constante de saturação média.

$$f_M(P) = K \frac{P}{\kappa + P}, \quad (2.26)$$

³Também conhecida como resposta funcional de Holling Tipo 1.

⁴Também conhecida como resposta funcional de Holling Tipo II.

Para $dP/dt = K \frac{P}{\kappa + P}$, a taxa de reação de P acelera inicialmente e depois desacelera até atingir a taxa máxima. Observe que quando a concentração de P é bem menor do que κ , o termo dominante no denominador de (2.26) é κ , desta forma a concentração P pode ser desprezada no denominador, isto é, quando $P \ll \kappa$ então, $f_M(P) \approx \frac{K}{\kappa} P$. Assim a resposta de Michaelis - Menten em seu primeiro estágio se comporta como uma resposta funcional linear [18, 19].

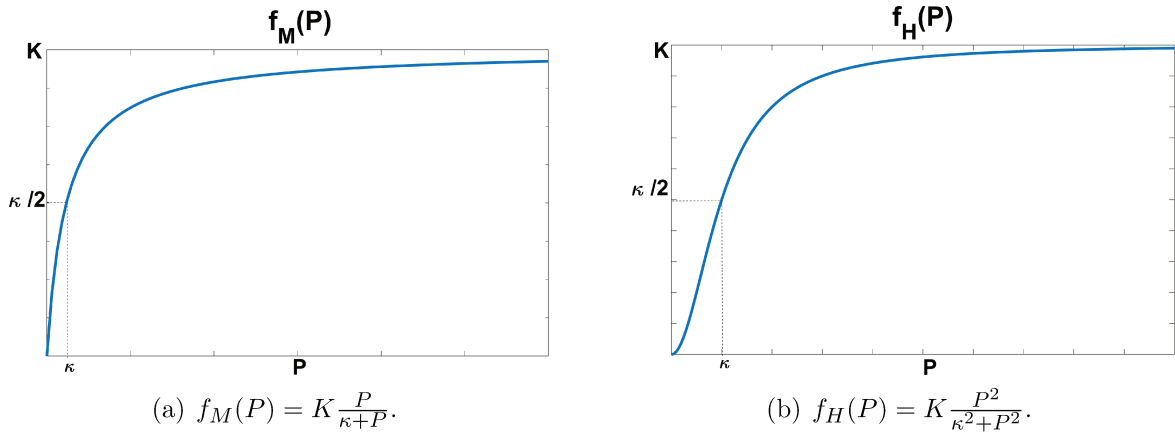


Figura 2.5: Respostas funcionais de Michaelis - Menten e Holling tipo III.

Analisando a resposta funcional de Michaelis - Menten, verifica-se que quando a concentração de P é bem maior do que κ , o termo dominante no denominador da Equação (2.26) é P . Desta forma, a constante de saturação média κ pode ser desprezada, e a resposta funcional $f(P)$ tende à taxa de crescimento máximo K , isto é, quando $P \gg \kappa$ então, $f(P) \approx K$. Assim, a taxa de crescimento de P satura e a resposta de Michaelis - Menten em seu estágio final se comporta como uma resposta funcional de ordem zero [18, 19, 21, 38, 46].

A resposta funcional não-linear de Holling tipo III é dada pela Equação (2.27),

$$f_H(P) = K \frac{P^2}{\kappa^2 + P^2}. \quad (2.27)$$

Quando as concentrações de P são altas, a resposta funcional de Holling tipo III, representada na Figura 2.5(b), é semelhante à resposta funcional de Michaelis - Menten na Figura 2.5(a) e sua interpretação é a mesma. Sem embargo, para concentrações baixas de P , quando $P \ll \kappa$, $f_H(P) \approx \frac{K}{\kappa^2} P^2$, isto é, no estágio inicial a resposta funcional de Holling tipo III é próxima de uma reação de segunda ordem [21]. Esta taxa de crescimento é menor que a taxa de crescimento da resposta de Michaelis - Menten.

2.3.2 Equações de Balanço de Massa de DBO e OD

No Apêndice A, são apresentadas as hipóteses sobre as quais se estabelece a modelagem de Streeter e Phelps [19]. Entretanto, de acordo com os autores, a modelagem da depleção do OD é dada através de uma equação de reação de primeira ordem, baseada no déficit do oxigênio definido como a diferença entre o valor de saturação do OD , representado por (C_s) e a concentração real de OD presente no corpo de água (C) . O déficit de oxigênio $C_s - C$ decresce a uma taxa diretamente proporcional ao próprio valor do déficit e este decréscimo é chamado por reaeração, dado pela Equação (2.28):

$$\frac{d}{dt}(C_s - C) = K_r(C_s - C), \quad (2.28)$$

onde:

- $\frac{d}{dt}(C_s - C)$: representa a taxa de déficit de oxigênio;
- C : representa a concentração de oxigênio dissolvido na água;
- C_s : é a constante de saturação de OD e
- K_r : é o valor da constante de proporcionalidade chamada coeficiente de reaeração.

Supondo a concentração inicial de oxigênio em $t = t_0$ dada por C_0 , fazendo-se algumas manipulações obtém-se a Equação (2.29), que representa a solução analítica da Equação (2.28),

$$C(t) = C_s + (C_0 - C_s)e^{-K_r t}. \quad (2.29)$$

As concentrações de DBO remanescentes são obtidas por meio de amostras incubadas por 5 dias a uma temperatura de 20°C e denotadas comumente por $DBO_{5,20}$. Considerando que o consumo de oxigênio para degradar a matéria orgânica na amostra varia ao longo do tempo, o déficit de oxigênio dissolvido aumenta a uma taxa proporcional à demanda de oxigênio da matéria orgânica remanescente. Assim, esta variação é dada por uma reação de primeira ordem, na equação diferencial ordinária linear, dada por:

$$\frac{dL}{dt} = -K_d L, \quad K_d > 0, \quad (2.30)$$

onde:

- L : representa a concentração de DBO remanescente;
- dL/dt : representa a taxa de oxidação de matéria orgânica, que decresce proporcionalmente à matéria orgânica remanescente e
- K_d : representa o coeficiente de desoxigenação.

Supondo $L(t_0) = L_0$ como condição inicial em $t = t_0$ a concentração de DBO remanescente na zona de mistura homogênea dada pela Equação (2.30), tem por solução analítica:

$$L(t) = L_0 e^{-K_d t}. \quad (2.31)$$

Uma vez que $K_d > 0$, $t > 0$, a exponencial é decrescente. Assim, L decresce indicando que a matéria orgânica está sendo degradada: quanto maior é K_d , mais rápido é o decaimento do DBO .

Os valores típicos do coeficiente K_d são considerados a uma temperatura de $20^\circ C$, denotados na literatura como $K_{d,20}$, de acordo com as características do corpo hídrico e do efluente (para mais detalhes ver no Capítulo 4, as Tabelas 4.1 e 4.2).

Existem pesquisas desenvolvidas por laboratórios para determinar estes valores, que mostram como a temperatura influencia no metabolismo microbiano [54] e, desta forma, K_d é um parâmetro que depende das características da matéria orgânica e da temperatura. Então, reconsiderando o valor de K_d e corrigindo o valor da temperatura real tem-se:

$$K_d = K_d(T) = K_{d,20} \theta^{T-20},$$

que expressa a relação entre K_d real com o $K_{d,20}$, em função da temperatura T da água.

K_d é o coeficiente de desoxigenação à temperatura ambiente e $K_{d,20}$ é o coeficiente de desoxigenação à temperatura de $20^\circ C$, sendo a DBO observada por 20 dias, θ é o coeficiente de temperatura adimensional, referenciado na Agência de Proteção Ambiental dos Estados Unidos (USEPA-1987), usualmente adotado como $\theta = 1,047$ e interpretado como o aumento do coeficiente K_d em 4,7% a cada acréscimo de $1^\circ C$ da temperatura da água.

O coeficiente de reaeração também é influenciado pela temperatura. Desta forma, $K_{r,20}$ tomado a uma temperatura de $20^\circ C$ deve ser corrigido para o valor da temperatura

real e assim, adotamos K_r como:

$$K_r = K_r(T) = K_{r,20}\theta^{T-20},$$

onde θ é usualmente adotado como 1,024.

A relação entre as variáveis DBO e OD é dada pela equação diferencial (2.32), que representa a dinâmica do oxigênio dissolvido proposta por Streeter e Phelps:

$$\frac{dC}{dt} = -K_dL + K_r(C_s - C). \quad (2.32)$$

Assim, a variação de OD no tempo apresenta perda pela oxidação de matéria orgânica, representada pelo sinal negativo no termo K_dL e ganho na concentração de OD , dado pela reaeração representada no segundo termo $K_r(C_s - C)$. Usando as Equações (2.29) e (2.31), pode-se obter a solução analítica da Equação (2.32) (ver apêndice A.2).

Capítulo 3

Modelo Proposto

3.1 Modelo Acoplado para *DBO* e *OD*

O modelo proposto tem por objetivo estudar a dinâmica das concentrações de *DBO* e *OD* (mg/l) num sistema aquático bidimensional $\Omega \subset \mathbb{R}^2$ e fronteira $\partial\Omega$, no intervalo de tempo $I = (0, t_f]$ (dias), com taxas de reações cinéticas de degradação da *DBO* e depleção do *OD* não-lineares, através de um sistema de EDP's do tipo difusão-advecção-reação, acopladas, de segunda ordem, onde as concentrações de *DBO* e *OD* em $(x, y, t) \in \Omega \times I$ são denotadas por $L(x, y, t) \geq 0$ e $C(x, y, t) \geq 0$, respectivamente.

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial t} = D_l \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \right) - (u, v) \cdot \left(\frac{\partial L}{\partial x}, \frac{\partial L}{\partial y} \right) - K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + q \end{array} \right. \quad (3.1)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t} = D_c \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - (u, v) \cdot \left(\frac{\partial C}{\partial x}, \frac{\partial C}{\partial y} \right) - K_2 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + \alpha(C_s - C) \end{array} \right. \quad (3.2)$$

onde:

L : representa a concentração de *DBO* remanescente (mg/l);

C : representa a concentração de *OD* na água (mg/l);

D_l : é o coeficiente de difusão da *DBO* (m^2/dia);

D_c : é o coeficiente de difusão do *OD* (m^2/dia);

$\mathbb{V} = (u, v)$: é o campo de velocidades do vento (m/dia);

K_1 : é o coeficiente de degradação do poluente a $20^\circ C$ ($1/dia$);

K_2 : é o coeficiente de desoxigenação do OD a $20^\circ C$ ($1/dia$);

κ : é o valor da saturação média de OD (mg/l);

α : é o coeficiente de reaeração ($1/dia$);

C_s : é o constante de saturação de oxigênio (mg/l) e

q : é o termo fonte (carga de DBO) ($mg/l/dia$).

Na Equação (3.1), a cinética de degradação de DBO é considerada como uma resposta funcional não-linear Holling tipo III, dependente da concentração de OD e da constante de saturação média κ , $K_1(C^2/(\kappa^2 + C^2))L$.

Após o estudo do modelo usando a resposta de Michaelis-Menten, e comparando com a resposta de Holling tipo III, consideramos esta última mais adequada. Esta escolha foi feita supondo que, para concentrações baixas de oxigênio a taxa de degradação de DBO é mais lenta, em comparação com a resposta funcional de Michaelis - Menten, (ver Figura 3.1), onde a taxa de degradação cresce rapidamente em concentrações baixas de OD . Desta Figura, verifica-se que ambas as respostas coincidem quando $C = \kappa$. Quando a concentração de OD aumenta ($C > \kappa$), a taxa de degradação de DBO dada pela resposta funcional de Holling tipo III é maior que a resposta funcional de Michaelis - Menten.

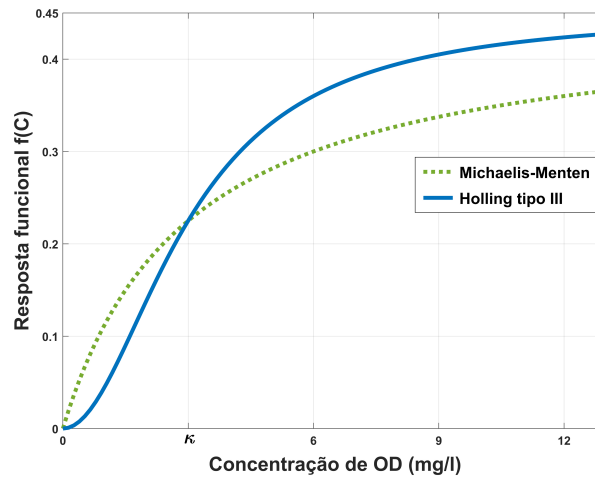


Figura 3.1: Respostas funcionais de Michaelis Menten $f_M(C) = K_1 \frac{C}{\kappa + C}$ e Holling tipo III $f_H(C) = K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2}$.

Assim, para concentrações baixas de C , a variação de L no tempo diminui proporcionalmente ao produto das concentrações de DBO e OD . Para concentrações altas de OD , a variação de L no tempo será independente de C e só dependerá de L , isto é, para concentrações altas de oxigênio esta resposta funcional permite remover DBO (em unidades de massa por litro) a uma taxa proporcional à concentração de DBO presente no meio aquático. Uma análise similar é feita para a cinética de desoxigenação do OD na Equação (3.2).

Como condições iniciais consideramos $L(x, y, 0) = L_0 \geq 0$ e $C(x, y, 0) = C_0 > 0$. O fluxo através das fronteiras Γ e $\partial\Omega \setminus \Gamma$, na direção do vetor normal η são dadas pelas condições de Neumann homogêneas, considerando que não há variação das concentrações de C e L , na fronteira indicada, assim, para OD no domínio $\frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\partial\Omega} = 0$ e para DBO condições de Neumann homogêneas $\frac{\partial L}{\partial \eta} \Big|_{\partial\Omega \setminus \Gamma} = 0$ e de Dirichlet $L(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \Gamma} = g(x, y, t)$, isto é os valores das concentrações de L , na fronteira Γ , são conhecidas e dadas pela função g .

Resumidamente, o sistema pode ser expresso como:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial L}{\partial t} = D_l \Delta L - \mathbf{V} \nabla L - K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + q \end{array} \right. \quad (3.3)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial C}{\partial t} = D_c \Delta C - \mathbf{V} \nabla C - K_2 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + \alpha(C_s - C) \end{array} \right. \quad (3.4)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} L(x, y, 0) = L_0 \quad C(x, y, 0) = C_0 \end{array} \right. \quad (3.5)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} L(x, y, t) \Big|_{(x,y) \in \Gamma} = g(x, y, t) \quad \frac{\partial L}{\partial \eta} \Big|_{\partial\Omega \setminus \Gamma} = 0 \quad \frac{\partial C}{\partial \eta} \Big|_{\partial\Omega} = 0 \end{array} \right. \quad (3.6)$$

Alguns estudos unidimensionais consideram a equação de difusão-advecção-reação, apresentando soluções analíticas. Entretanto alguns deles, pela sua complexidade, são estudados numericamente por não ser possível explicitar a solução analítica exata [28], assim como é proposto neste trabalho.

A seguir, apresentamos um estudo sobre a estabilidade do sistema.

3.2 Estudo de Estabilidade

Antes de resolver numericamente o sistema não-linear (3.3)-(3.6), estudaremos o modelo simplificado considerando o modelo sem fluxo difusivo e advectivo, analisando a estabilidade do problema simplificado e posteriormente comparando os resultados obtidos aqui com o modelo geral proposto no Capítulo 4.

O termo estabilidade é comumente usado para caracterizar o sistema de equações diferenciais e sua solução. A estabilidade da solução é determinada pelo comportamento das soluções do sistema que possuem condições iniciais próximas das condições da solução estudada [32].

Ao estudar o comportamento da *DBO* e do *OD*, em função do tempo, queremos saber o que acontece com o fenômeno quando as condições iniciais mudam, ou seja, qual o comportamento das variáveis dependentes a longo prazo. Existem valores de L e C que se mantêm invariantes a longo prazo?

Assim, desconsiderando o fluxo difusivo e advectivo no modelo nas Equações (3.3)-(3.4), obtemos o sistema de EDO's:

$$\begin{cases} \frac{dL}{dt} = -K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + q \\ \frac{dC}{dt} = -K_2 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + \alpha(C_s - C). \end{cases} \quad (3.7)$$

$$\quad \quad \quad (3.8)$$

Para a análise de estabilidade, devemos encontrar os pontos de equilíbrio. Assim iniciamos o estudo com a análise do caso estacionário, isto é, quando a variável dependente não apresenta variações significativas no tempo, permanecendo constante no tempo. Matematicamente isso é representado pelas derivadas da concentrações sendo nulas ($dL/dt = dC/dt = 0$).

Assim, o sistema estacionário é dado pelo problema homogêneo associado a (3.7)-(3.8), representado por:

$$\begin{cases} 0 = -K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + q \\ 0 = -K_2 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + \alpha(C_s - C) \end{cases} \quad (3.9)$$

$$\quad \quad \quad (3.10)$$

Para encontrar os pontos de equilíbrio $P = (L^*, C^*)$, temos que resolver o sistema (3.9)-(3.10) em relação às variáveis C e L , isto é, temos que encontrar valores de L^* e C^* que satisfazem o sistema. Da Equação (3.9), supondo K_1 e C não nulos temos:

$$L^* = \frac{q}{K_1} \left(\frac{\kappa^2 + C^2}{C^2} \right).$$

Substituindo na Equação (3.9) temos $\alpha(C_s - C^*) - \frac{K_2}{K_1} q = 0$.

Assim, para α não nulo, temos:

$$C^* = C_s - \frac{K_2}{\alpha K_1} q.$$

Portanto, o ponto de equilíbrio estacionário é dado por (3.11):

$$P^* = \left(\frac{q}{K_1} \left(\frac{\kappa^2 + [C^*]^2}{[C^*]^2} \right), C_s - \frac{K_2}{\alpha K_1} q \right). \quad (3.11)$$

Quando $q = 0$ obtemos $L^* = 0$ e $C^* = C_s$, isto é, o ponto de equilíbrio de fronteira $P_0 = (0, C_s)$. Considerando que não há sentido biológico para concentrações negativas, garantimos a existência do ponto de equilíbrio no interior sempre que $q \leq C_s \alpha K_1 / K_2$ e $q \neq 0$.

Para avaliar a estabilidade local dos pontos de equilíbrio, determina-se o polinômio característico da matriz Jacobiana (3.12), associada ao sistema (3.9)-(3.10). Assim, a matriz Jacobiana associada ao sistema é dada por:

$$J(L, C) = \begin{bmatrix} -K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} & -2K_1 \kappa^2 \frac{CL}{(\kappa^2 + C^2)^2} \\ -K_2 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} & -2K_2 \kappa^2 \frac{CL}{(\kappa^2 + C^2)^2} - \alpha \end{bmatrix}. \quad (3.12)$$

Para classificar os pontos de equilíbrio, utilizaremos o critério de Routh-Hurwitz [1], que nos garante que todas as raízes do polinômio característico $p(\lambda) = \lambda^2 + a\lambda + b$ possuem parte real negativa se, e somente se, $a > 0$ e $b > 0$.

