

MODELO MATEMÁTICO PARA SIMULAÇÃO
DE TRANSPORTE E DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS :
APLICAÇÃO AO ESTUDO DE LANÇAMENTO ACIDENTAL NO
RIO PARAIBA DO SUL

TANIA REGINA BUGE

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS
EM ENGENHARIA CIVIL .

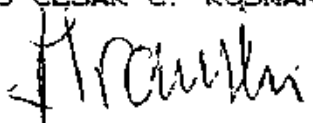
Aprovada por :



PROF. JOÃO SÉRGIO FAJARDO ROLDÃO - M. Sc.



PROF. PAULO CESAR C. ROSMAN - Ph.D.



Dr. JOEL M. BRANSKI - Dr. Ing.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 1990

BUGE, TANIA REGINA

Modelo Matemático para Simulação de
Transporte e Dispersão de Poluentes em Rios:
Aplicação ao Estudo de Lançamento Acidental
no Rio Paraíba do Sul. (Rio de Janeiro) 1990
x, 135 p. 29.7 cm (COPPE / UFRJ , M.Sc.,
Engenharia Civil, 1990)
Tese - Universidade Federal do Rio de
Janeiro, COPPE

AGRADECIMENTOS

Ao professor Luiz Carlos Wrobel pela orientação e dedicada ajuda para que os objetivos deste trabalho fossem atingidos.

Ao professor João Sérgio Fajardo Roldão, chefe do Laboratório de Traçadores da COPPE, que me proporcionou condições necessárias para o desenvolvimento desta pesquisa, juntamente com toda a equipe do laboratório.

A Homero Soares pelo apoio e incentivo.

Ao mestrando Jorge Prodanoff por ajudar-me a solucionar problemas de computação, contribuindo assim, para enriquecer meus conhecimentos nesta área.

A João Paulo pelo carinho e amizade.

E a todos que direta ou indiretamente contribuíram para o desenvolvimento desta tese.

RESUMO DA TESE APRESENTADA A COPPE/UFRJ COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS (M.Sc.).

MODELO MATEMÁTICO PARA SIMULAÇÃO
DE TRANSPORTE E DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS :
APLICAÇÃO AO ESTUDO DE LANÇAMENTO ACIDENTAL
NO RIO PARAÍBA DO SUL

TANIA REGINA BUGE

MARÇO - 90

ORIENTADOR : LUIZ CARLOS WROBEL

PROGRAMA : ENGENHARIA CIVIL

Esta tese consiste em uma formulação de diferenças finitas para solução da equação de difusão-advecção unidimensional, com aproximação regressiva do termo advectivo utilizando o esquema QUICKEST (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms). Para problemas onde o transporte advectivo é significativo, a solução via diferenças finitas com esquemas tradicionais apresenta problemas numéricos de oscilação e amortecimento da frente de onda. O presente estudo comprova o melhor desempenho do algoritmo QUICKEST na previsão do transporte e diluição

de poluentes comparado com resultados de outras formulações.

Diversos tipos de efluentes com diferentes termos de reação química são analisados, e seu lançamento acidental simulado com base em dados de campo obtidos em ensaios no rio Paraíba do Sul. O modelo desenvolvido mostrou-se eficiente, podendo ser facilmente implantado em micro-computadores.

ABSTRACT OF THESIS PRESENTED TO COPPE/UFRJ AS
PARTIAL FULFILLMENT OF THE REQUIREMENTS FOR THE
DEGREE OF MASTER OF SCIENCE (M.Sc.)

MATHEMATICAL MODEL FOR SIMULATION
OF TRANSPORT AND DISPERSION OF POLLUTANTS IN RIVERS:
APPLICATION TO THE STUDY OF ACCIDENTAL DISCHARGE
IN THE PARAIBA DO SUL RIVER

TANIA REGINA BUGE

MARÇO - 90

SUPERVISOR : LUIZ CARLOS WROBEL

DEPARTMENT : CIVIL ENGINEERING

This thesis consists in a finite difference formulation for solution of the one-dimensional advection-diffusion equation, with an upstream approximation of the advective term using the QUICKEST (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms) scheme. For problems in which advective transport is significant, finite difference solutions employing traditional schemes present numerical problems of oscillation and smoothing of the wave front. The present study shows the better behavior

of the QUICKEST algorithm for computing the transport and dillution of pollutants, compared with results obtained with other formulations.

Several types of effluents with different chemical reaction terms are analised, and their accidental discharge simulated based on field data obtained from studies carried out in the Paraíba do Sul river. The model developed has shown to be efficient and can be easily implemented in micro-computers.

INDICE

CAPÍTULO I - INTRODUÇÃO

I.1- Generalidades	1
I.2- Objetivos.....	2
I.3- Apresentação	3

CAPÍTULO II - MECANISMOS DE TRANSPORTE DE POLUENTES

II.1- Difusão Molecular e Lei de Fick	4
II.2- Advecção	9
II.3- Difusão Turbulenta	11
II.4- Dispersão em um Escoamento Laminar	16

CAPÍTULO III - RELAÇÃO ENTRE OS CONSTITUINTES

III.1- Introdução	23
III.2- Parâmetros de Qualidade de Água.....	24
III.2.1- Condições Aeróbicas e Anaeróbicas.....	24
III.2.2- Classificação dos Parâmetros...	24
III.3- Ciclo do Nitrogênio	27
III.3.1- Nitrogênio Orgânico	28
III.3.2- Amônia	28
III.3.3- Nitrito	29
III.3.4- Nitrato	29
III.4- Demanda Bioquímica de Oxigênio	29
III.5- Oxigênio Dissolvido	30
III.5.1- Concentração de Saturação de Oxigênio Dissolvido	33

III.5.2- Coeficiente de Reaeração	32
III.6- Fenol	34
III.7- Claneto	34
III.8- Taxas de Reações e Constantes Físicas	35

CAPITULO IV - SOLUÇÃO NUMÉRICA

IV.1- Introdução	37
IV.2- Aproximação de Derivadas via Diferenças Finitas	38
IV.2.1- Condições Iniciais e de Contorno	43
IV.3- Solução Analítica	44
IV.4- Comparação entre os Esquemas de Diferença Central e Regressiva	49
IV.5- Análise dos Resultados	54
IV.6- Método Quick	54
IV.6.1- Análise de Estabilidade	58
IV.7- Método QUICKEST	60

CAPITULO V - APLICAÇÕES E ANÁLISE DOS RESULTADOS . 77

CAPITULO VI - CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES 131

BIBLIOGRAFIA 133

CAPÍTULO I

I.1- GENERALIDADES

O crescimento desordenado do processo de industrialização tem provocado uma série de problemas ambientais devido principalmente ao lançamento de detritos nos cursos d'água naturais que provocam mudanças na qualidade da água.

Atualmente a contaminação é indiscriminada e requer cuidados no sentido de preservar a qualidade da água que constitui um elemento essencial à vida animal e vegetal.

O homem tem necessidade de água com qualidade adequada e em quantidade suficiente a fim de suprir suas necessidades, não somente para proteção de sua saúde, como também para seu desenvolvimento econômico.

O controle da poluição das águas se reveste de particular importância, no tocante à necessidade de proteção dos recursos hídricos, que vão se tornando cada vez mais escassos na maioria dos países e principalmente nas regiões metropolitanas.

Atualmente tem se desenvolvido pesquisas nesta área visando auxiliar no planejamento, operação e gerenciamento desses recursos. Modelos matemáticos de qualidade de água e transporte de poluentes são um exemplo típico, cuja utilização principal consiste em prever a movimentação dos poluentes ao longo do rio, permitindo a estimativa das variações temporais e espaciais de sua concentração ; com

isso, pode-se determinar o grau de tratamento requerido pela descarga de poluentes com o objetivo de se manter a qualidade da água do corpo receptor.

1.2- OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo o estudo de soluções numéricas, através do método das diferenças finitas, de problemas de transporte dispersão de poluentes em rios. Utiliza-se, na modelagem matemática, a equação de difusão-advecção unidimensional obtida do princípio de conservação de massa.

Com base na literatura técnica, é sabido que soluções desta equação através de esquemas tradicionais de diferença central e regressiva apresentam problemas numéricos de oscilação e amortecimento da frente de onda, respectivamente. Vários algoritmos foram propostos para minimizar estes problemas. Decidiu-se, no presente trabalho, estudar o esquema QUICKEST (Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics with Estimated Streaming Terms) desenvolvido por Leonard [1], e estendê-lo para a solução de problemas tratando de efluentes não-conservativos.

Discute-se também os principais fenômenos que devem ser considerados em modelos de transporte e dispersão de poluentes solúveis em rios.

Resultados de testes numéricos efetuados com dados do rio Paraíba do Sul [15] são apresentados em detalhes.

I.3- APRESENTAÇÃO

No capítulo II mostra-se os fenômenos físicos que devem ser considerados na dedução da equação de transporte de massa unidimensional, com suas respectivas variáveis e constantes.

No capítulo III apresenta-se as relações entre os constituintes a serem modelados , do ponto de vista de interação química e biológica.

O capítulo IV discute os problemas numéricos oriundos da solução de equações diferenciais via métodos discretos e apresenta a formulação e implementação numérica do algoritmo QUICKEST de diferenças finitas .

No capítulo V são apresentados testes numéricos para problemas de lançamento accidental de poluentes solúveis em rios com dados obtidos das campanhas de campo realizadas pelo Laboratório de Traçadores da COPPE/UFRJ [15] no rio Paraíba do Sul.

O Capítulo VI apresenta as principais conclusões e recomendações do presente trabalho, baseadas nos resultados dos testes numéricos realizados.

CAPÍTULO II

MECANISMOS DE TRANSPORTE DE POLUENTES

II.1 - DIFUSÃO MOLECULAR E LEI DE FICK

A difusão molecular caracteriza-se como um processo a nível microscópico em que as partículas de uma substância são transportadas por sua própria energia cinética. Este processo apenas, não tem grande importância no fenómeno de dispersão de uma substância em corpos d'água, exceto em escalas espaciais e temporais muito pequenas em comparação com as escalas de interesse do problema. Entretanto, muitos casos de dispersão no meio ambiente podem ser descritos por processos análogos à difusão molecular, mas em grande escala. A difusão molecular pode ser descrita como uma lei de observação em que a taxa temporal de transferência de massa de uma substância, por unidade de área, é proporcional ao gradiente espacial de concentração dessa substância. A hipótese de proporcionalidade é conhecida como lei de Fick.

A lei de Fick pode ser escrita como :

$$J = -D_m \partial C / \partial x \quad (II.1)$$

onde:

J = fluxo difusivo de massa

D_m = constante de proporcionalidade (coeficiente de difusão molecular)

C = concentração da substância (massa por unidade de volume)

O sinal negativo é um indicador de que o fluxo do material vai de áreas de concentração alta para áreas de concentração baixa, isto é, no sentido de concentrações decrescentes .

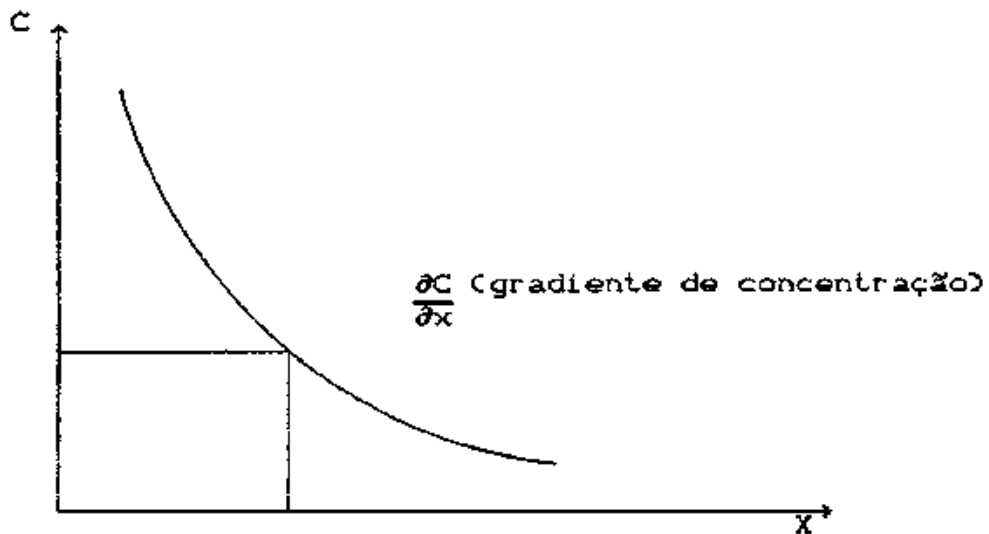


Fig.II.1—Variação espacial da concentração.

Sendo o fluxo uma grandeza vetorial, e visto que a difusão molecular é isotrópica (independe da direção do fluxo), a lei de Fick para três dimensões pode ser escrita em notação vetorial como :

$$\vec{J} = -D_m \vec{\nabla} C \quad (\text{II.2})$$

onde \vec{J} é o vetor fluxo de massa com componentes (J_x , J_y , J_z) no sistema de coordenadas cartesianas, e $\vec{\nabla} C$ é o gradiente da concentração.

A lei de Fick é uma equação que relaciona o fluxo de massa ao gradiente de concentração. Agora, mostraremos como a conservação de massa nos conduz a uma segunda relação, que é independente do tipo de processo de transporte. A combinação nos leva a uma equação diferencial parcial que é utilizada para descrever o processo difusivo.

A figura (II.2) ilustra o processo de transporte unidimensional em que a massa é transferida na direção x .

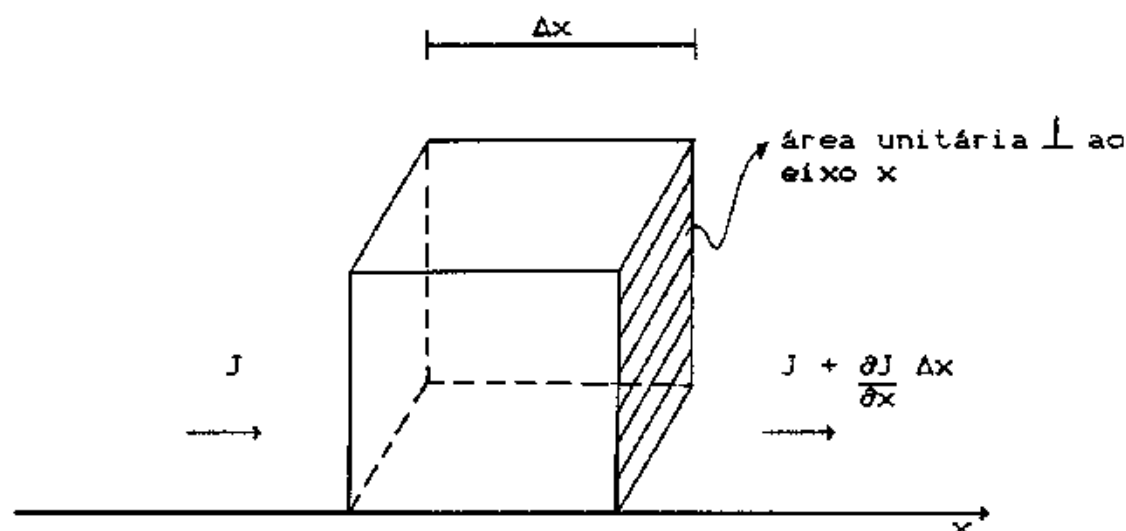


Fig.II.2-Volume de controle usado para derivar a equação (II.3).

Seja $C(x,t)$ a concentração no ponto x e no tempo t . Então existe uma massa $C(x,t)\Delta x$ por unidade de área,

limitada pelos dois planos paralelos . Desde que exista um trânsito de moléculas de dentro para fora e vice-versa, do volume limitado pelas placas , existe uma taxa de variação de massa com o tempo neste volume igual a :

$$(\partial C / \partial t) \Delta x$$

Esta taxa de variação temporal deve ser igual a diferença dos fluxos através de cada superfície.

Supondo que o fluxo de massa através da superfície unitária local a x é $J(x,t)$, então o fluxo por unidade de área através da superfície $x+\Delta x$ é definido como :

$$J(x,t) + \partial J(x,t) / \partial x \Delta x$$

e a diferença entre os dois é $\partial J / \partial x \Delta x$. Esta diferença deve ser igual à taxa de variação de massa no volume, de modo a satisfazer a conservação de massa . Igualando os dois termos, tem-se :

$$(\partial J / \partial x) + (\partial C / \partial t) = 0 \quad (II.3)$$

Portanto, podemos deduzir que a relação entre o fluxo $J(x,t)$ e a concentração $C(x,t)$ é independente do mecanismo de transporte molecular .

Substituindo a equação (II.1) na equação (II.3) teremos :

$$(\partial C / \partial t) = D_m (\partial^2 C / \partial x^2) \quad (II.4)$$

Alternativamente, diferenciando a equação (II.3) em relação a x e substituindo $\partial C / \partial x$ por $-J/D_m$, teremos :

$$(\partial J / \partial t) = D_m (\partial^2 J / \partial x^2) \quad (II.5)$$

As equações (II.4) e (II.5) são conhecidas como equações de difusão e descrevem como a massa é transferida pelo processo de difusão molecular .

Os resultados prévios podem ser estendidos a mais de uma direção, mais sucintamente utilizando notação vetorial. Considere um volume de controle fixo V com área superficial S . A concentração de massa do poluente é agora uma função da posição x e do tempo t , desse modo a massa total neste volume é :

$$\int_V C(x,t) \, dv$$

Se o fluxo de massa é $\vec{J}(x,t)$, então a conservação de massa requer que :

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V C(x,t) \, dv + \int_S (\vec{J}(x,t) \cdot \vec{n}) \, ds = 0$$

onde \vec{n} é um vetor unitário normal a superfície ds . Usando o Teorema de Green, e notando que V é um volume fixo, temos :

$$\int_V \left(\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{J} \right) dv = 0 \quad (II.6)$$

Se o volume V é arbitrário

$$\begin{array}{c} \rightarrow \rightarrow \\ \partial C / \partial t = - \nabla \cdot J \end{array} \quad (II.7)$$

Para o processo molecular o fluxo é descrito pela lei de Fick, equação (II.2), de modo que a equação (II.7) torna-se a equação de difusão :

$$\partial C / \partial t = D_m \nabla^2 C \quad (II.8)$$

Reescrevendo em coordenadas cartesianas, tem-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_m \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (II.9)$$

II.2- ADVECÇÃO

Suponhamos o fluido se movendo com velocidade \vec{U} , cujas componentes em x, y e z são u, v e w . Denomina-se advecção o transporte do centro de massa do fluido e assume-se que os processos de advecção e difusão são distintos, ocorrendo simultaneamente e que seus efeitos podem ser superpostos. Isso é equivalente a dizer que a difusão ocorre dentro do fluido em movimento bem como através de um fluido estacionário.

Inicialmente será analisado a difusão molecular em um escoamento laminar, de maneira que o coeficiente de difusão

D_m seja constante em todas as direções. Mais tarde, será analisado um escoamento turbulento com suas complexidades.

O fluxo advectivo de massa através de uma área unitária no plano yz em relação à componente da velocidade na direção x é equivalente ao produto escalar ($u.C$), uma vez que é a taxa com que o volume de fluido passa através da área unitária ($\vec{U} \cdot \vec{n}$ x área unitária = volume / tempo unitário) multiplicado pela concentração. O fluxo total de massa será a soma do fluxo advectivo mais o difusivo ,

$$J = \underbrace{u.C}_{\text{fluxo advectivo}} + \underbrace{(-D_m \partial C / \partial x)}_{\text{fluxo difusivo}} \quad (\text{II.10})$$

Substituindo a equação (II.10) na equação de conservação de massa unidimensional (II.3), obtemos a equação de difusão acrescida do termo advectivo :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (u.C)}{\partial x} = D_m \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (\text{II.11})$$

A equação em três dimensões vem a ser :

$$\left(\partial C / \partial t \right) + \vec{\nabla} \cdot (\vec{U} C) = D_m \nabla^2 C \quad (\text{II.12})$$

Aplicando ainda, a equação da continuidade

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0$$

obtem-se, finalmente :

$$(\partial C / \partial t) + \vec{U} \cdot \vec{\nabla} C = D_m \nabla^2 C \quad (\text{II.13})$$

Ou ainda, escrevendo a equação em coordenadas cartesianas e assumindo que o coeficiente D_m é constante para todas as direções coordenadas :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = D_m \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] \quad (\text{II.14})$$

II.3- DIFUSÃO TURBULENTA

A descrição de fluxo turbulento é baseada na suposição de que o fluxo variável instantâneo satisfaz a equação de Navier-Stokes. Muitos pesquisadores no campo da turbulência aceitam esta suposição como um postulado e usam-na como base para o desenvolvimento de teorias estatísticas ou modelos de simulação numérica.

A maneira de se representar as componentes de velocidades hidrodinâmicas instantâneas é em termos da soma da média temporal e da flutuação,

$$u = \bar{u} + u' \quad (\text{II.15})$$

onde \bar{u} é média temporal :

$$\bar{u}(t) = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} u(t') dt' \quad (\text{II.16})$$

e T é o período. Esta idéia é retratada na figura (II.3) .

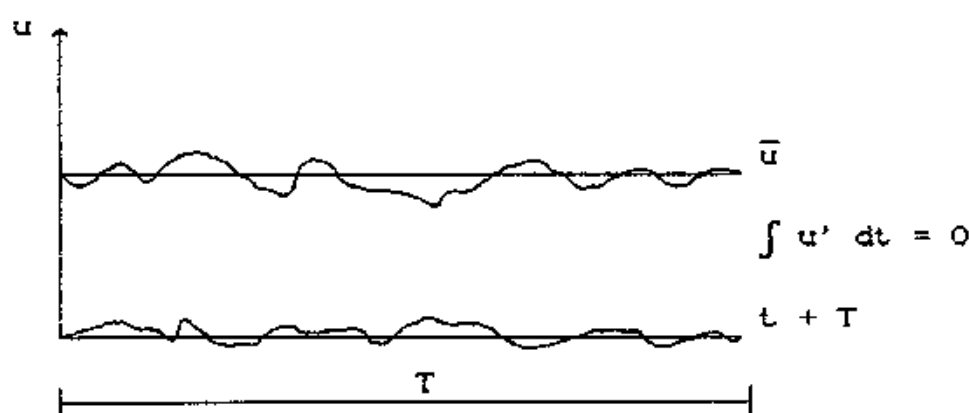


Fig.II.3 -Velocidade variando com o tempo devido a turbulência.

Analogamente, pode-se definir :

$$\begin{aligned} v &= \bar{v} + v' \\ w &= \bar{w} + w' \\ c &= \bar{c} + c' \end{aligned} \quad (\text{II.17})$$

onde :

$\bar{c}, \bar{v}, \bar{w}$ - valores médios

c', v', w' - flutuações obtidas das diferenças entre os valores instantâneos e os valores médios.

Substituindo as velocidades e concentrações instantâneas na equação (II.12), e tirando a média de cada termo em relação ao tempo ,

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} (\overline{\bar{C} + C'}) + \frac{\partial}{\partial x} (\overline{\bar{C} + C'})(\overline{\bar{u} + u'}) + \frac{\partial}{\partial y} (\overline{\bar{C} + C'})(\overline{\bar{v} + v'}) \\ + \frac{\partial}{\partial z} (\overline{\bar{C} + C'})(\overline{\bar{w} + w'}) = Dm \left[\frac{\partial^2 (\overline{\bar{C} + C'})}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 (\overline{\bar{C} + C'})}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 (\overline{\bar{C} + C'})}{\partial z^2} \right] \end{aligned}$$

(II.18)

Assumindo que a média do termo de flutuação é :

$$\overline{C'} = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} C' dt = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} (C - \bar{C}) dt = \bar{C} - \bar{C}$$

e supondo que a média temporal de \bar{C} é o próprio \bar{C} , então $\overline{C'} = 0$. Esta dedução também é válida para as componentes do campo de velocidade. Logo,

$$\overline{u C'} = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} u C' dt = \bar{u} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} C' dt = 0$$

$$\overline{u \bar{C}} = \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} u' \bar{C} dt = \bar{C} \frac{1}{T} \int_{t-T/2}^{t+T/2} u' dt = 0$$

o que também se aplica às componentes v e w .

Aplicando a propriedade de que a média temporal calculada sobre a média temporal de uma variável é a própria média, então a equação (II.18) torna-se :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial (\bar{u} \bar{C})}{\partial x} + \frac{\partial (\bar{v} \bar{C})}{\partial y} + \frac{\partial (\bar{w} \bar{C})}{\partial z} + \frac{\partial (\overline{u' C'})}{\partial x} +$$

$$\frac{\partial (\overline{v' C'})}{\partial y} + \frac{\partial (\overline{w' C'})}{\partial z} = Dm \left[\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} \right]$$

(II.19)

Os produtos dos termos médios podem ser expandidos ,
resultando :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \bar{C} \left[\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} \right]$$

$$+ \frac{\partial (\overline{u' C'})}{\partial x} + \frac{\partial (\overline{v' C'})}{\partial y} + \frac{\partial (\overline{w' C'})}{\partial z} = Dm \left[\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} \right]$$

(II.20)

Usando a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0$$

a equação (II.20) torna-se :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} + \frac{\partial (\overline{u' C'})}{\partial x} + \frac{\partial (\overline{v' C'})}{\partial y} \\ + \frac{\partial (\overline{w' C'})}{\partial z} = Dm \left[\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.21})$$

Os termos de produtos como $u'C'$, representam o fluxo de massa devido às flutuações turbulentas e, por analogia à lei de Fick de difusão molecular, podem ser representados por um sistema de transporte de massa equivalente, no qual o fluxo de massa é proporcional ao gradiente da concentração média, sendo o fluxo na direção das concentrações decrescentes,

$$\begin{aligned} \overline{u' C'} &= - D_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \\ \overline{v' C'} &= - D_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} \\ \overline{w' C'} &= - D_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \end{aligned}$$

onde D_x , D_y e D_z são coeficientes de difusão turbulenta. Reescrevendo a equação (II.21), teremos :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} - \frac{\partial (D_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x})}{\partial x} - \frac{\partial (D_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y})}{\partial y} \\ - \frac{\partial (D_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z})}{\partial z} = Dm \left[\frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial z^2} \right] \end{aligned} \quad (\text{II.22})$$

Os coeficientes D_x , D_y e D_z não são necessariamente os mesmos em todas as direcções, e são de ordem de grandeza maior que o coeficiente de difusão molecular D_m . Logo, podemos desprezar o termo D_m , ficando com :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{C}}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x} (D_x \frac{\partial \bar{C}}{\partial x}) + \frac{\partial}{\partial y} (D_y \frac{\partial \bar{C}}{\partial y}) + \frac{\partial}{\partial z} (D_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z})$$

(II.23)

A partir de agora , vamos omitir as barras dos termos médios, por questão de simplicidade .

II.4 - DISPERSÃO EM UM ESCOAMENTO LAMINAR

Considere um escoamento bidimensional como mostrado na figura II.4 . O fluxo é conduzido através de paredes paralelas, separadas por uma distância w , sendo todas as linhas de fluxo paralelas às paredes. A variação da velocidade entre as paredes é dada por $u(y)$ e a velocidade média é \bar{u} . A velocidade média pode ser calculada pela integração :

$$\bar{u} = \frac{1}{w} \int_0^h u \, dy \quad \text{(II.24)}$$

e o desvio entre a velocidade e a velocidade média na secção transversal é definido como :

$$u'(y) = u(y) - \bar{u} \quad (\text{II.25})$$

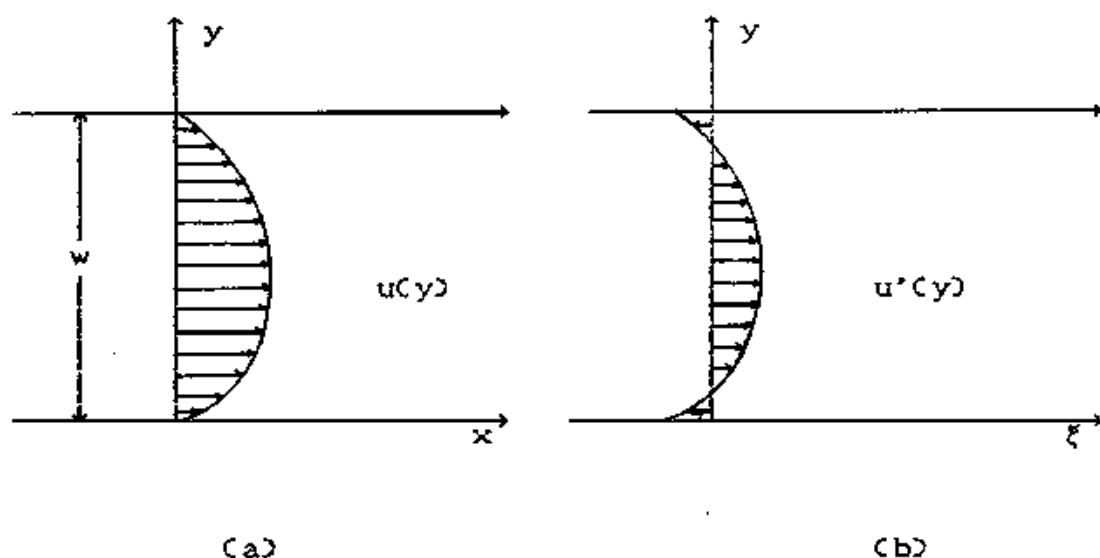


Fig.II.4 - a) Perfil de velocidade ; b) O mesmo perfil de velocidade de (a) , transformado para um sistema de coordenadas movendo-se com velocidade média, \bar{u} .

Se o fluxo transporta um soluto com concentração $C(x,y)$ e coeficiente de difusão molecular D_m , a concentração média em uma seção transversal qualquer do escoamento é definida como :

$$\bar{C} = \frac{1}{w} \int_0^w C \, dy \quad (\text{II.26})$$

Analogamente, o desvio da média é definido por

$$C'(x,y) = C(x,y) - \bar{C}(x) .$$

A equação de difusão para um escoamento na direção x é :

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = Dm \left[\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right] \quad (\text{II.27})$$

Substituindo-se C e u na equação (II.27) :

$$\frac{\partial (\bar{C} + C')}{\partial t} + (\bar{u} + u') \frac{\partial (\bar{C} + C')}{\partial x} = Dm \left[\frac{\partial^2 (\bar{C} + C')}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 (C')}{\partial y^2} \right] \quad (\text{II.28})$$

onde considerou-se que $\bar{C} = \bar{C}(x)$.

No momento, estamos apenas tratando com escoamento laminar, isto é, não estamos preocupados com as flutuações turbulentas ou com o efeito da turbulência no transporte de massa.

A equação (II.28) pode ser simplificada por uma transformação para um sistema de coordenadas cuja origem move-se com a velocidade média do escoamento . Definindo :

$$\xi = x - \bar{u}t , \tau = t \quad (\text{II.29})$$

e utilizando a regra da cadeia :

$$\frac{\partial}{\partial x} = \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \tau}{\partial x} \frac{\partial}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \xi} \quad (\text{II.30})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} = \frac{\partial \xi}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial \tau}{\partial t} \frac{\partial}{\partial \tau} = -\bar{u} \frac{\partial}{\partial \xi} + \frac{\partial}{\partial \tau}$$

Substituindo na equação (II.28) , obtem-se :

$$\frac{\partial (\bar{C} + C')}{\partial \tau} + u' \frac{\partial (\bar{C} + C')}{\partial \xi} = D_m \left[\frac{\partial^2 (\bar{C} + C')}{\partial \xi^2} + \frac{\partial^2 (C')}{\partial y^2} \right] \quad (\text{II.31})$$

A transformação para o sistema ξ, τ permite visualizar o escoamento como um observador que se desloca com a velocidade média. Neste sistema em movimento a única velocidade observada é u' , como mostra a figura II.4-b .

Considerando-se que a dispersão ao longo da direção do fluxo devida ao perfil de velocidades é muito maior que a difusão molecular , podemos desprezar o termo de difusão longitudinal na equação (II.31) , obtendo :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} + \frac{\partial C'}{\partial \tau} + u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} + u' \frac{\partial C'}{\partial \xi} = D_m \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \quad (\text{II.32})$$

A equação (II.32), ainda continua complicada sob o ponto de vista matemático, uma vez que u' varia com y . Não existe uma solução geral para (II.32). Taylor obteve uma solução analítica desprezando três termos da equação, inclusive o termo $\partial \bar{C} / \partial \tau$ que expressa o que estamos tentando encontrar que é a taxa de decaimento de

concentração, resultando assim uma equação de fácil solução para $C'(y)$:

$$u' \frac{\partial \bar{C}}{\partial \xi} = D_m \frac{\partial^2 C'}{\partial y^2} \quad (\text{II.33})$$

com $\frac{\partial C'}{\partial y} = 0$ nos pontos $y = 0, w$.

A justificativa para essa simplificação é discutida em detalhe por Fischer et al., [2] e baseia-se numa análise da ordem de grandeza de cada termo da equação (II.32).