Seja uma matriz A qualquer e $p(\lambda)$ seu polinômio característico:

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad p(\lambda) = \det(A - \lambda I),$$

onde,

$$p(\lambda) = \lambda^2 - (a_{11} + a_{22})\lambda + (a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}).$$

Assim, $a = -(a_{11} + a_{22})$ e $b = a_{11}a_{22} - a_{21}a_{12}$.

Considerando que os parâmetros e as variáveis do modelo são positivos, os coeficientes do polinômio característico da matriz Jacobiana aplicada aos pontos de equilíbrio $J(L^*, C^*)$ são tais que:

$$\begin{aligned} a &= K_1 \frac{[C^*]^2}{\kappa^2 + [C^*]^2} + 2K_2\kappa^2 \frac{C^*L^*}{(\kappa^2 + [C^*]^2)^2} + \alpha > 0, \\ b &= K_1 \frac{[C^*]^2}{\kappa^2 + [C^*]^2} \left(\alpha + 2K_2\kappa^2 \frac{C^*L^*}{(\kappa^2 + [C^*]^2)^2} \right) - 2K_1K_2\kappa^2 \frac{[C^*]^3L^*}{(\kappa^2 + [C^*]^2)^3} \\ &= \alpha K_1 \frac{[C^*]^2}{\kappa^2 + [C^*]^2} \\ &> 0, \end{aligned}$$

e portanto, o ponto de equilíbrio P^* na Equação (3.11) é localmente assintoticamente estável. Uma solução do sistema (3.7)-(3.8) é dada pela dupla de funções que satisfazem

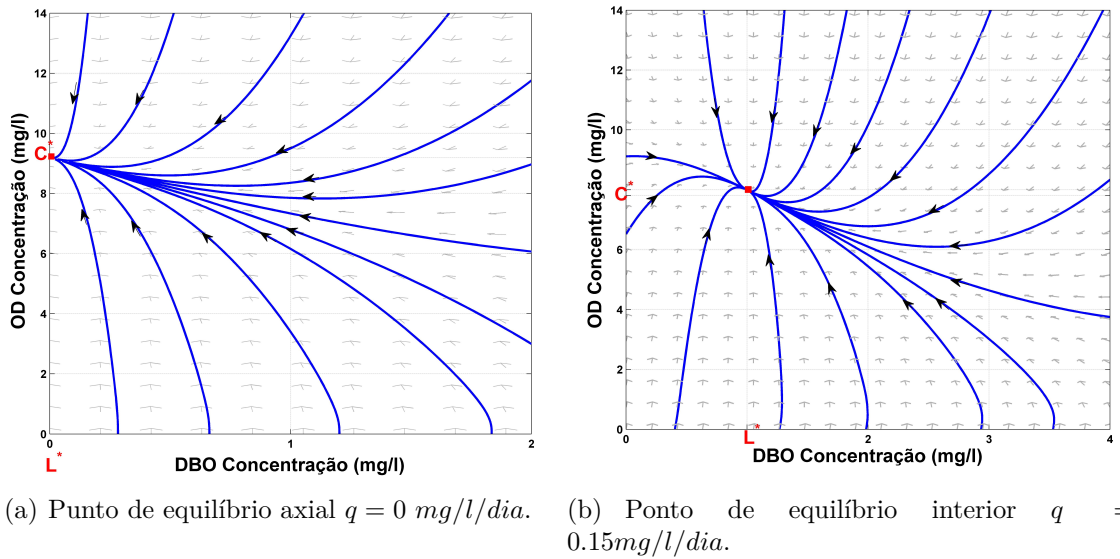


Figura 3.2: Plano de fase: Estabilidade do ponto de equilíbrio. Parâmetros da simulação: $K_1 = 0,15/\text{dia}$, $K_2 = 0,45/\text{dia}$, $\kappa = 0,5 \text{ mg/l}$, $\alpha = 0,37/\text{dia}$ e $C_s = 9,2 \text{ mg/l}$.

as duas equações do sistema acoplado, simultaneamente. Desta forma qualquer solução do sistema (3.7)-(3.8) é uma curva no espaço tridimensional, dada pelos pontos $(t, L(t), C(t))$. Assim, podemos também definir uma curva no plano LC , dada pelos pontos $(L(t), C(t))$ com $t_0 < t < t_f$ denominada **trajetória ou órbita da solução** $L = L(t)$ e $C = C(t)$.

O plano LC , é chamado de **Plano de Fase** das soluções do sistema e as curvas $(L(t), C(t))$ podem ser interpretadas como as trajetórias das soluções no plano LC .

Os planos de fase¹ dados na Figura 3.2, apresentam o comportamento ao longo do tempo das soluções do sistema (3.7)-(3.8) para diferentes condições iniciais, ilustrados pelas trajetórias da solução sendo todas estas atraídas pelo ponto de equilíbrio. Na Figura 3.2(a) temos o plano de fase na ausência de fontes onde o ponto de equilíbrio axial é $P^0 = (0; 9, 2)$ e na Figura 3.2(b) o ponto de equilíbrio no interior $P^*(1, 0039; 7, 9838)$ para uma fonte não nula.

3.3 Tratamento Numérico do Modelo

A modelagem de sistemas aquáticos é considerada como complexa, portanto obter soluções analíticas torna-se difícil [18], entretanto, podemos obter uma solução aproximada e para isso a análise numérica se torna indispensável.

Um modelo numérico é uma versão discretizada do modelo matemático [18], onde transforma-se um problema contínuo em um problema discreto, resultando em um sistema com um número finito de variáveis, a ser resolvido computacionalmente.

Existem diversos métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais parciais tais como o Método de Diferenças Finitas (MDF) e Elementos Finitos (EF) [25]. Mais o MDF tem se tornado um dos métodos mais utilizados na resolução numérica de sistemas de equações diferenciais [56].

Para resolver o modelo proposto, mediante métodos numéricos, iremos inicialmente discretizar o domínio de estudo e, posteriormente discretizar as equações diferenciais do modelo com o método de diferenças finitas e o método de Crank-Nicolson. Para resolver os sistemas não-lineares, obtidos pela discretização, utiliza-se um método Preditor Corretor. Além disso, devido aos valores dos parâmetros usados nas simulações, surgem oscilações

¹Plotada no programa Pplane no site: <https://la.mathworks.com>, Acesso em 07/2020.

pela dominância advectiva do problema, para evitar estas oscilações, um método Upwind será incorporado.

3.3.1 Discretização do Domínio

Resolver o sistema de equações diferenciais é encontrar as funções $L(x, y, t)$ e $C(x, y, t)$ que satisfaçam o sistema e suas condições iniciais, sendo estas definidas em $(x, y, t) \in \Omega \times I \subset \mathbb{R}^3$. Assim, vamos transformar o modelo contínuo em um modelo discreto através de discretizações do domínio espacial e temporal. Desta forma, L e C e suas derivadas serão definidas por um número finito de pontos.

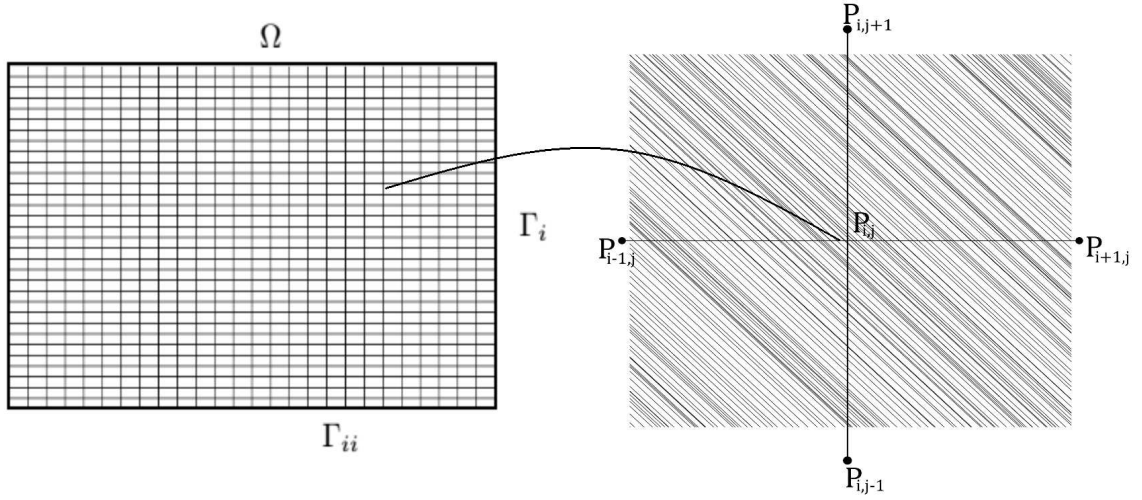


Figura 3.3: Discretização do domínio e estêncil de cinco pontos [6].

Inicialmente faremos as discretizações em uma variável particular P , que indicará a concentração de P . Nesta variável faremos tanto discretizações espaciais como temporal. Usaremos a notação $P_{i,j}^n$ para representar a concentração de P em um ponto arbitrário do plano (x_i, y_j) , no tempo arbitrário t_n .

Em relação à variável temporal, vamos tomar o intervalo de tempo $I = (0; t_f]$, subdividido em $n \in \mathbb{N}$ subintervalos de tempo igualmente espaçados, de tamanho Δt (*dias*), onde $\Delta t = t_f/n > 0$ e $t_i = i\Delta t$ para $\forall i = 0, \dots, n$.

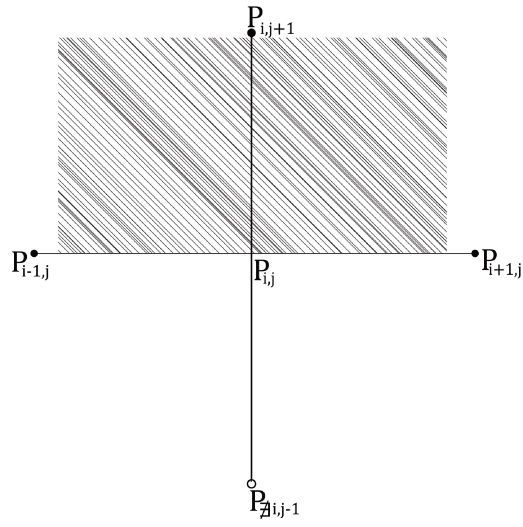
Dado um domínio bem definido e limitado Ω , a discretização deste domínio bidimensional consiste no conjunto discreto de nós (i, j) de coordenadas (x_i, y_j) no plano, obtidos quando dividimos o domínio Ω em uma malha, que pode ser homogênea ou não. Para o interesse deste trabalho vamos considerar um domínio retangular de

comprimento l e largura h , onde Δx e Δy são o espaçamento de malha na horizontal e na vertical (m).

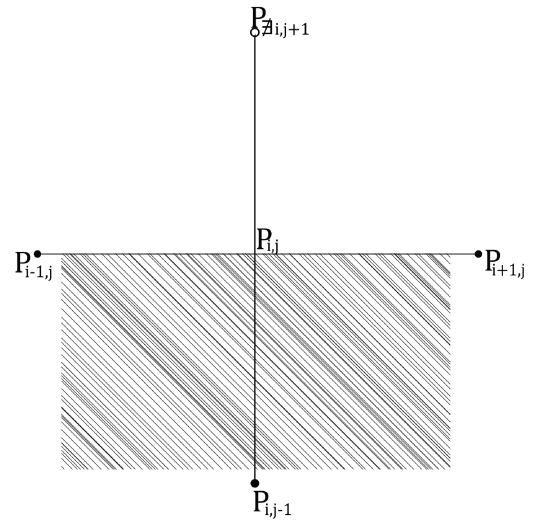
O reticulado do domínio espacial gera uma malha como na Figura 3.3, onde cada nó $(x_i, y_j) \in \Omega$ da malha representa um ponto da superfície da água, e o nó (x_i, y_j) é dito um ponto interior da malha se seus quatro vizinhos, (x_{i-1}, y_j) , (x_{i+1}, y_j) , (x_i, y_{j-1}) e (x_i, y_{j+1}) estão no interior do domínio Ω , como mostra o estêncil de cinco pontos na Figura 3.3. Se só dois ou três vizinhos estão no interior de Ω , o nó (x_i, y_j) é dito ponto fronteira, como na Figura 3.4.

Denotaremos simplesmente P^n a concentração de P no tempo t_n em um nó arbitrário da malha e $P_{i,j}$ a concentração de P no nó (x_i, y_j) , num tempo arbitrário.

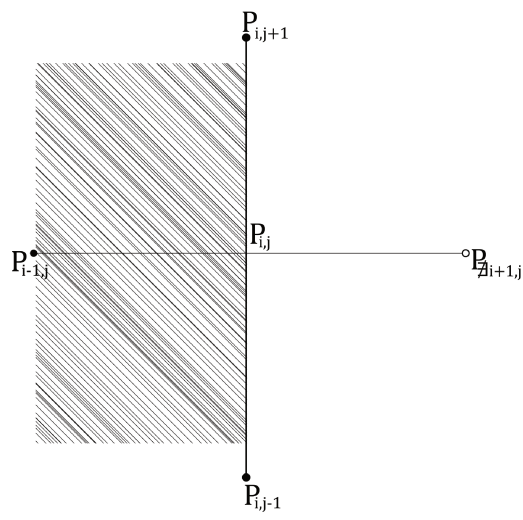
Observe que no domínio temos pontos interiores e de fronteira e cada um deve ser discretizado segundo suas equações. A condição de fronteira também é dada por meio de uma derivada direcional e assim, torna-se necessária a discretização. Com o estêncil de cinco pontos, obtemos oito tipos de fronteiras como apresentado na Figura 3.4.



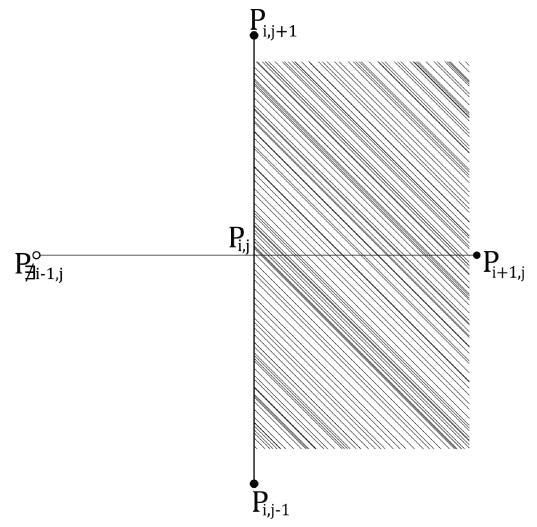
(a) Tipo I



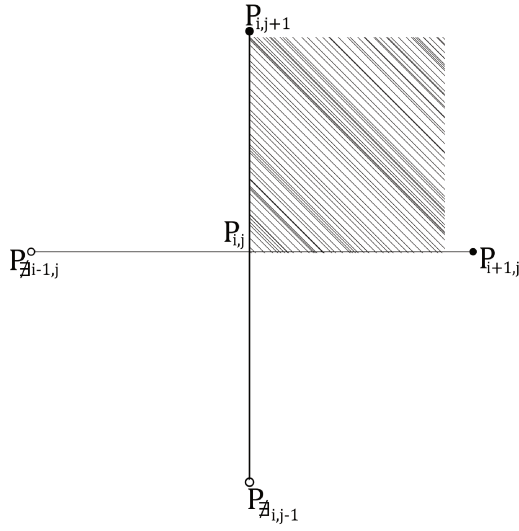
(b) Tipo II



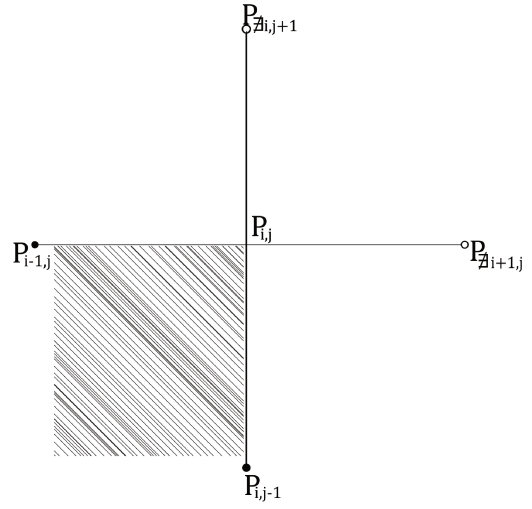
(c) Tipo II



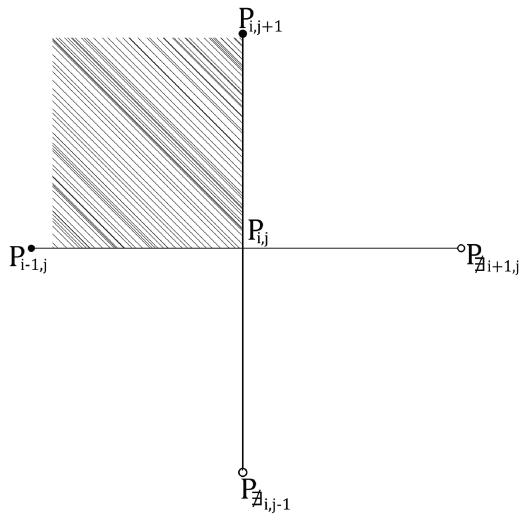
(d) Tipo IV



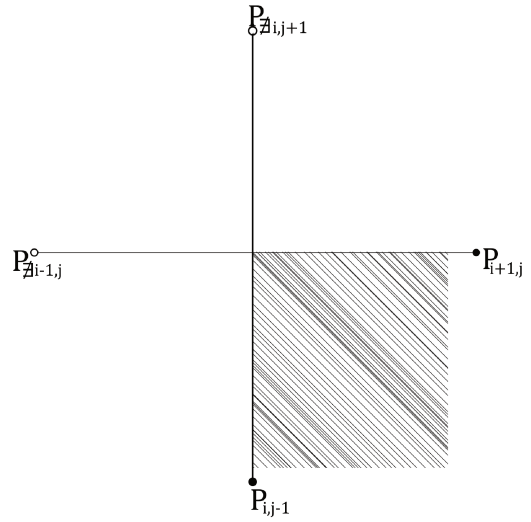
(e) Tipo V



(f) Tipo VI



(g) Tipo VII



(h) Tipo VIII

Figura 3.4: Tipos de fronteiras [6].

Para o tratamento numérico do modelo usaremos o método de Crank-Nicolson, que consiste em discretizar as derivadas usando o Método de Diferenças Finitas Centradas (DFC) de segunda ordem para a discretização das derivadas espaciais e a regra do trapézio para as derivadas da variável temporal. Assim, temos um método de segunda ordem de convergência no espaço e no tempo que é aplicado em um domínio discreto.

3.3.2 Discretização das Derivadas

Para a discretização temporal, com passo no tempo de $\Delta t/2$, denotaremos por $P^{n+1/2}$ a concentração de P no tempo $t_{n+\Delta t/2} \in (t_n, t_{n+1})$, num ponto qualquer do espaço. A aproximação da derivada na Equação (3.13) é obtida pela expansão de Taylor [11, 25],

$$\frac{\partial P^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} = \frac{P^{n+1} - P^n}{\Delta t}. \quad (3.13)$$

No modelo, as discretizações espaciais de $P_{i,j}$ e suas derivadas vão depender de seus vizinhos próximos, denotados à esquerda por $P_{i-1,j}$, à direita $P_{i+1,j}$, abaixo $P_{i,j-1}$ e acima $P_{i,j+1}$, com passo no espaço de Δx ou Δy , dependendo da derivada que estivermos aproximando. Para a discretização das derivadas de primeira ordem vamos usar a aproximação por DFC, em um tempo qualquer:

$$\frac{\partial P_{i,j}}{\partial x} = \frac{P_{i+1,j} - P_{i-1,j}}{2\Delta x} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial P_{i,j}}{\partial y} = \frac{P_{i,j+1} - P_{i,j-1}}{2\Delta y} + \mathcal{O}(\Delta y^2). \quad (3.15)$$

Para a discretização espacial das derivadas de segunda ordem do laplaciano, vamos usar a aproximação da segunda derivada por DFC em um tempo qualquer, dadas por:

$$\frac{\partial^2 P_{i,j}}{\partial x^2} = \frac{P_{i+1,j} - 2P_{i,j} + P_{i-1,j}}{\Delta x^2} + \mathcal{O}(\Delta x^2), \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial^2 P_{i,j}}{\partial y^2} = \frac{P_{i,j+1} - 2P_{i,j} + P_{i,j-1}}{\Delta y^2} + \mathcal{O}(\Delta y^2). \quad (3.17)$$

As discretizações anteriores foram dadas para as derivadas de P . Os valores da variável $P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}$, obtida da expansão de Taylor com passo $\Delta t/2$, é dado por:

$$P_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} = \frac{P_{i,j}^{n+1} + P_{i,j}^n}{2}. \quad (3.18)$$

Ressalta-se que o erro de truncamento do Método de Crank-Nicolson é da ordem $\mathcal{O}(\Delta x^2, \Delta y^2, \Delta t^2)$, ou seja, tem uma ordem de convergência igual a dois, tanto no tempo como no espaço.

3.3.3 Discretização do Modelo

Reescrevemos o modelo discretizado no tempo e no espaço, com as variáveis, $L(x_i, y_j, t_{n+\Delta t/2})$ e $C(x_i, y_j, t_{n+\Delta t/2})$, sendo a concentração de *DBO* e *OD* respectivamente no nó (i, j) de coordenadas (x_i, y_j) no interior de Ω , no instante $t_n \in I = (0, t_f]$:

$$\frac{\partial L_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} = D_l \Delta L_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{V} \nabla L_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - K_1 \frac{[C^2]_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa^2 + [C^2]_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}} L_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + q^{n+\frac{1}{2}} \quad (3.19)$$

$$\frac{\partial C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\partial t} = D_c \Delta C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - \mathbf{V} \nabla C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} - K_2 \frac{[C^2]_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}}{\kappa^2 + [C^2]_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}} L_{i,j}^{n+\frac{1}{2}} + \alpha(C_s - C_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}). \quad (3.20)$$

Substituindo as discretizações das derivadas, dadas pelas Equações (3.13)-(3.18) envolvidas no modelo para as variáveis L e C , na Equação (3.19) e, ordenando convenientemente as aproximações para os termos L^{n+1} do lado esquerdo e os termos L^n do lado direito, obtemos a discretização espaço temporal para L nos pontos (x_i, y_j) no interior de Ω dada por:

$$\begin{aligned} & L_{i-1,j}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + L_{i,j-1}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + \\ & L_{i,j}^{n+1} \left(1 + \frac{D_l \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{D_l \Delta t}{\Delta y^2} + \frac{K_1 \Delta t}{2} \frac{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2}{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2 + 4\kappa^2} \right) + \\ & L_{i,j+1}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + L_{i+1,j}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) = \\ & L_{i-1,j}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + L_{i,j-1}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + \\ & L_{i,j}^n \left(1 - \frac{D_l \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{D_l \Delta t}{\Delta y^2} - \frac{K_1 \Delta t}{2} \frac{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2}{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2 + 4\kappa^2} \right) + \\ & L_{i,j+1}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + L_{i+1,j}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + \Delta t q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.21)$$

Vamos ressaltar as variáveis na Equação (3.21):

$$\begin{aligned} & L_{i-1,j}^{n+1}(\dots) + L_{i,j-1}^{n+1}(\dots) + L_{i,j}^{n+1}(\dots + C_{i,j}^{n+1}, C_{i,j}^n) + L_{i,j+1}^{n+1}(\dots) + L_{i+1,j}^{n+1}(\dots) = \\ & L_{i-1,j}^n(\dots) + L_{i,j-1}^n(\dots) + L_{i,j}^n(\dots + C_{i,j}^{m+1}, C_{i,j}^m) + L_{i,j+1}^n(\dots) + L_{i+1,j}^n(\dots) + \Delta t q^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

No esquema anterior, a Equação (3.22) para a *DBO* gera um sistema de equações não-lineares, dado matricialmente da forma:

$$Me(C^{m+1}, C^n)L^{n+1} = Md(C^{m+1}, C^n)L^n + \Delta t q^{n+1/2}, \quad (3.23)$$

onde $Me(C^{n+1}, C^n)$ representa a matriz à esquerda e $Md(C^{n+1}, C^n)$ a matriz à direita, e a cada ponto no interior do domínio espacial de coordenadas (x_i, y_j) corresponde a uma equação do sistema. Desta forma, a ordem do sistema a ser resolvido depende da quantidade de nós da malha adotada na discretização do domínio espacial.

De maneira análoga, substituindo as aproximações correspondentes para a variável *OD* na Equação (3.20), obtemos a discretização espaço temporal da Equação (3.4) dado pelo sistema matricial:

$$\begin{aligned} & C_{i-1,j}^{m+1} \left(\frac{-D_c \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + C_{i,j-1}^{m+1} \left(\frac{-D_c \Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + \\ & C_{i,j}^{m+1} \left(1 + \frac{D_c \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{D_c \Delta t}{\Delta y^2} + \alpha \frac{\Delta t}{2} + \frac{K_2 \Delta t}{2} \frac{(L_{i,j}^{n+1} + L_{i,j}^n)(C_{i,j}^{m+1} + C_{i,j}^n)}{(C_{i,j}^{m+1} + C_{i,j}^n)^2 + 4\kappa^2} \right) + \\ & C_{i,j+1}^{m+1} \left(\frac{-D_c \Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + C_{i+1,j}^{m+1} \left(\frac{-D_c \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) = \\ & C_{i-1,j}^m \left(\frac{D_c \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + C_{i,j-1}^m \left(\frac{D_c \Delta t}{2\Delta y^2} + \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + \\ & C_{i,j}^m \left(1 - \frac{D_c \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{D_c \Delta t}{\Delta y^2} - \alpha \frac{\Delta t}{2} - \frac{K_2 \Delta t}{2} \frac{(L_{i,j}^{n+1} + L_{i,j}^n)(C_{i,j}^{m+1} + C_{i,j}^n)}{(C_{i,j}^{m+1} + C_{i,j}^n)^2 + 4\kappa^2} \right) + \\ & C_{i,j+1}^m \left(\frac{D_c \Delta t}{2\Delta y^2} - \frac{v \Delta t}{4\Delta y} \right) + C_{i+1,j}^m \left(\frac{D_c \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + \alpha C_s \Delta t. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Também, de maneira análoga, temos o esquema associado à Equação (3.24),

$$C_{i-1,j}^{m+1}(\dots) + C_{i,j-1}^{m+1}(\dots) + C_{i,j}^{m+1}(\dots + L_{i,j}^{n+1}, L_{i,j}^n, C_{i,j}^{m+1}, C_{i,j}^m) + C_{i,j+1}^{m+1}(\dots) + C_{i+1,j}^{m+1}(\dots) =$$

$$C_{i-1,j}^m(\dots) + C_{i,j-1}^m(\dots) + C_{i,j}^m(\dots + L_{i,j}^{n+1}, L_{i,j}^n, C_{i,j}^{n+1}, C_{i,j}^n) + C_{i,j+1}^m(\dots) + C_{i+1,j}^m(\dots) + \alpha C_s \Delta t. \quad (3.25)$$

No esquema anterior a Equação (3.25), para o OD , gera um sistema de equações matriciais não-linear dado por:

$$Ne(L^{n+1}, L^n, C^{n+1}, C^n)C^{n+1} = Nd(L^{n+1}, L^n, C^{n+1}, C^n)C^n + \alpha C_s \Delta t \quad (3.26)$$

onde $Ne(L^{n+1}, L^n, C^{n+1}, C^n)$ e $Nd(L^{n+1}, L^n, C^{n+1}, C^n)$ são as matrizes à esquerda e direita, respectivamente. As matrizes dos sistemas (3.23) e (3.26) são matrizes esparsas com entradas constantes, excepto nas diagonais que estão em função das variáveis envolvidas.

Discretizações para as condições de fronteira também são feitas de forma similar, usando ponto fantasma e as aproximações por DFC (ver Apêndice A.4).

Desta forma o problema se reduz a resolver o sistema matricial, não-linear a seguir:

$$\begin{cases} Me(C^{n+1}, C^n)L^{n+1} = Md(C^{n+1}, C^n)L^n + \Delta tq^{n+1/2}, \\ Ne(L^{n+1}, L^n, C^{n+1}, C^n)C^{n+1} = Nd(L^{n+1}, L^n, C^{n+1}, C^n)C^n + \alpha C_s \Delta t. \end{cases} \quad (3.27)$$

$$(3.28)$$

O esquema obtido pelas discretizações do modelo gera um sistema implícito de equações matriciais acoplado, dado pelas Equações (3.27)-(3.28), e para resolvê-lo, utiliza-se um método do tipo Preditor-Corretor. Este método, foi originalmente implementado para resolver problemas parabólicos utilizando o Método de Elementos Finitos (MEF) [13], mas também é adaptado para ser utilizado com MDF, como em [7]. Neste método temos que sobre-escrever os termos variáveis das matrizes a cada iteração no tempo, e assim, ao invés de resolver um sistema não linear, resolveremos sucessivos sistemas lineares².

Para cada passo no tempo usaremos C^n e L^n e iterações intermediárias para encontrar C^{n+1} e L^{n+1} como segue:

- Dados C^n e L^n , obtém-se C^* e L^* em uma iteração intermediária, entre $t = n$ e $t = n + 1$, a partir do seguinte sistema de equações matriciais:

$$\begin{aligned} Me(C^n, C^n)L^* &= Md(C^n, C^n)L^n + \Delta tq^{n+1/2} \\ Ne(L^*, L^n, C^n, C^n)C^* &= Nd(L^*, L^n, C^n, C^n)C^n + \alpha C_s \Delta t. \end{aligned}$$

²Os sistemas lineares foram resolvidos com as funções predeterminadas do Matlab

- Obtidos C^* e L^* , obtém-se C^{**} e L^{**} a partir de:

$$\begin{aligned} Me(C^*, C^n)L^{**} &= (C^*, C^n)L^* + \Delta t q^{n+1/2} \\ Ne(L^{**}, L^n, C^*, C^n)C^{**} &= Nd(L^{**}, L^n, C^*, C^n)C^* + \alpha C_s \Delta t. \end{aligned}$$

De forma análoga podemos obter C^{***} , L^{***} , C^{****} e L^{****} para aproximar C^{n+1} e L^{n+1} .

O Método Preditor Corretor aproxima com uma ordem de $\mathcal{O}(\Delta t)^2$, conforme aumentam as iterações intermediárias [30]. As iterações intermediárias podem ser repetidas várias vezes, a cada passo de tempo, para obter aproximações para C^{n+1} e L^{n+1} . Em geral, não há ganhos ao se repetir muitas vezes estas iterações intermediárias a cada passo do tempo. No caso deste trabalho, consideraremos quatro iterações intermediárias.

A solução numérica obtida através do método DFC para problemas de difusão-advecção pode apresentar oscilações que não correspondem à solução, quando o termo advectivo é dominante, e esta instabilidade também é influenciada pela discretização usada. Desta forma para evitar estas oscilações é estabelecida uma condição sobre a discretização do domínio [25, 42, 52]. Esta condição é dada por um número adimensional obtido pela razão entre o módulo da velocidade advectiva e o coeficiente de difusão (D) vezes o parâmetro de malha da discretização, denominado número local de Péclet em relação a x e y , respectivamente,

$$\mathbb{P}_{e_x} = \frac{|u|\Delta x}{2D} \leq 1, \quad \mathbb{P}_{e_y} = \frac{|v|\Delta y}{2D} \leq 1$$

O número de Péclet mede a dominância do termo advectivo perante ao termo difusivo. É necessário que sejam satisfeitas estas condições para garantir a convergência da solução discreta.

Na modelagem de OD e DBO , é um problema advectivo dominante, os coeficientes de difusão, D_l e D_c , são muito pequenos em comparação ao campo de velocidades, desta forma estudaremos um método para tratar a instabilidade numérica.

3.4 Difusão Artificial

Problemas de instabilidade numérica apresentam-se quando o termo advectivo é grande, comparado ao termo difusivo. Uma possibilidade de evitar as oscilações causadas pela instabilidade é o refinamento da malha, o que aumenta as dimensões dos sistemas a serem resolvidos, e finalmente, termina sendo caro computacionalmente. Os Métodos Upwind são uma boa ferramenta para enfrentar este tipo de problema.

3.4.1 Método Upwind

Oscilações na solução numérica surgem do fato de que usamos um esquema DFC para a discretização do termo advectivo da equação diferencial. Este termo é o principal responsável pelas dificuldades numéricas, pelo que daremos uma atenção especial.

Considerando a equação diferencial da *DBO*, será introduzida uma difusão artificial de modo a evitar as oscilações numéricas [45]. Dada a EDP da *DBO* escrita de acordo com a Equação (3.29)

$$\frac{\partial L}{\partial t} = D_l \left(\frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \right) - u \frac{\partial L}{\partial x} - v \frac{\partial L}{\partial y} - K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + q. \quad (3.29)$$

no caso de $u > 0$, utilizando DFC para o termo difusivo e diferenças finitas atrasadas para o termo advectivo, a expressão $D_l \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} - u \frac{\partial L}{\partial x}$ da Equação (3.29) pode ser discretizada como:

$$D_l \frac{L_{i-1,j} - 2L_{i,j} + L_{i+1,j}}{\Delta x^2} - u \frac{L_{i,j} - L_{i-1,j}}{\Delta x}. \quad (3.30)$$

Observando que:

$$\frac{L_{i,j} - L_{i-1,j}}{\Delta x} = \frac{L_{i+1,j} - L_{i-1,j}}{2\Delta x} - \frac{\Delta x}{2} \frac{L_{i+1,j} - 2L_{i,j} + L_{i-1,j}}{\Delta x^2}, \quad (3.31)$$

a Equação (3.30) pode ser escrita como:

$$D_{lx} \frac{L_{i-1,j} - 2L_{i,j} + L_{i+1,j}}{\Delta x^2} - u \frac{L_{i+1,j} - L_{i-1,j}}{2\Delta x}, \quad (3.32)$$

onde $D_{lx} = D_l(1 + \mathbb{P}_{ex})$, e \mathbb{P}_{ex} é o número local de Péclet na variável x .

De maneira similar, no caso de $v > 0$, utilizando DFC para o termo difusivo e diferenças finitas atrasadas para o termo advectivo, a expressão $D_l \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} - v \frac{\partial L}{\partial y}$ da Equação (3.29)

pode ser discretizada como:

$$D_{ly} \frac{L_{i,j-1} - 2L_{i,j} + L_{i,j+1}}{\Delta y^2} - v \frac{L_{i,j+1} - L_{i,j-1}}{2\Delta y}, \quad (3.33)$$

onde $D_{ly} = D_l(1 + \mathbb{P}_{e_y})$, e \mathbb{P}_{e_y} é o número local de Péclet na variável y .

O esquema dado pelas Equações (3.32)-(3.33) corresponde a uma discretização do esquema DFC da EDP perturbada da Equação (3.29) dada por:

$$\frac{\partial L}{\partial t} = \left(D_{lx} \frac{\partial^2 L}{\partial x^2} + D_{ly} \frac{\partial^2 L}{\partial y^2} \right) - u \frac{\partial L}{\partial x} - v \frac{\partial L}{\partial y} - K_1 \frac{C^2}{\kappa^2 + C^2} L + q. \quad (3.34)$$

Os novos números de Péclet locais obtidos a partir da Equação (3.34) são dados por:

$$\mathbb{P}_{e_x}^* = \frac{\mathbb{P}_{e_x}}{1 + \mathbb{P}_{e_x}}, \quad \mathbb{P}_{e_y}^* = \frac{\mathbb{P}_{e_y}}{1 + \mathbb{P}_{e_y}},$$

e consequentemente, os números de Péclet locais satisfazem $\mathbb{P}_{e_x}^* < 1$ e $\mathbb{P}_{e_y}^* < 1$ para quaisquer valores de Δx e Δy , respectivamente. Este método de difusão artificial é de primeira ordem em relação a Δx e Δy , e é a principal razão para procurar um esquema Upwind que seja de segunda ordem nas variáveis espaciais.

3.4.2 Método Scharfetter - Gummel

Nas Equações (3.32)-(3.33), os coeficientes de difusão $D_{lx} = D_l(1 + \mathbb{P}_{e_x})$ e $D_{ly} = D_l(1 + \mathbb{P}_{e_y})$ podem ser escritos de uma maneira mais geral como $D_{lx} = D_l(1 + \phi(\mathbb{P}_{e_x}))$ e $D_{ly} = D_l(1 + \phi(\mathbb{P}_{e_y}))$, onde ϕ é uma função que satisfaz algumas condições (para mais detalhes ver [42]). Diferentes escolhas de ϕ dão origem a diferentes esquemas. De fato, se escolhermos $\phi(z) = 0$, para todo z , obtemos o método DFC, enquanto se $\phi(z) = z$, obtemos o esquema de difusão artificial estudado na Subseção 3.4.1. Para $\phi(z) = z - 1 + B(2z)$, onde $B(z) = \frac{z}{e^z - 1}$ se $z > 0$ e $B(0) = 1$ é a função de Bernoulli [15, 42], obtemos o "exponential fitting scheme", também conhecido como método Scharfetter-Gummel (SG). Os novos números de Péclet locais obtidos a partir da Eq. (3.34) são dados por

$$\mathbb{P}_{e_x}^* = \frac{\mathbb{P}_{e_x}}{B(2\mathbb{P}_{e_x}) + \mathbb{P}_{e_x}}, \quad \mathbb{P}_{e_y}^* = \frac{\mathbb{P}_{e_y}}{B(2\mathbb{P}_{e_y}) + \mathbb{P}_{e_y}},$$

consequentemente, os números de Péclet locais satisfazem $\mathbb{P}_{e_x}^* < 1$ e $\mathbb{P}_{e_y}^* < 1$ para quaisquer valores de Δx e Δy .

Este método é um esquema de segunda ordem com relação a Δx e Δy . Os autores em [34] relataram que o método SG pode ser considerado como um esquema do tipo Upwind.

O método SG é amplamente utilizado como um método numérico eficaz na teoria de dispositivos semicondutores, estudado para método de volumes finitos (VF) [47].

Os coeficientes de difusão de DBO e OD são bem pequenos comparados com os valores das velocidades que serão utilizadas nas simulações, fato pelo qual deve ser implementado um esquema Upwind junto com uma malha refinada para obter boas aproximações. O método Upwind a ser utilizado será o método SG para as variáveis espaciais junto com o método de Crank-Nicolson para a variável temporal, obtendo assim, um esquema Upwind de segunda ordem tanto no espaço como no tempo.