A solução da equação (II.33) é :

$$C'(y) = \frac{1}{D_m} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \int_0^y \int_0^y u' dy dy + C'(0) \quad (\text{II.34})$$

Considere agora, a taxa de transporte de massa na direção do fluxo. A massa transportada relativa ao eixo coordenado móvel, é dada por :

$$M = \int_0^w u' C' dy$$

$$M = \frac{1}{D_m} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \int_0^w u' \int_0^y \int_0^y u' dy dy dy. \quad (\text{II.35})$$

O termo $\int_0^w u' \langle C'(0) \rangle dy = 0$, pois $\int_0^w u' dy = 0$.

A massa total transportada na direção do fluxo é proporcional ao gradiente de concentração nesta direção. Este resultado é igual ao encontrado para a difusão molecular, mas agora enunciado de uma forma mais ampla para a difusão na direção do fluxo através de todo o seu campo de velocidades.

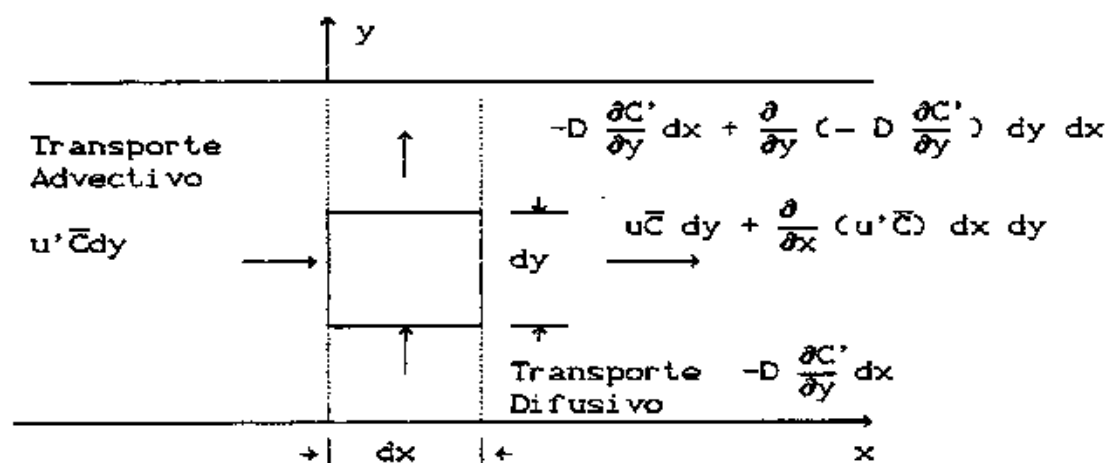


Fig.II.5—Balanço entre o fluxo advectivo e o fluxo difusivo expresso pela equação (II.33).

Analogamente ao coeficiente de difusão molecular, podemos definir um coeficiente de dispersão D , tal que :

$$\bar{M} = -h D \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} \quad (\text{II.36})$$

onde h , a profundidade, é a área por unidade de largura. O coeficiente de dispersão D expressa a propriedade difusiva do campo de velocidades e é geralmente conhecido como coeficiente de dispersão longitudinal. Comparando (II.35) com (II.36), vemos que :

$$D = - \frac{1}{h D_m} \int_0^h u' \int_0^y \int_0^y u' dy dy dy . \quad (\text{II.37})$$

O coeficiente D tem a mesma função que D_m , coeficiente de difusão molecular, para toda a seção transversal. Desta maneira, podemos escrever a equação de difusão unidimensional para valores médios na seção transversal, no sistema móvel de coordenadas, da seguinte forma :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial \tau} = D \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial \xi^2} \quad (\text{II.38})$$

Retornando ao sistema fixo de coordenadas e reintroduzindo o termo contendo a velocidade advectiva média, tem-se :

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = D \frac{\partial^2 \bar{C}}{\partial x^2} \quad (\text{II.39})$$

Esta equação é conhecida como a "equação de difusão-advectação unidimensional".

CAPÍTULO III

RELAÇÕES ENTRE OS CONSTITUINTES

III.1 - INTRODUÇÃO

Um dos problemas mais difíceis no desenvolvimento de modelos de qualidade de água é a determinação adequada do grau de complexidade do modelo. É necessário, mas não suficiente, a condição de que o modelo de qualidade de água seja capaz de simular "a priori" as condições observadas durante um certo intervalo de tempo.

O grande número de problemas ambientais causados pelo aumento de cargas poluidoras lançadas em cursos d'água naturais tem exigido, por parte da comunidade científica, estudos que permitam relacionar a descarga de poluentes num corpo líquido com mudanças provocadas na qualidade da água. Esta relação é normalmente expressa na forma de equações matemáticas que descrevem fenômenos como advecção, dispersão, fontes, decaimento e mudanças, nos vários constituintes, por reações químicas, físicas e biológicas, incluindo inter-relações entre estes.

Os parâmetros necessários para análises matemáticas de qualidade de água em rios incluem características hidrológicas do rio e taxas de reação para variáveis particulares em estudo. Por exemplo, quando se estuda a poluição em rio devida a um despejo accidental de um certo

poluente, procurar-se-á simular a variação da concentração dessa substância à jusante do lançamento, assim como determinar o tempo de passagem da nuvem poluente nas várias seções a jusante.

Considerando-se os constituintes de interesse a serem simulados pelo modelo QUICKEST, e em função dos dados geralmente disponíveis nas análises de qualidade de água, decidiu-se simplificar a descrição matemática das reações químicas e biológicas que se passam entre as substâncias, através de termos de 1^a ordem.

III.2- PARÂMETROS DE QUALIDADE DE ÁGUA

III.2.1- Condições aeróbicas e anaeróbicas

As condições aeróbicas ocorrem quando a decomposição da matéria orgânica é feita na presença de oxigênio.

As condições anaeróbicas ocorrem quando não existe presença de oxigênio na decomposição da matéria orgânica.

III.2.2- Classificação dos Parâmetros

A qualidade da água apresenta características físicas, químicas e biológicas. Os parâmetros físicos da água são, em geral aqueles que afetam os sentidos humanos. Dentro

desta classificação estão parâmetros como temperatura da água, densidade, turbidez, odor e cor. Alguns parâmetros são resultados de componentes químicos da água, mas são classificados aqui como parâmetros físicos porque podem ser detectados pelos sentidos humanos.

Os parâmetros químicos e biológicos descrevem as modificações químicas e biológicas na água, função da interação destes componentes . Esses parâmetros variam devido a combinação de componentes físicos, químicos e biológicos e não por efeitos separados. Portanto, alguns parâmetros são ordenados a seguir segundo suas características principais.

- Parâmetros Físicos :

Temperatura da água : A temperatura da água afeta os processos biológicos que se desenvolvem na água. Para cada organismo existe uma faixa de temperatura para o crescimento e morte ideal.

Densidade : A diferença de densidade num rio é função da diferença de temperatura ao longo da vertical ou devido a variação da quantidade de material em suspensão ao longo da profundidade.

Turbidez : É uma característica decorrente da presença de substâncias em suspensão, ou seja, de sólidos suspensos, finamente divididos em estado coloidal, e de organismos microscópicos.

- Parâmetros Químicos :

Oxigênio Dissolvido (OD) : Este é um parâmetro importante na análise da poluição de um rio. O oxigênio é necessário na água para manter as condições de vida de alguns organismos e para a decomposição aeróbica do despejo poluidor.

O oxigênio usado na diluição da matéria orgânica é repostado pelo processo de reaeração. A reaeração é produzida pela atmosfera, turbulência do rio, fotossíntese de plantas aquáticas.

Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) : Este parâmetro mede a quantidade de oxigênio usado pela água na degradação de material orgânico.

-Parâmetros Biológicos :

Esses parâmetros podem ser classificados em organismos patogênicos, que são organismos provenientes de dejetos de animais.

Indicadores bacteriológicos : é outro tipo de avaliação biológica, que testa o número de bactérias presentes na água. Os indicadores normalmente usados são : coliformes fecais e totais, etc.

Indicadores aquáticos : são utilizados habitantes aquáticos como peixe e plankton para verificar o grau de poluição através de sua resistência às condições anormais .

III.3 - CICLO DO NITROGÊNIO

Uma parte importante do nitrogênio da biosfera provém da fixação do nitrogênio molecular atmosférico . O ciclo do nitrogênio constitui um processo bioquímico no qual se produz nitrogênio molecular por fixação, assimilação e desnitrificação , como mostra a figura III.1 .

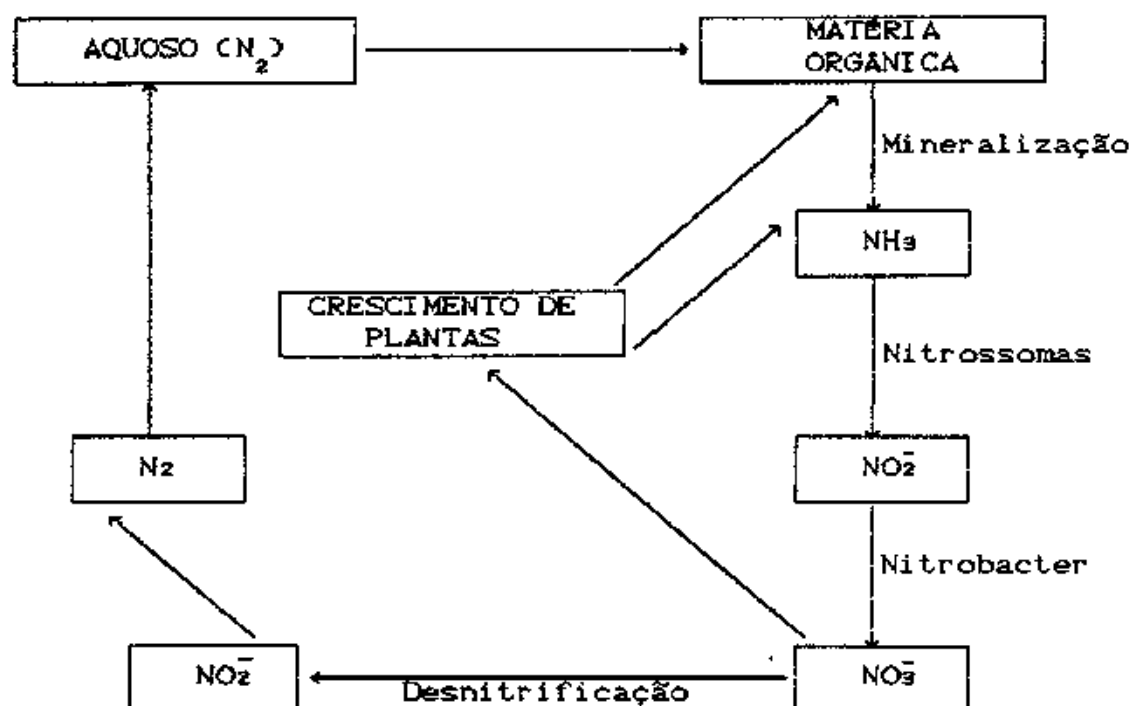


Fig.III.1 - Ciclo do Nitrogênio

As equações diferenciais governantes dessas transformações de nitrogênio de uma forma para outra, são normalmente modeladas como equações diferenciais de 1^a ordem que serão descritas a seguir.

III.3.1 - NITROGÊNIO ORGÂNICO

$$\frac{dN_1}{dt} = - \beta_3 N_1 - \tau_2 N_1 \quad (\text{III.1})$$

onde :

N_1 = concentração de nitrogênio orgânico, mg/l.

β_3 = taxa de hidrólise do nitrogênio orgânico em amônia, s^{-1} .

τ_2 = coeficiente de deposição de nitrogênio orgânico, s^{-1} .

III.3.2 - AMÔNIA

$$\frac{dN_2}{dt} = \beta_3 N_1 - \beta_4 N_2 + \tau_1 / d \quad (\text{III.2})$$

onde :

β_4 = taxa de oxidação, $NH_3 \rightarrow NO_2$, s^{-1} .

N_2 = concentração de amônia, mg/l.

d = profundidade média , m .

r_1 = taxa de demanda bética de amônia, $\text{mg/m}^2 \cdot \text{seg}$.

III.3.3 - NITRITO

$$\frac{dN_3}{dt} = \beta_1 N_2 + \beta_2 N_3 \quad (\text{III.3})$$

onde :

N_3 = concentração de nitrito, mg/l .

β_2 = taxa de oxidação , $\text{NO}_2 \rightarrow \text{NO}_3$, s^{-1} .

III.3.4 - NITRATO

$$\frac{dN_4}{dt} = \beta_2 N_3 \quad (\text{III.4})$$

onde :

N_4 = concentração de nitrato , mg/l .

III.4- DEMANDA BIOQUÍMICA DE OXIGÊNIO

A demanda bioquímica de oxigênio é utilizada como uma medida da quantidade de oxigênio requerida para a oxidação de matéria orgânica biodegradável presente na água por ação bioquímica aeróbica. A demanda de oxigênio em águas

residuais é exercida por três classes distintas : (1) matéria orgânica carbonada utilizável como fonte de alimento para organismos aeróbicos ; (2) nitrogênio oxidável derivado do nitrito, amônia e compostos de nitrogênio orgânico os quais servem de alimento para bactérias específicas (por exemplo Nitrossomas) ; e (3) compostos químicos reduzidos, isto é, íon ferroso (Fe^{2+}), íon sulfito (SO_3^{2-}) e (S^{2-}) que são oxidados pelo oxigênio dissolvido .

A utilização de oxigênio pelas bactérias para a estabilização orgânica pode ser aproximada por uma equação diferencial de primeira ordem . Ou seja, a taxa de oxigênio usado é uma função da quantidade de material oxidável remanescente no sistema num tempo qualquer :

$$\frac{dL}{dt} = - K_1 L \quad \text{(III.5)}$$

onde :

L = concentração de DBO , mg/l .

K_1 = taxa de desoxigenação, s^{-1} .

III.5 - OXIGÊNIO DISSOLVIDO

Em geral, o parâmetro mais importante numa análise de qualidade de água é a concentração de oxigênio dissolvido. O oxigênio é necessário na água para manter as condições de

vida dos vários organismos aquáticos e para a decomposição aeróbica de despejos poluidores.

A previsão do consumo e da concentração de oxigênio em meios hídricos é função de vários fatores significativos, tais como : oxidação da matéria orgânica (carbonácea e nitrogenada), demanda bética, respiração das plantas e animais, fotossíntese, reaeração atmosférica, e interações com o ciclo de nitrogênio (transformação amônia \rightarrow nitrito e nitrito \rightarrow nitrato). A equação diferencial utilizada para descrever a taxa de variação de oxigênio dissolvido é mostrada a seguir. Cada termo representa uma fonte ou sumidouro de oxigênio.

$$\frac{dO}{dt} = K_2(O^* - O) - K_1L - \alpha_1\beta_1N_2 - \alpha_2\beta_2N_3 \quad (III.6)$$

onde :

O = concentração de oxigênio dissolvido, mg/l .

O^* = concentração de saturação de oxigênio dissolvido, mg/l.

α_1 = taxa de oxigênio gasto para oxidação da amônia em nitrito, mg/mg .

α_2 = taxa de oxigênio gasto para oxidação de nitrito em nitrato, mg/mg .

K_1 = taxa de desoxigenação de DBO, s^{-1} .

L = concentração de DBO , mg/l .

β_1 = taxa de oxidação da amônia, s^{-1} .

β_2 = taxa de oxidação do nitrito, s^{-1} .

N_2 = concentração de amônia, mg/l .

N_3 = concentração de nítrito, mg/l .

III.5.1 - CONCENTRAÇÃO DE SATURAÇÃO DE OXIGÊNIO DISSOLVIDO

A solubilidade do oxigênio dissolvido na água decresce com o aumento da temperatura, aumento da concentração de sólidos dissolvidos e com a pressão . Neste trabalho, é utilizada uma equação não linear para calcular a concentração de saturação de oxigênio dissolvido, proposta pela American Public Health Association (1985) .

$$O^* = 14.652 - 0.41022T + 0.0079910T^2 - 0.00077774T^3$$

(III.7)

onde T é a temperatura da água em $^{\circ}\text{C}$. Esta equação foi desenvolvida para a pressão atmosférica padrão.

III.5.2- COEFICIENTE DE REAERAÇÃO

O coeficiente de reaeração é normalmente escrito em função da profundidade e da velocidade do rio . Muitos pesquisadores tem desenvolvido relações empíricas para este coeficiente com base na seguinte relação apresentada por

Streeter e Phelps.

$$K_2 = \frac{c u^n}{d^2} \quad (\text{III.8})$$

onde c e n são parâmetros, u é a velocidade e d a profundidade. A relação entre K_2 e temperatura é geralmente expressa por :

$$K_2(T) = K_2^{20} \theta^{(T-20)} \quad (\text{III.9})$$

onde $\theta = 1.0238$, um coeficiente definido experimentalmente e K_2^{20} é o coeficiente de reaeração quando $T = 20^\circ\text{C}$. O modelo utiliza a equação proposta por O'Connor e Dobbins [16], baseada nas características turbulentas do rio. Para rios que apresentam velocidades baixas e condições isotrópicas, tem-se :

$$K_2^{20} = \frac{(D_m \bar{u})}{d^{1.5}} \quad (\text{III.10})$$

Para rios com velocidades altas e condições anisotrópicas, a relação é :

$$K_2^{20} = \frac{480 D_m^{0.5} S_o^{0.25}}{d^{1.25}} \times 2.31 \quad (\text{III.11})$$

onde :

S_o = declividade, m/m.

d = profundidade média , m .

\bar{u} = velocidade , m/s .

K_2 = coeficiente de reaeração , s.⁻¹.

III.6 - FENOL

Para descrever a taxa de variação de fenol utilizamos a equação diferencial de primeira ordem , dada a seguir :

$$\frac{dF}{dt} = - K_f F \quad \text{(III.12)}$$

onde :

F = concentração de fenol , mg/l .

K_f = taxa de decaimento de fenol , s.⁻¹.

III.7 - CIANETO

A equação diferencial que descreve a variação de cianeto é :

$$\frac{dCN}{dt} = - K_{cn} CN \quad \text{(III.13)}$$

onde :

CN = concentração de cianeto , mg/l .

K_{cn} = taxa de decaimento do cianeto , s^{-1} .

III.8 - TAXAS DE REAÇÕES E CONSTANTES FÍSICAS

As reações químicas e biológicas que são simuladas pelo modelo QUICKEST são representadas por equações que contêm vários parâmetros. A tabela 1 apresenta uma lista desses parâmetros com valores usuais e suas dimensões, obtidos do manual do modelo QUAL2E [4].

TABELA III.1

VALORES TÍPICOS PARA COEFICIENTES DE REAÇÃO

VARIÁVEL	DESCRIÇÃO	UNIDADE	VALORES
α_1	taxa de consumo de O_2 por unidade de oxidação de amônia	$\frac{mg-O}{mg-N}$	3.0-4.0
α_2	taxa de consumo de O_2 por unidade de oxidação de nitrito	$\frac{mg-O}{mg-N}$	1.0-1.14
β_1	taxa de oxidação bio- lógica de amônia	dia^{-1}	0.10-1.00
β_2	taxa de oxidação de nitrito	dia^{-1}	0.20-2.00
β_3	taxa de hidrólise de nitrogênio orgânico para a amônia	dia^{-1}	0.20-0.40
r_1	taxa de demanda ben- tica de amônia	$mg/m^2 \cdot dia$	—
r_2	coeficiente de depo- sição de nitrogênio orgânico	dia^{-1}	0.001-0.10

CAPÍTULO IV

SOLUÇÃO NUMÉRICA

IV.1 - INTRODUÇÃO

Um típico modelo de qualidade de água é composto por um conjunto de equações diferenciais parciais no tempo e no espaço. Para resolver estas equações diferenciais aplicadas a problemas práticos de engenharia é necessário recorrer a técnicas de solução numérica.

No modelo proposto a equação básica é a equação de transporte de massa unidimensional,

$$\frac{\partial}{\partial t} (AC) = \frac{\partial}{\partial x} (AD \frac{\partial C}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial x} (AUC) + \frac{dC}{dt} + S \quad (IV.1)$$

em cuja solução deve-se tomar determinados cuidados com a escolha do método numérico a ser empregado, devido a existência na equação de fenômenos de natureza matemática distinta: o termo dispersivo representado por uma derivada de segunda ordem e o advectivo, representado por uma derivada de primeira ordem.

O parâmetro que demonstra a importância desses dois fenômenos é conhecido como número de Péclet, $Pe = uh/D$ (adimensional), sendo h um comprimento característico. Quando Pe assume o valor zero, dizemos que o problema é puramente difusivo e a equação se torna parabólica. Quando Pe tende a infinito, o problema é dito puramente advectivo

e a equação do problema se torna hiperbólica. No primeiro caso a utilização de métodos discretos conduz a boas aproximações ; no segundo tem-se um problema de propagação, e a solução via diferenças finitas leva a problemas numéricos de oscilação e amortecimento da frente da onda.

Neste capítulo apresentaremos os fundamentos do esquema numérico adotado, bem como algumas técnicas de aplicação imediata à equação de difusão - advecção.

IV.2- APROXIMAÇÃO DE DERIVADAS VIA DIFERENÇAS FINITAS

Considere-se uma função U finita e contínua, definida dentro de um domínio uni-dimensional. Utilizando o teorema de Taylor, podemos escrever :

$$U(x+h) = U(x) + h U'(x) + \frac{1}{2} h^2 U''(x) + \frac{1}{6} h^3 U'''(x) + \dots \quad (\text{IV.2})$$

e

$$U(x-h) = U(x) - h U'(x) + \frac{1}{2} h^2 U''(x) - \frac{1}{6} h^3 U'''(x) + \dots \quad (\text{IV.3})$$

onde h representa um pequeno incremento ao longo do eixo x . Somando-se as expressões (IV.2) e (IV.3) e desprezando os termos de ordem superior a dois, obtem-se :

$$U(x+h) + U(x-h) = 2U(x) + h^2 U''(x) + O(h^4) \quad (\text{IV.4})$$

Reorganizando os termos, tem-se :

$$U''(x) = \left[\frac{d^2 U}{dx^2} \right] \approx \frac{1}{h^2} \left\{ U(x+h) - 2U(x) + U(x-h) \right\} - O(h^2) \quad (IV.5)$$

com erro de aproximação da ordem de h^2 .

Por outro lado, subtraindo a equação (IV.3) da equação (IV.2), teremos :

$$U'(x) = \left[\frac{dU}{dx} \right] \approx \frac{1}{2h} \left\{ U(x+h) - U(x-h) \right\} \quad (IV.6)$$

com erro de aproximação da ordem de h^2 .

A equação (IV.6) aproxima a declividade da tangente no ponto P pela declividade da corda AB (figura IV.1). Esta relação é conhecida como aproximação por Diferença Central. Podemos também aproximar a declividade da tangente no ponto P pela declividade da corda PB, que é conhecida como aproximação por diferença progressiva, resultando :

$$U'(x) \approx \frac{1}{h} \left\{ U(x+h) - U(x) \right\} + O(h) \quad (IV.7)$$

ou ainda, pela declividade da corda AP, resultando na aproximação por diferença regressiva:

$$U'(x) \approx \frac{1}{h} \left\{ U(x) - U(x-h) \right\} + O(h) \quad (IV.8)$$

Os esquemas se diferenciam pelos pontos utilizados e

pela ordem de aproximação, que é de segunda ordem no esquema centrado e de primeira ordem nos outros dois.

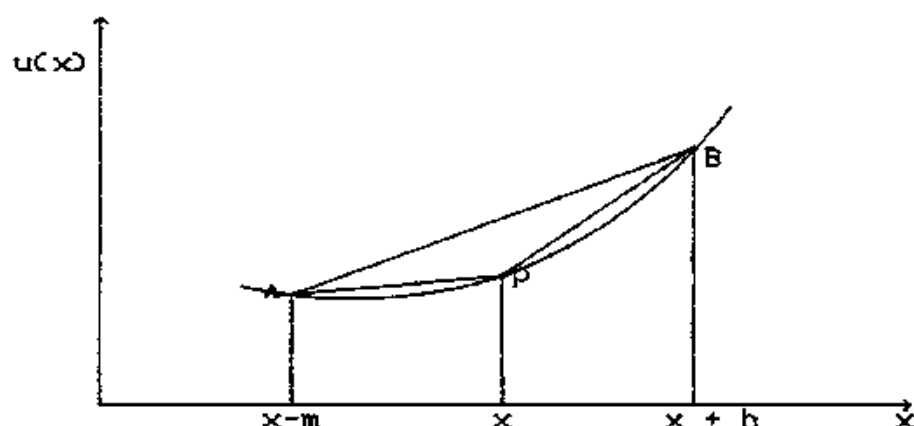


Fig. IV.1- Interpretação geométrica para aproximação via diferenças finitas.

Considere-se agora uma função U dependente de x e t . Subdivide-se o plano $x-t$ em um conjunto de retângulos iguais de lados Δx e Δt , igualmente espaçados por linhas paralelas a Ox e a Ot , definidas como mostra a Figura IV.2.

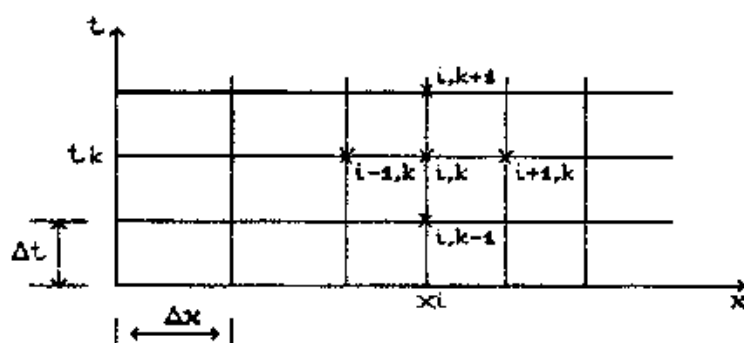


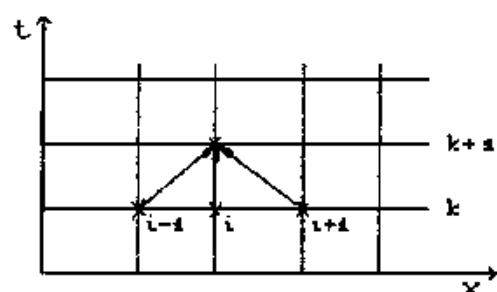
Fig. IV.2- Malha de discretização

Denotamos o valor de U representativo na malha pelo ponto $P(x_i, t_k)$, como :

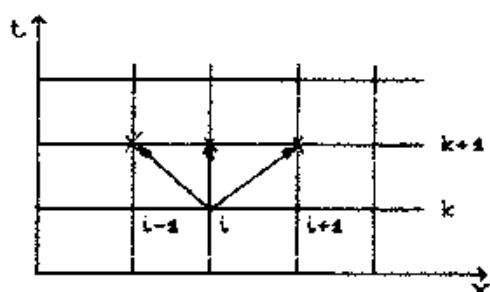
$$U(P) = U_i^k$$

onde o subíndice i está relacionado com a variável espaço e o superíndice k com a variável tempo.

A discretização no tempo pode ser feita utilizando esquemas implícitos ou explícitos. Os esquemas implícitos relacionam o valor da função U no ponto x_i , no instante t_{k+1} com valores de U em outros pontos, no mesmo nível de tempo, $U(x_i, t_k)$. Isto dá origem a um sistema de equações que deve ser resolvido simultaneamente para várias incógnitas. Os esquemas explícitos utilizam somente informações da variável no instante anterior, em diferentes pontos, para o cálculo da variável no instante posterior. Assim, a solução é dada por uma equação explícita que relaciona $U(x_i, t_{k+1})$ com valores conhecidos no instante anterior.



(a)



(b)

Fig. IV.3 - (a)- Esquema explícito.

(b)- Esquema implícito.

Retornando à equação (IV.1), desprezando os termos de reações e fontes e considerando A, D e u constantes no tempo e no espaço, aplicaremos os esquemas apresentados da seguinte forma :

1 - Diferença Regressiva (DR) para o termo advectivo

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_i^k - C_{i-1}^k}{\Delta x} \quad (\text{IV.9})$$

2 - Diferença Central (DC) para o termo advectivo

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{C_{i+1}^k - C_{i-1}^k}{2\Delta x} \quad (\text{IV.10})$$

3 - Diferença Progressiva (DF) no tempo

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{C_i^{k+1} - C_i^k}{\Delta t} \quad (\text{IV.11})$$

4 - Segunda derivada centrada no espaço para o termo difusivo

$$\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = \frac{C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k}{\Delta x^2} \quad (\text{IV.12})$$

Substituindo (IV.9) , (IV.11) e (IV.12) em (II.39), obtem-se :

$$C_i^{k+1} = C_i^k - \frac{u\Delta t}{\Delta x} \left[C_i^k - C_{i-1}^k \right] + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left[C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k \right] \quad (\text{IV.13})$$

Substituindo (IV.10) , (IV.11) e (IV.12) em (II.39) ,
obtem-se :

$$C_i^{k+1} = C_i^k - \frac{u\Delta t}{2\Delta x} \left[C_{i+1}^k - C_{i-1}^k \right] + \frac{D\Delta t}{\Delta x^2} \left[C_{i+1}^k - 2C_i^k + C_{i-1}^k \right] \quad (\text{IV.14})$$

IV.2.1 - Condições Iniciais e de Contorno

A condição inicial mais comum para as equações (IV.13) e (IV.14) é da forma :

$$C(x,0) = f(x) \quad (\text{IV.15})$$

onde $f(x)$ pode assumir uma distribuição qualquer.

Para a condição de contorno à montante, temos :

$$C(0,t) = g(t) \quad (\text{IV.16})$$

onde $g(t)$ também pode assumir vários tipos de distribuição.

Para a condição de contorno à jusante, usamos a expressão a seguir:

$$\frac{\partial C(\infty,t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.17})$$

Na prática, é comum truncar-se o comprimento do trecho em estudo a uma certa distância finita $x = L$, e impor que :

$$\frac{\partial C(L,t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.18})$$

Esta aproximação foi adotada no presente trabalho.

IV.3 - SOLUÇÃO ANALÍTICA

Com a finalidade de testar as aproximações de diferenças finitas apresentadas, analisou-se um problema com solução analítica conhecida [12]. A equação diferencial abaixo,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - u \frac{\partial C}{\partial x} - \mu C \quad (\text{IV.19})$$

com condições iniciais e de contorno :

$$C(x, 0) = C_i \quad (\text{IV.20})$$

$$C(0, t) = \begin{cases} C_o & 0 < t \leq t_o \\ 0 & t > t_o \end{cases} \quad (\text{IV.21})$$

$$\frac{\partial C(L, t)}{\partial x} = 0 \quad (\text{IV.22})$$

tem-se a seguinte solução analítica :

$$C(x, t) =$$

$$\begin{cases} C_i A(x, t) + C_o B(x, t) & 0 < t \leq t_o \\ C_i A(x, t) + C_o B(x, t) - C_o B(x, t - t_o) & t > t_o \end{cases} \quad (\text{IV.23})$$

onde C_o e C_i são constantes, e :

$$A(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} E(\beta_m, x) \exp \left[\frac{ux}{2D} - \mu t - \frac{u^2 t}{4D} - \frac{\beta_m^2 D t}{L^2} \right] \quad (\text{IV.24})$$

$$B_1(x) = 1 - \sum_{m=1}^{\infty} \frac{E(\beta_m, x) \frac{vL^2}{D} \exp \left\{ \frac{ux}{2D} \right\}}{\left[\beta_m^2 + \left(\frac{uL}{2D} \right)^2 + \frac{uL}{D} \right]} \quad (\text{IV. 26})$$

$$B_2(x, t) = \sum_{m=1}^{\infty} \frac{E(\beta_m, x) \left[\beta_m^2 + \left(\frac{uL}{2D} \right)^2 \right] \exp \left[\frac{ux}{2D} - \mu t - \frac{u^2 t}{4D} - \frac{\beta_m^2 D t}{L^2} \right]}{\left[\beta_m^2 + \left(\frac{uL}{2D} \right)^2 + \frac{\mu L^2}{D} \right]} \quad (\text{IV. 27})$$

$$E(\beta_m, x) = \frac{2\beta_m \sin \left[\frac{\beta_m x}{L} \right]}{\left[\beta_m^2 + \left(\frac{uL}{2D} \right)^2 + \frac{uL}{2D} \right]} \quad (\text{IV. 28})$$

$$v = u \left(1 + \frac{4\mu D}{u^2} \right)^{1/2} \quad (\text{IV. 29})$$

Os valores característicos β_m são raízes positivas de

$$\beta_m \cot(\beta_m) + \frac{vL}{2D} = 0 \quad (\text{IV. 30})$$

O termo $B_1(x)$ pode ser expresso por uma forma alternativa que é mais facilmente determinada :

$$B_4(x) = \frac{\exp \left[\frac{(u-v)x}{2D} \right] + \left[\frac{v-u}{v+u} \right] \exp \left[\frac{(u+v)x}{2D} - \frac{vL}{D} \right]}{\left[1 + \frac{(v-u)}{(u+v)} \exp \left(-vL/D \right) \right]} \quad (\text{IV. 31})$$

Alternativamente, pode-se empregar a seguinte solução aproximada :

$$\begin{aligned} A(x,t) = \exp(-\mu t) & \left\{ 1 - \frac{1}{2} \exp(ux/D) \operatorname{erfc} \left[\frac{x-ut}{2(Dt)^{1/2}} \right] \right. \\ & - \frac{1}{2} \exp(ux/D) \operatorname{erfc} \left[\frac{x-ut}{2(Dt)^{1/2}} \right] \\ & - \frac{1}{2} \left[2 + \frac{u(2L-x)}{D} + \frac{u^2 t}{D} \right] \exp(uL/D) \operatorname{erfc} \left[\frac{(2L-x) + ut}{2(Dt)^{1/2}} \right] \\ & \left. + \left(\frac{u^2 t}{\pi D} \right)^{1/2} \exp \left[\frac{uL}{D} - \frac{1}{4Dt} (2L-x + ut)^2 \right] \right\} \end{aligned} \quad (\text{IV. 32})$$

$$B(x,t) = B_3(x,t) / B_4(x) \quad (\text{IV. 33})$$

onde :

$$B_4(x) = 1 + \frac{(v-u)}{(v+u)} \exp(-vL/D) \quad (\text{IV. 34})$$

$$\begin{aligned}
B_2(x, t) = & \frac{1}{2} \exp \left[\frac{(u-v)x}{2D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x-vt}{2(Dt)^{1/2}} \right] \\
& + \frac{1}{2} \exp \left[\frac{(u+v)x}{2D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x-vt}{2(Dt)^{1/2}} \right] \\
& + \frac{(v-u)}{2(v+u)} \exp \left[\frac{(u-v)x - 2vL}{2D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{(2L-x) - vt}{2(Dt)^{1/2}} \right] \\
& + \frac{(v+u)}{2(v-u)} \exp \left[\frac{(u-v)x - 2vL}{2D} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{(2L-x) + vt}{2(Dt)^{1/2}} \right] \\
& + \frac{v}{2\mu D} \exp \left[\frac{uL}{D} - \mu t \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{(2L-x) + vt}{2(Dt)^{1/2}} \right]
\end{aligned}$$

(IV.35)

Função EXF (A,B)

Esta função foi definida para exprimir o produto de uma função exponencial (exp) e uma função erro complementar (erfc) como a seguir :

$$\operatorname{EXF}(A,B) = \exp(A) \operatorname{erfc}(B) \quad \text{(IV.36)}$$

onde:

$$\operatorname{erfc}(B) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_B^{\infty} \exp(-\tau^2) d\tau \quad \text{(IV.37)}$$

Duas aproximações diferentes são usadas para EXF(A,B).

Para $0 \leq B \leq 3$

$$\text{EXF}(A,B) \approx \exp(A-B^2)(a_1\tau + a_2\tau^2 + a_3\tau^3 + a_4\tau^4 + a_5\tau^5)$$

(IV.38)

onde :

$$\tau = \frac{1}{1 + 0.32759118}$$

(IV.39)

$$a_1 = 0.2548296$$

$$a_2 = -0.2844967$$

$$a_3 = 1.421414$$

$$a_4 = 1.453152$$

$$a_5 = 1.061405$$

Para $B > 3$

$$\text{EXF}(A,B) \approx \frac{1}{\sqrt{\pi}} \exp(A-B^2) / (B+0.5 / (B+1. / (B+1.5 / (B+2. / (B+2.5 / (B+1.))))))$$

(IV.40)

Para valores negativos de B , a seguinte relação adicional é usada :

$$\text{EXF}(A,B) = 2 \exp(A) - \text{EXF}(A,-B)$$

(IV.41)

A função $\text{EXF}(A,B)$ não pode ser usada para valores muito pequenos ou muito grandes dos argumentos A , B . A função retorna zero para duas condições :

$$|A| > 170 \quad B \leq 0$$

ou

$$|A - B^2| > 170 \quad B > 0$$

IV.4 - COMPARAÇÃO ENTRE OS ESQUEMAS DE DIFERENÇA CENTRAL E REGRESSIVA

Este exemplo compara as soluções numéricas obtidas com as aproximações de diferenças finitas apresentadas e a solução analítica [12] do problema descrito anteriormente, com dados obtidos das campanhas de campo realizadas no rio Paraíba do Sul [15] .

Dados :

- 1 - Concentração inicial = 0.0 mg/l em todo o trecho .
- 2 - Injeção contínua a montante com concentração igual a 7.0 mg/l .
- 3 - $D = 40 \quad [m^2/s]$
- 4 - $U = 0.80 \quad [m/s]$
- 5 - $\Delta x = 500 \quad [m]$
- 6 - $\Delta t = 240 \quad [s]$

7 - Duração da injeção = $60\Delta t$

8 - Numero de Peclet = 10.00

9 - Condição inicial

$$C(x,0) = 0 \quad , \quad 0 < x < 80\Delta x$$

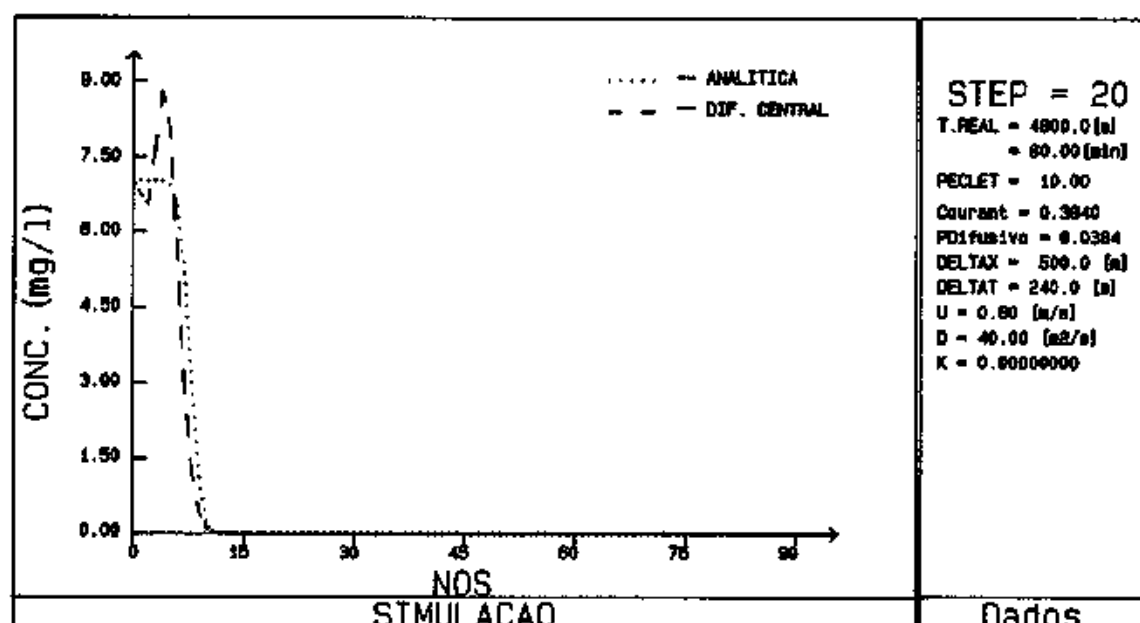
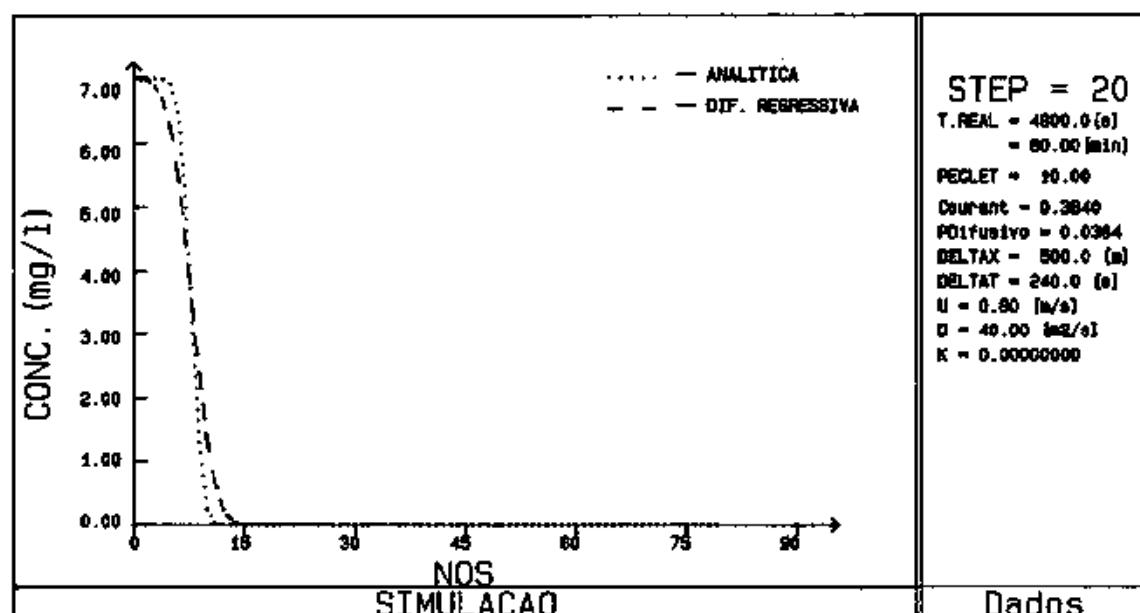
10 - Condição de contorno de montante

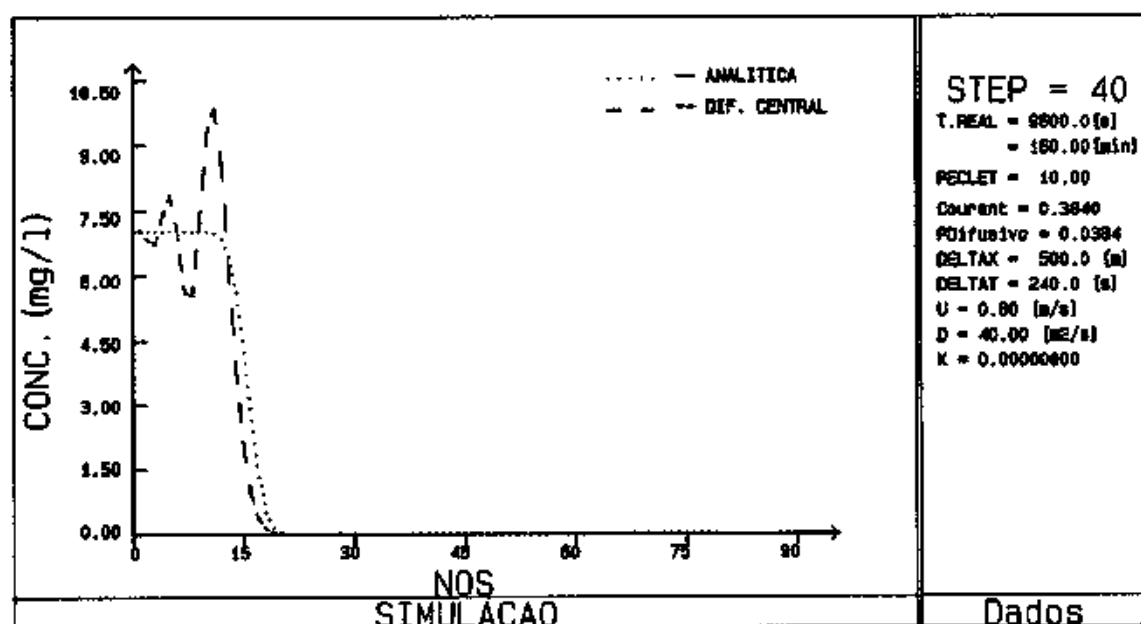
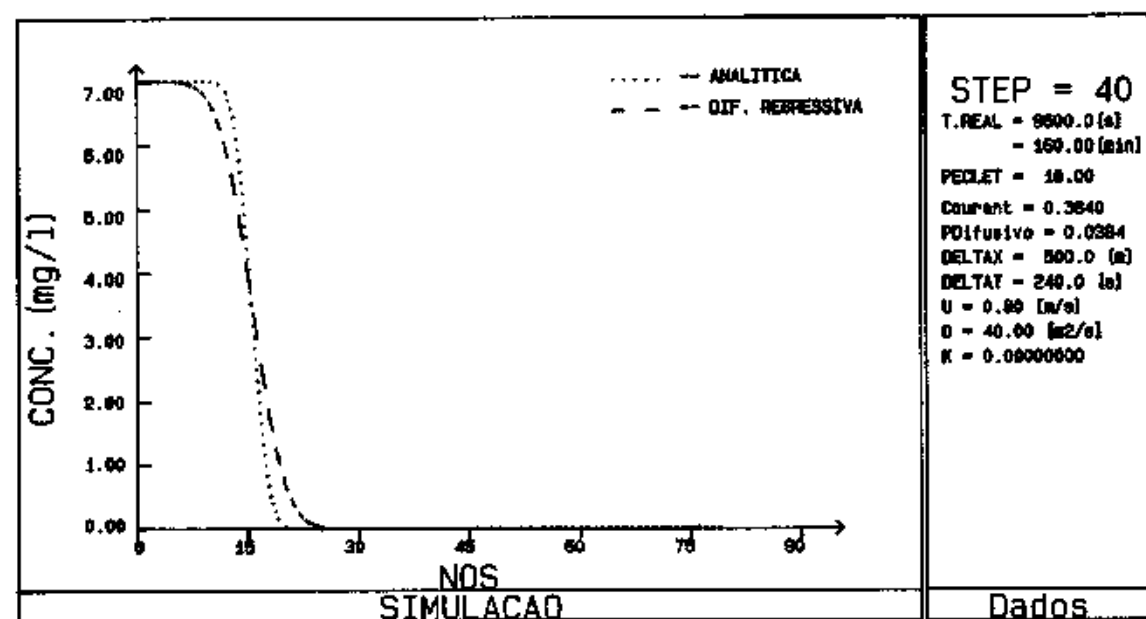
$$C(0,t) = \begin{cases} 7 & 0 < t \leq 60\Delta t \\ 0 & t > 60\Delta t \end{cases}$$

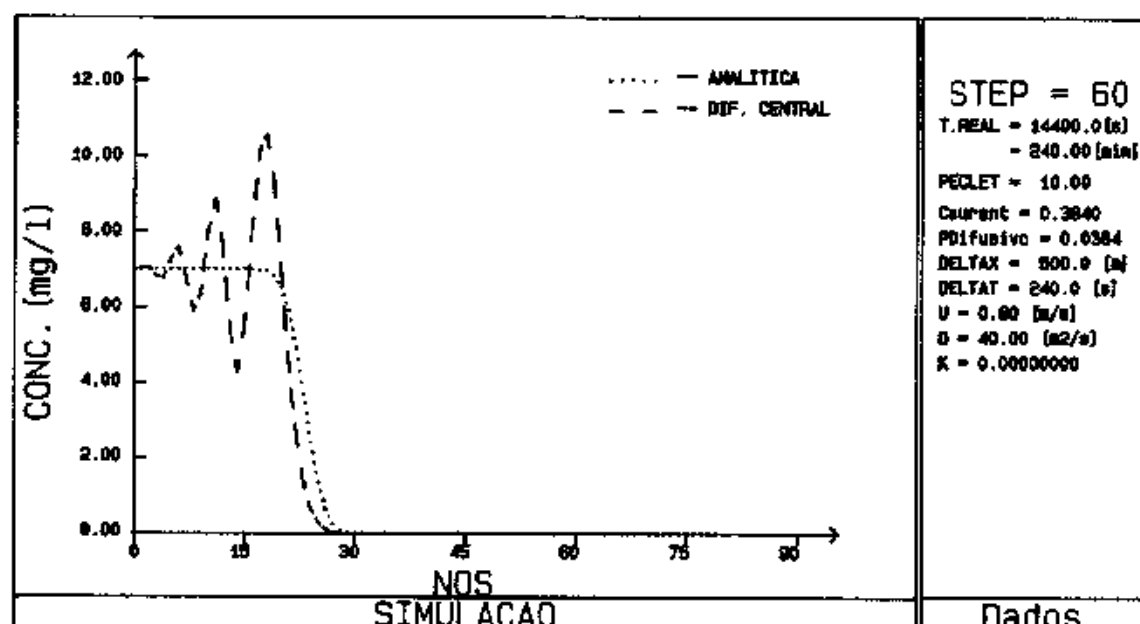
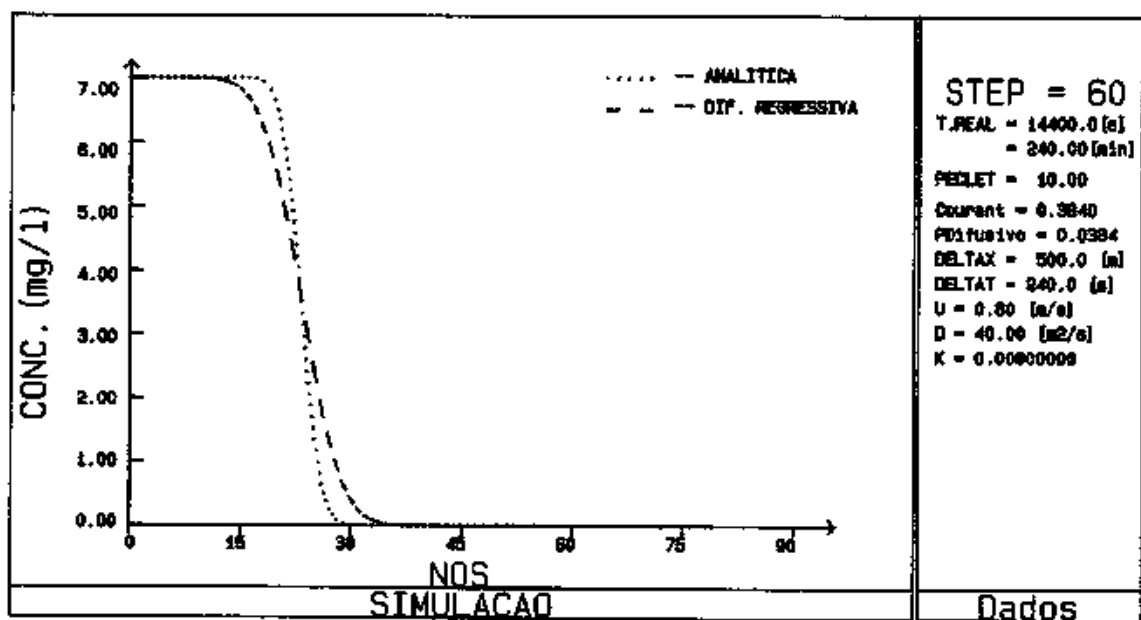
11 - Condição de contorno de jusante

$$\frac{\partial C}{\partial x}(80\Delta x,t) = 0 \quad , \quad t > 0$$

Os resultados são mostrados nas figuras (IV.4) a (IV.9) a seguir.

Fig. IV.4 - Diferença Central para $Pe = 10$ Fig. IV.5 - Diferença Regressiva para $Pe = 10$

Fig. IV.6 - Diferença Central para $Pe = 10$ Fig. IV.7 - Diferença Regressiva para $Pe = 10$

Fig. IV.8 - Diferença Central para $Pe = 10$ Fig. IV.9 - Diferença Regressiva para $Pe = 10$

IV.5 - ANÁLISE DOS RESULTADOS

Podemos observar, com relação a solução por diferença central, a formação de oscilações à montante da frente de onda que aumentam ao longo do tempo. Esse comportamento oscilatório é devido a aproximação de diferença central do termo advectivo. Para evitar-se o problema de oscilações, é comum utilizar-se a solução por diferença regressiva para este termo. Porém, a aproximação de diferença regressiva apresenta problemas numéricos de amortecimento da frente de onda. As imprecisões desse esquema são devidas à introdução de um coeficiente de difusão artificial ao problema, o chamado "upwind". Uma forma de se amenizar esses problemas é se fazer o refinamento da malha. Entretanto, para problemas práticos de engenharia, especialmente se tratando de modelos para escoamentos turbulentos em regime não permanente, essa solução se torna impraticável.

IV.6 - MÉTODO QUICK

A formulação do algoritmo QUICK utiliza um esquema de interpolação quadrática com três nós, sendo dois simétricos e um assimétrico a montante, para o cálculo do valor de ϕ no ponto r , como mostra a figura (IV.10).

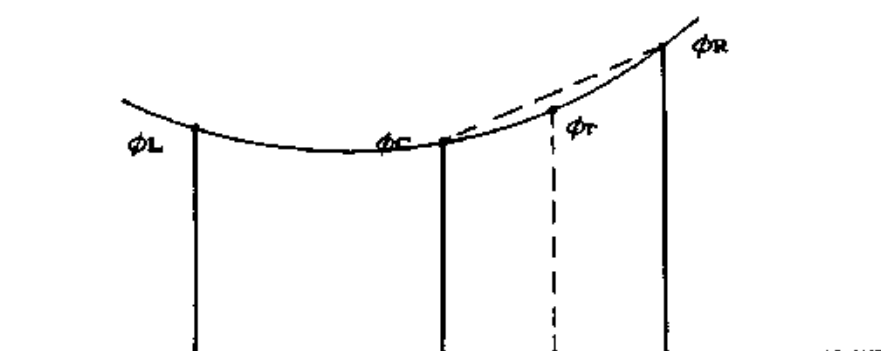


Fig.(IV.10) - Interpolação regressiva quadrática para ϕ_r

A fórmula resultante para espaçamentos de malha constantes é dada por :

$$\phi_r = \frac{1}{2} (\phi_C + \phi_R) - \frac{1}{8} (\phi_L + \phi_R - 2\phi_C) \quad (\text{IV.42})$$

Esta expressão é obtida considerando a curva acima como sendo uma parábola que passa pelos três nós. Dessa maneira, podemos escrever que :

$$\phi(x) = a x^2 + bx + c \quad (\text{IV.43})$$

onde a e b e c são constantes a determinar .

Pontos : $(\Delta x, \phi_C)$

$(2\Delta x, \phi_R)$

$(0, \phi_L)$

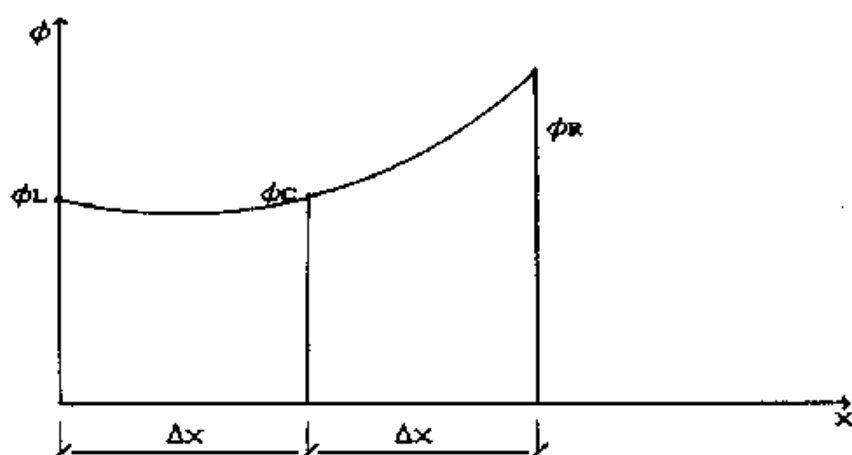


Fig.(IV.11) -Eixos coordenados para interpolação de ϕ

Aplicando a expressão (IV.43) aos pontos L, C e R de acordo com o sistema local definido na figura (IV.11), tem-se :

$$\phi_L = c,$$

$$\phi_C = a\Delta x^2 + b\Delta x + \phi_L,$$

$$\phi_R = 4a\Delta x^2 + 2b\Delta x + \phi_L. \quad (\text{IV.44})$$

Resolvendo o sistema, encontramos :

$$a = (\phi_R - 2\phi_C + \phi_L) / 2\Delta x^2 \quad (\text{IV.45})$$

$$b = (4\phi_C - \phi_R - 3\phi_L) / 2\Delta x \quad (\text{IV.46})$$

Substituindo os coeficientes a e b na equação (IV.43) ,

$$\phi(x) = \frac{\phi_R - 2\phi_C + \phi_L}{2\Delta x^2} x^2 + \frac{4\phi_C - \phi_R - 3\phi_L}{2\Delta x} x + \phi_L$$

$$(\text{IV.47})$$

Aplicando a expressão acima no ponto r, com coordenada local $x = 3\Delta x/2$, obtém-se :

$$\phi_r = \frac{9}{8} (\phi_R - 2\phi_C + \phi_L) + \frac{3}{4} (4\phi_C - \phi_R - 3\phi_L) + \phi_L \quad (\text{IV.48})$$

Rearranjando a expressão acima :

$$\phi_r = \frac{1}{2} (\phi_C + \phi_R) - \frac{1}{8} (\phi_L + \phi_R - 2\phi_C) \quad (\text{IV.49})$$

O esquema pode ser interpretado como sendo uma interpolação linear corrigida por um termo proporcional à curvatura de uma parábola. Para a modelação do gradiente $(\partial\phi/\partial x)_r$, a tangente ao nó no centro do intervalo é mostrada na figura IV.10. É uma propriedade da parábola que a inclinação da tangente na mediatriz entre dois pontos é igual a inclinação da corda que liga estes pontos, isto é,

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_r = \frac{\phi_R - \phi_C}{\Delta x} \quad (\text{IV.50})$$

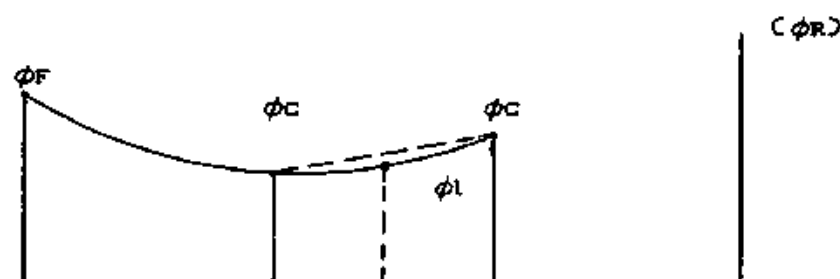


Fig.(IV.12) - Interpolação regressiva quadrática para ϕ_L

Analogamente, a Figura (IV.12) mostra a construção para ϕ_l e $(\partial\phi/\partial x)_l$. As fórmulas correspondentes são :

$$\phi_l = \frac{1}{2} (\phi_L + \phi_C) - \frac{1}{8} (\phi_F + \phi_C - 2\phi_L) \quad (\text{IV.51})$$

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial x} \right)_l = \frac{\phi_C - \phi_L}{\Delta x} \quad (\text{IV.52})$$

As fórmulas (IV.49) a (IV.52) são apropriadas para regime permanente em que o número de Péclet é grande . As fórmulas correspondentes para regime não-permanente serão descritas na próxima seção .

IV.6.1- Análise de estabilidade de Von Neumann

É instrutivo se fazer uma análise para investigar a estabilidade do modelo unidimensional (QUICK), usando diferença progressiva no tempo (explícito) e valores constantes de A, u, D e Δx :

$$\frac{\phi_C^{k+1} - \phi_C^k}{\Delta t} = \frac{u}{\Delta x} (\phi_F^k - \phi_L^k) + \frac{D}{\Delta x^2} (\phi_L^k + \phi_R^k - 2\phi_C^k) \quad (\text{IV.53})$$

onde :

$$\phi_C = \phi_i, \quad \phi_L = \phi_{i-1}, \quad \phi_R = \phi_{i+1}, \quad (\text{IV.54})$$

$$\phi_r = \frac{1}{2} (\phi_i + \phi_{i+1}) - \frac{1}{8} (\phi_{i-1} + \phi_{i+1} - 2\phi_i) \quad (\text{IV.55})$$

$$\phi_l = \frac{1}{2} (\phi_{i-1} + \phi_i) - \frac{1}{8} (\phi_{i-2} + \phi_i - 2\phi_{i-1}) \quad (\text{IV.56})$$

Multiplicando (IV.53) por Δt e passando todos os termos em k para o lado direito, resulta :

$$\begin{aligned} \phi_i^{k+1} = \phi_i^k + Cr \left[\frac{1}{8} \phi_{i-2}^k - \frac{7}{8} \phi_{i-1}^k + \frac{3}{8} \phi_i^k + \frac{3}{8} \phi_{i+1}^k \right] \\ + \alpha (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) \end{aligned} \quad (\text{IV.57})$$

onde Cr é o número de Courant, dado por :

$$Cr = \frac{u \Delta t}{\Delta x} \quad (\text{IV.58})$$

e α o parâmetro difusivo

$$\alpha = \frac{D \Delta t}{\Delta x^2} \quad (\text{IV.59})$$

As condições de estabilidade do método QUICK [1] são :

$$\alpha + \frac{Cr}{4} \leq \frac{1}{2} \quad (\text{IV.60})$$

$$\frac{2}{Cr} \leq 2\alpha$$

IV.7 - MÉTODO QUICKEST

Em escoamentos não permanentes onde a advecção é predominante (isto é, difusão pequena) os solutos dissolvidos no meio são transportados com a velocidade local do fluido. A figura (IV.13) mostra esta idéia para uma direção coordenada onde, por simplicidade, a componente da velocidade é suposta constante. A equação de diferenças finitas para advecção pura pode ser escrita na forma :

$$\frac{\phi_i^{k+1} - \phi_i^k}{\Delta t} = u \frac{(\tilde{\phi}_l - \tilde{\phi}_r)}{\Delta x} \quad (\text{IV.61})$$

onde $\tilde{\phi}$ representa os valores médios no centro do intervalo para um incremento de tempo Δt . Usando-se interpolação linear entre os valores nodais, os valores médios no centro do intervalo podem ser estimados assumindo que o perfil ϕ é transladado para jusante sem sofrer modificações. Tomando-se como referência as figuras (IV.14) e (IV.14a), pode-se escrever :

$$\text{tg } \beta = \frac{\phi_{i-1}^k - \phi_i^k}{\Delta x} = \frac{y}{u \Delta t / 2} \Rightarrow y = \frac{u \Delta t}{2 \Delta x} (\phi_{i-1}^k - \phi_i^k) \quad (\text{IV.62})$$

$$\tilde{\phi}_l = \frac{\phi_{i-1}^k + \phi_i^k}{2} + y \quad (\text{IV.63})$$

Logo :

$$\tilde{\phi}_i^k = \frac{\phi_{i-1}^k + \phi_i^k}{2} + \frac{u\Delta t}{2\Delta x} (\phi_{i-1}^k - \phi_i^k) \quad (\text{IV.64})$$

Como,

$$Cr = \frac{u\Delta t}{\Delta x},$$

chega-se a

$$\tilde{\phi}_i^k = \frac{1}{2} \left[(\phi_{i-1}^k + \phi_i^k) - Cr (\phi_i^k - \phi_{i-1}^k) \right] \quad (\text{IV.65})$$

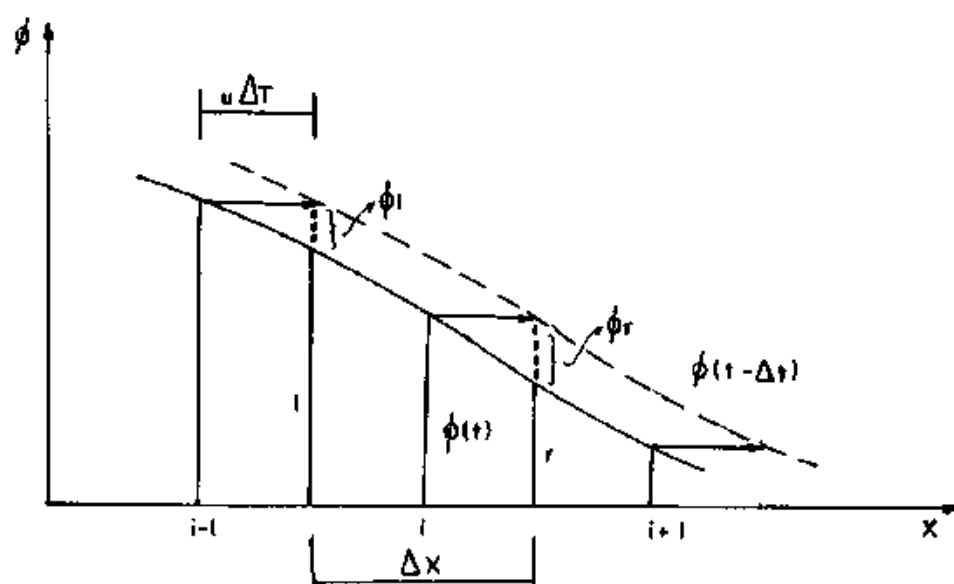


Fig.IV.13- Estimativa dos valores médios assumindo advecção pura (para velocidade constante a curva dada por $\phi(t)$ é simplesmente transladada para a direita de uma distância $u\Delta t$.)