Capítulo 4

Simulações e Análise dos Resultados

Neste capítulo apresentaremos as simulações realizadas que permitem, após a apresentação do modelo matemático, a implementação das equações do modelo através de código computacional e inserção dos dados de entrada de parâmetros, condições iniciais e de fronteiras. Desta forma, obtêm-se as soluções numéricas aproximadas das variáveis estudadas através de representações gráficas.

Uma das vantagens dos modelos computacionais é a possibilidade de gerar cenários, o que propicia entendimentos dos fenômenos e interpretações acerca do comportamento das variáveis e do modelo em si. A geração de cenários pode auxiliar no desenvolvimento de ações de prevenção e de manejo do recurso hídrico.

As simulações aqui apresentadas foram desenvolvidas utilizando-se o software Matlab e seguem subdivididas em: simulações do modelo não espacial, sem o transporte difusivo e advectivo, e simulações do modelo proposto, que considera os transportes mencionados. Neste segundo conjunto de simulações são apresentados três cenários: o Cenário 1, com duas cargas de *DBO* (20mg/l/dia e 85mg/l/dia), o Cenário 2, com assoreamento nas fronteiras e vento da direção noroeste e o Cenário 3, com correnteza num perfil parabólico.

4.1 Simulações do Modelo Não Espacial

Neste primeiro conjunto de simulações temos a abordagem do modelo temporal dado pelo sistemas de EDO's (Equações (3.7)-(3.8)) da Seção 3.2 sem considerações dos transportes difusivos e advectivos.

Ressalta-se, aqui, que o coeficiente de reaeração, α , varia de acordo com as características do corpo hídrico [39] (ver Tabela 4.1).

Para as simulações o domínio de estudo é considerado como rios vagarosos/ou grande lagoas.

Corpo hídrico	Rios Rasos	Rios Profundos
Pequenas lagoas	0, 23	0, 12
Rios vagarosos, grandes lagos	0, 37	0, 23
Grandes rios com baixa velocidade	0, 46	0, 37
Grandes rios com velocidade normal	0, 69	0, 46
Rios Rápidos	1, 15	0, 69
Corredeiras e quedas d'água	> 1, 61	> 1, 15

Tabela 4.1: Coeficiente de reaeração α (1/dia) [39].

O coeficiente de desoxigenação K_2 depende, além da temperatura, das características da matéria orgânica. A Tabela 4.2 apresenta um sumário dos intervalos típicos médios para a constante de desoxigenação [10]. As simulações realizadas consideraram um esgoto bruto muito concentrado.

Efluente	K_2 (1/dia)
Esgoto bruto muito concentrado	0, 35 – 0, 45
Esgoto bruto pouco concentrado	0, 30 – 0, 40
Efluente primário	0, 30 – 0, 40
Efluente secundário	0, 12 – 0, 24
Águas naturais limpas	0, 09 – 0, 21
Água para abastecimento público	< 0, 12

Tabela 4.2: Constante cinética de desoxigenação K_2 , para diferentes efluentes, [10].

A Tabela 4.3 indica todos os parâmetros utilizados nas simulações computacionais¹, sendo considerada a temperatura do meio aquático como $T = 20^\circ C$. No caso específico da constante κ de saturação média do *OD*, realizamos diferentes testes para determiná-la, já que os valores encontrados na literatura estudada são da ordem 10^{-3} [41], e não refletem a análise feita nas Seções 2.3.1 e 3.1 para o modelo proposto nesta tese.

Parâmetros - Descrição	Valores	Unidades	Fonte
D_l Coeficiente de difusão da <i>DBO</i>	$1,9752 \times 10^{-9}$	m^2/dia	[51]
D_c Coeficiente de difusão do <i>OD</i>	$1,8144 \times 10^{-10}$	m^2/dia	[12]
K_1 Coeficiente de degradação da <i>DBO</i>	0,15	1/ <i>dia</i>	Adotado
K_2 Coeficiente de desoxigenação do <i>OD</i>	0,45	1/ <i>dia</i>	Tabela 4.2
κ Saturação média do <i>OD</i>	3	mg/l	Adotado
α Coeficiente de reareração	0,37	1/ <i>dia</i>	Tabela 4.1
C_s Constante de saturação de <i>OD</i>	9,2	mg/l	[55]

Tabela 4.3: Parâmetros do modelo e seus valores utilizados para as simulações.

Considerando diferentes condições iniciais e um período de $t_f = 60$ dias, temos, na Figura 4.1, a evolução temporal das concentrações de *OD* e *DBO* em função do tempo. A Figura 4.1(b), com condição inicial $L_0 = 16 \text{ mg/l}$, indica que a concentração de *OD* sofre uma queda brusca nos primeiros dias da simulação, originando um déficit crítico, maior que o originado na Figura 4.1(a), com condição inicial $L_0 = 10 \text{ mg/l}$. Verifica-se, ainda, que independente do oxigênio ser crítico, o corpo de água tende a se reestabelecer, indicando uma capacidade de autodepuração: a quantidade de *OD* aumenta até atingir o valor do ponto de equilíbrio interior.

Considerando a Resolução CONAMA 357/2005 [4], para um rio de Classe 2 o valor mínimo permitido de *OD* é 5 mg/l (ver Tabela A.1 do Apêndice). Nas simulações da Figura 4.1, verifica-se que o tempo que o corpo hídrico demora para atingir o valor mínimo permitido é maior na Figura 4.1(b) do que o tempo na Figura 4.1(a).

¹Os parâmetros adotados, condições iniciais e fontes são valores aproximados de pesquisas estudadas nesta tese.

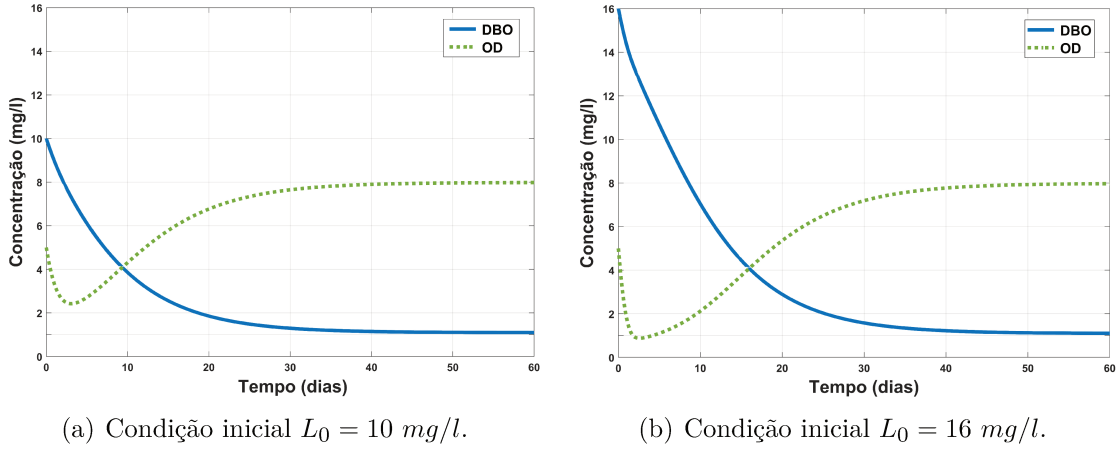


Figura 4.1: Variação ao longo do tempo das concentrações de DBO e OD para diferentes condições iniciais de DBO e condição inicial para OD $C_0 = 5 \text{ mg/l}$.

Em ambas as simulações da Figura 4.1 são constatados o mesmo ponto de equilíbrio, independente dos valores iniciais e o mesmo nível assintótico em $L^* = 1,004$ e $C^* = 7,883$. Desta forma, as simulações concordam com o ponto de equilíbrio não trivial assintoticamente estável, estudado na Seção 3.2.

A seguir apresentamos as concentrações de OD e DBO para três valores de q : $q_1 = 0,2 \text{ mg/l/dia}$, $q_2 = 0,5 \text{ mg/l/dia}$ e $q_3 = 0,8 \text{ mg/l/dia}$, e condições iniciais: $L_0 = 10 \text{ mg/l}$ e $C_0 = 5 \text{ mg/l}$.

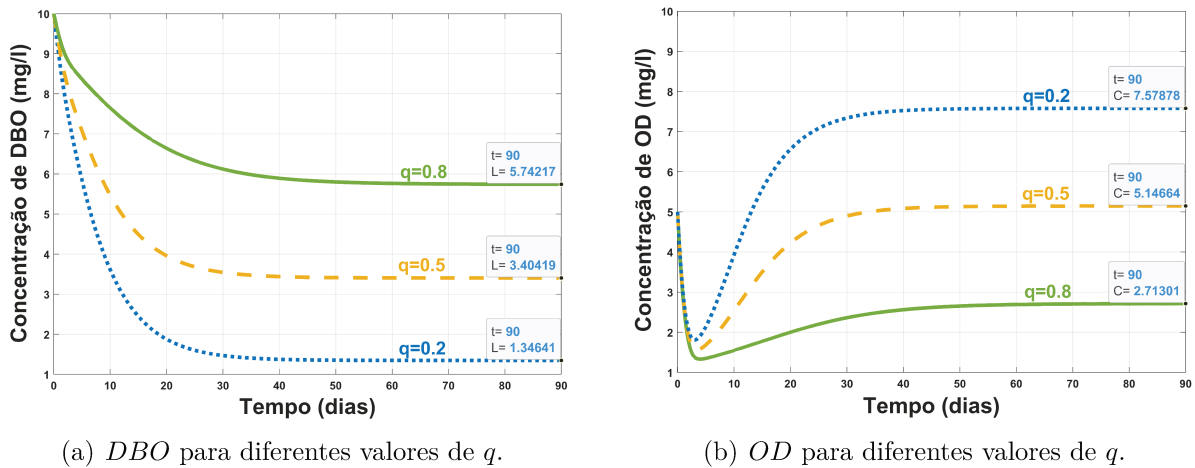


Figura 4.2: Variação ao longo do tempo das concentrações de DBO e OD para diferentes fontes.

Na Figura 4.2 temos as concentrações de DBO e OD em função do tempo, para os diferentes valores de q , o que acarreta nos diferentes pontos de equilíbrio. Observe que na Equação (3.11), P^* está em função de q , logo as concentrações ao longo do tempo vão

atingir o nível assintótico em valores diferentes. Para $q_1 = 0,2 \text{ mg/l/dia}$, obtemos o ponto de equilíbrio $L^* = 1,3464$ e $C^* = 7,5784$, isto é, após um tempo (aproximadamente 40 dias) os valores das concentrações de L e C permanecem invariantes no tempo. Para $q_2 = 0,5 \text{ mg/l/dia}$, obtemos o ponto de equilíbrio $L^* = 3,4041$ e $C^* = 5,1459$ e, finalmente, para $q_3 = 0,8 \text{ mg/l/dia}$, obtemos o ponto de equilíbrio $L^* = 5,7408$ e $C^* = 2,7135$.

Observa-se na Figura 4.2 que quanto maior a carga de DBO remanescente no corpo de água, menores os valores para OD . Verifica-se que as concentrações de OD diminuem drasticamente nos primeiros dias e atingem um valor crítico, segundo a CETESB, valores menores que $2 - 3 \text{ mg/l}$ de oxigênio dissolvido pertencem a uma condição perigosa que pode ser prejudicial para algumas espécies [27].

4.2 Simulações do Modelo Proposto

Neste segundo conjunto de simulações apresentamos as simulações do modelo proposto, espacial, com a ação dos transportes difusivo e advectivo, representados no sistema de EDP's em (3.3)-(3.6).

A superfície do corpo hídrico foi considerada como um retângulo de comprimento $l = 10 \text{ km}$ e largura $h = 5 \text{ km}$. Os parâmetros da discretização espacial são $\Delta x = 0,0503$ e $\Delta y = 0,0505 \text{ km}$, resultando numa malha com 20.000 nós. Para a discretização temporal tomou-se $\Delta t = 0,1429 \text{ dias}$. Os demais parâmetros utilizados seguem apresentados na Tabela 4.3, exceto os que foram alterados, mencionados em cada simulação.

4.2.1 Cenário 1

Neste cenário, consideramos o domínio retangular como sendo o canto de um lago, tomaremos dois conjuntos de simulações: um com carga de DBO de $q = 20 \text{ mg/l/dia}$ e outro de $q = 85 \text{ mg/l/dia}$ para análise do comportamento das concentrações de DBO e OD ao longo do tempo. As simulações serão apresentadas em três estágios: estágio inicial nos primeiros 4 dias, estágio intermediário após 20 dias e o estágio final 60 dias. Estes intervalos de tempo foram escolhidos considerando que, aproximadamente, após 20 dias, as concentrações de cada variável começaram a se estabilizar.

Para o campo de velocidades foi considerado um vento noroeste com velocidade de 2 m/seg , medido a 10 m de altura e cuja magnitude na superfície está entre 1% - 3% [24,

37], mas utilizou-se o valor de 1% nas simulações. Além disso, sabendo que o vento não é constante no dia todo, supomos que o vento efetivo sobre a superfície da água é de 10 % e fizemos as conversões necessárias para a obtenção dos valores de $\mathbf{V} = (u, v)$. As condições iniciais consideradas foram $L_0 = 10 \text{ mg/l}$, $C_0 = 5 \text{ mg/l}$ e para a fronteira condições de Neumann homogêneas para ambas as variáveis.

Fonte $q = 20 \text{ mg/l/dia}$

A Figura 4.3 retrata, então, a distribuição da concentração de DBO no domínio, considerando uma fonte pontual de $q = 20 \text{ mg/l/dia}$ no nó de número 80 da malha gerada, na borda esquerda do domínio, com 4, 20 e 60 *dias* de simulação.

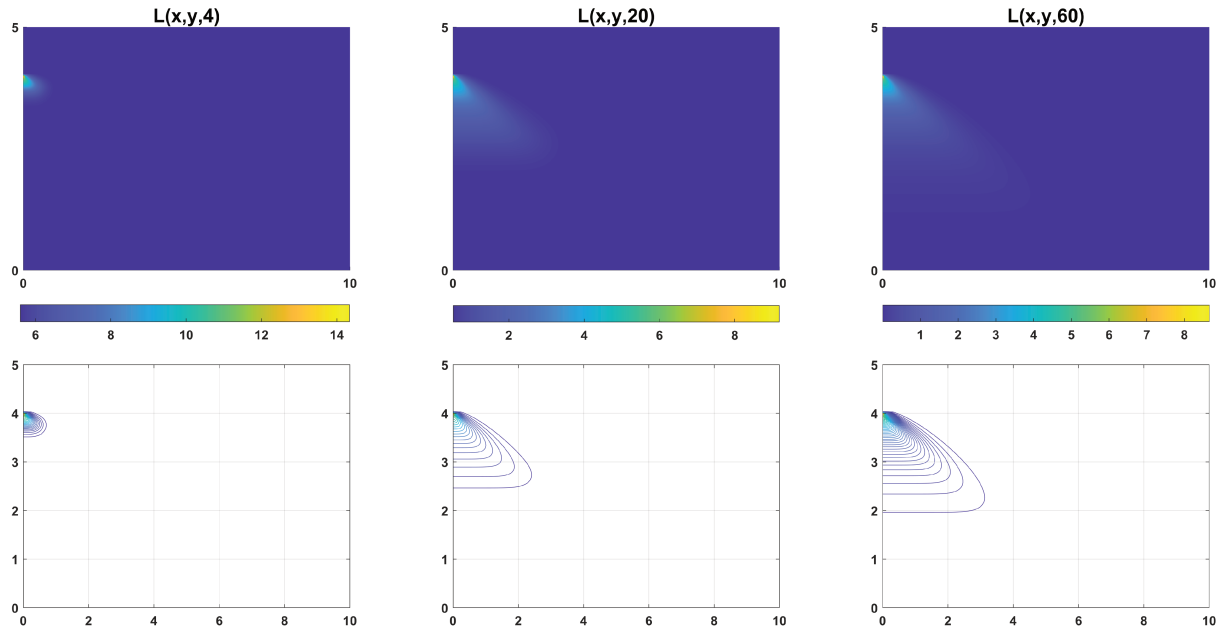


Figura 4.3: Distribuição das concentrações de DBO para 4, 20, e 60 *dias* de simulação com fonte $q = 20 \text{ mg/l/dia}$.

Como pode ser visualizado, as simulações apresentam um espectro de cores no domínio que varia desde o azul forte, região de menor concentração de DBO , até a cor amarela, que representa a máxima concentração do poluente.

Na primeira coluna da Figura 4.3 apresenta-se o espalhamento da DBO com quatro dias, tendo-se maior concentração da DBO próximo da fonte.

A Figura 4.4 apresenta o espalhamento da concentração de OD no domínio. Observe na Figura 4.4 que as concentrações de OD são menores onde há maior incidência de DBO (como perto da fonte). Longe da fonte, as concentrações de OD são maiores.

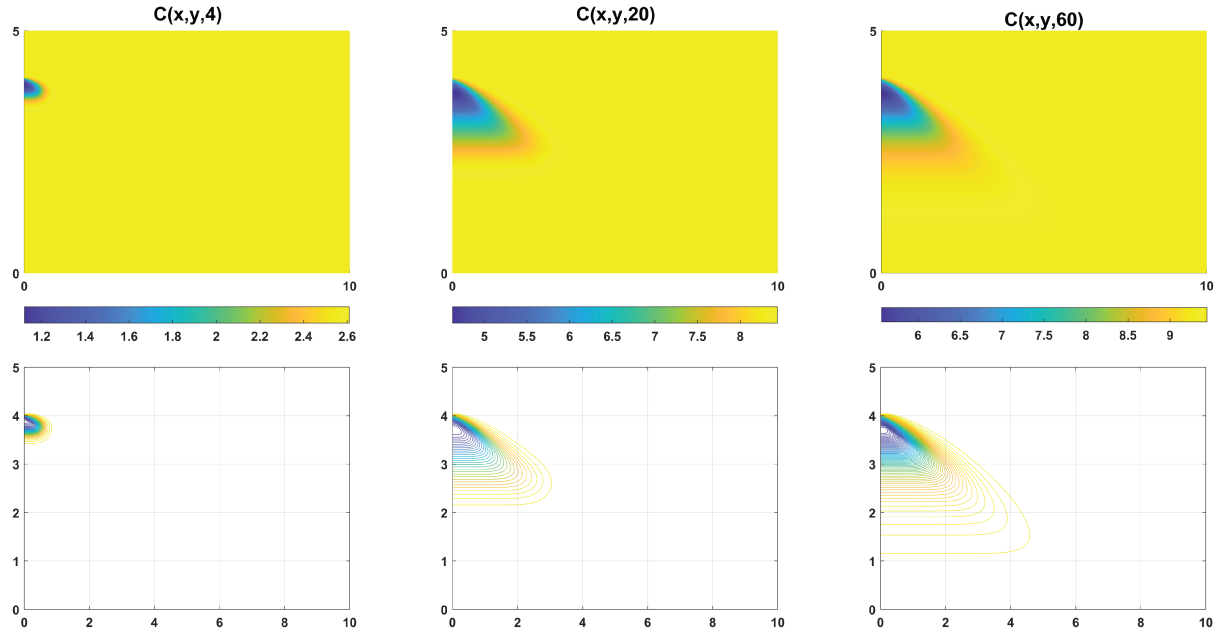


Figura 4.4: Distribuição das concentrações de OD para 4, 20, e 60 *dias* de simulação com fonte $q = 20 \text{ mg/l/dia}$.

Observa-se, também, a influência do transporte advectivo no espalhamento das concentrações de DBO e OD nas Figuras 4.3 e 4.4, condizente com a direção do vento.

Considerando aleatoriamente 6 pontos (nós) do domínio, Figura 4.5, podemos analisar a evolução temporal das concentrações de DBO e OD durante 60 *dias* de simulação, apresentada na Figura 4.6.

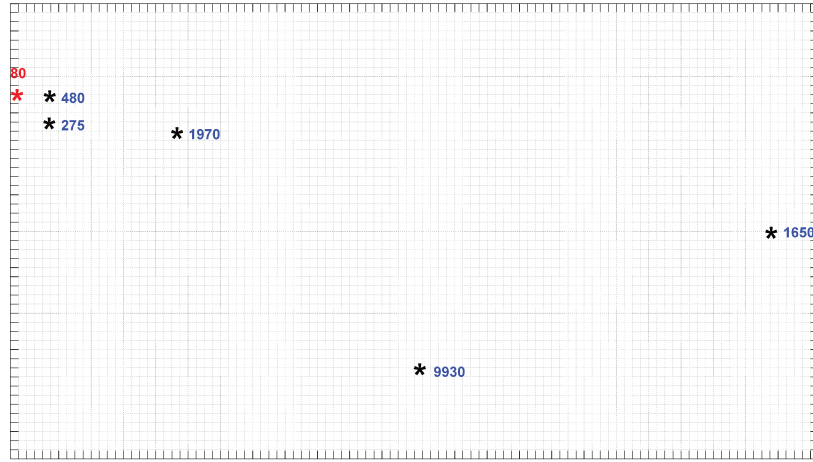
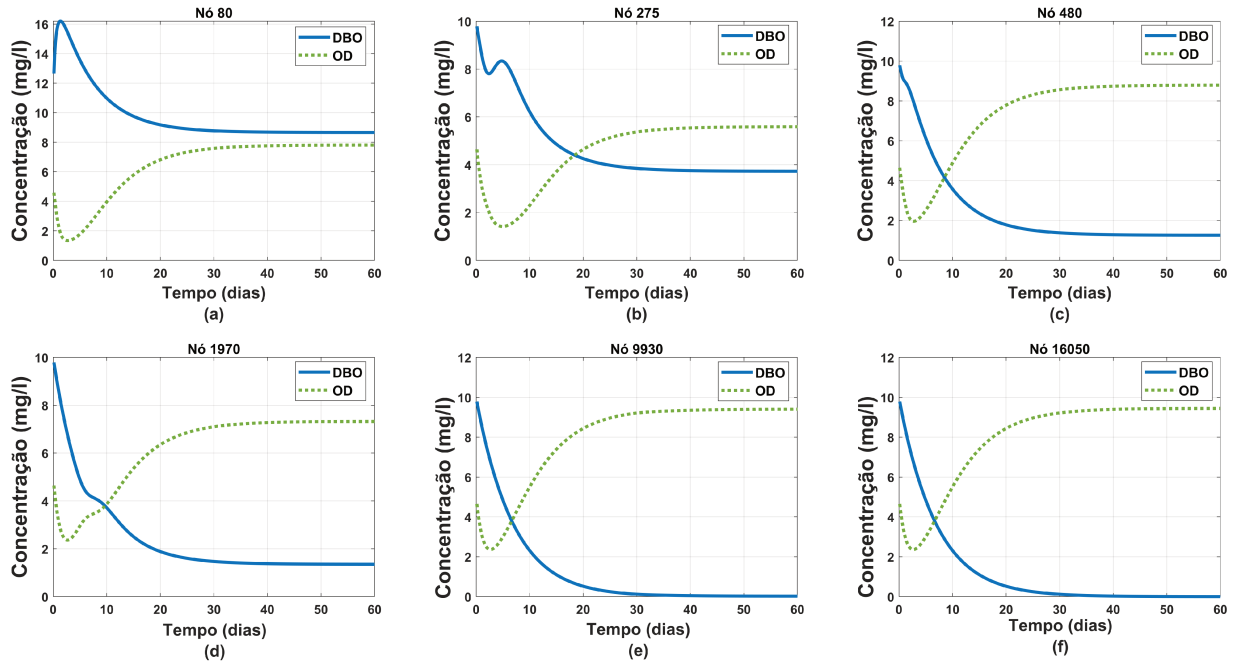


Figura 4.5: Localização dos nós no domínio.

Figura 4.6: Comportamento ao longo do tempo de DBO e OD , em diferentes nós do domínio para $q = 20 \text{ mg/l/dia}$.

De acordo com a Figura 4.6, a maior concentração de DBO está localizada no nó da fonte, nó 80. E é neste mesmo nó que o OD atinge seu menor valor.

Com aproximadamente 3 dias, Figura 4.6(a), o OD assume seu menor valor e depois disso vai aumentando gradualmente, pois a DBO começa a diminuir devido à ação da difusão e o transporte advectivo que espalha o resíduo para outros pontos do domínio.

As Figuras 4.6(e) e 4.6(f) apresentam a evolução temporal da DBO e do OD nos nós 9930 e 16050, localizados longe da fonte. Comparando tais resultados com as simulações apresentadas na Figuras 4.3, verifica-se que tais nós não foram atingidos pela fonte, pois o OD aumenta até assumir o nível de saturação $9,2 \text{ mg/l}$, com a DBO diminuindo, consequentemente, na abundância de OD .

Observa-se nas Figuras 4.6(a) - 4.6(f) que após 40 *dias*, aproximadamente, a DBO e o OD se tornam invariantes no tempo, atingindo o nível assintótico.

Fonte $q = 85 \text{ mg/l/dia}$

Neste Cenário, consideramos uma fonte de $q = 85 \text{ mg/l/dia}$ em todas as simulações. Na Figura 4.7, pode se observar a distribuição da concentração de DBO no domínio.

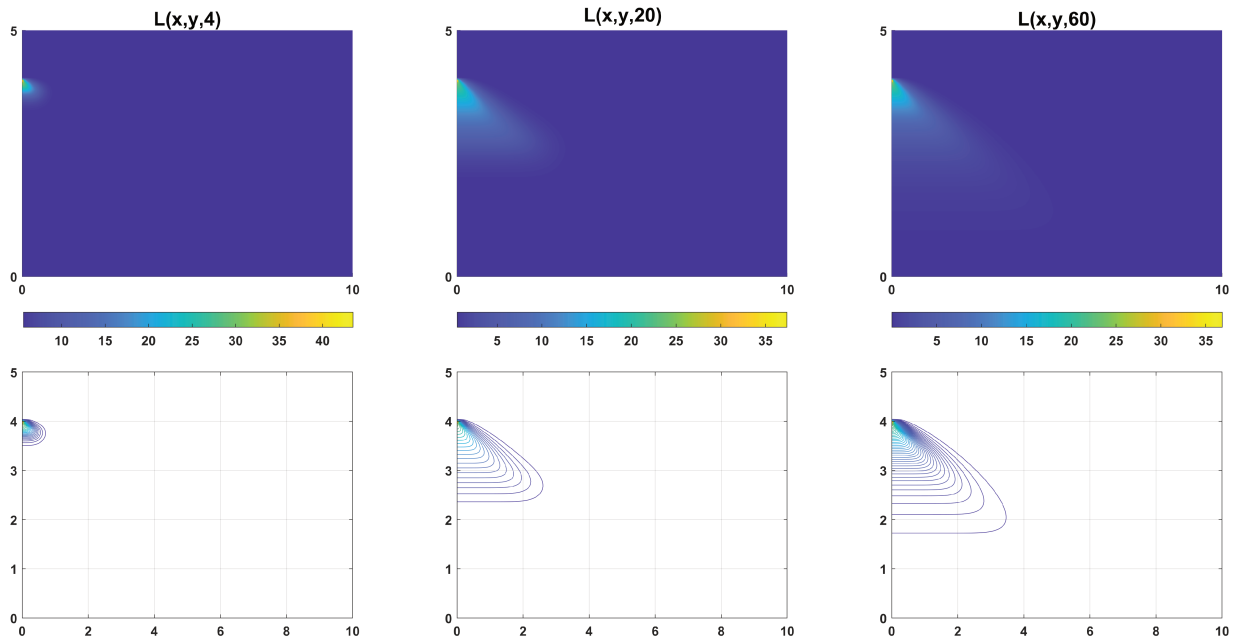


Figura 4.7: Distribuição das concentrações de DBO para 2, 5, e 60 *dias* de simulação com fonte $q = 85 \text{ mg/l/dia}$.

Comparando as simulações apresentadas nas Figuras 4.3 e 4.7, pode-se observar que quanto maior a fonte, maior o espalhamento da carga poluidora, aumentando as concentrações de DBO nos nós atingidos. Observe que no estágio inicial na Figura 4.3, para $q = 20 \text{ mg/l/dia}$, a concentração máxima após 4 *dias* é aproximadamente $14,4 \text{ mg/l}$, valor menor que a concentração máxima no estágio inicial na Figura 4.7, de uma ordem de, aproximadamente, 45 mg/l .

De forma análoga, nos estágios intermediário e final, na Figura 4.3, as concentrações de *DBO* são, aproximadamente, de $8,6 \text{ mg/l}$ e $8,7 \text{ mg/l}$; valores menores que as concentrações nos mesmos estágios da Figura 4.7, aproximadamente de 37 mg/l .

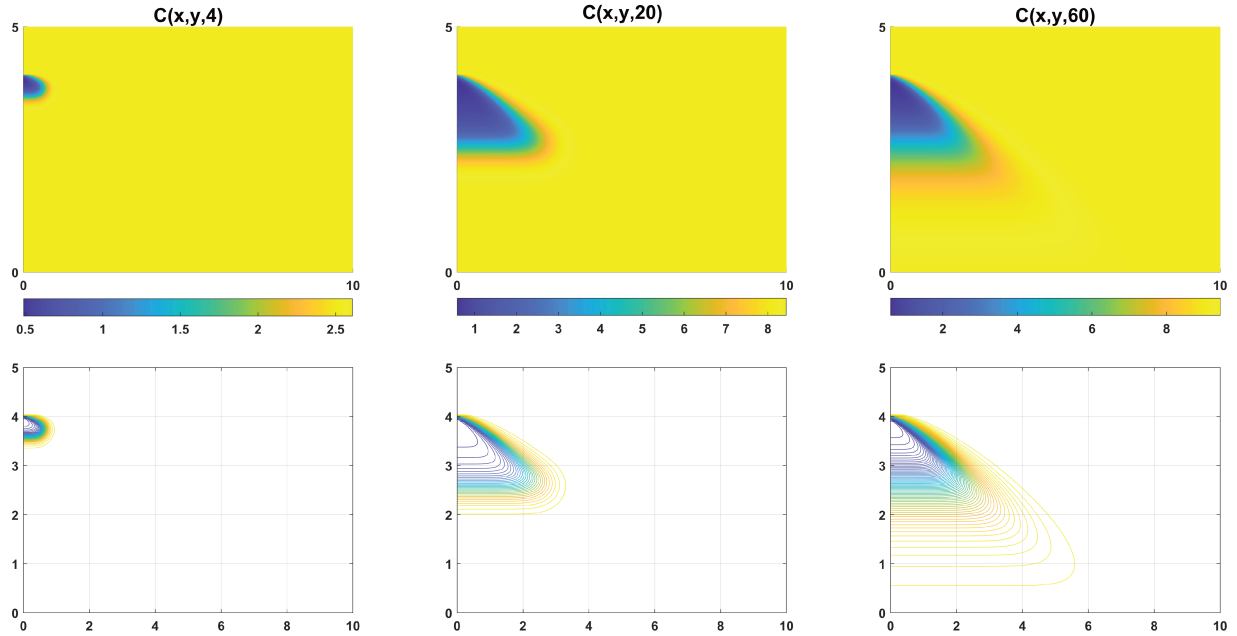


Figura 4.8: Evolução temporal da dispersão de *OD* para $q = 85 \text{ mg/l/dia}$.

Comparando as simulações apresentadas nas Figuras 4.4 e 4.8, observa-se que quanto maior a carga q de *DBO*, mais difícil é a autodepuração do corpo de água. Segundo o espectro de cores na Figura 4.8, observa-se que as áreas de baixa concentração de *OD*, representadas em cor azul, são maiores do que na Figura 4.4 que foi simulada para uma carga menor. Além disso, na Figura 4.4, as concentrações mínimas de *OD*, nos três estágios, são maiores do que as concentrações obtidas na Figura 4.8 nos três estágios.

Na Figura 4.9, observa-se o comportamento evolutivo das concentrações de *DBO* e *OD* nos seis nós escolhidos para esta nova carga de $q = 85 \text{ mg/l/dia}$. Desta forma, verifica-se no nó da fonte, refletido no primeiro estágio da Figura 4.9(a), com maior concentração de *DBO*, 45 mg/l . Na Figura 4.9(b), mostra-se o fato do nó 275 estar perto da fonte, na direção do vento. Este, entre os nós observados, indica o local mais crítico do corpo de água pois as concentrações de *DBO* são altas, atingindo 25 mg/l e as concentrações de *OD* não são suficientes para oxidar a matéria orgânica presente, causando concentrações de *OD* muito baixas, as menores entre os pontos observados.

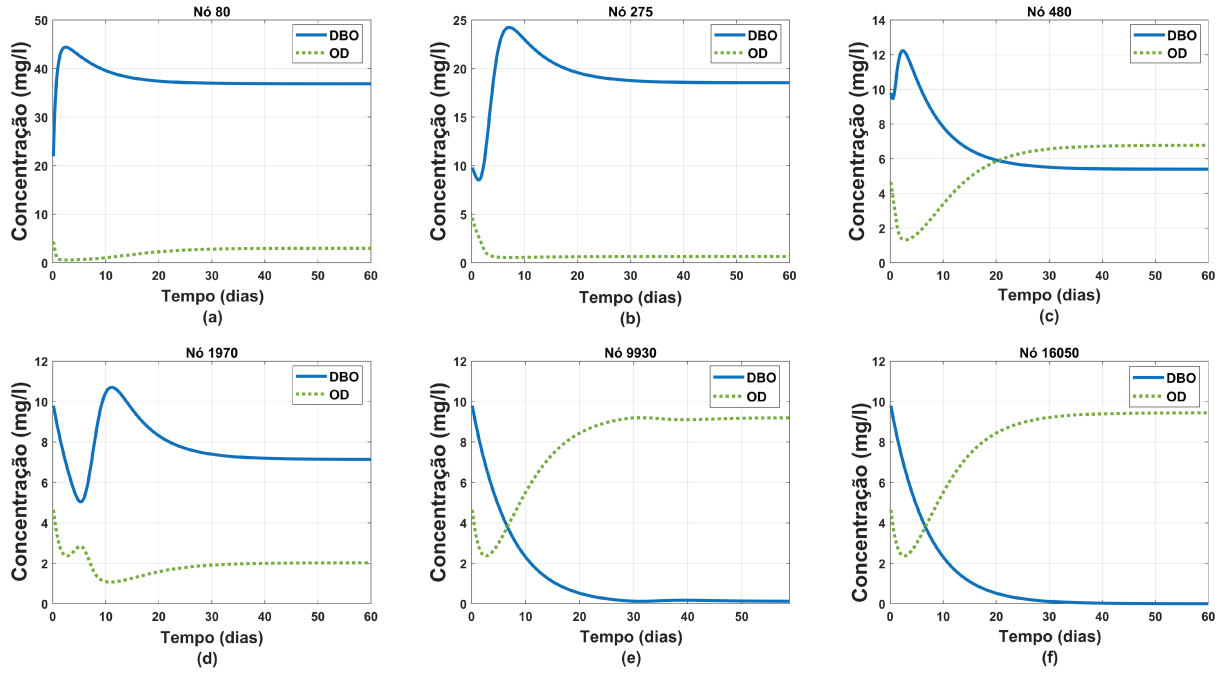


Figura 4.9: Comportamento ao longo do tempo de DBO e OD , em diferentes nós do domínio para $q = 85 \text{ mg/l/dia}$.

O nó 480, Figura 4.9(c), é atingido pela fonte nas primeiras iterações mas o fato dele não estar na direção do vento influencia na concentração de DBO , que é menor que a indicada na Figura 4.9(b). Entretanto, a concentração de OD melhora neste ponto.

Na Figura 4.9(d) pode-se observar que o nó 1970 é atingido pelo efeito da fonte após os primeiros 5 *dias*, causando um incremento da concentração de DBO , por conseguinte concentrações menores de OD . Nas Figuras 4.9(e) e 4.9(f), pelo fato de estar mais distantes da fonte, as concentrações de OD tendem assintoticamente ao valor de saturação, enquanto as concentrações de DBO tendem para zero.

4.2.2 Cenário 2

Neste cenário, consideramos o domínio retangular como sendo o canto de um lago (ver Figura 4.10). Considerando poluição por assoreamento causada pela chuva, escoando matéria orgânica pelas fronteiras vertical à esquerda e a fronteira horizontal superior no interior do lago.

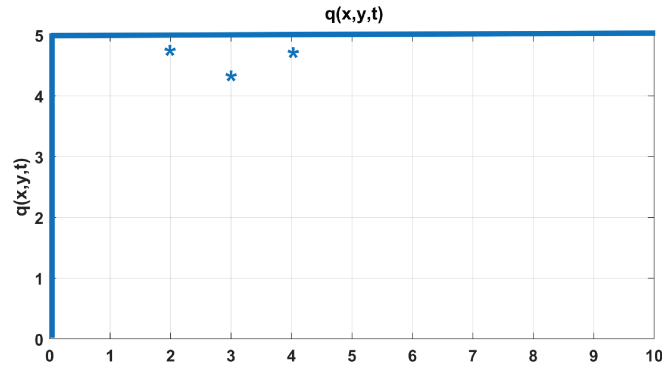


Figura 4.10: Domínio do Cenário II

O assoreamento é representado como fontes que diminuem no tempo dadas por: $q(x, y, t) = (5/it) \text{ mg/l/dia}$ onde $it = 1, \dots, 140$ é o número de iterações no tempo. Também são consideradas três fontes no interior do domínio com valor de 10 mg/l , nos nós 4090, 6080 e 8090.

Para o transporte advectivo é considerado o campo de velocidades dado pelo vento na superfície da água, onde $\mathbf{V} = (5, 4 \times 10^2, -1.6317 \times 10^3) \text{ m/dia}$. As condições de fronteira são as de Neumann homogêneas para as duas variáveis e o tempo total de simulação é de 60 dias .

Na Figura 4.11 pode se observar a interação entre as variáveis DBO e OD mediante a distribuição espacial no tempo das concentrações, sob os efeitos das fontes poluidoras e o vento noroeste.

A Figura 4.11(a) apresenta a distribuição espacial da concentração de DBO e suas respectivas curvas de nível. Nela podemos observar nos primeiros cinco dias, na primeira e segunda colunas, o acúmulo de DBO nas fronteiras com assoreamento, além do espalhamento na direção do vento.

Considerando que o assoreamento diminui com o tempo, no final da simulação após 60 dias , na terceira coluna, a concentração de DBO se estabiliza, exceto nas localidades das fontes e nas regiões de acúmulo pela ação (direção) do vento (noroeste).