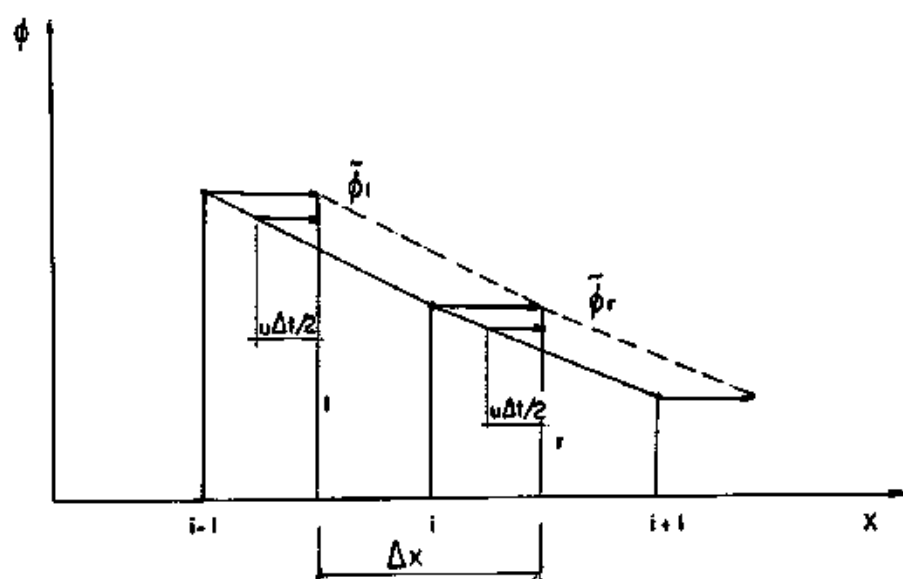


Fig. IV.14- Estimativa da convecção dos valores médios $\tilde{\phi}_l$ e $\tilde{\phi}_r$, assumindo interpolação linear entre os valores nodais para $\phi(t)$.

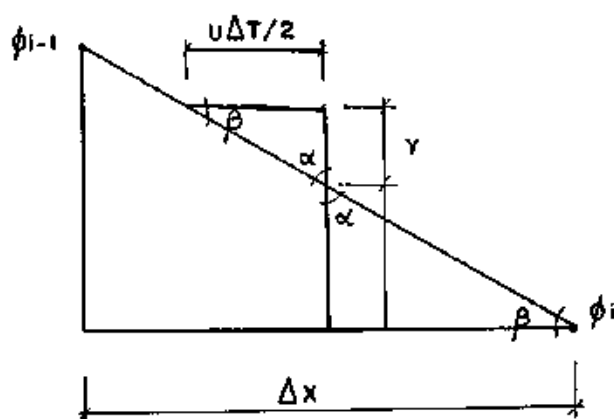


Figura IV.14-a- Estimativa de ϕ .

Analogamente, pode-se escrever :

$$\tilde{\phi}_r = \frac{1}{2} \left[(\phi_i^k + \phi_{i+1}^k) - Cr (\phi_{i+1}^k - \phi_i^k) \right] \quad (\text{IV.66})$$

Substituindo as expressões (IV.65) e (IV.66) em (IV.61) e rearrumando, obtém-se :

$$\phi_i^{k+1} = \phi_i^k - \frac{Cr}{2} (\phi_{i+1}^k - \phi_{i-1}^k) + \frac{Cr^2}{2} (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) \quad (\text{IV.67})$$

que é equivalente a aproximação progressiva no tempo, centrada no espaço para o caso de advecção mais difusão, com coeficiente de difusão $u^2 \Delta t / 2$.

Assumindo-se que a mesma estimativa de $\tilde{\phi}_l$ e $\tilde{\phi}_r$ possa ser feita quando a difusão natural se faz presente, a equação da difusão - advecção completa fica sendo :

$$\phi_i^{k+1} = \phi_i^k - \frac{Cr}{2} (\phi_{i+1}^k - \phi_{i-1}^k) + \left(\text{advecção} + \frac{Cr}{2} \right) (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) \quad (\text{IV.68})$$

Um procedimento similar pode ser feito em conjunto com interpolação regressiva quadrática . Neste caso os termos de curvatura são incluídos na fórmula de interpolação para

os valores no centro do intervalo ; é consistente, então incluir termos de curvatura similares na modelação do termo temporal .

A aproximação de diferenças finitas para advecção pura, vista anteriormente na equação (IV.61) :

$$\frac{\phi_i^{k+1} - \phi_i^k}{\Delta t} = u \frac{\phi_l^k - \phi_r^k}{\Delta x}$$

pode ser reescrita da forma :

$$(\phi_i^{k+1} - \phi_i^k) \Delta x = u (\phi_l^k - \phi_r^k) \Delta t \quad (\text{IV.69})$$

Isto é uma aproximação que supõe que $(\phi^{k+1} - \phi^k)$ seja constante ao longo de um Δx (igual ao valor no ponto i), e que $(\phi_l - \phi_r)$ seja constante ao longo de um Δt (igual ao valor no tempo k). Para se obter uma relação exata, devemos integrar os dois lados, da forma :

$$\begin{aligned} \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \phi^{k+1} d\xi - \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \phi^k d\xi &= \int_0^{\Delta t} u \phi_l d\tau - \int_0^{\Delta t} u \phi_r d\tau \\ &= \int_0^{\Delta \xi} \phi_l(\xi) d\xi - \int_0^{\Delta \xi} \phi_r(\xi) d\xi \end{aligned}$$

(IV.70)

onde :

$$\Delta \xi = \int_0^{\Delta t} u \, d\tau = u \, \Delta t = C_r \, \Delta x \quad (\text{IV.71})$$

Podemos interpretar, de acordo com a figura (IV.15), que a função ϕ é projetada para o instante posterior $(k+1)$ a partir de valores do instante anterior (k) .

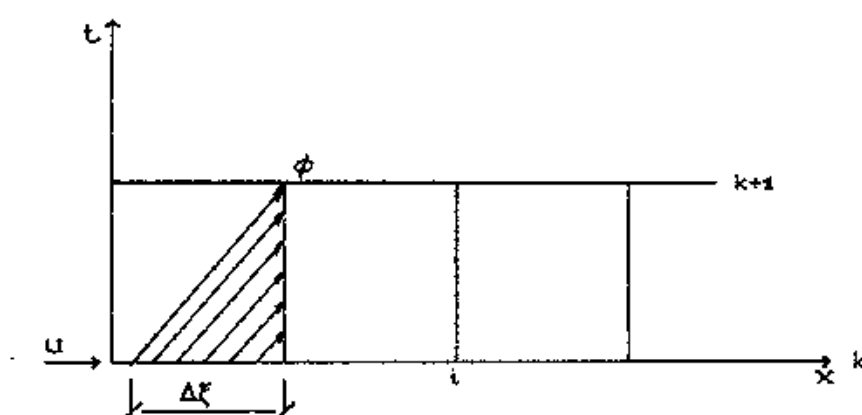


Fig.IV.15 -Interpretação geométrica
para a grandeza $\phi(\xi)$

Através da expansão por série de Taylor podemos aproximar ϕ_l da seguinte forma :

$$\phi_l(\xi) = \phi_l^k - \xi \, \text{Grad}l + \frac{1}{2} \, \xi^2 \, \text{Curv}l \quad (\text{IV.72})$$

Integrando :

$$\int_0^{\Delta \xi} \phi_l(\xi) d\xi = \phi_l^k \Delta \xi - \frac{1}{2} \text{Grad}l \Delta \xi^2 + \frac{1}{6} \text{Curv}l \Delta \xi^3$$

(IV.73)

Como, por definição, tem-se $\Delta \xi = Cr \Delta x$

$$\int_0^{\Delta \xi} \phi_l(\xi) d\xi = Cr \Delta x \phi_l^k - \frac{1}{2} Cr^2 \Delta x^2 \text{Grad}l + \frac{1}{6} Cr^3 \Delta x^3 \text{Curv}l$$

(IV.74)

Colocando $Cr \Delta x$ em evidência ,

$$\int_0^{\Delta \xi} \phi_l(\xi) d\xi = Cr \Delta x \left[\phi_l^k - \frac{1}{2} Cr \Delta x \text{Grad}l + \frac{1}{6} Cr^2 \Delta x^2 \text{Curv}l \right]$$

(IV.75)

onde ,

$$\text{Grad}l = (\phi_i^k - \phi_{i-1}^k) / \Delta x ,$$

$$\text{Curv}l = (\phi_{i-2}^k + \phi_i^k - 2\phi_{i-1}^k) / \Delta x^2 ,$$

$$\phi_l^k = \frac{1}{2} (\phi_{i-1}^k + \phi_i^k) - \frac{\Delta x^2}{6} \text{Curv}l .$$

(IV.76)

Analogamente para ϕ_r , teremos :

$$\phi_r(\xi) = \phi_r^k - \xi \text{Grad}r + \frac{1}{2} \xi^2 \text{Curv}r$$

(IV.77)

Integrando :

$$\int_0^{\Delta \xi} \phi_r(\xi) d\xi = \phi_r^k \Delta \xi - \frac{1}{2} \text{Gradr} \Delta \xi^2 + \frac{1}{6} \text{Curvr} \Delta \xi^3 \quad (\text{IV. 78})$$

Como, por definição, tem-se $\Delta \xi = Cr \Delta x$

$$\int_0^{\Delta \xi} \phi_r(\xi) d\xi = Cr \Delta x \phi_r^k - \frac{1}{2} Cr^2 \Delta x^2 \text{Gradr} + \frac{1}{6} Cr^3 \Delta x^3 \text{Curvr} \quad (\text{IV. 79})$$

Colocando $Cr \Delta x$ em evidência ,

$$\int_0^{\Delta \xi} \phi_r(\xi) d\xi = Cr \Delta x \left[\phi_r^k - \frac{1}{2} Cr \Delta x \text{Gradr} + \frac{1}{6} Cr^2 \Delta x^2 \text{Curvr} \right] \quad (\text{IV. 80})$$

onde ,

$$\text{Gradr} = (\phi_{i+1}^k - \phi_i^k) / \Delta x ,$$

$$\text{Curvr} = (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) / \Delta x^2 ,$$

$$\phi_r^k = \frac{1}{2} (\phi_i^k + \phi_{i+1}^k) - \frac{\Delta x^2}{8} \text{Curvr} . \quad (\text{IV. 81})$$

Portanto a aproximação do lado direito da equação (IV. 70) vem a ser :

$$LD = Cr\Delta x \left\{ \left[\phi_l^k - \frac{1}{2} Cr\Delta x Grad_l + \frac{1}{6} Cr\Delta x^2 Curv_l \right] - \left[\phi_r^k - \frac{1}{2} Cr\Delta x Grad_r + \frac{1}{6} Cr\Delta x^2 Curv_r \right] \right\} \quad (IV.82)$$

Para calcular o lado esquerdo da equação (IV.70), deve-se notar que a integral $\int \phi d\xi$ pode ser interpretada como sendo a área hachurada da figura (IV.16)

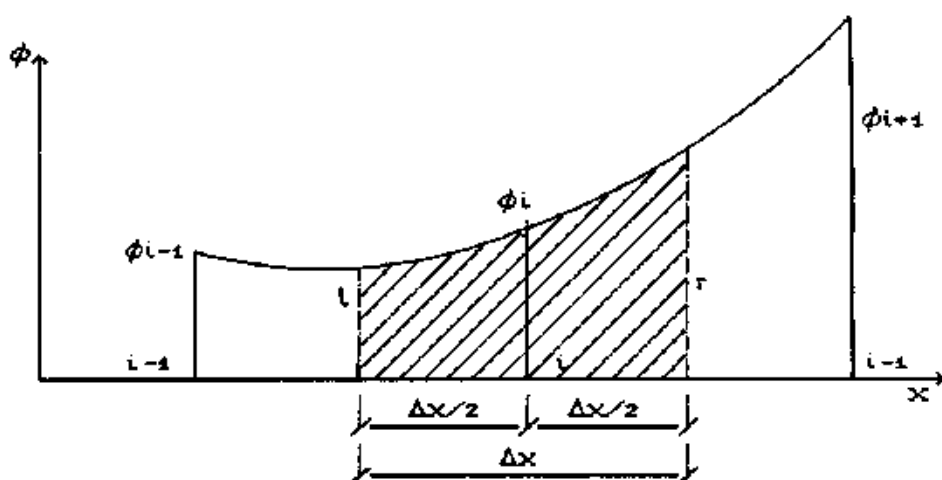


Fig. IV.16

Pela aproximação do QUICKEST, considerando um sistema local com origem no ponto i , tem-se :

$$\phi = ax^2 + bx + c \quad (IV.83)$$

Portanto :

$$\int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \phi \, d\xi = \int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} (ax^2 + bx + c) \, d\xi \quad (\text{IV.84})$$

$$= \left. \frac{a}{3} x^3 + \frac{b}{2} x^2 + cx \right|_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2}$$

$$= \frac{a}{12} \Delta x^3 + c \Delta x \quad (\text{IV.85})$$

Cálculo dos coeficientes a e c :

$$x = 0 \Rightarrow \phi = c = \phi_i ,$$

$$x = \Delta x \Rightarrow \phi = a\Delta x^2 + b\Delta x + \phi_i = \phi_{i+1} ,$$

$$x = -\Delta x \Rightarrow \phi = a\Delta x^2 - b\Delta x + \phi_i = \phi_{i-1} \quad (\text{IV.86})$$

Resolvendo o sistema de equações acima , obtem-se :

$$a = \frac{1}{2\Delta x^2} (\phi_{i+1} + \phi_{i-1} - 2\phi_i) \quad (\text{IV.87})$$

Por definição :

$$\text{Curv}_r = (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) / \Delta x^2 \quad (\text{IV.88})$$

logo,

$$a = \frac{1}{2} \text{Curv}_r \quad (\text{IV.89})$$

O resultado final é :

$$\int_{-\Delta x/2}^{\Delta x/2} \phi^{k+1} d\xi = \Delta x \left(\phi_i^{k+1} + \frac{\Delta x^2}{24} \text{Curvr}^{k+1} \right) \quad (\text{IV.90})$$

Procedendo de maneira análoga para a integral de ϕ^k , chega-se finalmente à seguinte expressão correspondente ao lado esquerdo da equação (IV.70) :

$$\begin{aligned} \text{LE} &= \Delta x \left[\left(\phi_i^{k+1} + \frac{\Delta x^2}{24} \text{Curvr}^{k+1} \right) - \left(\phi_i^{k+1} + \frac{\Delta x^2}{24} \text{Curvr}^{k+1} \right) \right] \\ &= \Delta x \left[\left(\phi_i^{k+1} - \phi_i^k \right) + \frac{\Delta x^2}{24} \left(\text{Curvr}^{k+1} - \text{Curvr}^k \right) \right] \end{aligned} \quad (\text{IV.91})$$

Agora, a diferença temporal entre curvaturas pode ser interpretada aproximadamente da seguinte forma :

$$\text{equação do problema : } \frac{\partial \phi}{\partial t} = -u \frac{\partial \phi}{\partial x}$$

$$\text{Portanto : } \frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \Delta x^2 \right] = \Delta x^2 \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] \quad (\text{IV.92})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] = -u \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right] \quad (\text{IV.93})$$

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = \frac{\text{Curvr}^{k+1} - \text{Curvr}^k}{\Delta t} \quad (\text{aproximação de D.F. no tempo})$$

(IV.94)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \right) = \frac{\text{Curvr}^k - \text{Curvl}^k}{\Delta x} \quad (\text{aproximação de D.F. no espaço})$$

(IV.95)

Temos que :

$$\text{Curvr}^{k+1} - \text{Curvr}^k = - \frac{u \Delta t}{\Delta x} (\text{Curvr}^k - \text{Curvl}^k) \quad (\text{IV.96})$$

$$= - C_r (\text{Curvr}^k - \text{Curvl}^k) \quad (\text{IV.97})$$

Substituindo as expressões (IV.76) e (IV.81) em (IV.82) :

$$\begin{aligned} LD = \Delta x C_r \left[\frac{1}{2} (\phi_{i-1}^k + \phi_i^k) - \frac{1}{8} (\phi_{i-2}^k + \phi_i^k - 2\phi_{i-1}^k) \right. \\ \left. - \frac{C_r}{2} (\phi_i^k - \phi_{i-1}^k) + \frac{C_r^2}{8} (\phi_{i-2}^k + \phi_i^k - 2\phi_{i-1}^k) \right. \\ \left. - \frac{1}{2} (\phi_i^k - \phi_{i+1}^k) + \frac{1}{8} (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) \right. \\ \left. - \frac{C_r}{2} (\phi_{i+1}^k - \phi_i^k) + \frac{C_r^2}{8} (\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) \right] \end{aligned}$$

(IV.98)

Agrupando os termos semelhantes :

$$LD = \Delta x \, C_r \left[-\frac{1}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k) + \frac{C_r}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k - 2\phi_i^k) \right. \\ \left. + \left(\frac{C_r^2}{6} - \frac{1}{8} \right) (\phi_{i-2}^k - 3\phi_{i-1}^k + 3\phi_i^k - \phi_{i+1}^k) \right]$$

(IV.99)

Substituindo a expressão (IV.97) em (IV.91) :

$$LE = \Delta x \left[(\phi_i^{k+1} - \phi_i^k) - \frac{C_r \Delta x^2}{24} (\text{Curvr}^k - \text{Curvl}^k) \right] \\ = \Delta x \left[(\phi_i^{k+1} - \phi_i^k) - \frac{C_r}{24} (\phi_{i-2}^k - 3\phi_{i-1}^k + 3\phi_i^k - \phi_{i+1}^k) \right]$$

(IV.100)

Iguando (IV.99) e (IV.100) :

$$\phi_i^{k+1} = \phi_i^k - \frac{C_r}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k) + \frac{C_r^2}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k - 2\phi_i^k) \\ + C_r \left[\frac{C_r^2}{6} - \frac{1}{8} - \frac{1}{24} \right] (\phi_{i-2}^k - 3\phi_{i-1}^k + 3\phi_i^k - \phi_{i+1}^k)$$

$$\phi_i^{k+1} = \phi_i^k - \frac{C_r}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k) + \frac{C_r^2}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k - 2\phi_i^k) \\ + \frac{C_r}{8} (C_r^2 - 1) (\phi_{i-2}^k - 3\phi_{i-1}^k + 3\phi_i^k - \phi_{i+1}^k)$$

(IV.101)

Comparando as equações (IV.67) e (IV.101), nota-se que a única diferença é o último termo em (IV.101), que não existe em (IV.67). Mas a equação acima foi deduzida considerando apenas advecção, e pode ser estendida para o caso do problema apresentar uma difusão natural α . Obtemos então :

$$\begin{aligned} \phi_i^{k+1} = \phi_i^k - \frac{C_r}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k) + \left[\alpha + \frac{C_r^2}{2} (\phi_{i+1}^k + \phi_{i-1}^k - 2\phi_i^k) \right. \\ \left. + C_r \left[-\frac{1}{6} (C_r^2 - 1) + \alpha \right] (\phi_{i-2}^k - 3\phi_{i-1}^k + 3\phi_i^k - \phi_{i+1}^k) \right] \end{aligned}$$

(IV.102)

Esta equação difere da equação (IV.68) pelo aparecimento de uma quantidade :

$$\begin{aligned} C_r \left[-\frac{1}{6} (C_r^2 - 1) + \alpha \right] (\phi_{i-2}^k - 3\phi_{i-1}^k + 3\phi_i^k - \phi_{i+1}^k) = \\ = -C_r \left[\frac{1}{6} (C_r^2 - 1) + \alpha \right] \left[(\phi_{i-1}^k + \phi_{i+1}^k - 2\phi_i^k) - (\phi_{i-2}^k + \phi_i^k - 2\phi_{i-1}^k) \right] \\ = -C_r \left[\frac{1}{6} (C_r^2 - 1) + \alpha \right] \Delta x^2 (Curv_r^k - Curv_l^k) \\ = \Delta x^2 C_r \left[\frac{1}{6} (C_r^2 - 1) + \alpha \right] (Curv_r^k - Curv_l^k) \end{aligned}$$

(IV.103)

que é devido à consideração dos termos de curvatura no caso de interpolação regressiva quadrática .

A equação (IV.102) também pode ser escrita da forma :

$$\begin{aligned} \phi_i^{k+1} = \phi_i^k - Cr \left\{ \left[\frac{1}{2} (\phi_i^k + \phi_{i+1}^k) - \frac{\Delta x}{2} Cr Grad_r - \frac{\Delta x^2}{6} (1 - Cr - 3\alpha) Curv_r \right] \right. \\ \left. - \left[\frac{1}{2} (\phi_{i-1}^k + \phi_i^k) - \frac{\Delta x}{2} Cr Grad_l - \frac{\Delta x^2}{6} (1 - Cr - 3\alpha) Curv_l \right] \right\} \\ + \alpha \left[\left(\Delta x Grad_r - \frac{\Delta x^2}{2} Cr Curv_r \right) - \left(\Delta x Grad_l - \frac{\Delta x^2}{2} Cr Curv_l \right) \right] \end{aligned}$$

(IV.104)

como aparece em [1] .

Uma condição necessária para estabilidade é dada abaixo :

$$\alpha \leq \frac{(3 - 2Cr) (1 - Cr)^2}{6 (1 - 2Cr)} \quad \text{se} \quad Cr < \frac{1}{2}$$

$$\alpha \leq \frac{(3 - 2Cr) (Cr - 1)^2}{6 (2Cr - 1)} \quad \text{se} \quad Cr > \frac{1}{2}$$

(IV.105)

Temos ainda a condição física irrestrita :

$$\alpha \geq 0 \quad \text{(IV.106)}$$

As condições (IV.105) e (IV.106) são necessárias mas não suficientes para a estabilidade . Através dos parâmetros examinados para uma série de valores α e C_r pode-se encontrar a região de estabilidade para o método QUICKEST , como mostra a figura (IV.17) .

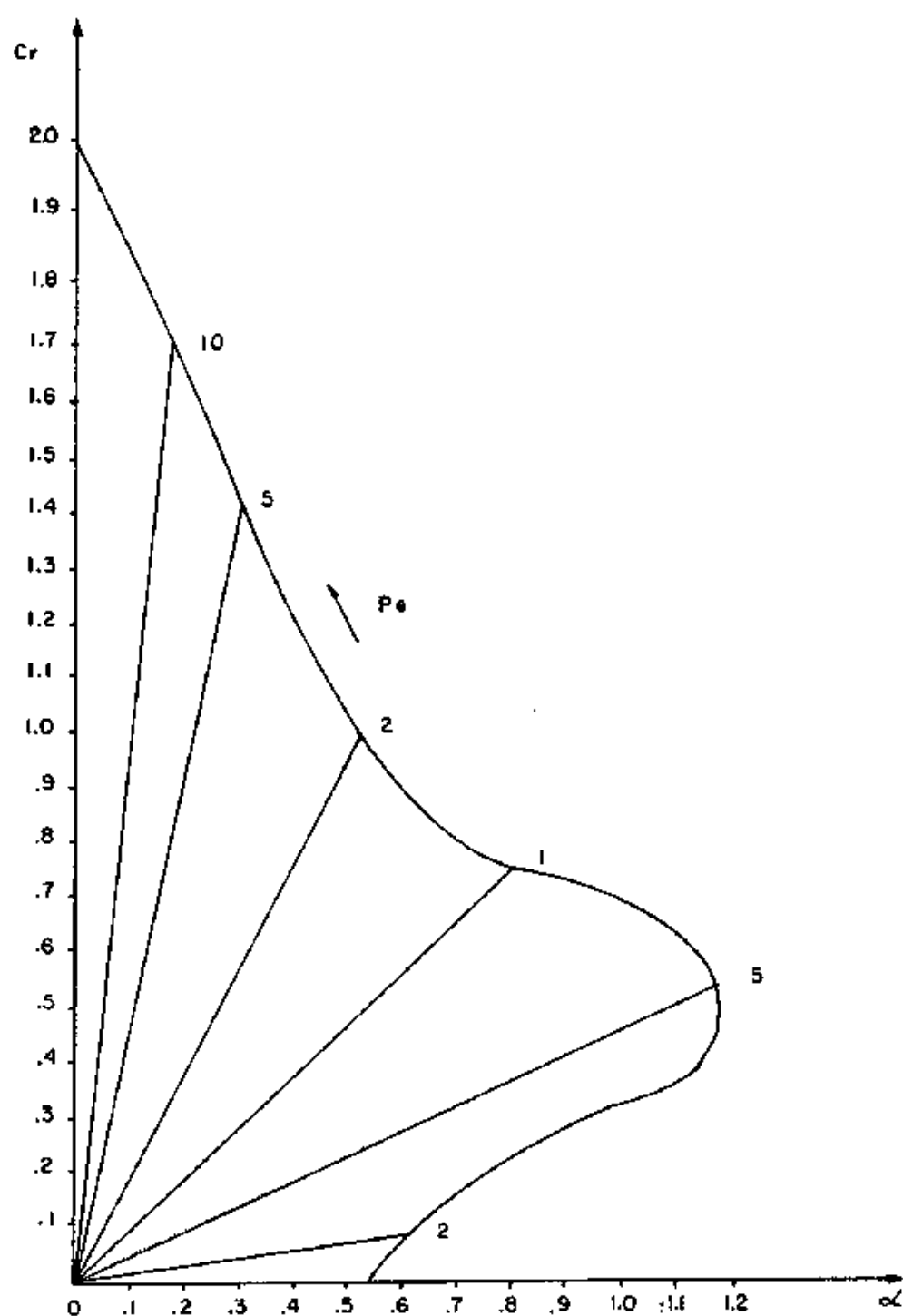


Fig.IV.17 - Região de estabilidade no plano (α, Cr)
para o método QUICKEST.

CAPITULO V

APLICAÇÕES E ANÁLISE DE RESULTADOS

Com o objetivo de mostrar a potencialidade do Modelo, serão apresentados neste capítulo testes numéricos realizados com dados obtidos em estudos anteriores no rio Paraíba do Sul [15], no trecho situado entre Volta Redonda e Barra do Piraí .

1º EXEMPLO :

- Este exemplo compara os esquemas de diferença central, diferença regressiva e QUICKEST com uma solução analítica conhecida [12], simulando um efluente conservativo, para Pe igual a 10, 20, 50 e 100 .

1º CASO -

$$Pe = 10$$

$$U = 0.50 \quad [m/s]$$

$$D = 25.00 \quad [m^2/s]$$

$$\Delta x = 500 \quad [m]$$

$$\Delta t = 240 \quad [s]$$

2º CASO -

$$Pe = 20$$

$$U = 0.40 \quad [m/s]$$

$$D = 10.00 \quad [m^2/s]$$

$$\Delta x = 500 \quad [m]$$

$$\Delta t = 240 \quad [s]$$

3º CASO -

$$Pe = 50$$

$$U = 1.00 \quad [m/s]$$

$$D = 10.00 \quad [m^2/s]$$

$$\Delta x = 500 \quad [m]$$

$$\Delta t = 240 \quad [s]$$

4º CASO -

$$Pe = 100$$

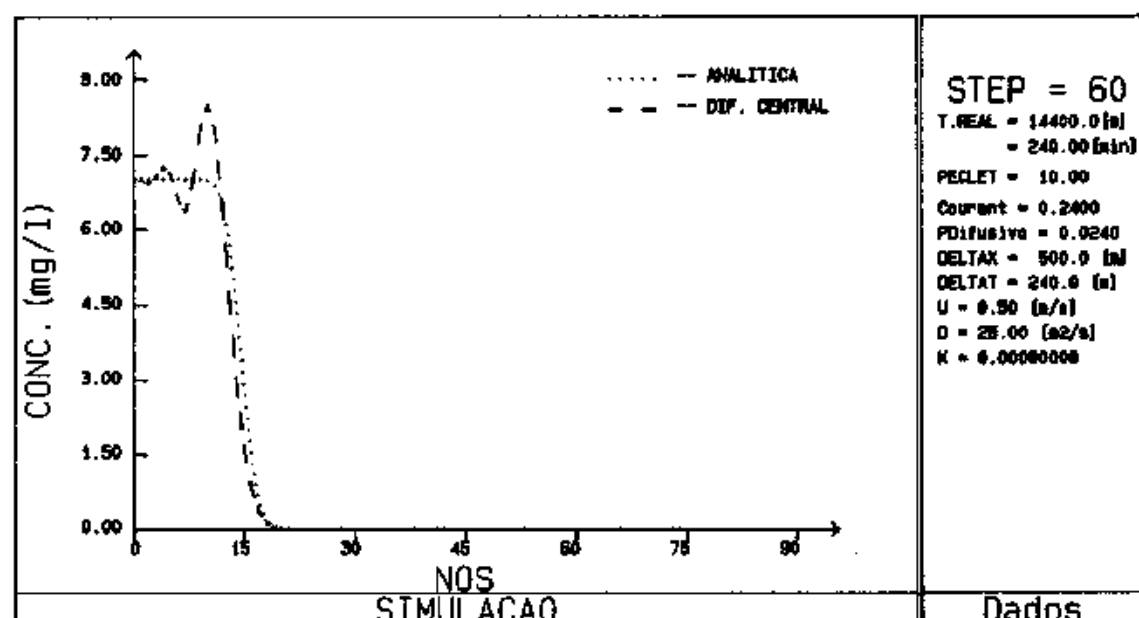
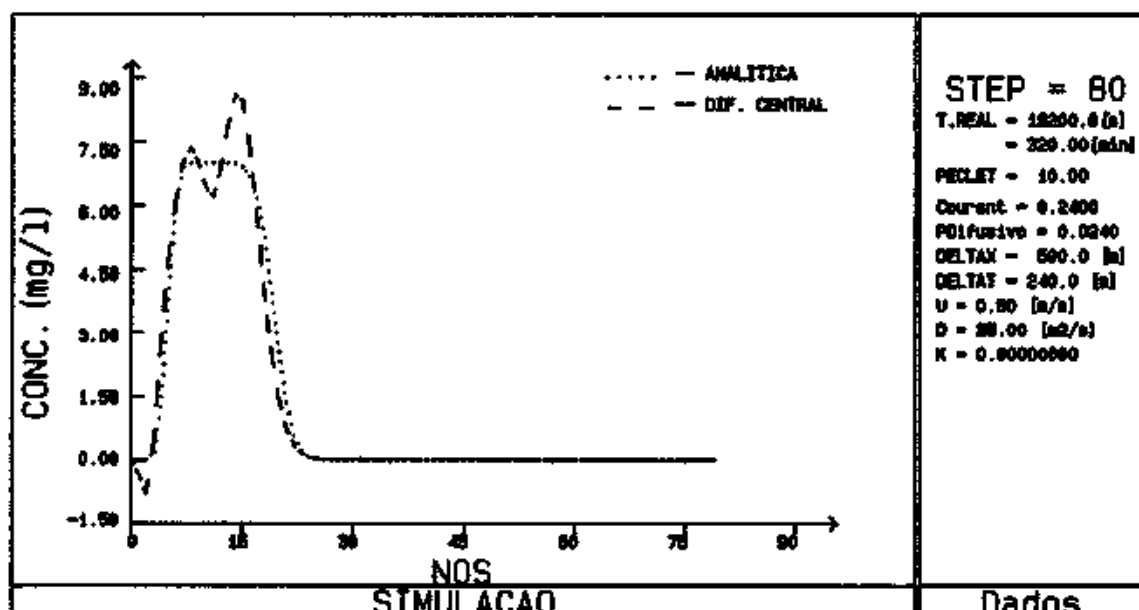
$$U = 2.00 \quad [m/s]$$

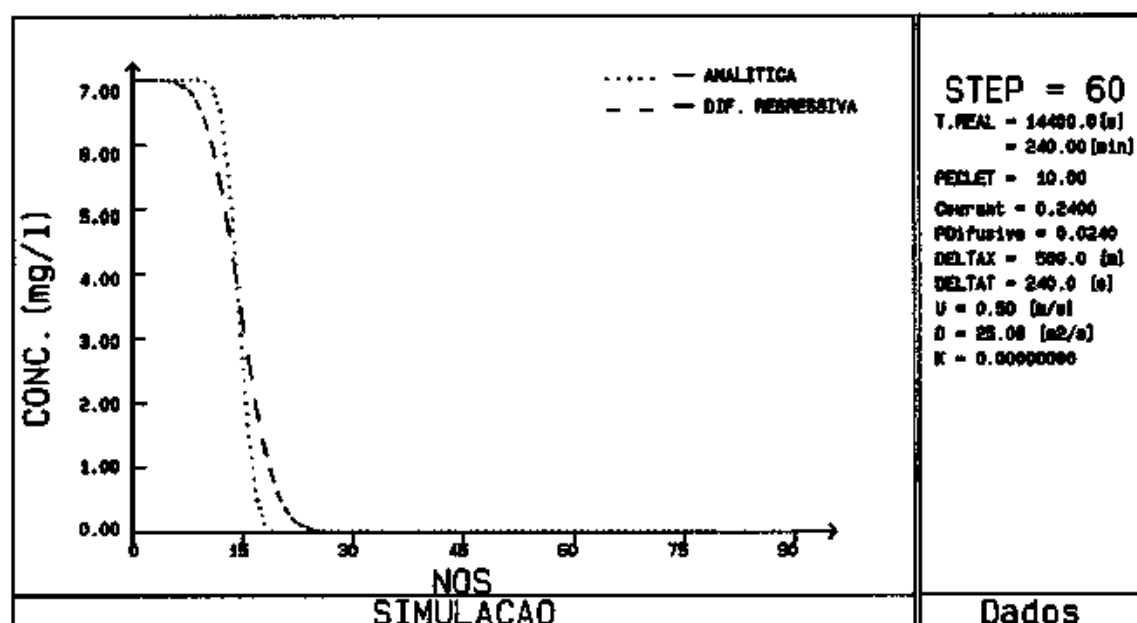
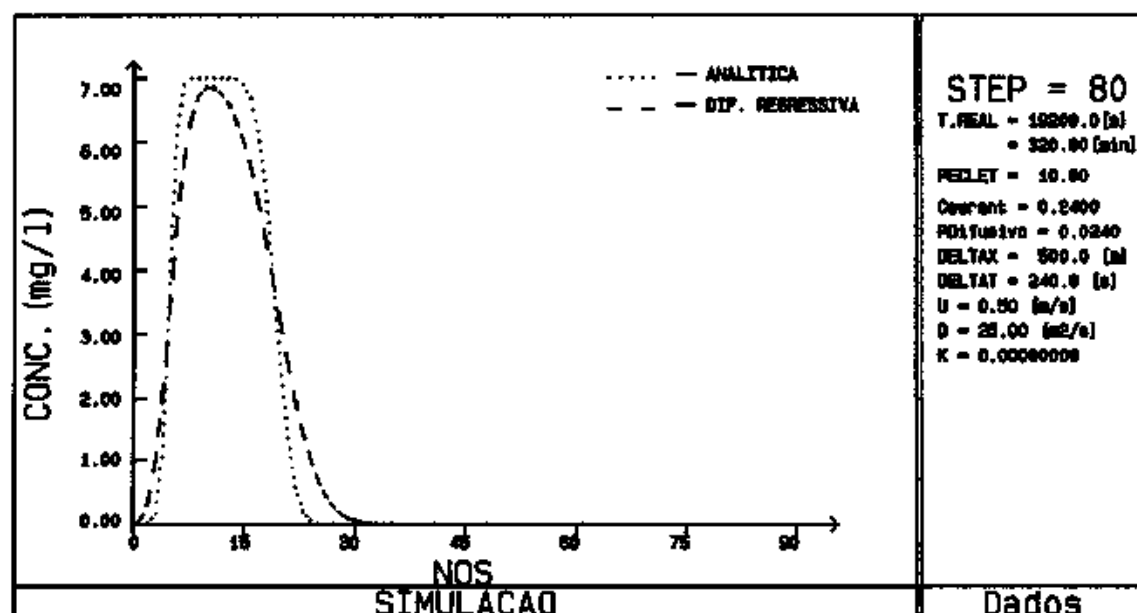
$$D = 10.00 \quad [m^2/s]$$

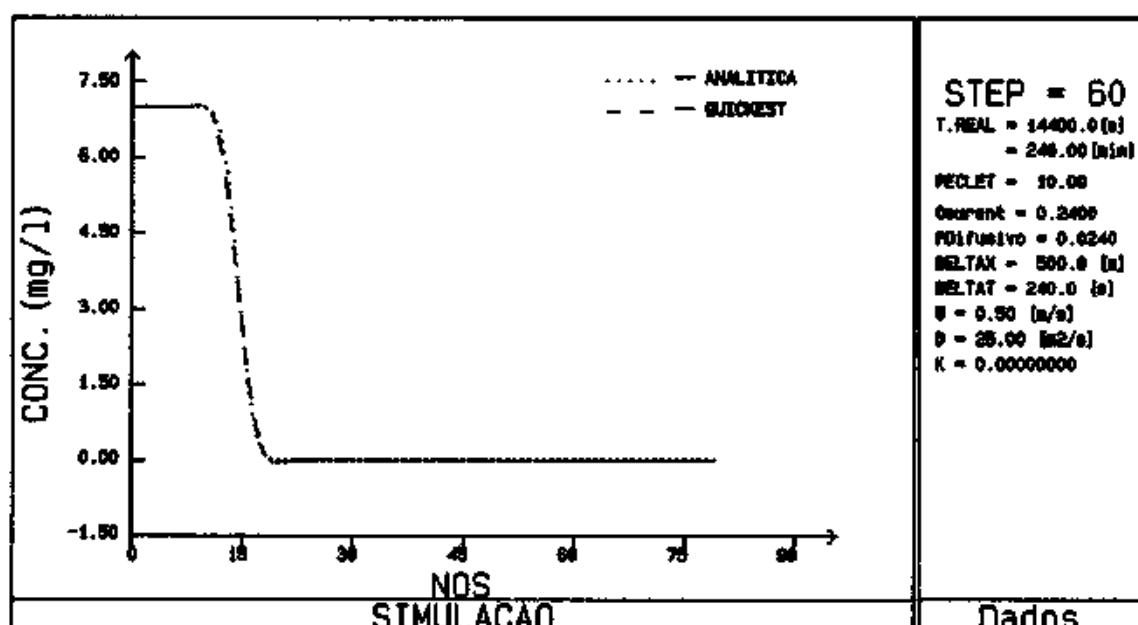
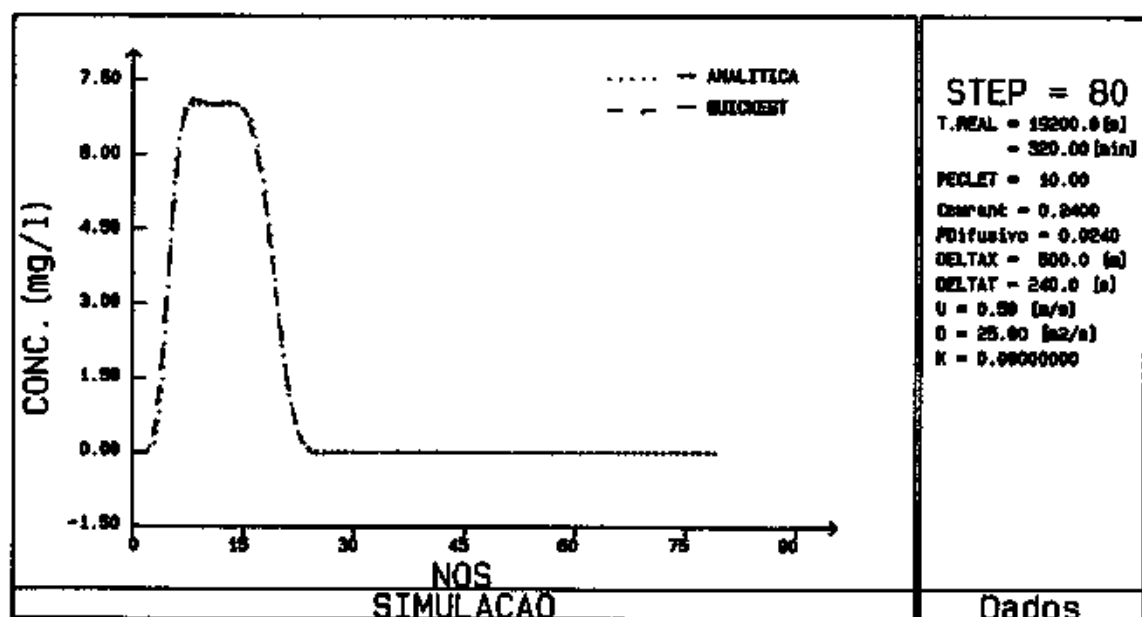
$$\Delta x = 500 \quad [m]$$

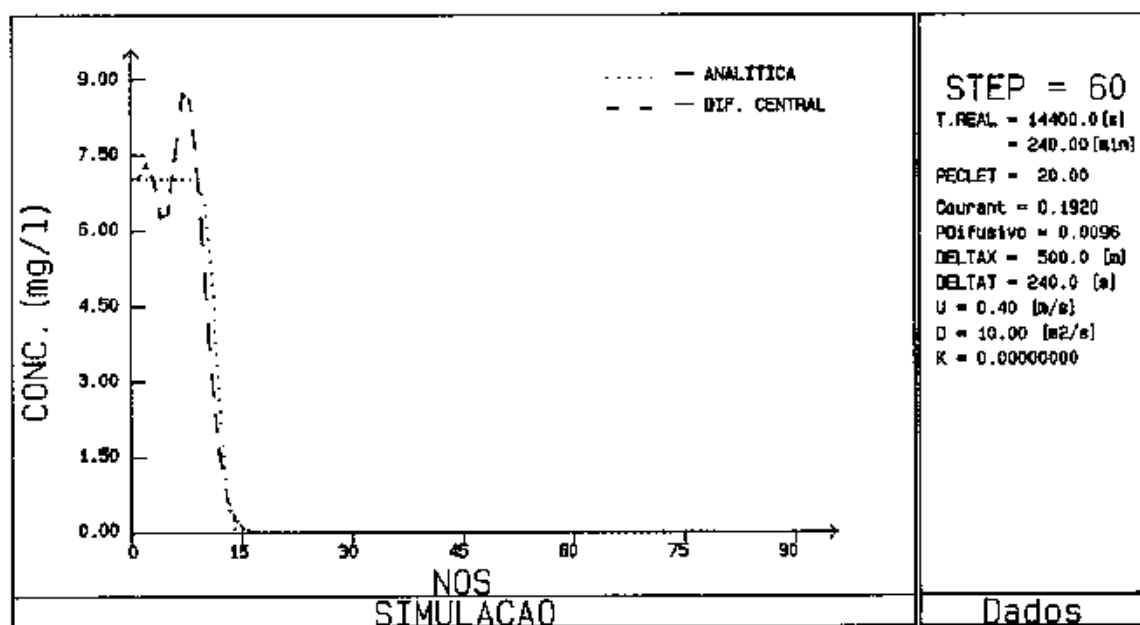
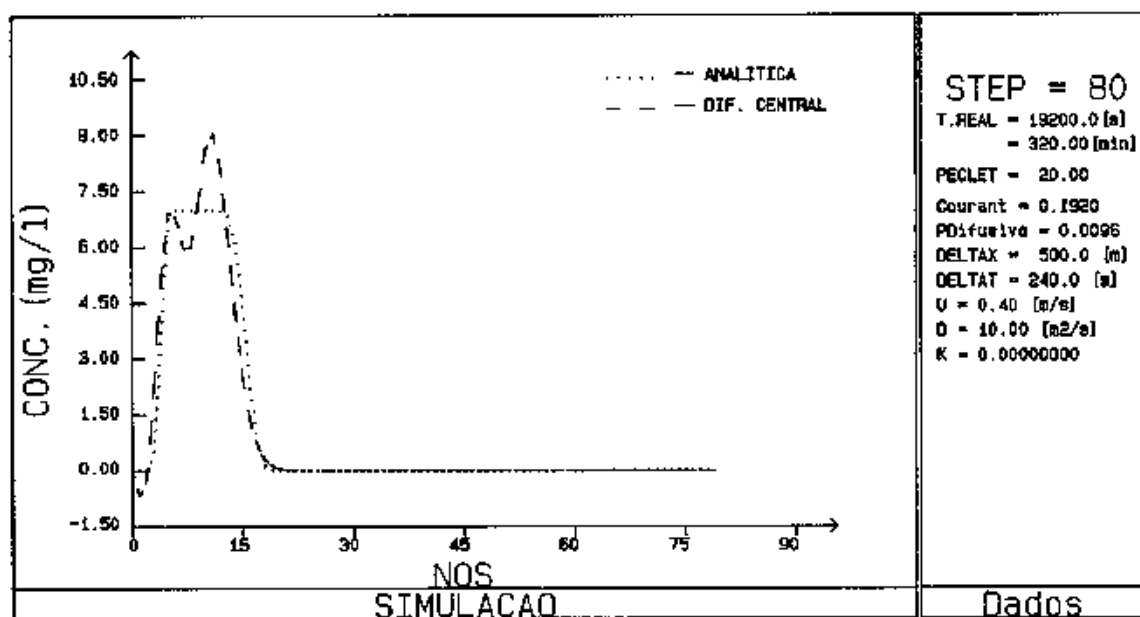
$$\Delta t = 240 \quad [s]$$

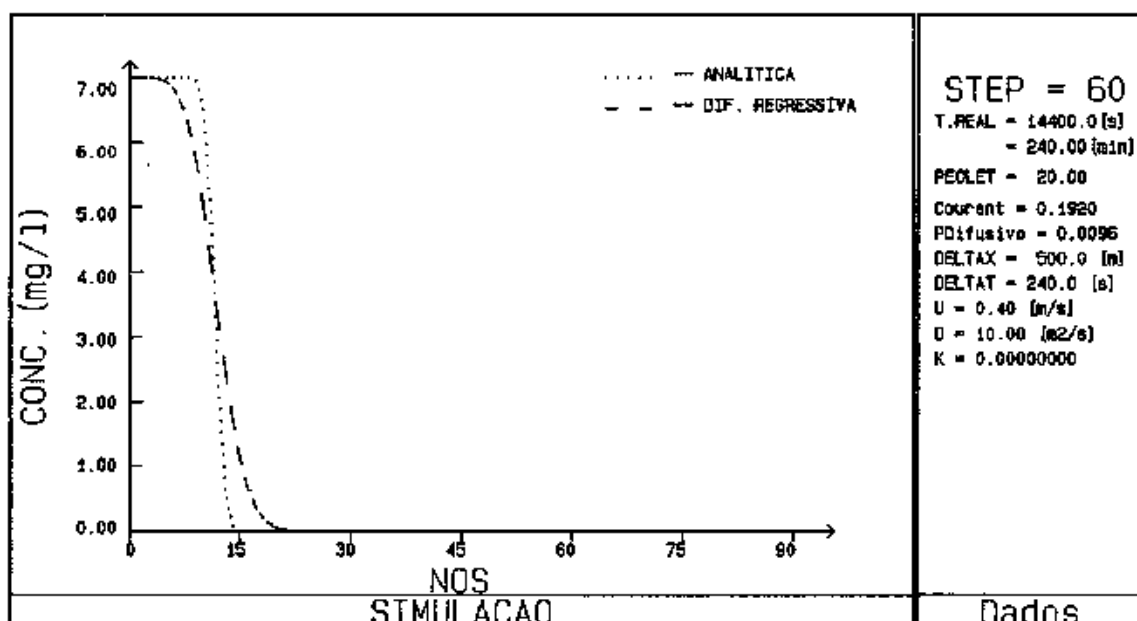
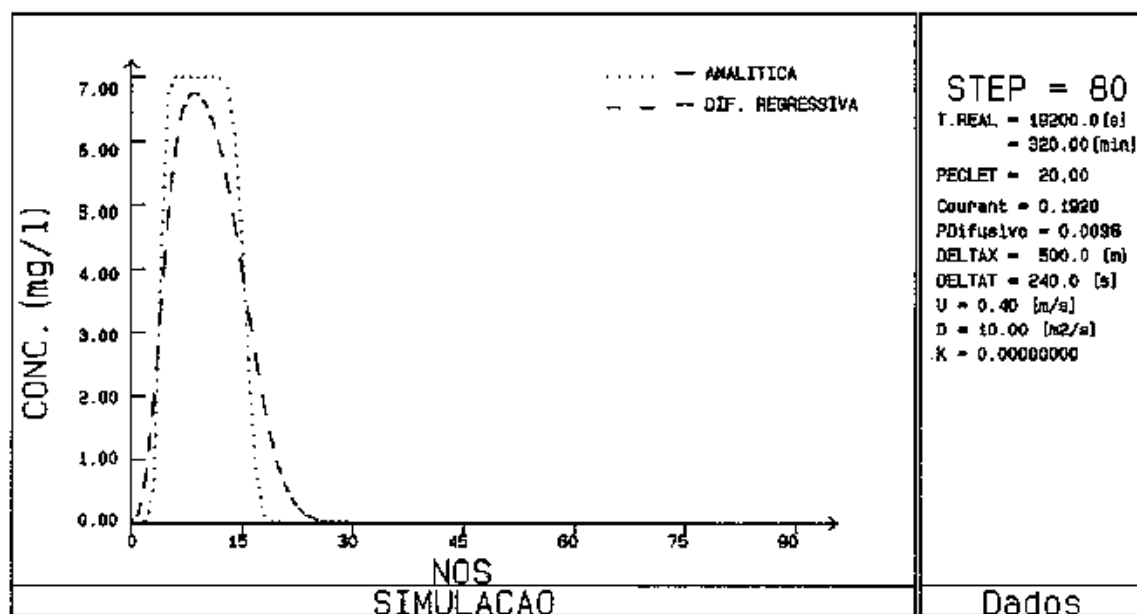
Os resultados são apresentados nas figuras (V.1) a (V.24) para intervalos de tempo $60 \Delta t$ e $100 \Delta t$. Podemos notar que existe um aumento de oscilações para o esquema de diferença central a medida que Pe aumenta. Para o esquema de diferença regressiva ocorre um amortecimento da frente de onda. O esquema QUICKEST apresenta um excelente ajuste com a solução analítica para todos os valores de Pe considerados.

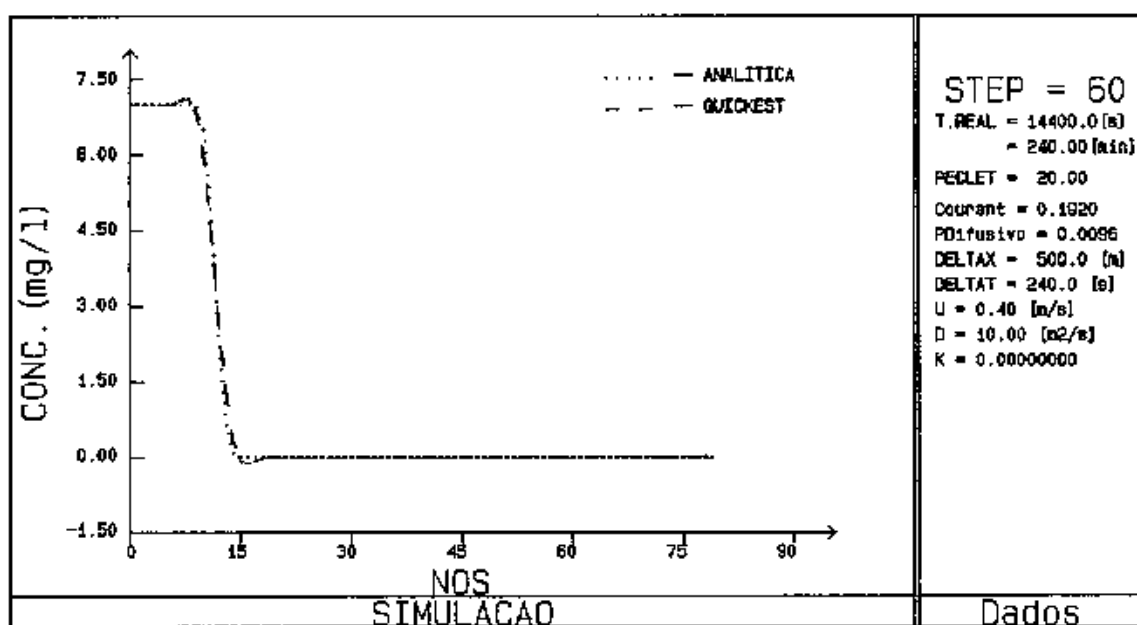
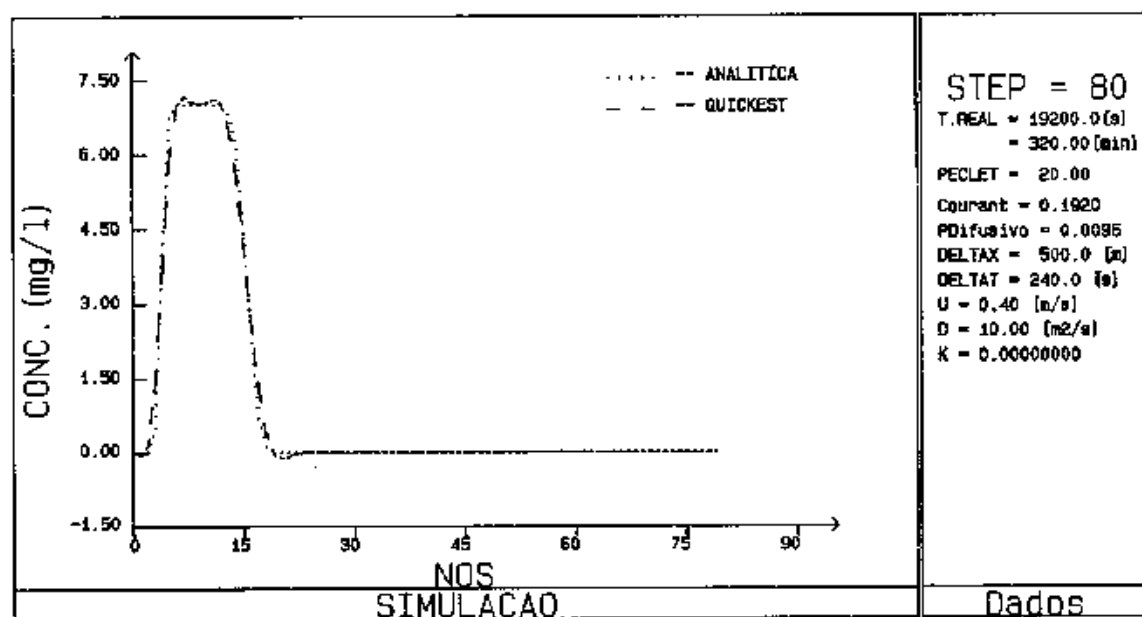
Fig. V.1 - Dif. Central para $Pe = 10$ Fig. V.2 - Dif. Central para $Pe = 10$

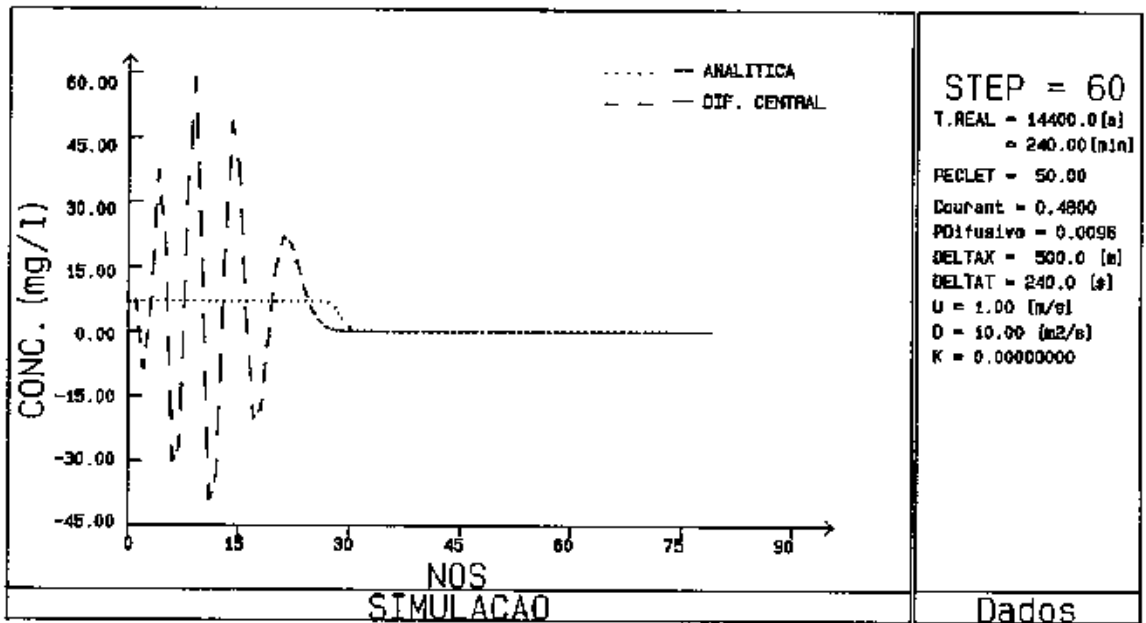
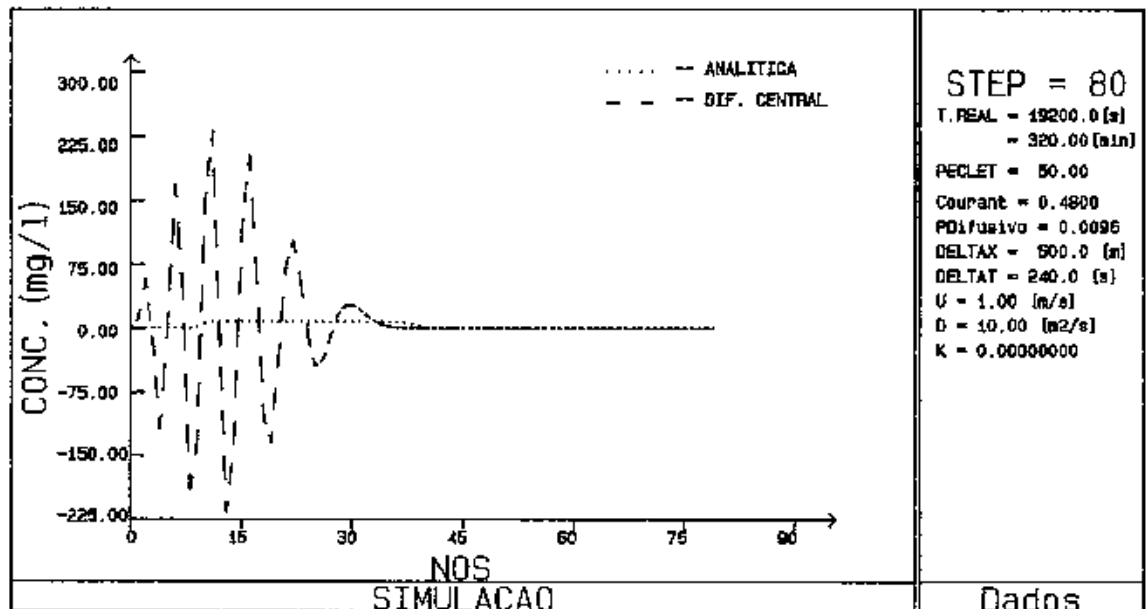
Fig. V.3 - Dif. Regressiva para $Pe = 10$ Fig. V.4 - Dif. Regressiva para $Pe = 10$

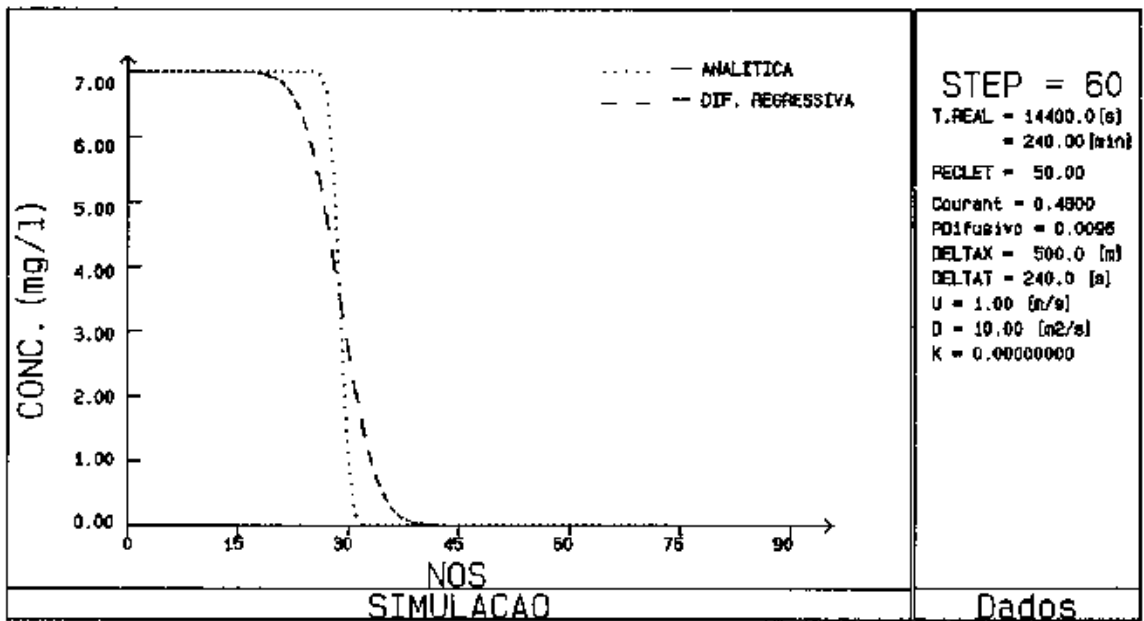
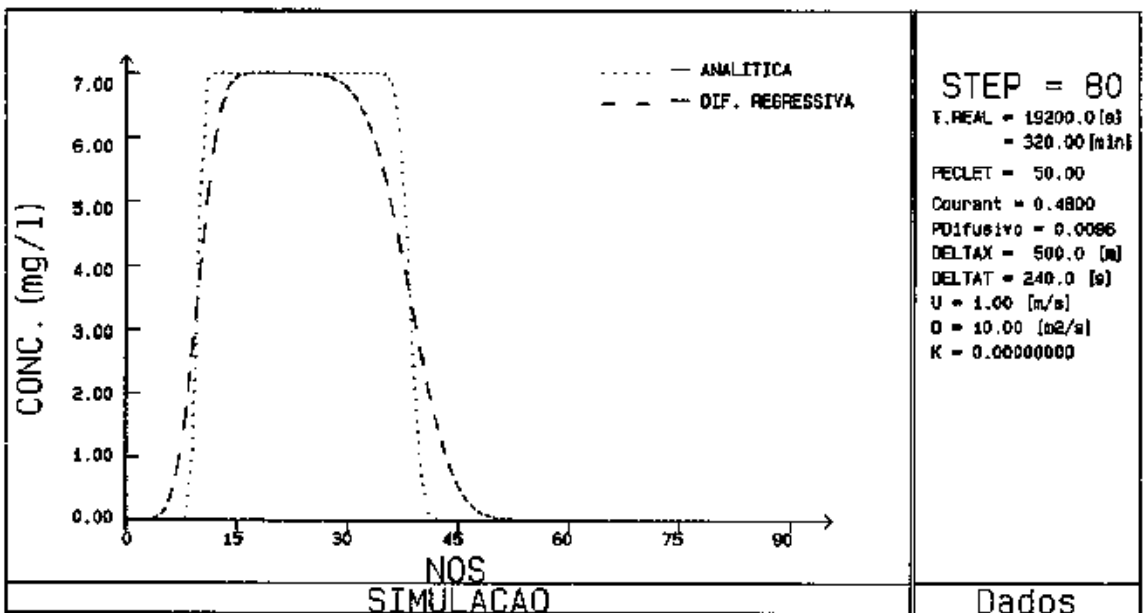
Fig. V.5 - QUICKEST para $Pe = 10$ Fig. V.6 - QUICKEST para $Pe = 10$

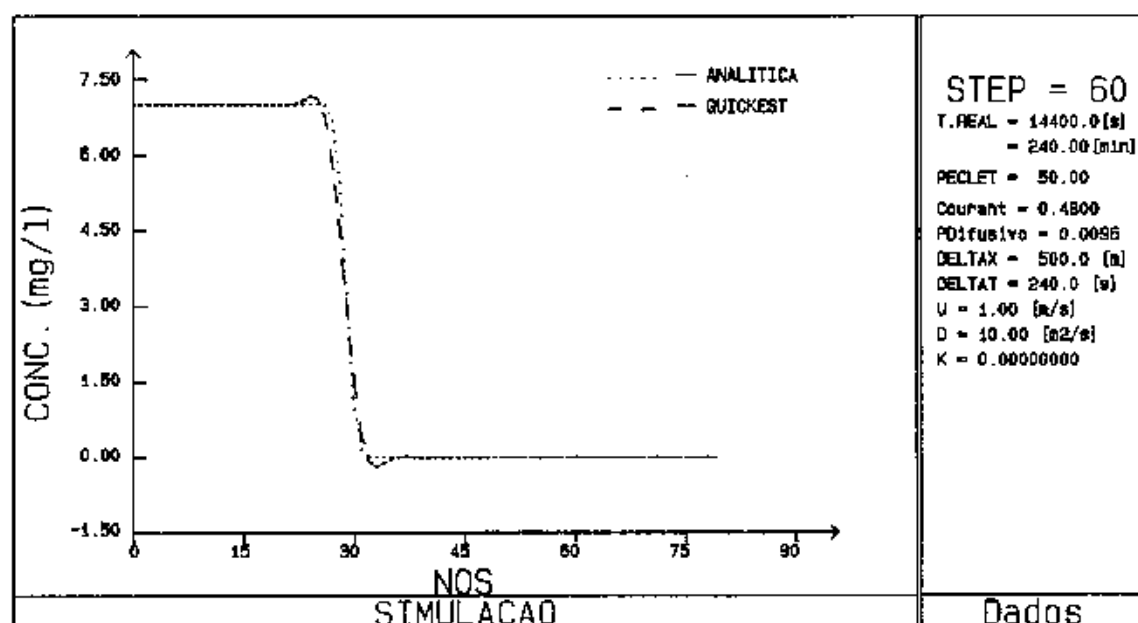
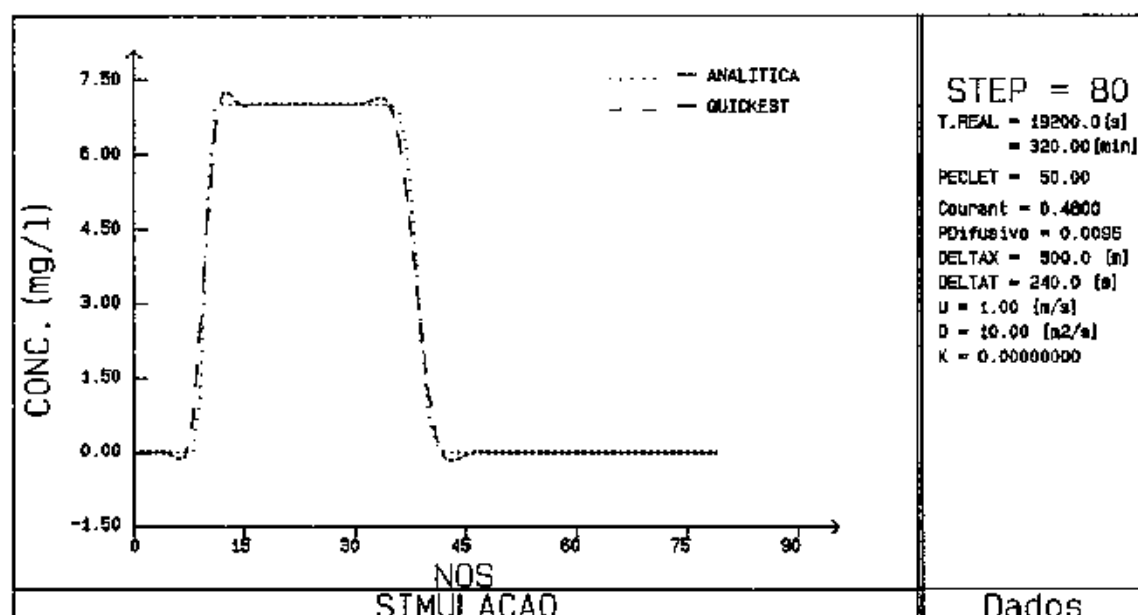
Fig. V.7 - Dif. Central para $Pe = 20$ Fig. V.8 - Dif. Central para $Pe = 20$