A distribuição espacial da concentração de OD na Figura 4.11(b), indica a depleção do oxigênio na regiões onde há maiores concentrações de DBO da Figura 4.11(a). Após 60 dias a concentração de OD atinge o nível de saturação do oxigênio C_s , nos setores onde não há influência do transporte da fonte e o vento.

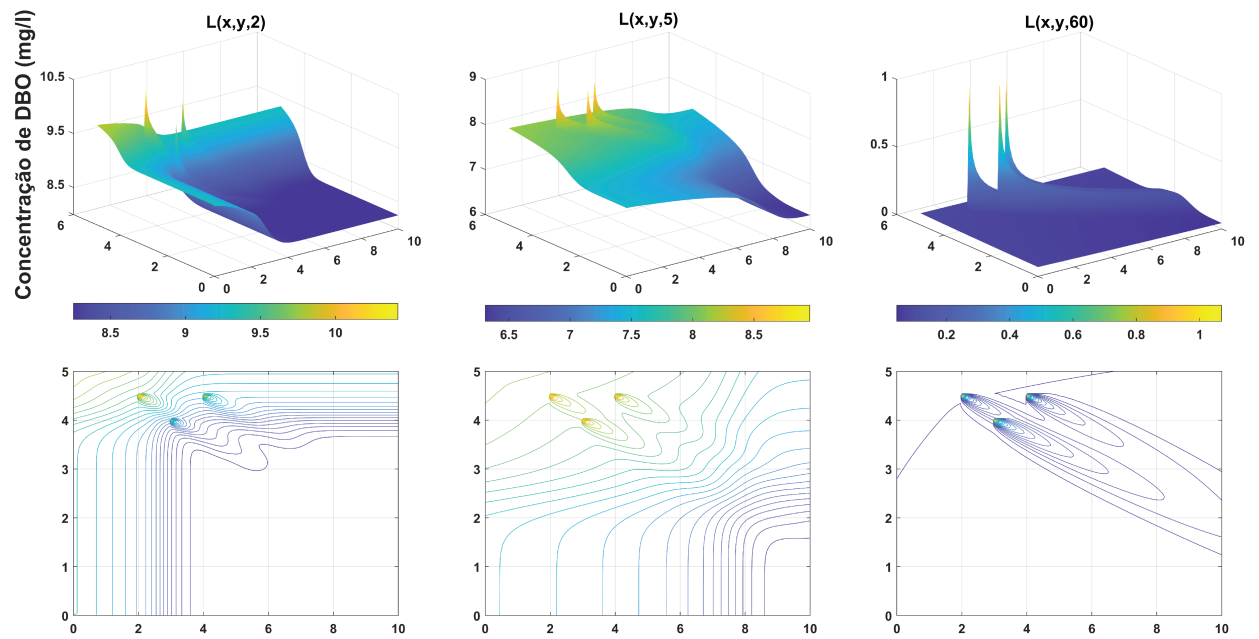
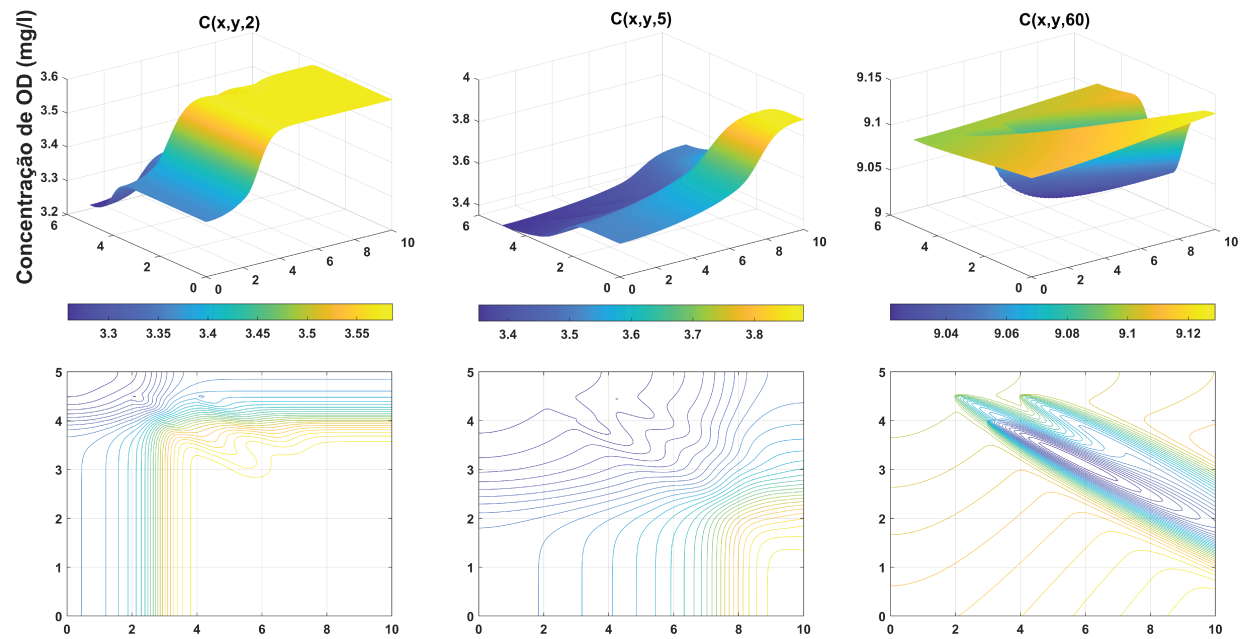
(a) Distribuição das concentrações de *DBO* para 2, 5, e 60 *dias* de simulação.(b) Distribuição das concentrações de *OD* para 2, 5, e 60 *dias* de simulação.

Figura 4.11: Evolução temporal das concentrações de *DBO* e *OD* com: vento noroeste, assoreamento nas fronteiras vertical a esquerda e a fronteira horizontal superior e três fontes no interior, tempo de simulação 60 *dias* e condições iniciais $L_0 = 10 \text{ mg/l}$ e $C_0 = 5 \text{ mg/l}$.

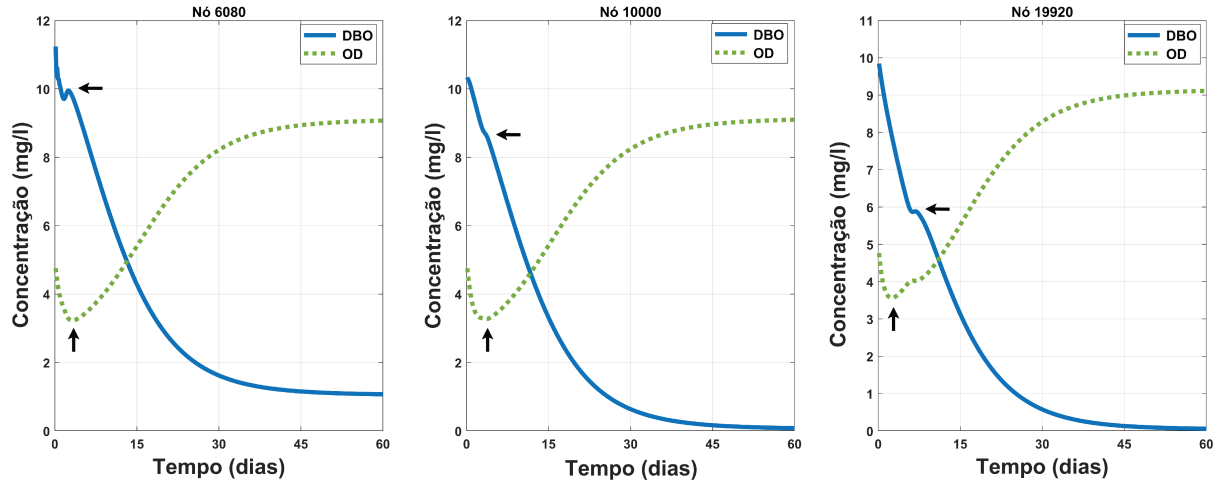


Figura 4.12: Comportamento ao longo do tempo das concentrações de *DBO* e *OD*, em diferentes nós do domínio.

Na Figura 4.12, observa-se o comportamento evolutivo das concentrações de *DBO* e *OD* em três nós escolhidos da malha: nós 6080, nó 10000 e nó 19920.

No nó 6080 pode se observar que nos primeiros dias a concentração de *DBO* é maior que a condição inicial de $L_0 = 10 \text{ mg/l}$, e isto ocorre pelo fato do referido nó ser coincidente com uma das fontes. Ambos os nós 6080 e 10000 estão perto da fronteira horizontal superior, e desta forma, ambos os nós são atingidos pelo assoreamento nos primeiros 3 dias de simulação, indicado com uma seta horizontal, enquanto o nó 19920 localizado na fronteira vertical à direita, longe das fontes, é atingido após cinco dias.

Para o comportamento temporal da concentração de *OD*, observa-se um decaimento na concentração nos primeiros dias até atingir o valor mínimo de concentração, indicado por uma seta vertical, e depois disso, a concentração começa aumentar até atingir o nível assintótico. As temporais verificam o comportamento clássico observado em estudos teóricos.

4.2.3 Cenário 3

Neste cenário consideramos o domínio retangular como um trecho de um rio. O transporte advectivo foi tomado como o campo de velocidades da correnteza do rio com perfil parabólico [36], dado pela Equação (4.1):

$$u(y) = 4u_0 \frac{y}{h} \left(1 - \frac{y}{h}\right) \quad (4.1)$$

onde u_0 representa a velocidade máxima da correnteza na calha do trecho do rio, com comprimento l e largura h . O campo de velocidades é dado por $\mathbf{V} = (u(y), 0)$, (Figura 4.13).

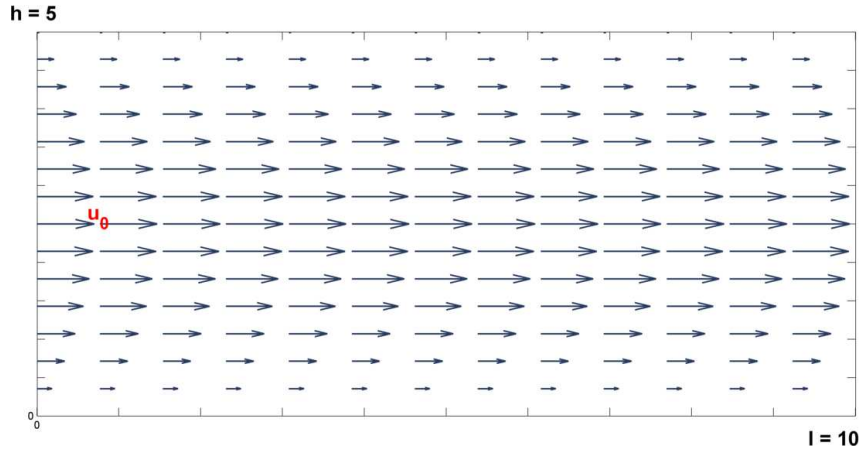


Figura 4.13: Campo de velocidade do rio dado por um perfil parabólico com $u_0 = 0,1$ m/s .

Supondo que o rio vem poluído à montante e que a concentração de *DBO* seja conhecida, em maior concentração na calha central do rio, adotamos como condição de contorno na lateral esquerda do domínio a condição de Dirichlet: $L(x_0, y, t) = e^{-((y-50)/40)^2}$. As demais fronteiras seguem consideradas como sendo de Neumann homogêneo.

Na Figura 4.14(a), observa-se o efeito da difusão, do transporte dado pelo perfil parabólico e pela condição de Dirichlet na concentração de *DBO*. Constata-se que a menor concentração de *DBO* encontra-se nas fronteiras horizontais, onde a condição de Dirichlet é próxima de zero e a magnitude do vetor velocidade é nula, porém, na calha central do rio onde, com a velocidade máxima da correnteza, observam-se maiores concentrações de *DBO*.

No tocante à Figura 4.14(b), verifica-se o decaimento da concentração do *OD* nos setores de maior concentração de *DBO*. As maiores concentrações de *OD* ocorrem perto das margens horizontais, onde se tem as menores concentrações de *DBO*. Uma concentração inicial de *OD* igual a 3 mg/l foi considerada neste cenário, e observa-se no último gráfico uma concentração próxima de $9,2 \text{ mg/l}$, isto deve se à reareação a qual atua como uma fonte de *OD* em todo o domínio de simulação.

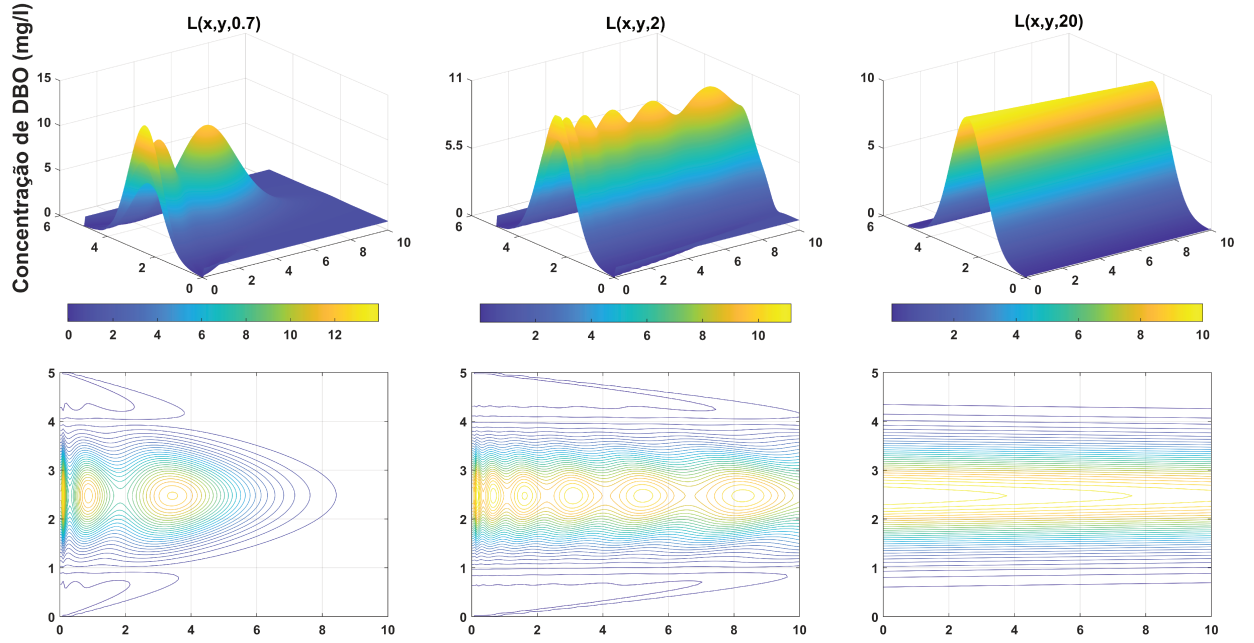
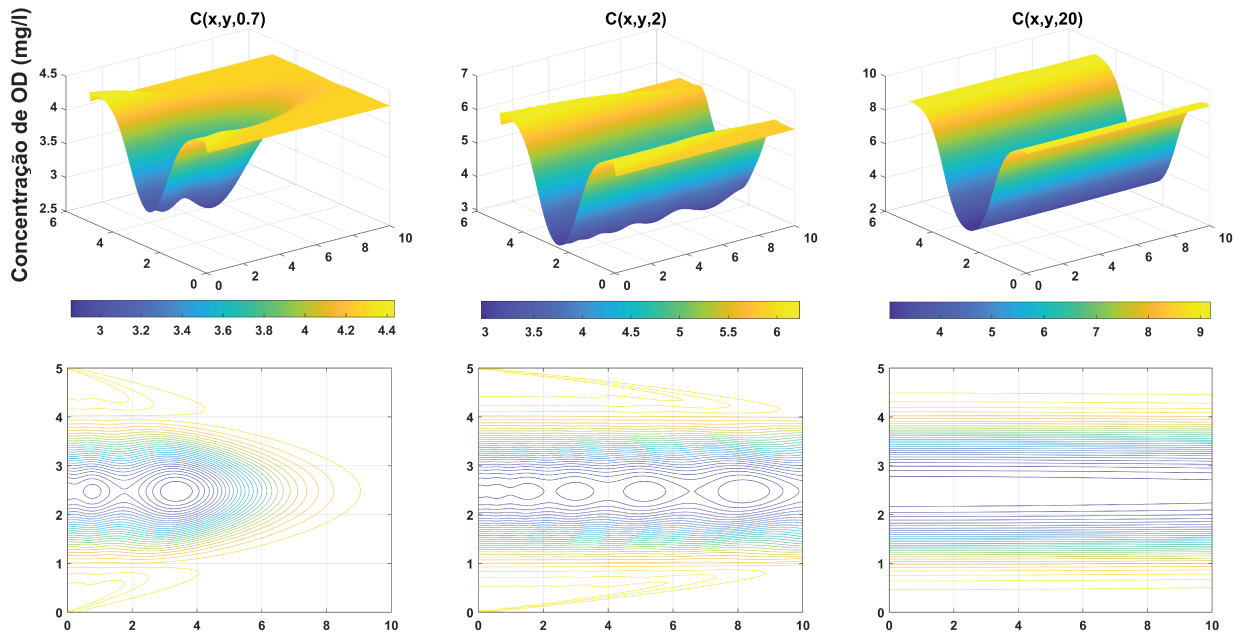
(a) Distribuição das concentrações de *DBO* após 20 *dias* de simulação.(b) Distribuição das concentrações de *OD* após 20 *dias* de simulação.

Figura 4.14: Evolução temporal das concentrações de *DBO* e *OD* com: campo de velocidades do rio com perfil parabólico, condição de fronteira de Dirichlet na lateral esquerda, tempo de simulação 20 *dias* e condições iniciais $C_0 = 3 \text{ mg/l}$ para e $L_0 = 1 \text{ mg/l}$.

Conclusões

Nesta pesquisa, apresentamos um modelo não-linear para a dinâmica de *DBO* e *OD* mediante um sistema acoplado de EDP's com condições iniciais e de fronteira específicas, considerando relações cinéticas de Holling tipo III entre as variáveis, para o estudo da depleção de *OD* num meio aquático devido presença de matéria orgânica.

Durante o estudo foi também apresentado o modelo simplificado e provada a existência de um ponto de equilíbrio assintoticamente estável.

Para as experimentações foram desenvolvidos algoritmo e programas computacionais para simulação da solução numérica do modelo proposto num domínio bidimensional.

Mediante simulações, foi analisada a influência de diferentes valores de fonte, q , sobre a concentração de *OD*, mostrando que para maiores valores de q , menores os valores de *OD*.

As simulações geraram diferentes cenários considerando transportes advectivos de vento e correnteza com um perfil parabólico. Também foram introduzidas nas simulações interferências externas, como o lançamento de poluente com cargas de *DBO* e/ou escoamento de material orgânico pelas fronteiras do domínio.

A partir das simulações espaço-temporais constatou-se que, à medida que a concentração de *DBO* aumenta, a concentração de *OD* diminui e vice-versa. Conforme o esperado, a concentração de matéria orgânica alcança o seu valor máximo, próximo ao local de despejo, e o nível de concentração diminui à medida que aumenta a distância da fonte poluidora.

Além disso, verificou-se que o poluente se dispersa mais rapidamente na direção do vento e/ou correnteza, sob influência da velocidade do escoamento. Nos setores do domínio onde a concentração de *DBO* foi tomada como nula, a concentração de *OD* atingiu o nível de saturação $C_s = 9,2 \text{ mg/l}$, ou seja, o ponto de equilíbrio $(0, C_s)$.