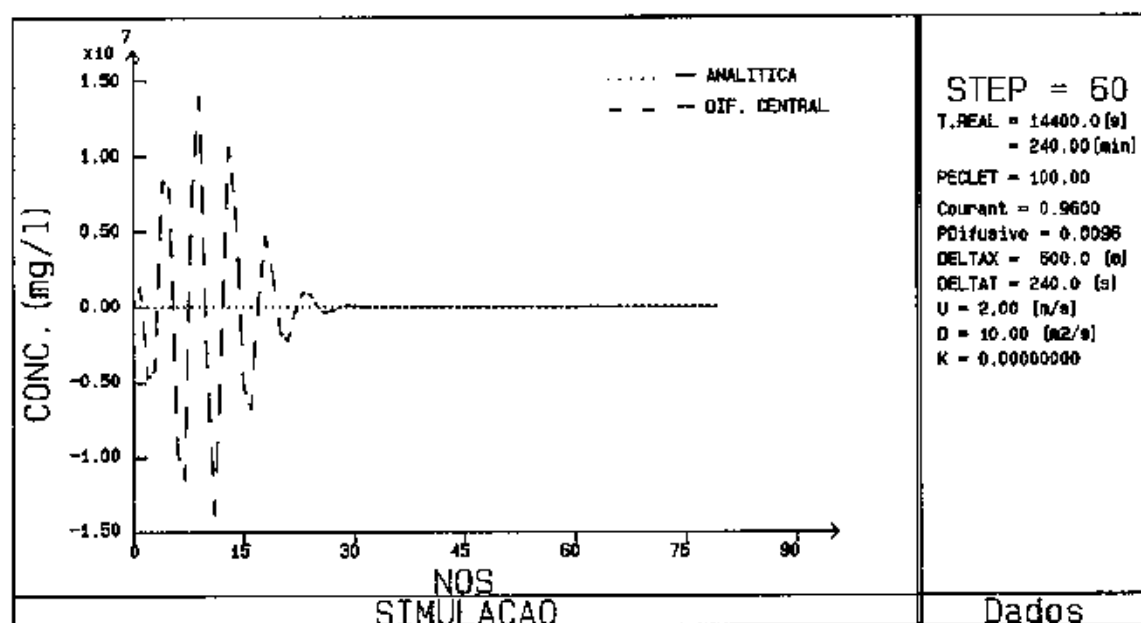
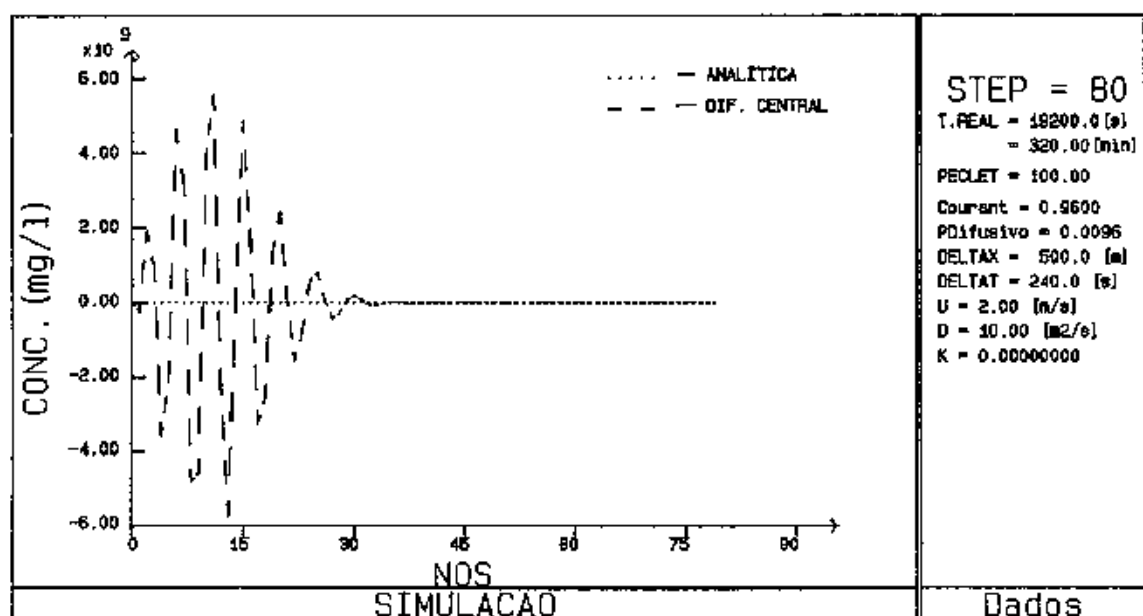
Fig. V.9 - Dif. Regressiva para $Pe = 20$ Fig. V.10 - Dif. Regressiva para $Pe = 20$

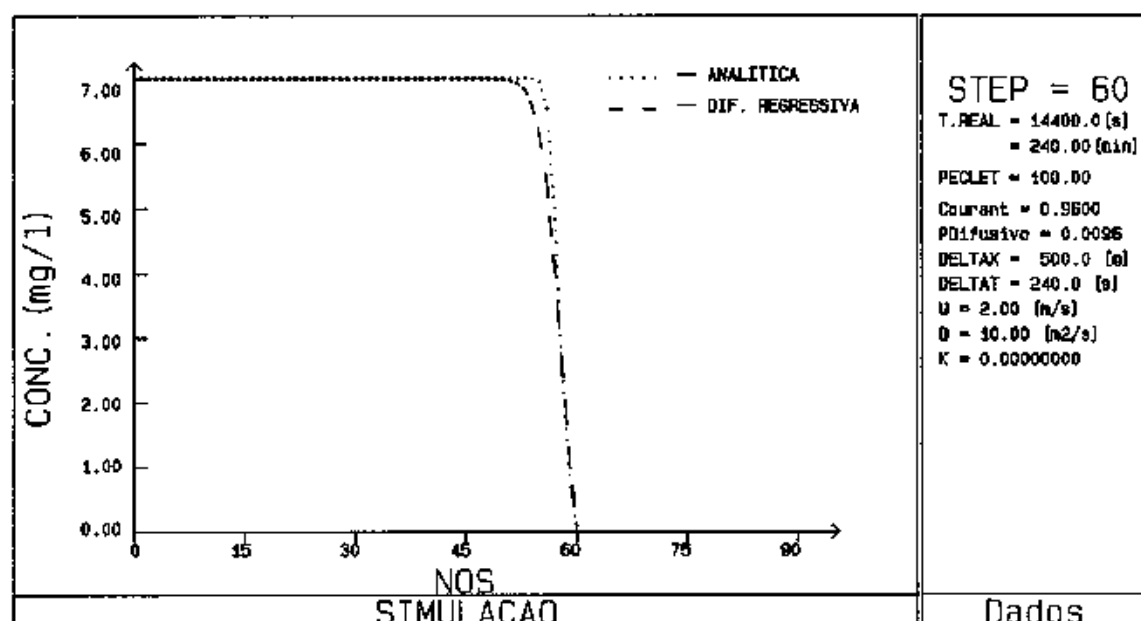
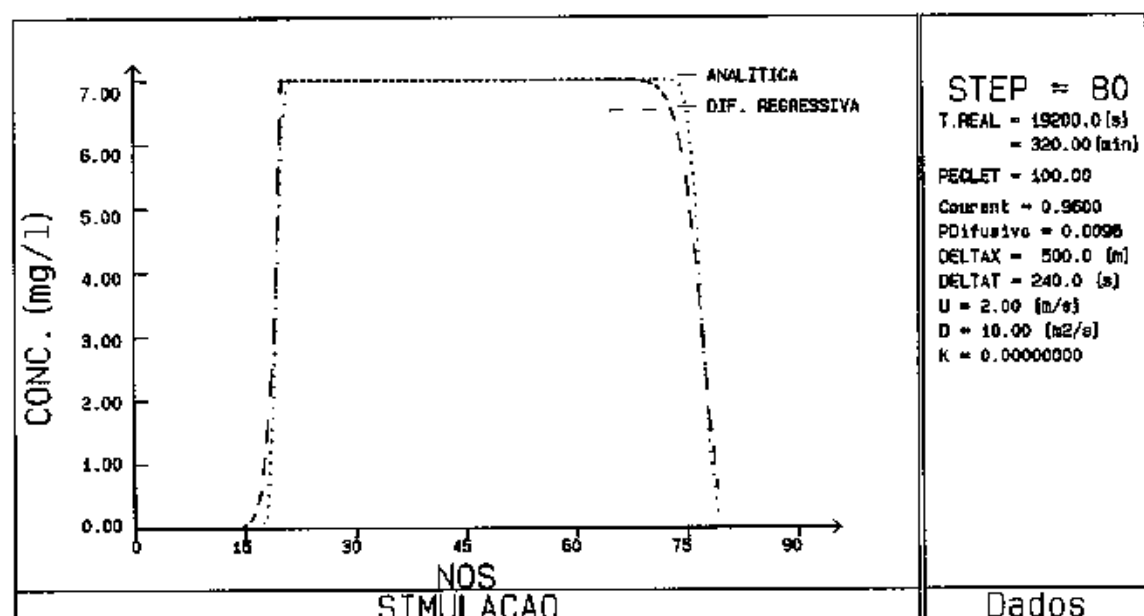
Fig. V.11 - QUICKEST para $Pe = 20$ Fig. V.12 - QUICKEST para $Pe = 20$

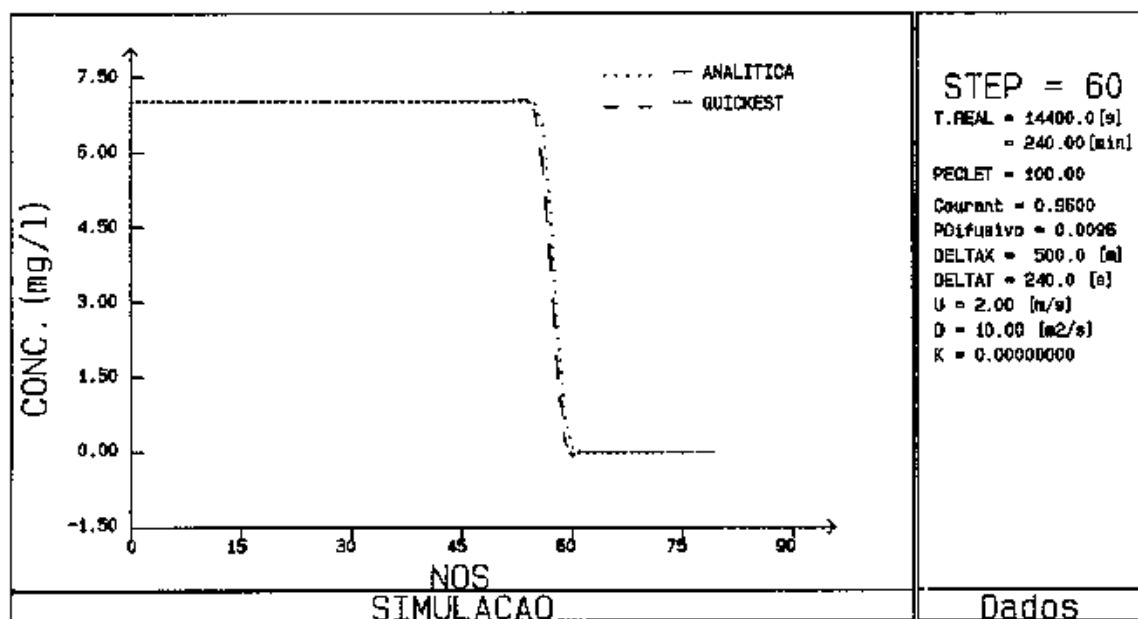
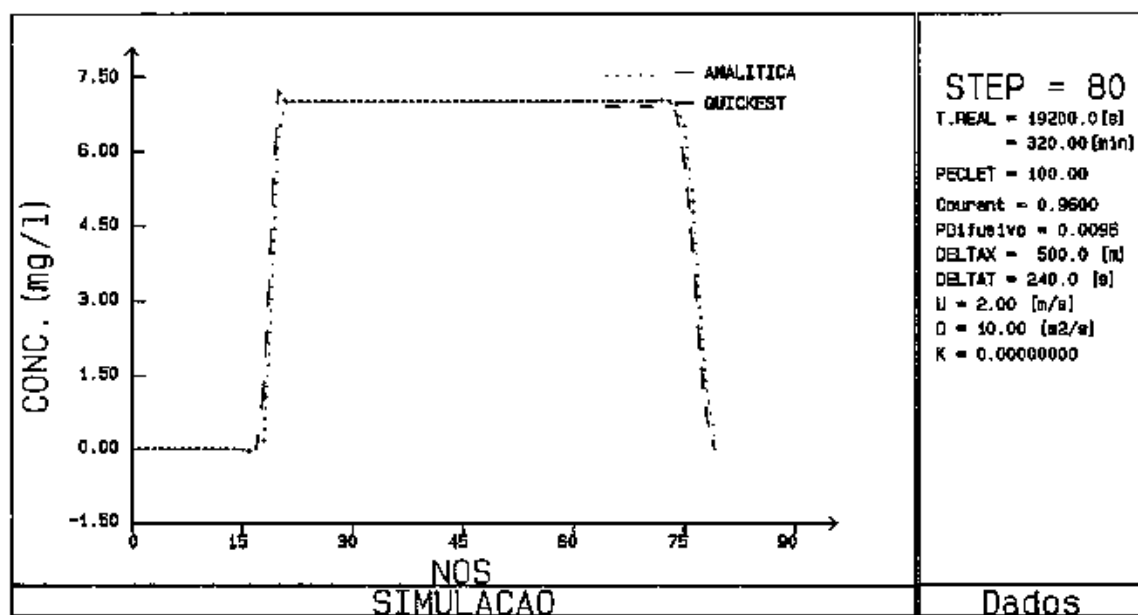
Fig. V.13 - Dif. Central para $Pe = 50$ Fig. V.14 - Dif. Central para $Pe = 50$

Fig. V.15 - Dif. Regressiva para $Pe = 50$ Fig. V.16 - Dif. Regressiva para $Pe = 50$

Fig. V.17 - QUICKEST para $Pe = 50$ Fig. V.18 - QUICKEST para $Pe = 50$

Fig. V.19 - Dif. Central para $Pe = 100$ Fig. V.20 - Dif. Central para $Pe = 100$

Fig. V.21 - Dif. Regressiva para $Pe = 100$ Fig. V.22 - Dif. Regressiva para $Pe = 100$

Fig. V.23 - QUICKEST para $Pe = 100$ Fig. V.24 - QUICKEST para $Pe = 100$

2º EXEMPLO :

- Este exemplo apresenta uma comparação do QUICKEST com uma solução analítica [12] para um caso simplificado com parâmetros constantes, para um problema de injeção de curta duração de DBO .

DADOS :

- 1º CASO PÉCLET = 7.5

$$U = 0.45 \quad [m/s]$$

$$D = 30.0 \quad [m^2/s]$$

$$\Delta x = 500 \quad [m]$$

$$\Delta t = 240 \quad [s]$$

$$K = 0.0000101 \quad [/s]$$

- 2º CASO PÉCLET= 15.0

$$U = 0.90 \quad [m/s]$$

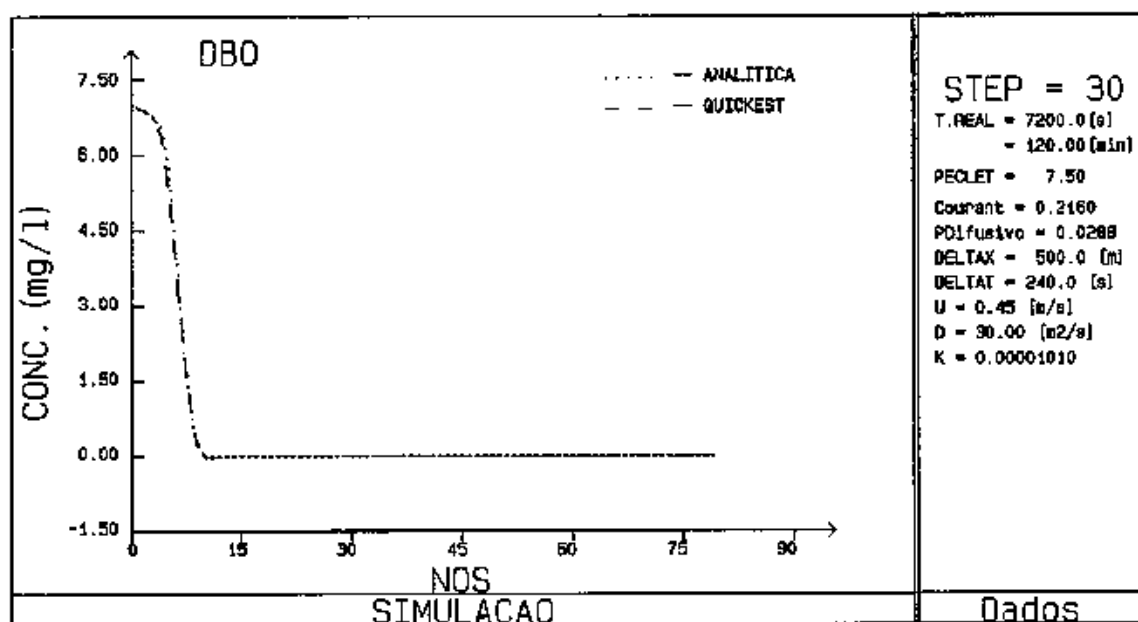
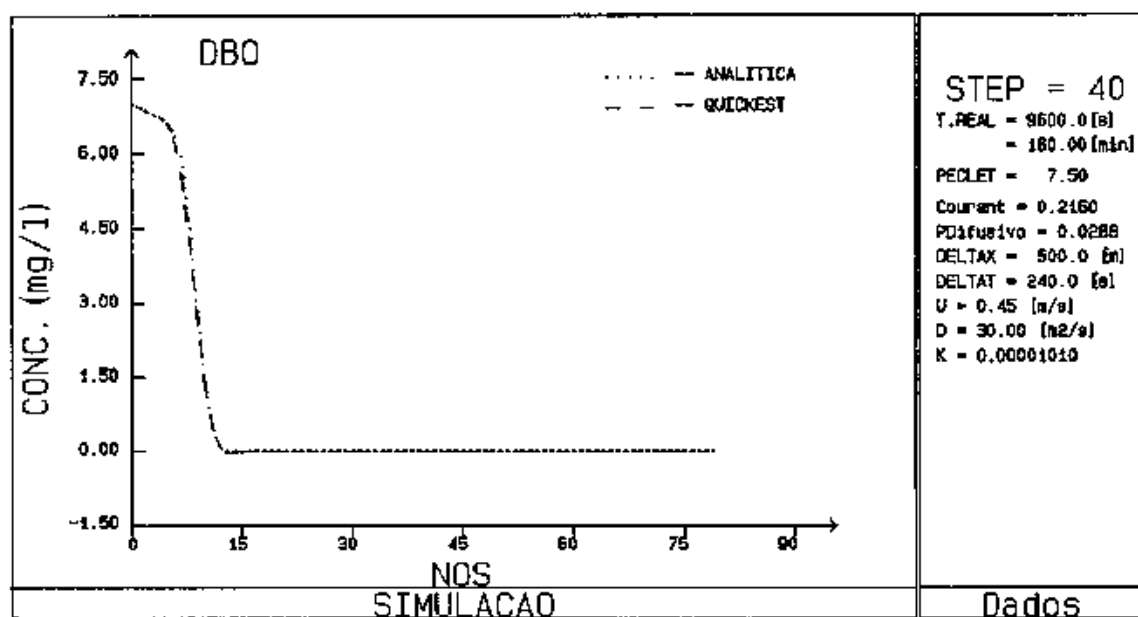
$$D = 30.0 \quad [m^2/s]$$

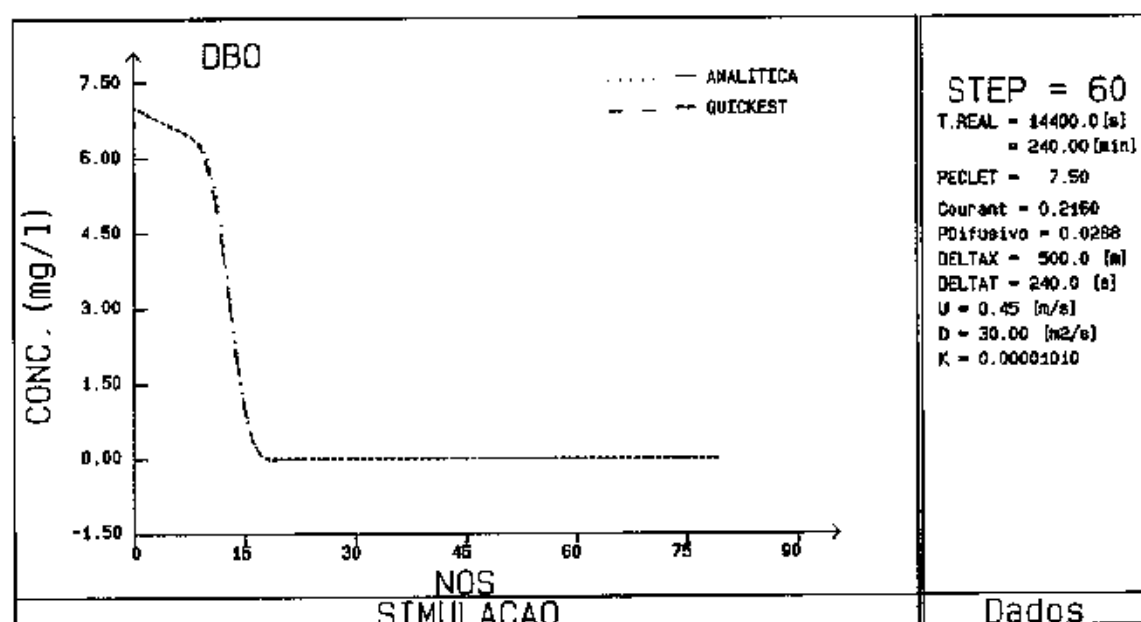
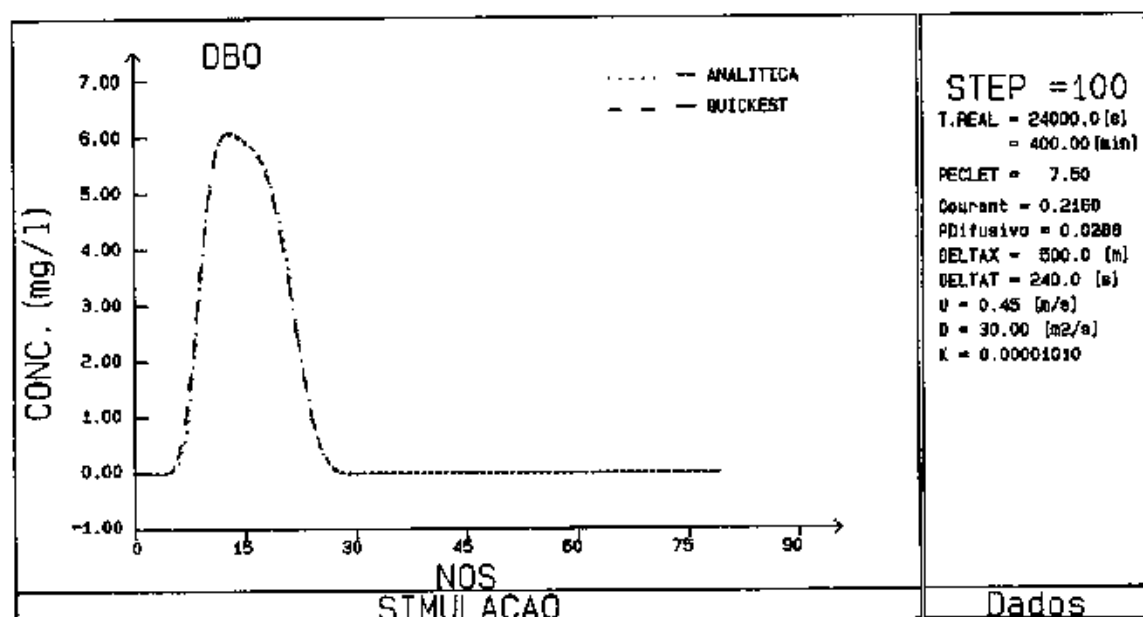
$$\Delta x = 500 \quad [m]$$

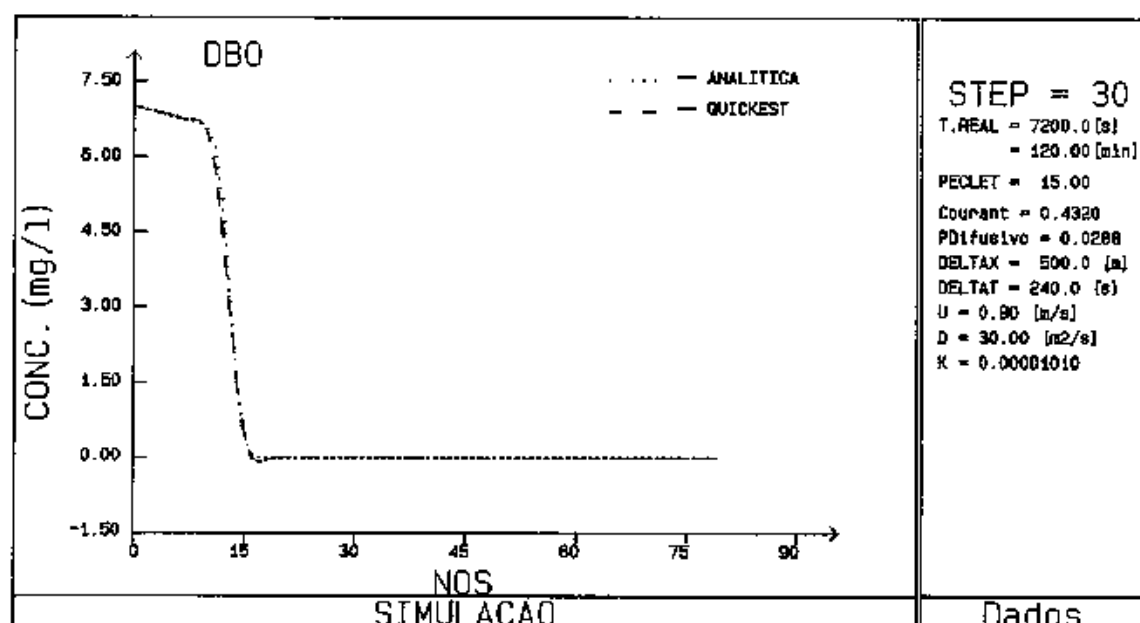
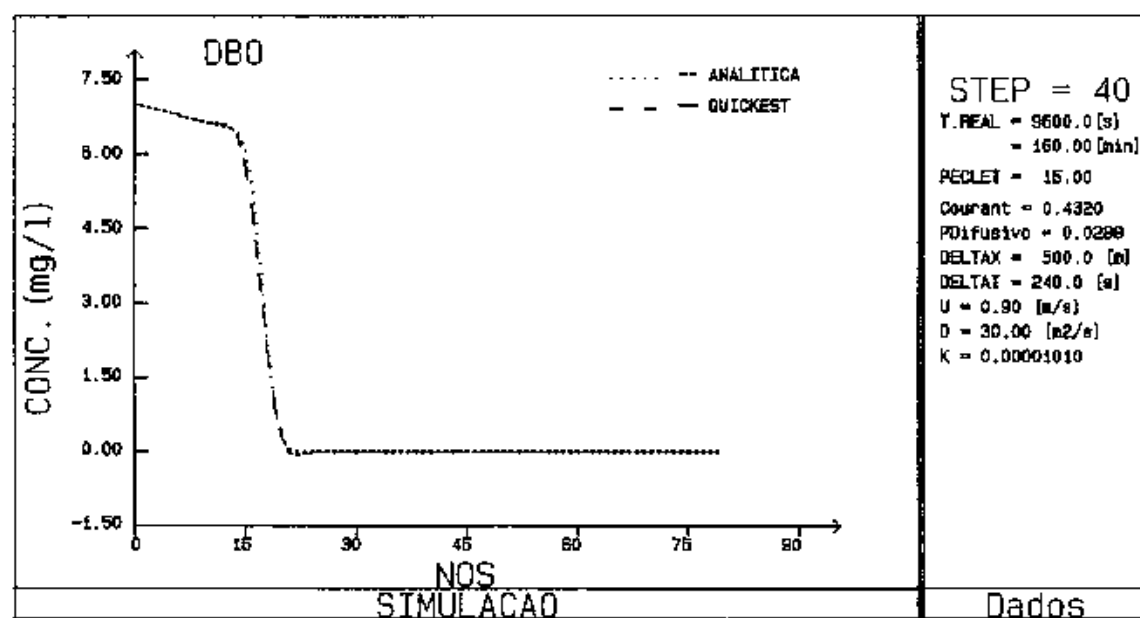
$$\Delta t = 240 \quad [s]$$

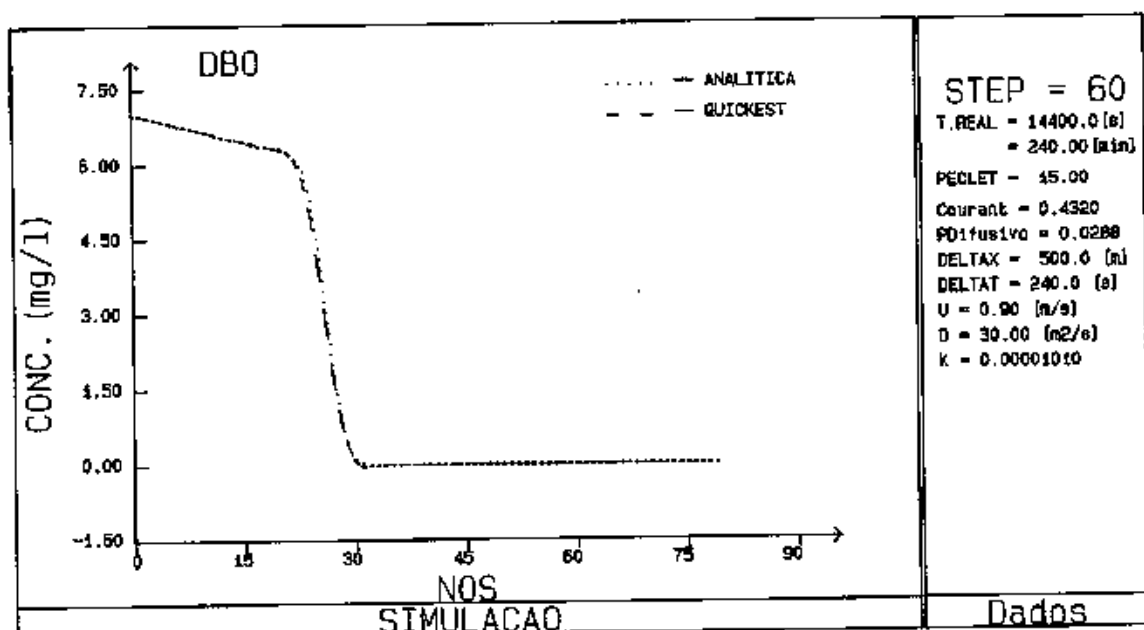
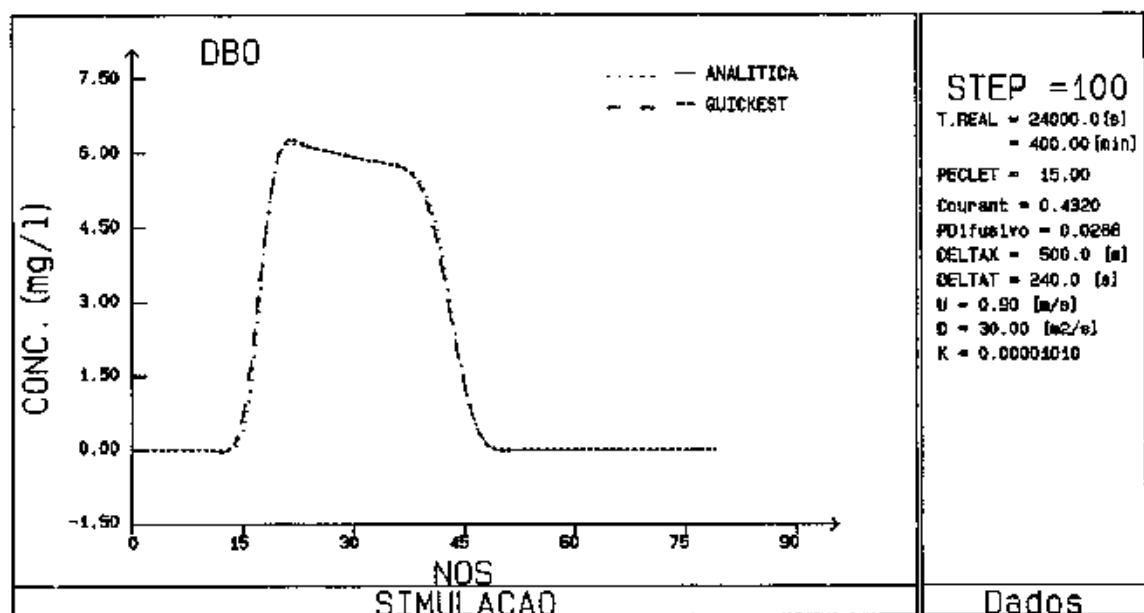
$$K = 0.0000101 \quad [/s]$$

As saídas com os resultados são mostrados nas figuras (V.25) a (V.32) . Podemos notar que o modelo não apresenta problemas de oscilações e amortecimento da frente de onda de poluente para valores do número de Peclet de interesse prático .