Durante a implementação do modelo dificuldades surgiram em relação a estabilidade, tendo em vista a ordem dos parâmetros, como os coeficientes de difusão D_l e D_c , 10^{-9} e 10^{-10} , respectivamente. De modo a garantir a condição sobre a discretização do domínio, atendendo a condição do número de Péclet, teríamos que adotar parâmetros de discretização para Δx e/ou Δy muito pequenos, de ordem menor que 10^{-9} , o que torna os sistema lineares a serem resolvidos computacionalmente caros, devido ao tamanho das matrizes a serem resolvidas; desta forma, o esquema Scharfetter-Gummel tornou-se uma ferramenta numérica útil para a obtenção dos resultados apresentados sem ter que usar uma malha extremamente fina.

O modelo e as técnicas usadas neste trabalho podem ser adaptados a problemas do mundo real, proporcionando informação de diagnóstico da qualidade dos recursos hídricos para a implementação de políticas de gestão por órgãos ambientais.

Referências bibliográficas

- [1] H. B. Aguirre, V. C. A. Loredó, G. E. C. Díaz e C. E. Campos. “Estabilidad de sistemas por medio de polinomios Hurwitz”. Em: *Revista de matemática, teoría y aplicaciones* 24.1 (2017), pp. 61–77. ISSN: 2215-3373. DOI: [10.15517/RMTA.V24I1.27751](https://doi.org/10.15517/RMTA.V24I1.27751).
- [2] ANA. *Agência Nacional de Águas, Ministério do Meio Ambiente Monitoramento da Qualidade da Água de Rios e Reservatórios*, pp. 11–12.
- [3] R. C. Bassanezi e W. C. Ferreira. *Equações diferenciais com aplicações*. HARBRA, 1988.
- [4] BRASIL - CONAMA. “Resolução Nº 357, de 17 de Março de 2005. Ministério do Meio Ambiente. Dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes, e dá outras providências”. URL: <http://www2.mma.gov.br/port/conama/res/res05/res35705.pdf>.
- [5] M. H. S. Bucci e L. F. C. De Oliveira. “A Interferência das atividades antrópicas na qualidade da água em reservatório de abastecimento urbano. Estudo de caso: Represa Dr. João Penido. Juiz de Fora, MG”. Em: *Eclética Química* Vol. 37.1 (2012), pp. 9–22. ISSN: 1678-4618. DOI: [10.26850/1678-4618eqj.v37.1.2012.p09-22](https://doi.org/10.26850/1678-4618eqj.v37.1.2012.p09-22).
- [6] D. Cajas. “Impacto ambiental em meios aquáticos: modelagem, aproximação e simulação de um estudo na Baía de Buenaventura–Colômbia.” Dissertação de Mestrado em Matemática Aplicada. IMECC- UNICAMP, Campinas/SP, 2015. URL: http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/307268/1/CajasGuaca_Denis_M.pdf.
- [7] D. Cajas, J. C. Rubianes e J. Meyer. “Método de Diferencias Finitas para a modelagem e simulação da dispersão de poluentes em meios aquáticos”. Em: *Biomatemática* Vol. 25.4 (2015), pp. 45–58.
- [8] R. S. Cantrell e C. Cosner. *Spatial ecology via reaction-diffusion equations*. John Wiley & Sons, 2004. ISBN: 0471493015.
- [9] S. Ceola, F. Laio e A. Montanari. “Human-impacted waters: New perspectives from global high-resolution monitoring”. Em: *Water Resources Research* Vol. 51.9 (2015), pp. 7064–7079. ISSN: 1944-7973. DOI: [10.1002/2015WR017482](https://doi.org/10.1002/2015WR017482).
- [10] M. A. Churchill, H. L. Elmore e R. A. Buckingham. “The prediction of stream reaeration rates”. Em: *Journal of the Sanitary Engineering Division* Vol. 88 (1962), pp. 1–46. DOI: [10.1061/JSEDAI.0000459](https://doi.org/10.1061/JSEDAI.0000459).

-
- [11] M. C. Cunha. *Métodos numéricos*. Editora da UNICAMP, 2011. ISBN: 978-8526808775.
- [12] E. L. Cussler. *Diffusion: mass transfer in fluid systems*. Cambridge University Press, 2009.
- [13] J. Douglas Jr, T. Dupont e R. E. Ewing. “Incomplete iteration for time-stepping a Galerkin method for a quasilinear parabolic problem”. Em: *Journal on Numerical Analysis* 16.3 (1979), pp. 503–522. DOI: [10.1137/0716039](https://doi.org/10.1137/0716039).
- [14] C. Fan e W.-S. Wang. “Influence of biological oxygen demand degradation patterns on water-quality modeling for rivers running through urban areas”. Em: *Annals of the New York Academy of Sciences* Vol. 1140.1 (2008), pp. 78–85. ISSN: 1749-6632. DOI: [10.1196/annals.1454.031](https://doi.org/10.1196/annals.1454.031).
- [15] P. Farrell e D. Peschka. “Nonlinear diffusion, boundary layers and nonsmoothness: Analysis of challenges in drift-diffusion semiconductor simulations”. Em: *Computers Mathematics with Applications*. 78 (2019), pp. 3731–3747. DOI: [10.1016/j.camwa.2019.06.007](https://doi.org/10.1016/j.camwa.2019.06.007).
- [16] A. V. Gotovtsev. “Modification of the Streeter-Phelps system with the aim to account for the feedback between dissolved oxygen concentration and organic matter oxidation rate”. Em: *Water resources* Vol. 37.2 (2010), pp. 245–251. ISSN: 0097-8078. DOI: [10.1134/S0097807810020120](https://doi.org/10.1134/S0097807810020120).
- [17] F. N. Ibrahim, M. Dimian e A. Wadi. “Remediation of pollution in a river by unsteady aeration with arbitrary initial and boundary conditions”. Em: *Journal of Hydrology* Vol. 525 (2015), pp. 793–797.
- [18] Z.-G. Ji. *Hydrodynamics and water quality, modeling rivers, lakes, and estuaries*. John Wiley & Sons, 2017. ISBN: 978-1-118-87715-9.
- [19] S. E. Jørgensen. *Fundamentals of ecological modelling*. Vol. 9. Elsevier, 1988. ISBN: 0-444-99535-8.
- [20] S. E. Jørgensen e G. Bendoricchio. *Fundamentals of ecological modelling*. Vol. 21. Elsevier, 2001. ISBN: 9780080532103.
- [21] L. E. Keshet. *Mathematical Models in Biology*. SIAM. Society for Industrial e Applied Mathematics, 1988, pp. 272–280. ISBN: 0-89871-554-7.
- [22] U. W. Kim. “Mathematical modeling and analytical solutions of dissolved oxygen and biochemical oxygen demand profiles under three-dimensional, unsteady – state conditions.” Doctoral Tese in Engineering Science. New Jersey Institute of Technology. Newark/ New Jersey, 1981. URL: <https://digitalcommons.njit.edu/dissertations/1259>.
- [23] M. V. Kumarasamy. “Deoxygenation and reaeration coupled hybridmixing cells based Pollutant transport model to assess water quality status of a river”. Em: *International Journal of Environmental Research* Vol. 9.1 (2015), pp. 341–350. ISSN: 1735-6865. DOI: [10.22059/ijer.2015.906](https://doi.org/10.22059/ijer.2015.906).

- [24] R. Lardner et al. "Computation of the residual flow in the Gulf using the Mt Mitchell data and the KFUPM/RI hydrodynamical models". Em: *Marine pollution bulletin* 27 (1993), pp. 61–70. DOI: [doi.org/10.1016/0025-326X\(93\)90008-8](https://doi.org/10.1016/0025-326X(93)90008-8).
- [25] R. J. LeVeque. *Finite difference methods for ordinary and partial differential equations: steady-state and time-dependent problems*. Vol. 98. Siam, 2007. ISBN: 9780898716290.
- [26] K. E. Lindenschmidt. "The effect of complexity on parameter sensitivity and model uncertainty in river water quality modelling". Em: *Ecological Modelling* Vol. 190.1-2 (2006), pp. 72–86. ISSN: 0304-3800. DOI: [10.1016/j.ecolmodel.2005.04.016](https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2005.04.016).
- [27] D. P. Loucks et al. *Water resources systems planning and management: an introduction to methods, models and applications*. Paris: Unesco, 2005. ISBN: 92-3-103998-9.
- [28] M. Maleewong e S. Hasadsri. "Analytical and numerical results of dissolved oxygen and biochemical oxygen demand in non-uniform open channel". Em: *Ecological Modelling* Vol. 252 (2013), pp. 11–22. ISSN: 0304-3800. DOI: [10.1016/j.ecolmodel.2012.09.026](https://doi.org/10.1016/j.ecolmodel.2012.09.026).
- [29] B. J. McCartin e S. B. Forrester. "A fractional step-exponentially fitted hopscotch scheme for the Streeter-Phelps equations of river self-purification". Em: *Engineering Computations* (2002). ISSN: 0264-440. DOI: [10.1108/02644400210419049](https://doi.org/10.1108/02644400210419049).
- [30] J. F. C. A. Meyer. "Modelagem e simulação numérica do transiente térmico em meios compostos". Tese de Doutorado em Matemática. IMECC - UNICAMP, Campinas / SP, 1988.
- [31] A. K. Misra. "Modeling the depletion of dissolved oxygen in a lake due to submerged macrophytes". Em: *Nonlinear Analysis: Modelling and Control* Vol. 15.2 (2010), pp. 185–198. ISSN: 1392-5113. DOI: [10.15388/NA.2010.15.2.14353](https://doi.org/10.15388/NA.2010.15.2.14353).
- [32] L. H. A. Monteiro. *Sistemas Dinâmicos*. 2ª Ed. Editora Livraria da Física, 2006. ISBN: 858832508X.
- [33] W. W. Nazaroff e L. Alvarez-Cohen. *Environmental Engineering Science*. 2001. ISBN: 978-0-471-14494-6.
- [34] M. Odanaka, M. Wakabayashi e T. Ohzone. "The dynamics of latchup turn-on behavior in scaled CMOS". Em: *IEEE Transactions on Electron Devices* 32 (1985), pp. 1334–1340. DOI: [10.1109/T-ED.1985.22120](https://doi.org/10.1109/T-ED.1985.22120).
- [35] J. A. Oliveira de Jesus. "Utilização de modelagem matemática 3D na gestão da qualidade da água em mananciais aplicação no Reservatório Billings." Tese de Doutorado em saúde pública. USP, São Paulo, 2006.
- [36] A. de Oliveira Fortuna. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluídos: conceitos básicos e aplicações*. 2000. ISBN: 8531405262.
- [37] R. F. Oliveira. "O comportamento evolutivo de uma mancha de óleo na Baía de Ilha Grande, RJ: modelagem, análise numérica e simulações." Tese de Doutorado

- em Matemática Aplicada. IMECC - UNICAMP, Campinas / SP, 2003. URL: http://repositorio.unicamp.br/bitstream/REPOSIP/307261/1/Oliveira_RosaneFerreirade_D.pdf.
- [38] G. T. Orlob. *Mathematical modeling of water quality: Streams, lakes and reservoirs*. Vol. 12. John Wiley & Sons, 1983. ISBN: 0471100315.
- [39] M. Owens, R. W. Edwards e J. W. Gibbs. “Some reaeration studies in streams”. Em: *Air Water Pollut.* 8 (1964), pp. 469–486.
- [40] B. Pimpunchat, W. L. Sweatman, W. Triampo et al. “Modelling river pollution and removal by aeration”. Em: *MODSIM 2007 International Congress on Modelling and Simulation. Land, Water & Environmental Management: Integrated Systems for Sustainability. Modelling and Simulation Society of Australia and New Zealand*. 2007, pp. 2431–2437.
- [41] B. Pimpunchat, W. L. Sweatman, G. C. Wake et al. “A mathematical model for pollution in a river and its remediation by aeration”. Em: *Applied Mathematics Letters* Vol. 22.3 (2009), pp. 304–308. ISSN: 0893-9659. DOI: [10.1016/j.aml.2008.03.026](https://doi.org/10.1016/j.aml.2008.03.026).
- [42] A. Quarteroni. *Numerical models for differential problems*. Vol. 2. Springer, 2009.
- [43] A. H. Rosa, L. F. Fraceto e V. Moschini-Carlos. *Meio ambiente e sustentabilidade*. Artmed Editora, 2009, p. 47. ISBN: 8540701960.
- [44] J. C. Rubianes. “Modelagem matemática e simulação computacional da influência de poluentes e da velocidade de corrente na dinâmica populacional de macrófitas aquáticas.” Tese de Doutorado em Matemática Aplicada. IMECC - UNICAMP, Campinas / SP, 2015. URL: <http://www.repositorio.unicamp.br/handle/REPOSIP/321496>.
- [45] J. C. Rubianes, D. Cajas, J. Meyer e J. A. I. Rubianes. “Esquema Scharfetter-Gummel e sua aplicação na modelagem da dispersão de agrotóxicos no Lago Titicaca”. Em: *Biomatemática* Vol. 26.5 (2015), pp. 59–74. ISSN: 1679-365X. URL: http://www.ime.unicamp.br/~biomat/bio25_art5.pdf.
- [46] J. C. Rubianes, D. Cajas, J. F. C. A. Meyer e J. A. I. Rubianes. “Modelagem da depleção de oxigênio dissolvido pela presença de macrófitas aquáticas”. Em: *Biomatemática* Vol. 26.13 (2016), pp. 179–188. ISSN: 1679-365X. URL: http://www.ime.unicamp.br/~biomat/Bio26_art13.pdf.
- [47] D. L. Scharfetter e H. Gummel. “Large-signal analysis of a silicon Read diode oscillator”. Em: *IEEE Transactions on Electron Devices* 16 (1969), pp. 64–77. DOI: [10.1109/T-ED.1969.16566](https://doi.org/10.1109/T-ED.1969.16566).
- [48] J. Shukla, A. Misra e P. Chandra. “Mathematical modeling and analysis of the depletion of dissolved oxygen in eutrophied water bodies affected by organic pollutants”. Em: *Nonlinear Analysis: Real World Applications* 9.5 (2008), pp. 1851–1865.

-
- [49] S. A. Socolofsky e G. H. Jirka. “Environmental fluid mechanics part I: Mass transfer and diffusion”. Em: *Engineering Lectures* (2002). URL: http://www.ifh.uni-karlsruhe.de/lehre/envflu_I/Downloads/course_script/ed2/script_ed2.pdf.
- [50] H. W. Streeter e E. B. Phelps. *A study of the pollution and natural purification of the Ohio River*. Rel. técn. US Department of Health, Education, & Welfare, 1925.
- [51] S. Sunarsih et al. “Analysis of wastewater facultative pond using advection-diffusion model based on explicit finite difference method”. Em: *Environmental Engineering Research* 26.3 (2021). DOI: [10.4491/eer.2019.496](https://doi.org/10.4491/eer.2019.496).
- [52] V. Thomée. “From finite differences to finite elements; a short history of numerical analysis of partial differential equations”. Em: *Journal of Computational and Applied Mathematics* 128 (2001), pp. 1–54.
- [53] T. F. Vidal. “Modelagem fuzzy para sistema DBO/OD em reservatório com estratificação térmica utilizando modelos de balanço de massa.” Tese de Doutorado em Engenharia Civil, UFC, Fortaleza/ CE, 2016.
- [54] M. Von Sperling. *Estudos e modelagem da qualidade da água de rios*. DESA/UFMG, 2007. ISBN: 8542300807.
- [55] M. Von Sperling. *Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos*. 3ª Ed. Vol. 1. Editora UFMG, 2005. ISBN: 85-7041-114-6.
- [56] P.-b. Zhou. *Numerical analysis of electromagnetic fields*. Springer Science & Business Media, 1993. ISBN: 978-3-642-50321-4.

Apêndice A

Modelagem de Streeter e Phelps

A.1 Hipóteses para a Modelagem de Streeter e Phelps

O modelo de Streeter e Phelps, assume mistura completa e uniforme em cada ponto, isto é, a turbulência é suficiente para permitir que a concentração de OD e DBO seja a mesma em toda a seção transversal. Desta forma não depende das coordenadas espaciais do domínio, assim podemos assumir que as derivadas direcionais espaciais são nulas, isto é, sem difusão nem advecção. Assim o modelo de Streeter e Phelps assume:

- Meio de mistura completa e uniforme de OD e DBO em cada ponto da seção transversal.
- A biodegradação e reaeração são reações de primeira ordem.
- Possui só uma fonte.
- Possui uma carga constante de poluição dada em um ponto.
- Não há nenhum fluxo afluente.
- Não há transporte por difusão nem advecção [29].

A.2 Modelo de Streeter e Phelps

Levando em consideração as hipóteses apresentadas na Seção [A.1](#), o modelo proposto por Streeter e Phelps descreve a dinâmica do oxigênio dissolvido em um rio mediante a

taxa de variação do déficit de oxigênio o qual é dado por dois processos independentes, as equações de reaeração (2.28) e desoxigenação (2.30). Assim:

$$\frac{d}{dt}(C_s - C) = \underbrace{K_d L}_{\text{Desoxigenação}} - \underbrace{K_r(C_s - C)}_{\text{Reaeração}}, \quad (\text{A.1})$$

Considerando um déficit inicial D_0 , usando a solução da Equação (2.30), dada por (2.31) e resolvendo a equação diferencial (A.1) [50, 20], podemos chegar à seguinte solução,

$$C(t) = C_s - \left(\frac{K_d L_0}{K_r - K_d} \right) \left(e^{-K_d t} - e^{-K_r t} \right) - D_0 e^{-K_r t}. \quad (\text{A.2})$$

A Equação (A.2), representa a concentração de oxigênio dissolvido presente na água no tempo t , sendo esta a solução da equação da dinâmica de OD em (A.3), obtida substituindo D em (A.1), comumente encontrada na literatura dada pela seguinte EDO,

$$\frac{dC}{dt} = -K_d L + K_r(C_s - C). \quad (\text{A.3})$$

A.3 Valores de OD e DBO Permissíveis

Segundo a legislação brasileira vigente CONAMA 357/2005, que classifica os recursos hídricos e estabelece padrões de qualidade e de lançamento de efluentes, as águas doces são classificadas em cinco classes segundo a qualidade requerida para seus usos [4], como mostra a Figura A.1, sendo a classe especial a de melhor qualidade destinadas à preservação e conservação do meio aquático e com desinfecção para abastecimento e consumo humano. Segundo esta escala o nível de deterioração do recurso hídrico limita seu uso, por exemplo, a classe 4 que é destinada apenas para navegação e à harmonia paisagística, [2].