Fig. V.25- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 7.5$ Fig. V.26- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 7.5$

Fig. V.27- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 7.5$ Fig. V.28- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 7.5$

Fig. V. 29- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 15.0$ Fig. V. 30- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 15.0$

Fig.V.31- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 15.0$ Fig.V.32- Comparação com Solução Analítica para $Pe = 15.0$

3º EXEMPLO :

- Este exemplo visa comparar os modelos QUICKEST e QUAL2E com uma solução analítica [12], para um caso simplificado de injeção contínua de Fenol com parâmetros físicos médios relativos ao rio Paraíba do Sul [15]. O modelo QUAL2E [4] desenvolvido pelo United States Environmental Protection Agency é amplamente utilizado no mundo inteiro e emprega um esquema de diferença regressiva para o termo advectivo, o que provoca um amortecimento da frente de onda, conforme pode ser visto a seguir.

DADOS :

- 1- Concentração inicial da substância = 0.0 mg/l
- 2- $D = 29,02 \quad [m^2/s]$
- 3- $U = 0.66 \quad [m/s]$
- 4- $A = 320.30 \quad [m^2]$
- 5- $\Delta x = 500 \quad [m]$
- 6- $\Delta t = 240 \quad [s]$
- 7- Duração da injeção : $300\Delta t$
- 8- Concentração de injeção : 10 mg/l
- 9- N^o Peclet = 11.39

As Figuras (V.33) a (V.38) apresentam os resultados para os níveis de tempo $30\Delta t$, $60\Delta t$, $90\Delta t$, $120\Delta t$, $150\Delta t$ e $180\Delta t$. Pode-se observar a concordância do QUICKEST com a solução analítica e a difusão artificial introduzida pelo QUAL2E.

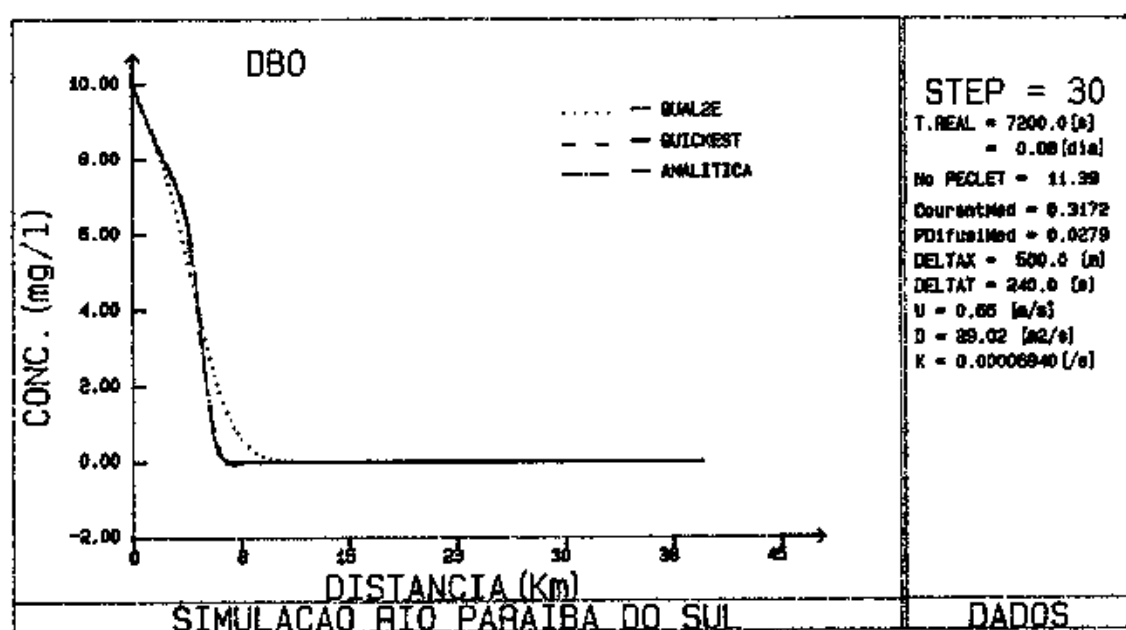


Fig. V.33 - Comparação QUICKEST, QUAL2E e solução analítica para Fenol.

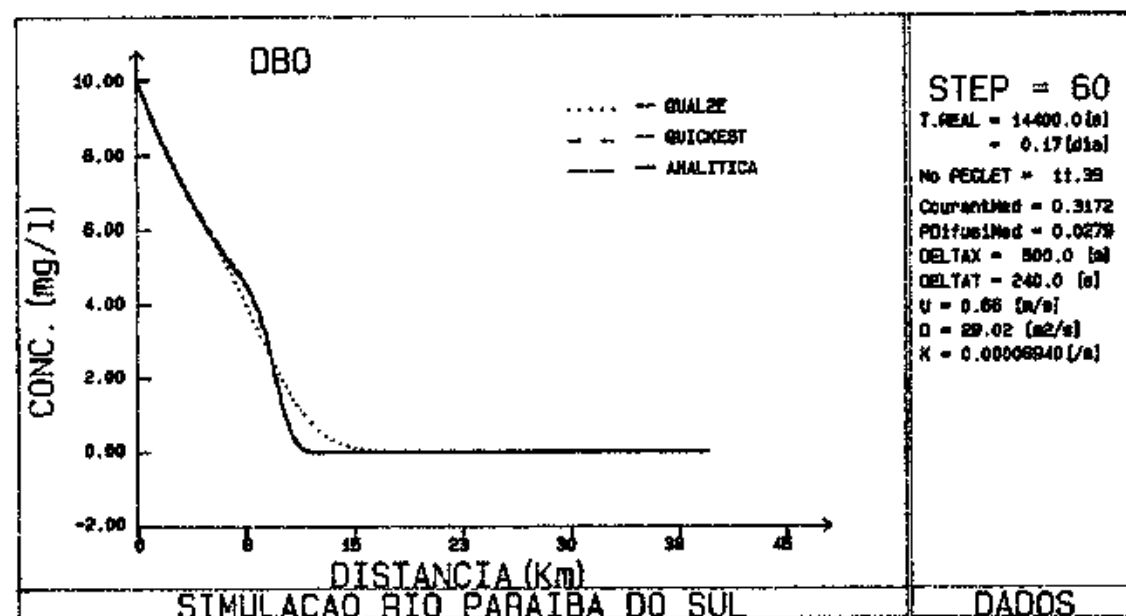


Fig. V.34- Comparação QUICKEST, QUAL2E e solução analítica para Fenol.

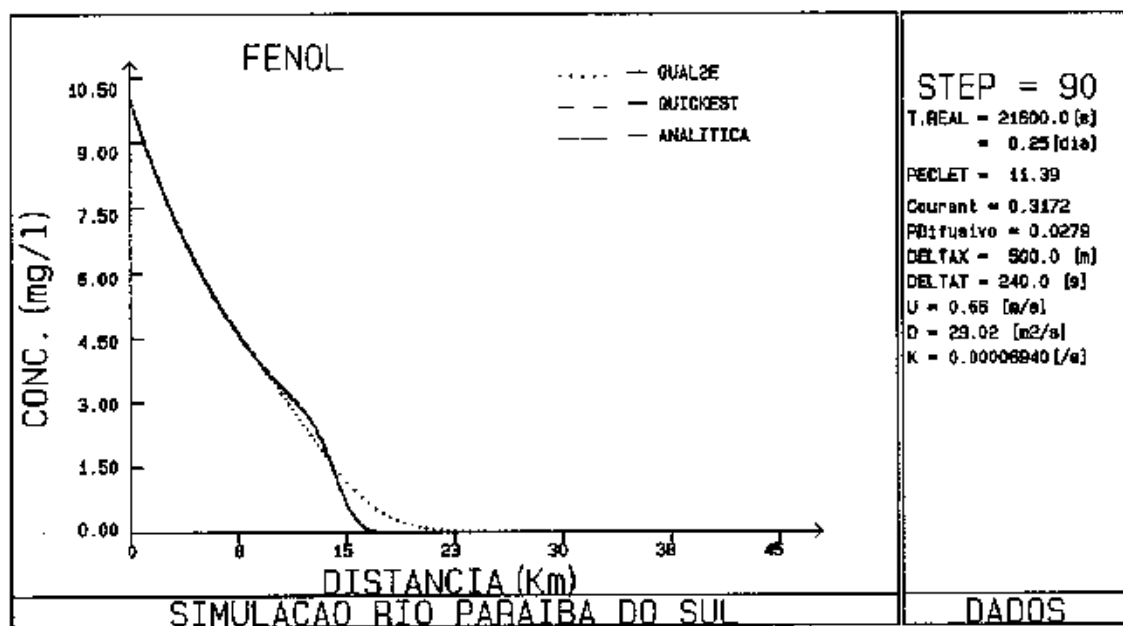


Fig. V.35 - Comparação QUICKEST, QUAL2E e solução analítica para Fenol.

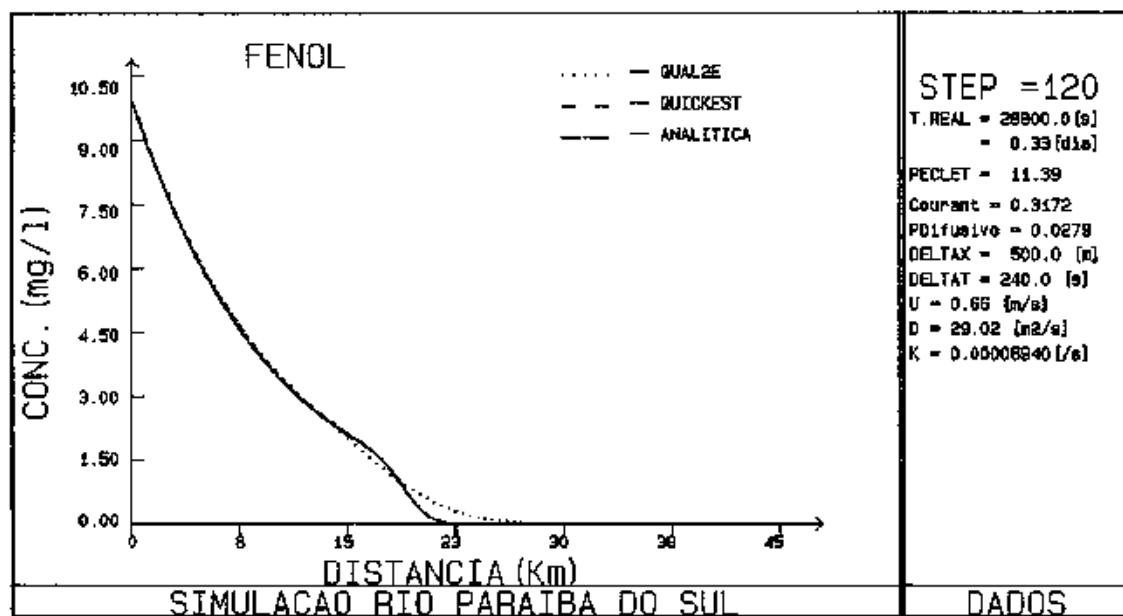


Fig. V.36 - Comparação QUICKEST, QUAL2E e solução analítica para Fenol.

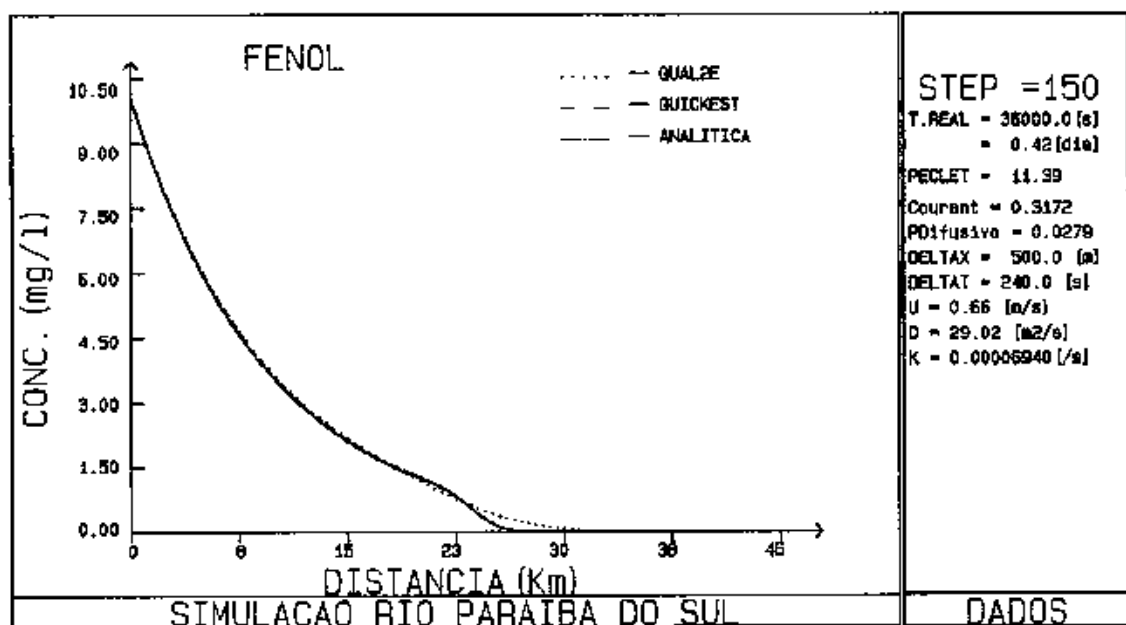


Fig. V.37 - Comparação QUICKEST, QUAL2E e solução analítica para Fenol.

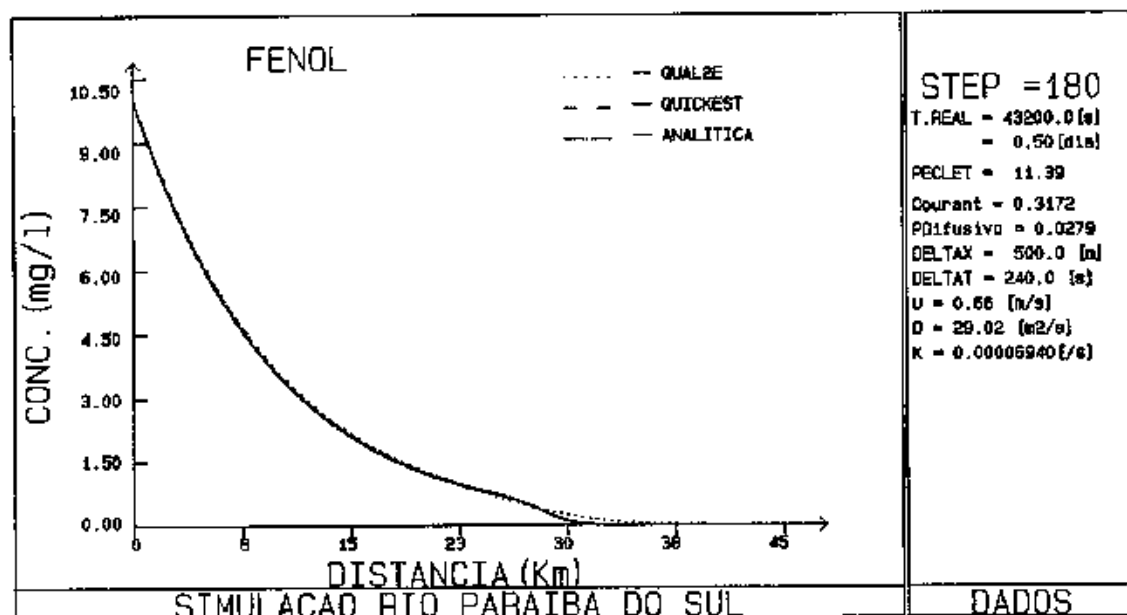


Fig. V.38 - Comparação QUICKEST, QUAL2E e solução analítica para Fenol.

4º EXEMPLO :

- Com a finalidade de verificar a potencialidade do modelo QUICKEST na simulação simultânea de vários efluentes, neste exemplo vamos compará-lo com o QUAL2E [4] , para um acidente simulado no rio Paraíba do Sul, com injeção contínua de vários efluentes. Analisa-se também, a variação de concentração de oxigênio dissolvido no rio. Os parâmetros U, D, A variam a cada trecho .

DADOS :

1- Concentração inicial das substâncias :

DBO	=	0.0	mg/l
Fenol	=	0.0	mg/l
Nitrog. Org.	=	0.0	mg/l
Amônia	=	0.0	mg/l
Nitrito	=	0.0	mg/l
Nitrato	=	0.0	mg/l
OD	=	0.0	mg/l

2- Concentração de injeção das substâncias :

DBO	=	7.0	mg/l
Fenol	=	10.0	mg/l
Nitrog. Org.	=	1.0	mg/l
Amônia	=	5.0	mg/l

Nitrito	=	2.0	mg/l
Nitrato	=	2.0	mg/l
OD	=	6.0	mg/l

- 3- $D = D(x) \text{ [m}^2/\text{s]}$ $0 \leq x \leq 40 \text{ Km}$
- 4- $U = U(x) \text{ [m/s]}$ $0 \leq x \leq 40 \text{ Km}$
- 5- $A = A(x) \text{ [m}^2]$ $0 \leq x \leq 40 \text{ Km}$
- 6- $\Delta x = 500 \text{ [m]}$
- 7- $\Delta t = 240 \text{ [s]}$
- 8- Duração da injeção : $300\Delta t$
- 9- Intervalos de apresentação de resultados
 $30\Delta t, 90\Delta t, 150\Delta t, 210\Delta t, 240\Delta t \text{ e } 300\Delta t$
- 10- $N^0\text{Peclet} = 11.66 \text{ (médio)}$

As figuras (V.39) a (V.81) apresentam os resultados dos modelos QUAL2E e QUICKEST para os seguintes efluentes: DBO, Fenol, Nitrogênio Orgânico, Amônia, Nitrito, Nitrato e OD.

Pode-se observar, tomando-se por base dados do rio Paraíba do Sul, um amortecimento da frente de onda para todos os poluentes no modelo QUAL2E. Nota-se, também, que os esquemas tendem para a mesma solução em regime permanente, quando a frente de onda já foi completamente dispersada.

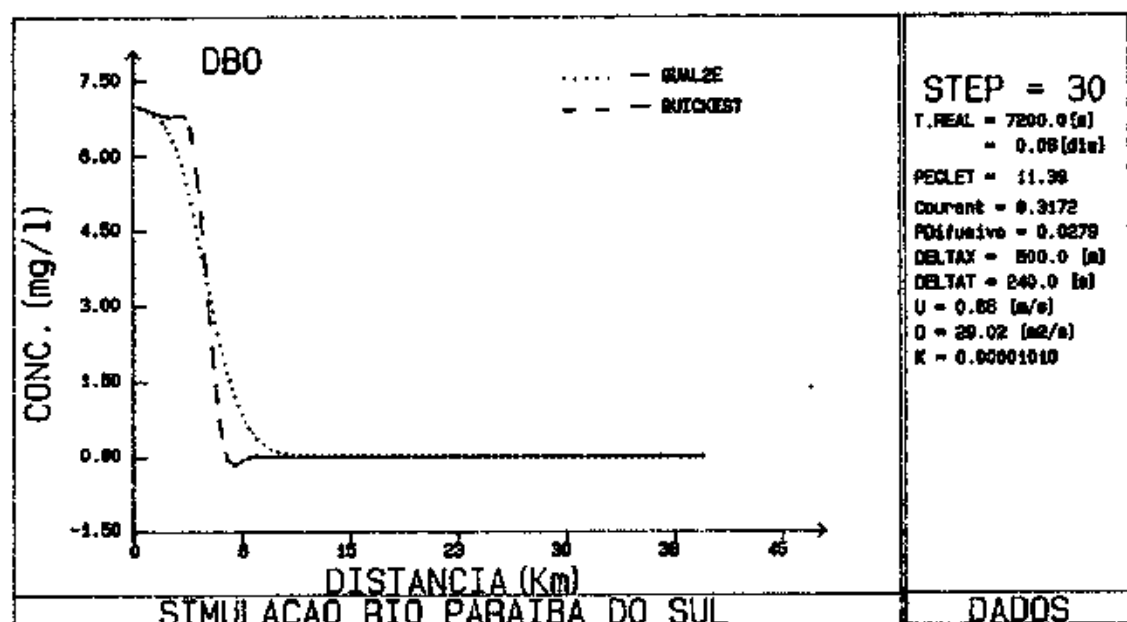


Fig. V. 39- Comparação com QUAL2E para DBO.

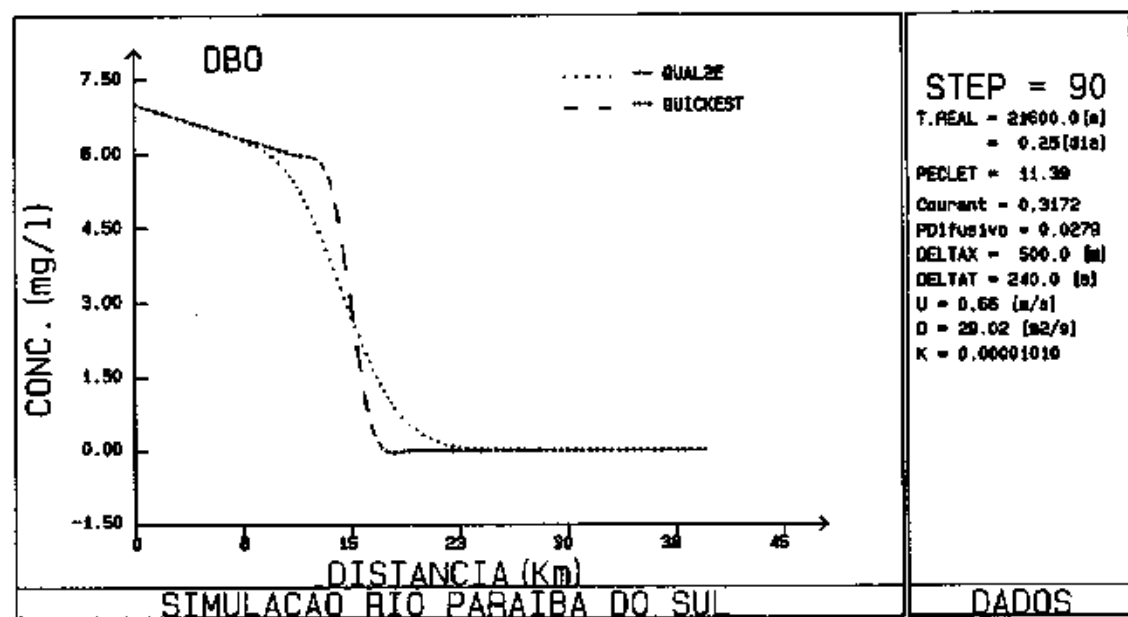


Fig. V. 40- Comparação com QUAL2E para DBO.

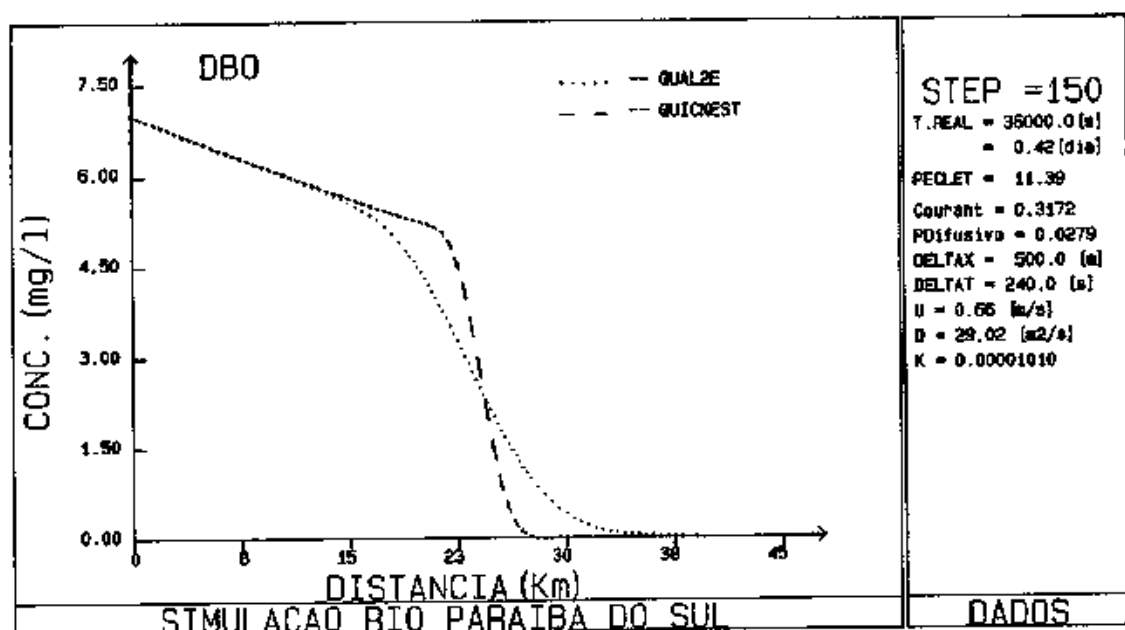


Fig. V. 41- Comparação com QUAL2E para DBO.

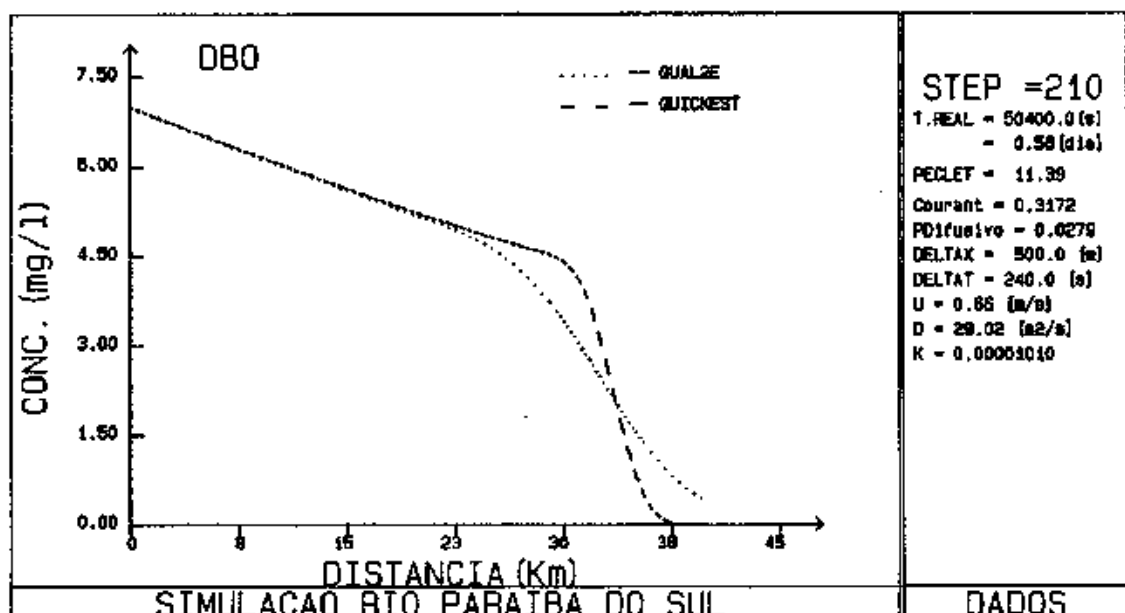


Fig. V. 42- Comparação com QUAL2E para DBO.

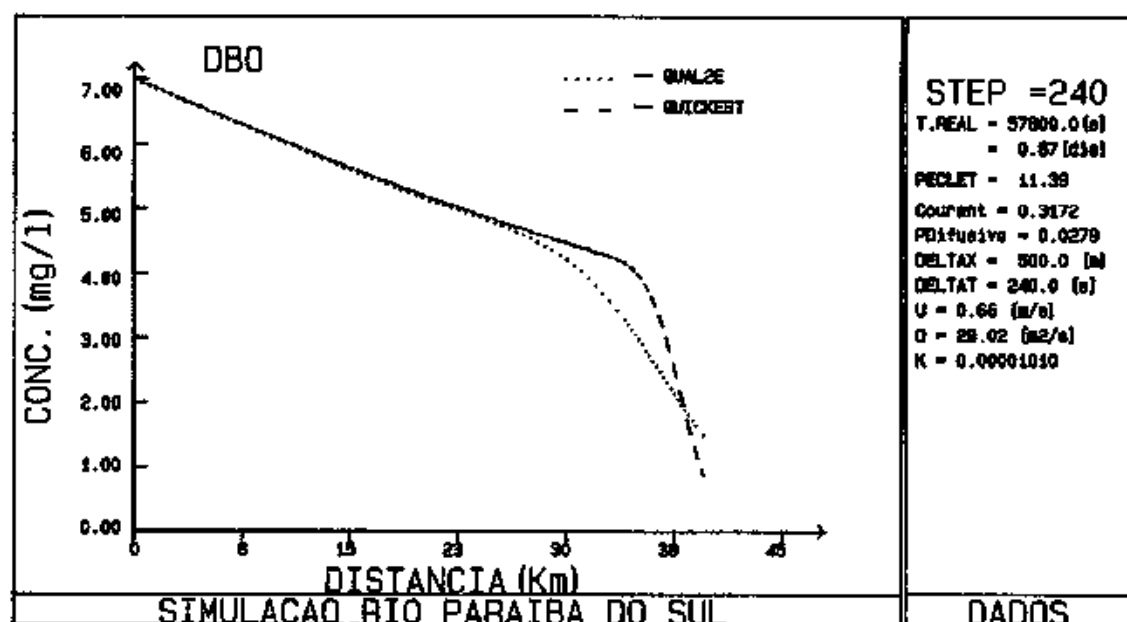


Fig. V. 43- Comparação com QUAL2E para DBO.

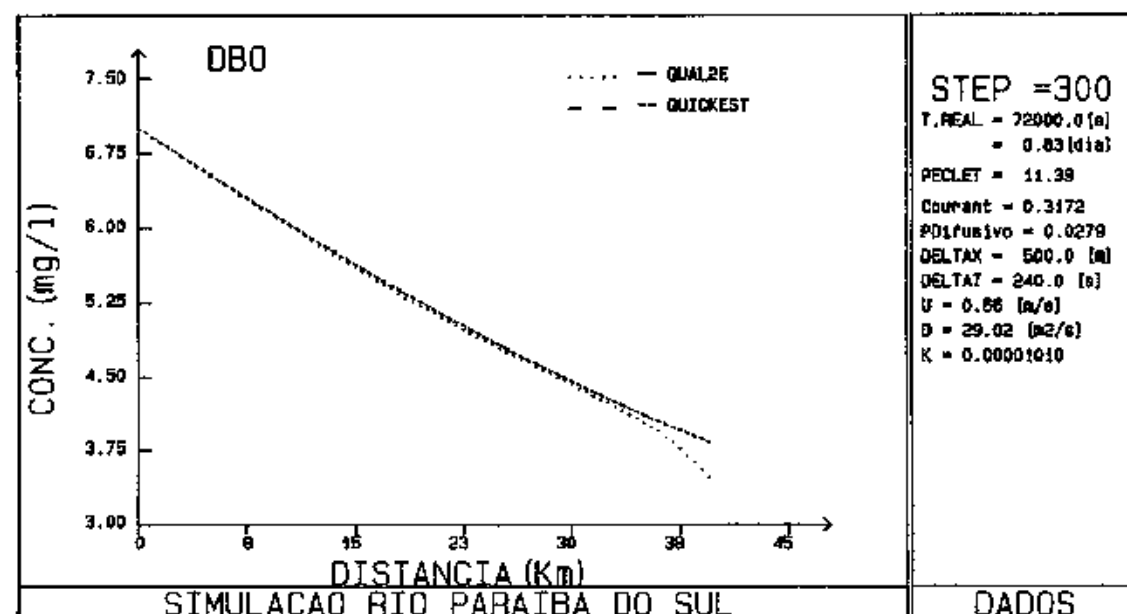


Fig. V. 44- Comparação com QUAL2E para DBO.