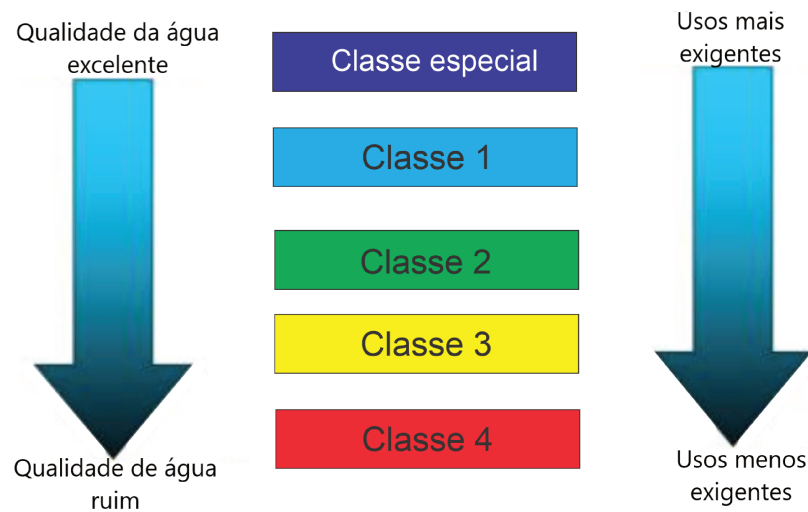


Figura A.1: Classificação das águas doces segundo a qualidade requerida para seus usos [2].

Segundo a legislação brasileira vigente CONAMA 357/2005, os teores mínimos de OD e máximo da DBO permissíveis depende da classificação do rio, ver Tabela A.1.

Classe de manancial	Valor mínimo de OD	Valor máximo de DBO
Classe 1	$6,0mg/l O_2$	$3,0mg/l O_2$
Classe 2	$5,0mg/l O_2$	$5,0mg/l O_2$
Classe 3	$4,0mg/l O_2$	$10,0mg/l O_2$
Classe 4	$2,0mg/l O_2$	—

Tabela A.1: Valores mínimos de OD e valores máximos de DBO para cada classe de corpo hídrico, [4].

A.4 Discretização das Condições de Fronteira

Na discretização das condições de fronteira assumimos as condições de contorno gerais, já que a partir destas podemos obter as condições de fronteira de Dirichlet, Neumann, Robin e as condições de não fluxo, estudadas na Seção (2.2), as discretizações são feitas de forma análoga à discretização dos pontos interiores.

Observe que esta classificação de fronteiras é espacial. Assim, vamos fazer as discretizações espaciais correspondentes considerando, inicialmente, a condição de fronteira geral para a variável L , no ponto de fronteira $(x_i, y_j) \in \Gamma_i$ num tempo arbitrário $t \in I$.

$$D \frac{\partial L_{ij}}{\partial \eta} + (\gamma - \mathbf{V} \cdot \eta) L_{ij} = 0 \quad (\text{A.4})$$

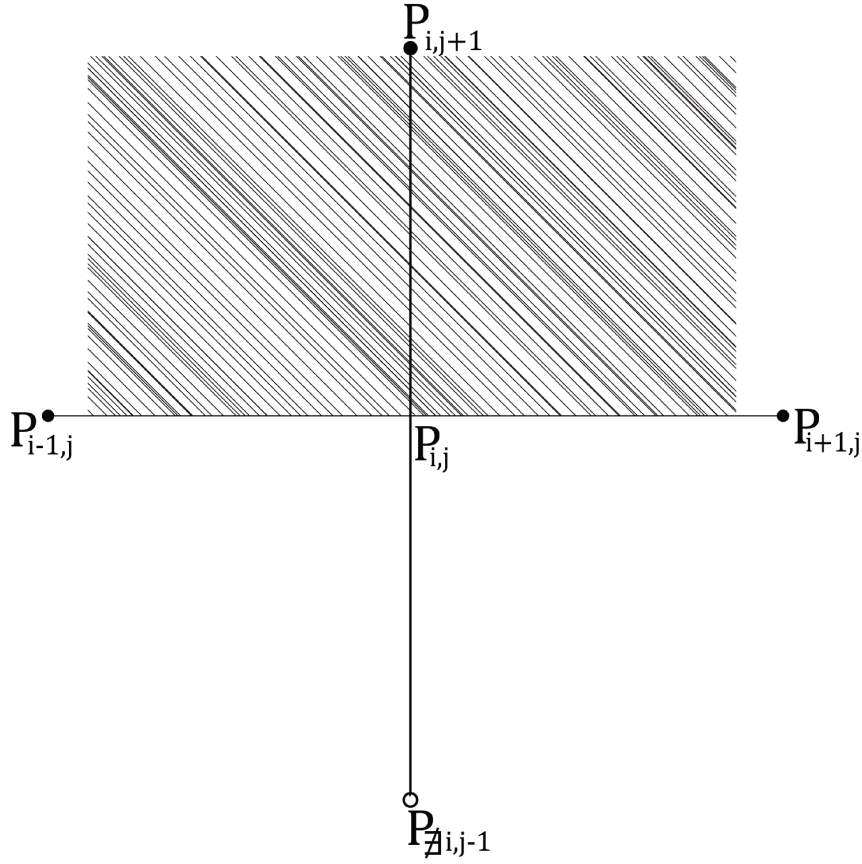


Figura A.2: Fronteira Tipo I, [6].

Denotamos fronteira Tipo I, Γ_1 , a fronteira horizontal com domínio acima do segmento como mostra a Figura A.2.

Discretizando a derivada direcional na direção $\eta = (0, -1)$ usaremos pontos fictícios. Observe que na Figura A.2 o ponto $L_{i,j-1}$ não pertence ao domínio, então trabalharemos com $L_{\#i,j-1}$ e encontraremos o valor aproximado [6]. Da derivada direcional temos:

$$\frac{\partial L_{ij}}{\partial \eta} = \langle \nabla L_{ij}, \eta \rangle = -\frac{\partial L_{ij}}{\partial y} \quad (\text{A.5})$$

Agora, com a condição de contorno de Robin (2.24) e a aproximação da derivada por diferenças finitas (3.15) temos:

$$\frac{\partial L_{ij}}{\partial y} = \frac{L_{i,j+1} - L_{\#i,j-1}}{2\Delta y} = \frac{(\gamma + v)}{D_l} L_{ij}. \quad (\text{A.6})$$

Isolando $L_{\#i,j-1}^*$, vem:

$$L_{\#i,j-1} = L_{i,j+1} - \frac{2\Delta y}{D_l}(\gamma + v)L_{ij}. \quad (\text{A.7})$$

Agora, substituindo (A.7), para os tempos t^n e t^{n+1} na Equação (3.21), e desenvolvendo as contas à esquerda com $L_{i,j+1}^{n+1}$ e $L_{\#i,j-1}^{n+1}$, obtemos a discretização para os pontos de fronteira Tipo I, dada por:

$$\begin{aligned} & L_{i-1,j}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + \\ & L_{i,j}^{n+1} \left(1 + \frac{D_l \Delta t}{\Delta x^2} + \frac{D_l \Delta t}{\Delta y^2} + \frac{K_1 \Delta t}{2} \frac{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2}{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2 + 4\kappa^2} + \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} + \frac{v \Delta t}{2D_l} \right) (\gamma + v) \right) + \\ & L_{i,j+1}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{\Delta y^2} \right) + L_{i+1,j}^{n+1} \left(\frac{-D_l \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) = L_{i-1,j}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{2\Delta x^2} + \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + \quad (\text{A.8}) \\ & L_{i,j}^n \left(1 - \frac{D_l \Delta t}{\Delta x^2} - \frac{D_l \Delta t}{\Delta y^2} - \frac{K_1 \Delta t}{2} \frac{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2}{(C_{i,j}^{n+1} + C_{i,j}^n)^2 + 4\kappa^2} - \left(\frac{\Delta t}{\Delta y} + \frac{v \Delta t}{2D_l} \right) (\gamma + v) \right) + \\ & L_{i,j+1}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{\Delta y^2} \right) + L_{i+1,j}^n \left(\frac{D_l \Delta t}{2\Delta x^2} - \frac{u \Delta t}{4\Delta x} \right) + \Delta t q_{i,j}^{n+\frac{1}{2}}. \end{aligned}$$

De forma análoga podemos fazer com os pontos de fronteira Tipo I, para a variável C . Os outros sete tipos de fronteira também podem ser discretizados usando os mesmos procedimentos.

Apêndice B

Código computacional

```

%cenário I
clear all
clf
clc
tic;

% dados do domínio
l=10; h=5; tf=60;

% paâmetros do problema
kappa=0.5*10^6;
alpha = 0.37;
dl=2.0*10^(-9);
dc=1.8144*10^(-10);
kl=0.15;
kc=0.45;
u=2*1.728/(sqrt(5))*0.1;
v=-1.728/(sqrt(5))*0.1;

% parâmetros da discretização
nt=420; dt=tf/nt;    npit=4;
nx=199; dx=l/nx;    nnx=nx+1;
ny=99;  dy=h/ny;    nny=ny+1;
nn=nnx*nny;
s=9.2*(10^(6))*ones(nn,1);

% Número de Peclet
[u*dx/dl v*dy/dl]
[u*dx/dc v*dy/dc]

% Fonte
q=0.0*ones(nn,1);
q(80)=85*10^6;

% Pontos de Equilibrio
x1=(s - (kc*q)/(alpha*kl));
p1=((kappa+x1).*q./(kl*x1));

% Condições iniciais
l0=10*10^6*ones(nn,1); c0=5*10^6*ones(nn,1);

% Termo convectivo

Pl_x =(u/(2*dl))*dx;
Pl_y=(v/(2*dl))*dy;

P2_x =(u/(2*dc))*dx;
P2_y=(v/(2*dc))*dy;

lambdal_x = 1 - 1/abs(Pl_x) + 2/(exp(2*abs(Pl_x))-1);
lambdal_y = 1 - 1/abs(Pl_y) + 2/(exp(2*abs(Pl_y))-1);

lambda2_x = 1 - 1/abs(P2_x) + 2/(exp(2*abs(P2_x))-1);
lambda2_y = 1 - 1/abs(P2_y) + 2/(exp(2*abs(P2_y))-1);

```

```

if u > 0
dl_x = dl*(1 + lambdal_x*Pl_x);
dc_x = dc*(1 + lambda2_x*P2_x);
elseif u < 0
    dl_x = dl*(1 - lambdal_x*Pl_x);
    dc_x = dc*(1 - lambda2_x*P2_x);
else dl_x = dl;
    dc_x = dc;
end
%%
if v > 0
dl_y = dl*(1 + lambdal_y*Pl_y);
dc_y = dc*(1 + lambda2_y*P2_y);
elseif v < 0
    dl_y = dl*(1 - lambdal_y*Pl_y);
    dc_y = dc*(1 - lambda2_y*P2_y);
else dl_y = dl;
    dc_y = dc;
end

% valores auxiliares

dt2=dt/2;          ddx=dx*dx;          ddy=dy*dy;
Dlx=dl_x*dt2/ddx;  Dly=dl_y*dt2/ddy;
Dcx=dc_x*dt2/ddx;  Dcy=dc_y*dt2/ddy;
ctx=c*dt/dx;       cty=c*dt/dy; %

%Parâmetros de atualização de Contorno

t1M = c*(dt/dy + v*dt/(2*dl_y));
t1B = c*(dt/dy + v*dt/(2*dc_y));

t3M = c*(dt/dx - u*dt/(2*dl_x));
t3B = c*(dt/dx - u*dt/(2*dc_x));

t4M = c*(dt/dx + u*dt/(2*dl_x));
t4B = c*(dt/dx + u*dt/(2*dc_x));

ut=u*dt/(4*dx);    vt=v*dt/(4*dy);
klt=kl*dt2;        kct=kc*dt2;

% Matriz M

Mee=-Dlx-ut;
Meb=-Dly-vt;
Med=-Dlx+ut;
Mea=-Dly+vt;
Lp=2*(Dlx+Dly);

Mde=-Mee;
Mdb=-Meb;
Mdd=Dlx-ut;
Mda=Dly-vt;

```

```
% Matriz N
```

```
Nee=-Dcx-ut;      Nde=Dcx+ut;  
Neb=-Dcy-vt;      Ndb=Dcy+vt;  
Ned=-Dcx+ut;      Ndd=Dcx-ut;  
Nea=-Dcy+vt;      Nda=Dcy-vt;  
Cp=2*(Dcx+Dcy)+alpha*dt/2;
```

```
% preparação das matrizes
```

```
Me=sparse(nn); Md=sparse(nn);  
Ne=sparse(nn); Nd=sparse(nn);  
Mel=sparse(nn); Mdl=sparse(nn);  
Nec=sparse(nn); Ndc=sparse(nn);
```

```
% preenchimento da parte constante, linear
```

```
for i=1:nn  
    Me(i,i)=1+Lp; Md(i,i)=1-Lp;  
    Ne(i,i)=1+Cp; Nd(i,i)=1-Cp;  
end  
for i=1:nn-1  
    Me(i+1,i)=Meb; Me(i,i+1)=Mea;  
    Md(i+1,i)=Mdb; Md(i,i+1)=Mda;  
    Ne(i+1,i)=Neb; Ne(i,i+1)=Nea;  
    Nd(i+1,i)=Ndb; Nd(i,i+1)=Nda;  
end  
for i=1:nn-nny  
    Me(i+nny,i)=Mee; Me(i,i+nny)=Med;  
    Md(i+nny,i)=Mde; Md(i,i+nny)=Mdd;  
    Ne(i+nny,i)=Nee; Ne(i,i+nny)=Ned;  
    Nd(i+nny,i)=Nde; Nd(i,i+nny)=Ndd;  
end
```

```
for i=1:nny  
    ind=i;  
    Me(ind,ind+nny)=-2*Dlx;      Md(ind,ind+nny)=2*Dlx;  
    Me(ind,ind)=Me(ind,ind)+t4M;  Md(ind,ind)=Me(ind,ind)-t4M;  
    Ne(ind,ind+nny)=-2*Dcx;      Nd(ind,ind+nny)=2*Dcx;  
    Ne(ind,ind)=Ne(ind,ind)+t4B;  Nd(ind,ind)=Ne(ind,ind)-t4B;  
end
```

```
for i=1:nny  
    ind=(nx)*nny+i;  
    Me(ind,ind-nny)=-2*Dlx;      Md(ind,ind-nny)=2*Dlx;  
    Me(ind,ind)=Me(ind,ind)+t3M;  Md(ind,ind)=Me(ind,ind)-t3M;  
    Ne(ind,ind-nny)=-2*Dcx;      Nd(ind,ind-nny)=2*Dcx;  
    Ne(ind,ind)=Ne(ind,ind)+t3B;  Nd(ind,ind)=Ne(ind,ind)-t3B;  
end
```

```
Me(1,2)=-2*Dly; Md(1,2)=2*Dly;
```

```
for i=1:nx  
    ind=i*nny+1;  
    Me(ind,ind-1)=0;      Md(ind,ind-1)=0;  
    Me(ind,ind+1)=-2*Dly;  Md(ind,ind+1)=2*Dly;  
    Me(ind,ind)=Me(ind,ind)+t1M; Md(ind,ind)=Me(ind,ind)-t1M;  
    Ne(ind,ind-1)=0;      Nd(ind,ind-1)=0;  
    Ne(ind,ind+1)=-2*Dcy;  Nd(ind,ind+1)=2*Dcy;  
    Ne(ind,ind)=Ne(ind,ind)+t1B; Nd(ind,ind)=Ne(ind,ind)-t1B;  
end
```

```

for i=1:nx
ind=i*nny;
Me(ind,ind-1)=-2*Dly;      Md(ind,ind-1)=2*Dly;
Me(ind,ind+1)=0;          Md(ind,ind+1)=0;
Ne(ind,ind-1)=-2*Dcy;      Nd(ind,ind-1)=2*Dcy;
Ne(ind,ind)=Ne(ind,ind)+cty; Ne(ind,ind)=Ne(ind,ind)-cty;
Ne(ind,ind+1)=0;          Nd(ind,ind+1)=0;
end
Ne(nn,nn-1)=-2*Dcy;      Md(nn,nn-1)=2*Dly;

Me(nn,nn-nny)=-dl_x*dt/ddx; Md(nn,nn-nny)=dl_x*dt/ddx;
Me(nn,nn-1)=-dl_y*dt/ddy;   Md(nn,nn-1)=dl_y*dt/ddy;

Ne(nn,nn-nny)=-dc_x*dt/ddx; Nd(nn,nn-nny)=dc_x*dt/ddx;
Ne(nn,nn-1)=-dc_y*dt/ddy;   Nd(nn,nn-1)=dc_y*dt/ddy;

Me(1,1+nny)=-dl_x*dt/ddx;   Md(1,1+nny)=dl_x*dt/ddx;
Me(1,2)=-dl_y*dt/ddy;       Md(1,2)=dl_y*dt/ddy;

Ne(1,1+nny)=-dc_x*dt/ddx;   Nd(1,1+nny)=dc_x*dt/ddx;
Ne(1,2)=-dc_y*dt/ddy;       Nd(1,2)=dc_y*dt/ddy;

lz=l0; cz=c0;
verl = zeros(nny,nnx);
verc = zeros(nny,nnx);
vx = [0:dx:1]; vy = [0:dy:h];
for it=1:nt
Mel=Me; Mdl=Md;
Nec=Ne; Ndc=Nd;
for k=1:npit

for i=1:nn
cc=(cz+c0); cc2=cc(i)*cc(i);
kkc=kl*t*(cc2/(cc2+4*kappa*kappa));
Mel(i,i)=Me(i,i)+kkc;
Mdl(i,i)=Md(i,i)-kkc;
end
lz=Mel\ (Mdl*l0)+(q)*dt;

for i=1:nn
ll=(lz+l0);      cc=(cz+c0);
lc2=ll(i)*cc(i); cc2=cc(i)*cc(i);
kklc=kct*(lc2/(cc2+4*kappa*kappa));
Nec(i,i)=Ne(i,i)+kklc;
Ndc(i,i)=Nd(i,i)-kklc;
end

cz=Nec\ (Ndc*c0)+(alpha*s)*dt;

end
c0=cz; l0=lz;
c00 = c0*10^(-6); l00=l0*10^(-6);

xx = 1:nt;
DBO275(it) = l00(275,1);
OD275(it) = c00(275,1);

```

```

%Visualizacao dos resultados
for j=1:nnx
for i=1:nny
ind = (j-1)*nny + i;
verl(i,j) = l00(ind);
verc(i,j) = c00(ind);
end
end

%Gráfico do resultado
pause(0.00001);
display(it)

if it == 28
    h=figure;
    figure(1)

subplot(2,3,1)
surf(vx,vy,verl),view(0,90),colorbar('southoutside'), shading interp;

subplot(2,3,4)
surf(vx,vy,verc),view(0,90),colorbar('southoutside'), shading interp;

saveas(h,sprintf('FIG%d.fig',it)) % will create FIG1, FIG2,
end
hold on

if it == 140
    h=figure;
    figure(1)% -----

subplot(2,3,2)
surf(vx,vy,verl),view(0,90),colorbar('southoutside'), shading interp;

subplot(2,3,5)
surf(vx,vy,verc),view(0,90),colorbar('southoutside'), shading interp;

saveas(h,sprintf('FIG%d.fig',it)) % will create FIG1, FIG2,
end
hold on
if it == 420 % 60 dias
    h=figure;

    figure(1)%-----

subplot(2,3,3)
surf(vx,vy,verl),view(0,90),colorbar('southoutside'), shading interp;

subplot(2,3,6)
surf(vx,vy,verc),view(0,90),colorbar('southoutside'), shading interp;

saveas(h,sprintf('FIG%d.fig',it))
end
end

```

```
toc;

hold off
figure

%subplot(2,3,2);
plot(xx, DBO275,xx,OD275);grid
title('Nó 275')
xlabel('Iterações')
ylabel('Concentração (mg/L)')
legend('DBO','OD')
```