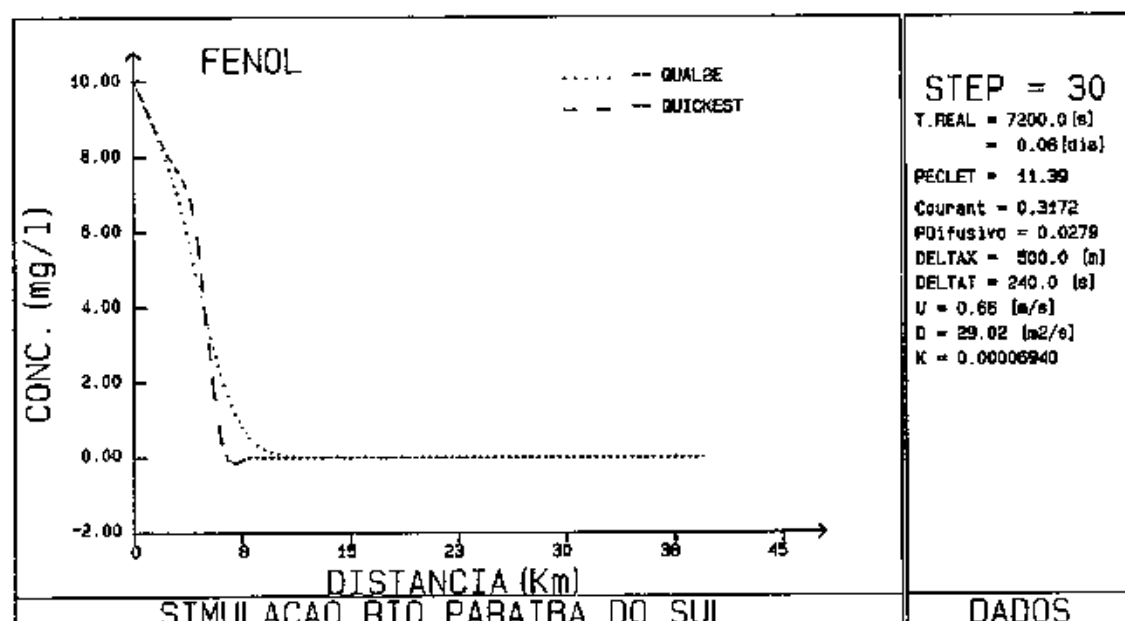


Fig. V. 45- Comparação com QUAL2E para Fenol.

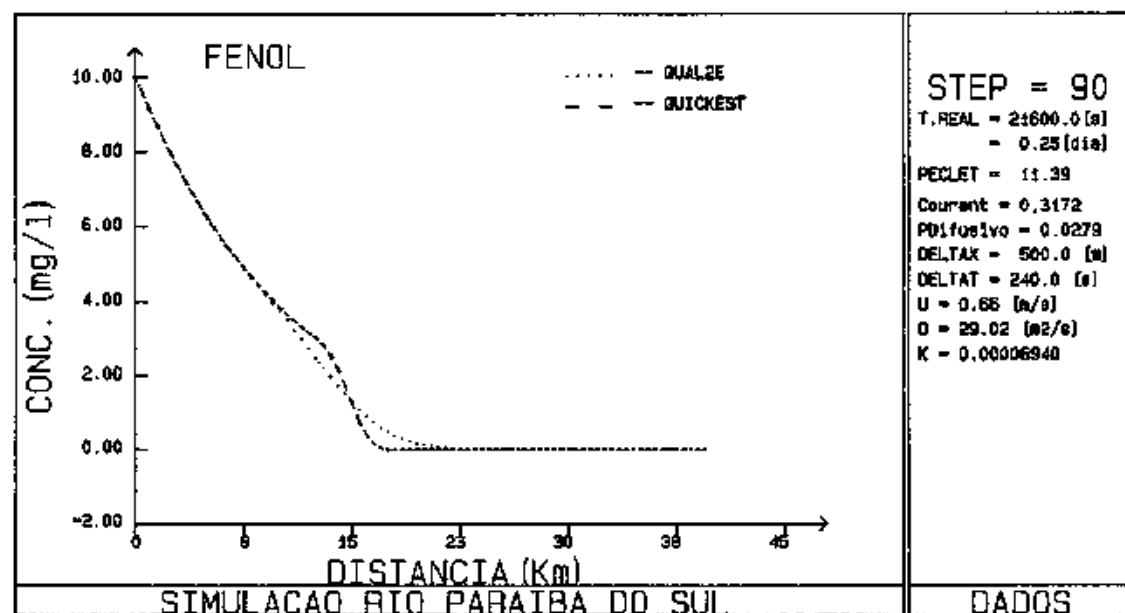


Fig. V. 46- Comparação com QUAL2E para Fenol.

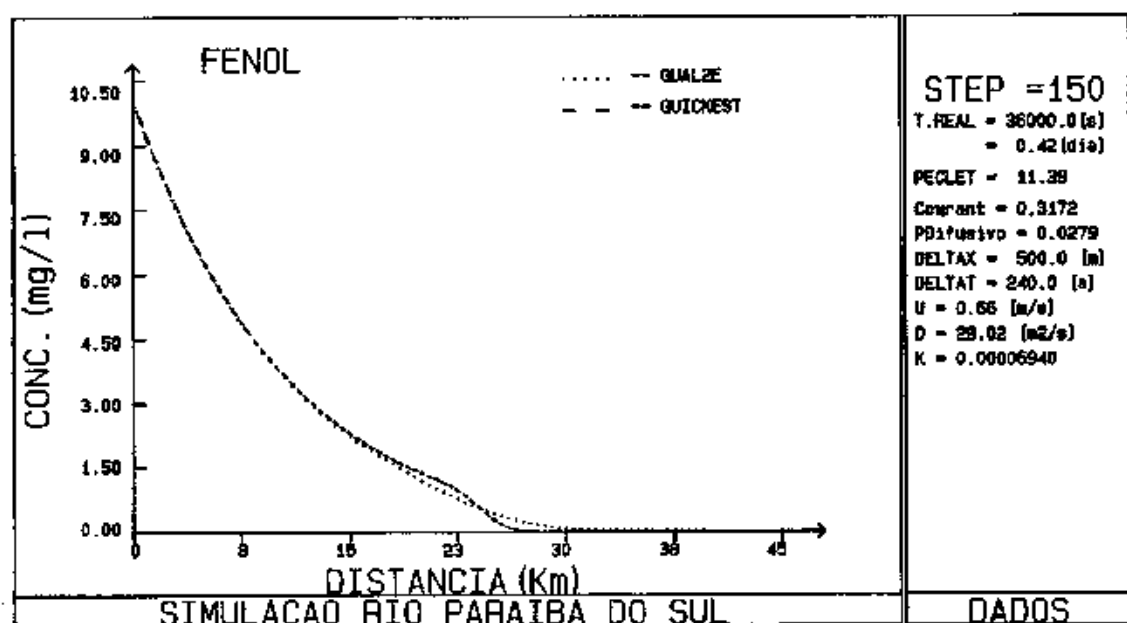


Fig.V.47- Comparação com QUAL2E para Fenol.

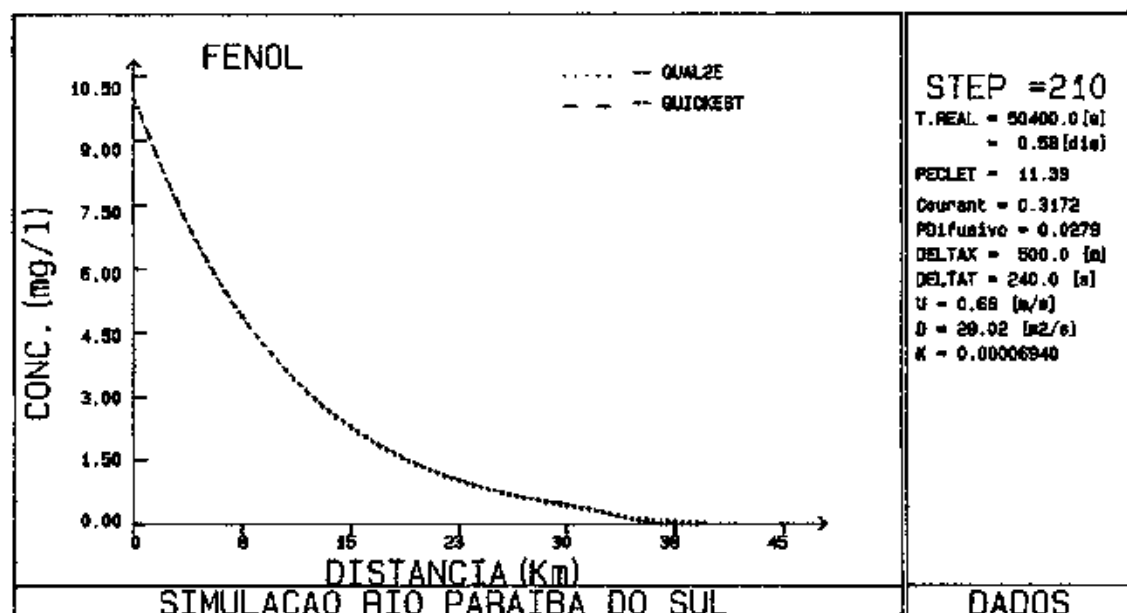


Fig.V.48- Comparação com QUAL2E para Fenol.

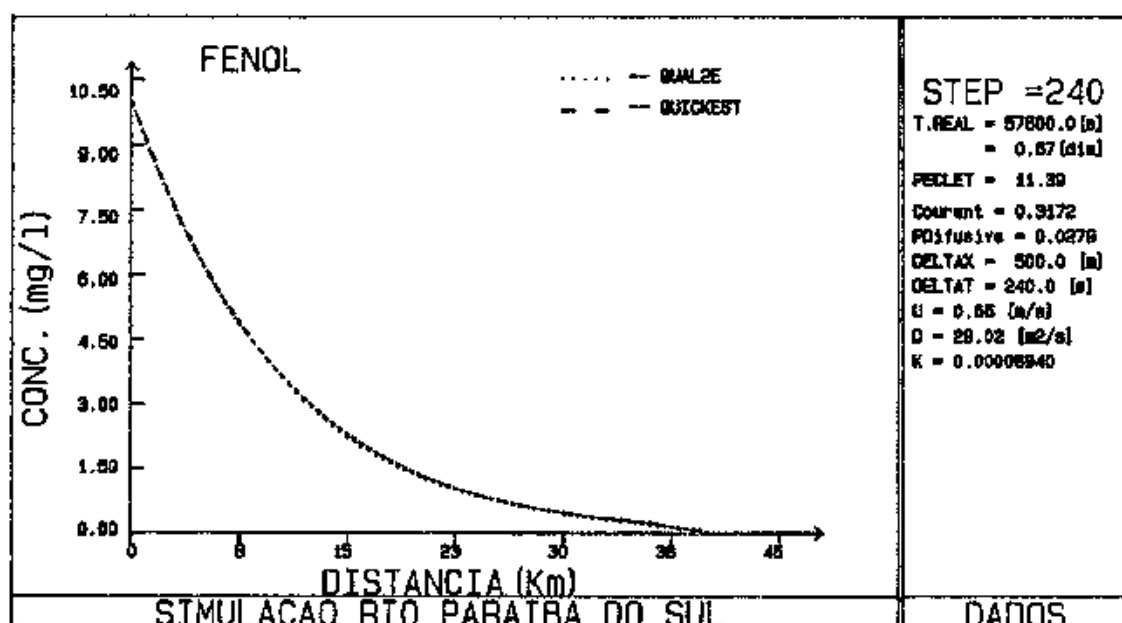


Fig.V.49- Comparação com QUAL2E para Fenol.

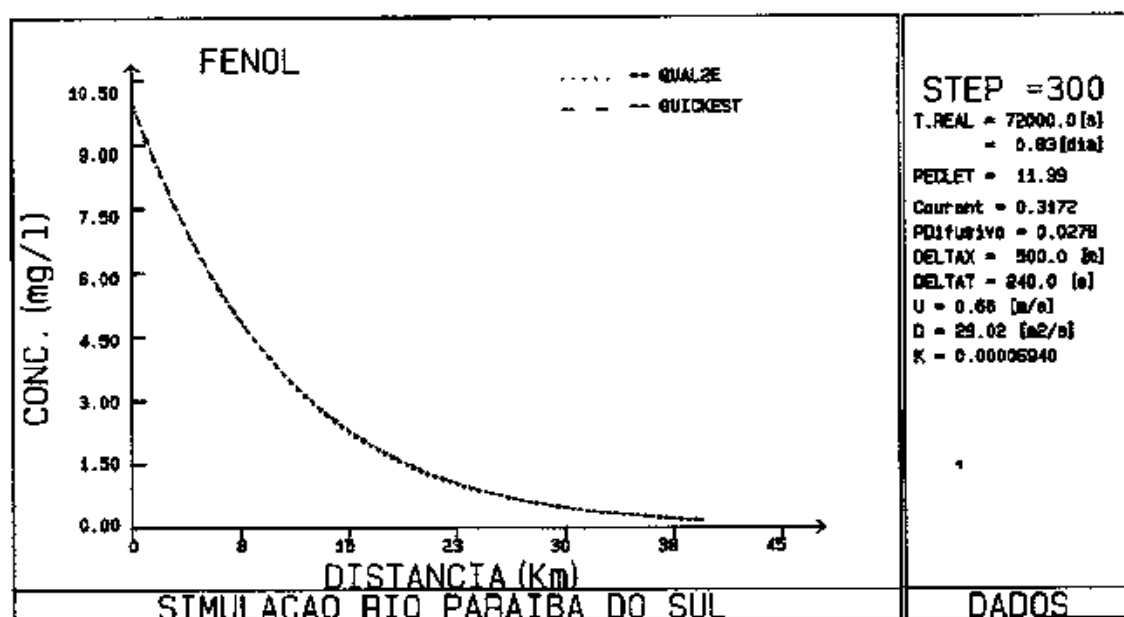


Fig.V.50- Comparação com QUAL2E para Fenol.

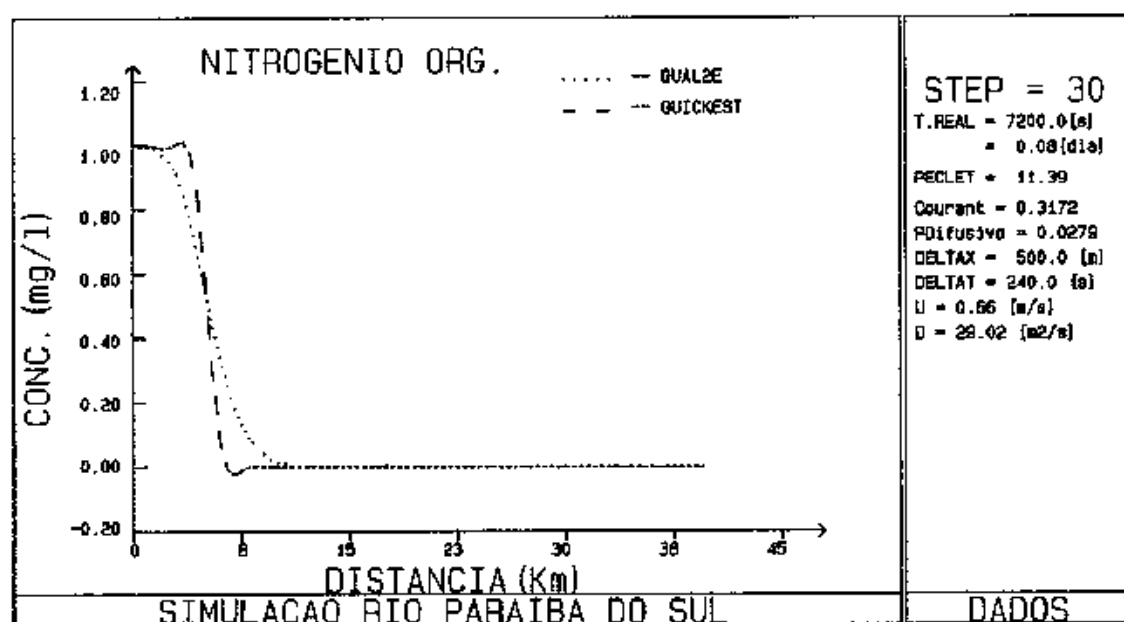


Fig.V.51- Comparação com QUAL2E para Nitrogênio Org.

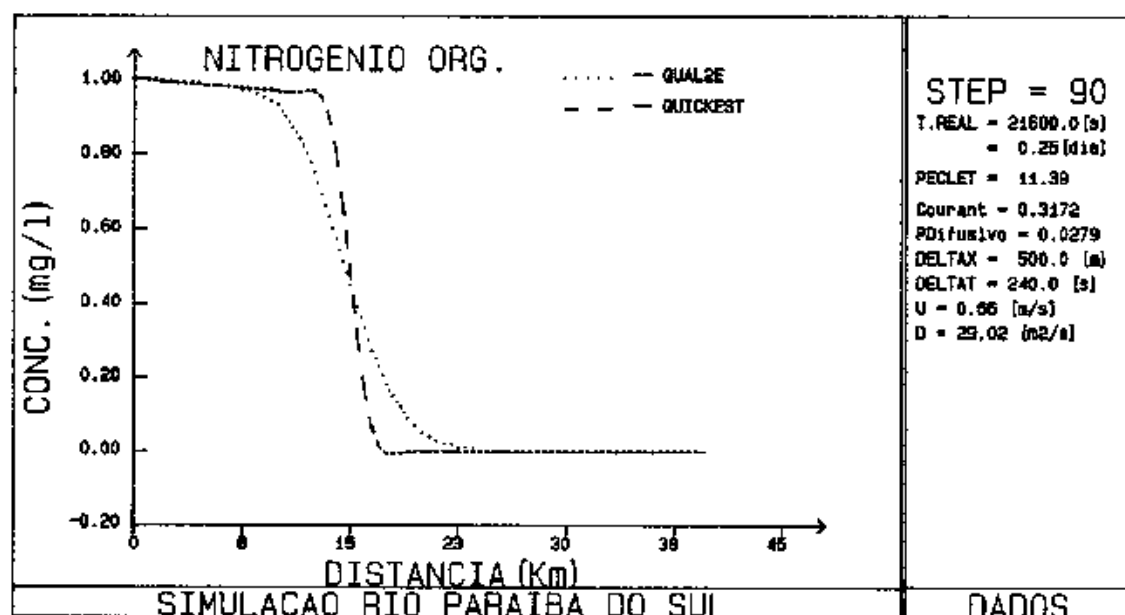


Fig.V.52- Comparação com QUAL2E para Nitrogênio Org.

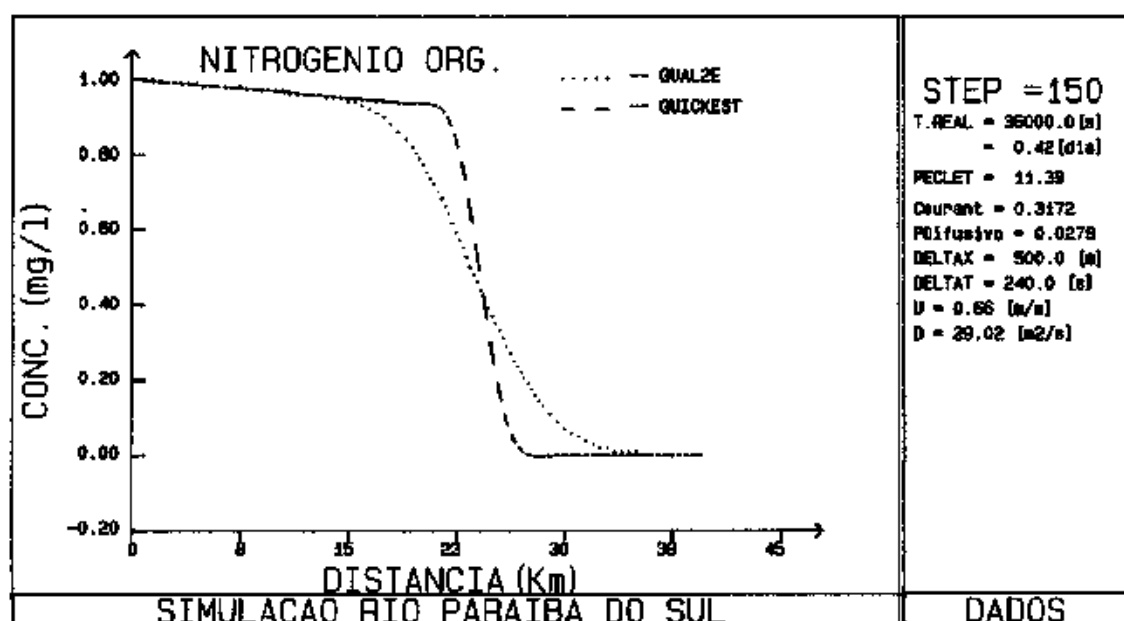


Fig.V.53- Comparação com QUAL2E para Nitrogênio Org.

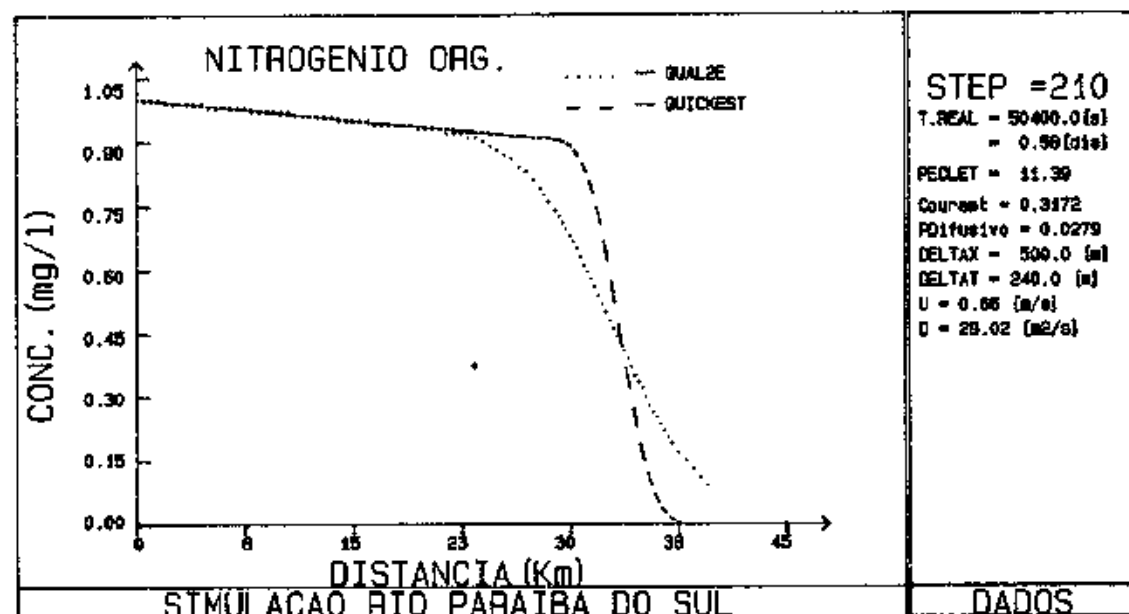


Fig.V.54- Comparação com QUAL2E para Nitrogênio Org.

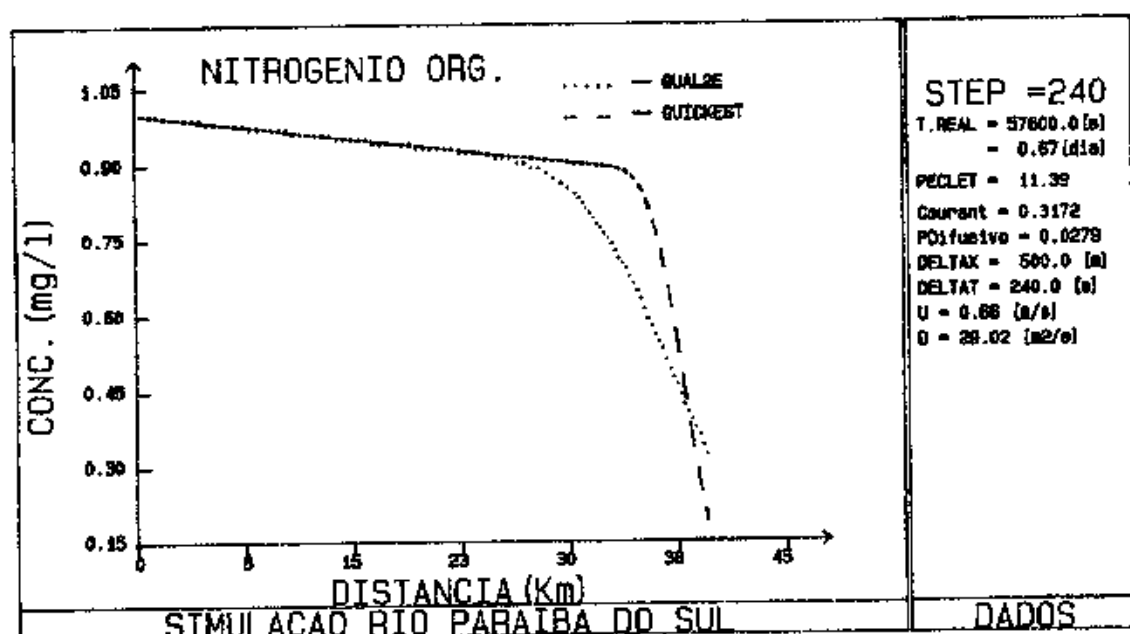


Fig. V.55- Comparação com QUAL2E para Nitrogênio Org.

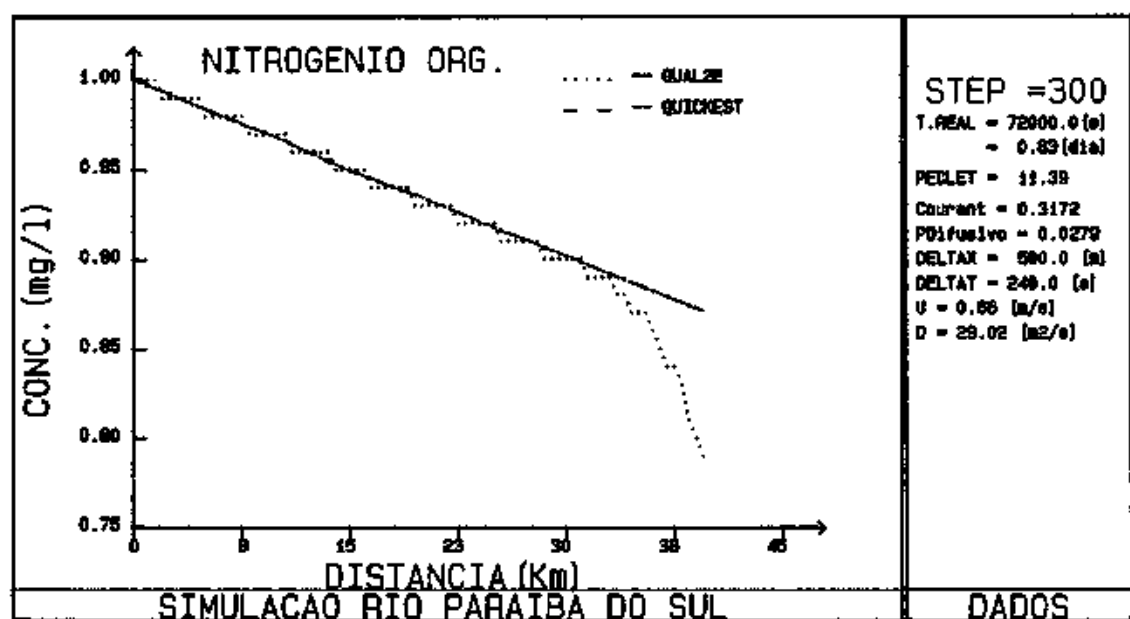


Fig. V.56- Comparação com QUAL2E para Nitrogênio Org.

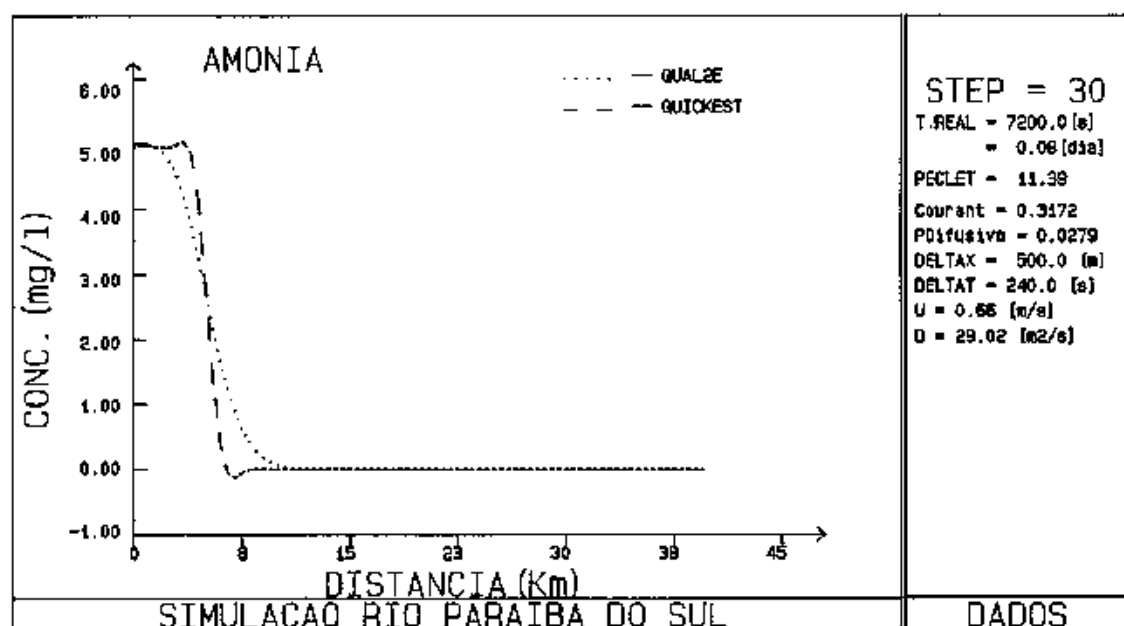


Fig. V.57- Comparação com QUAL2E para Amônia

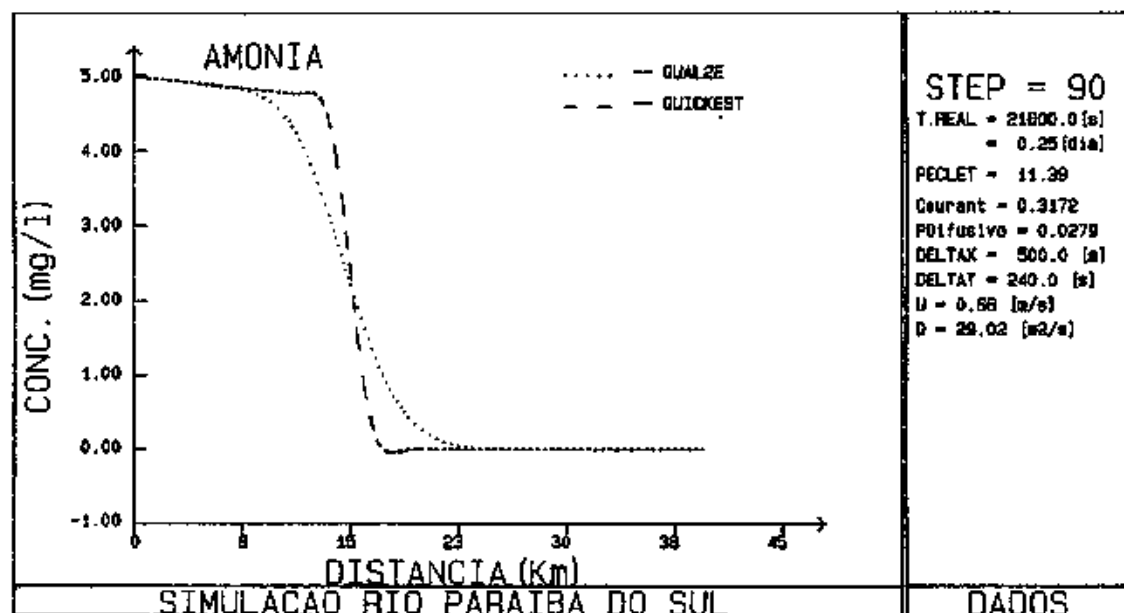


Fig. V.58- Comparação com QUAL2E para Amônia

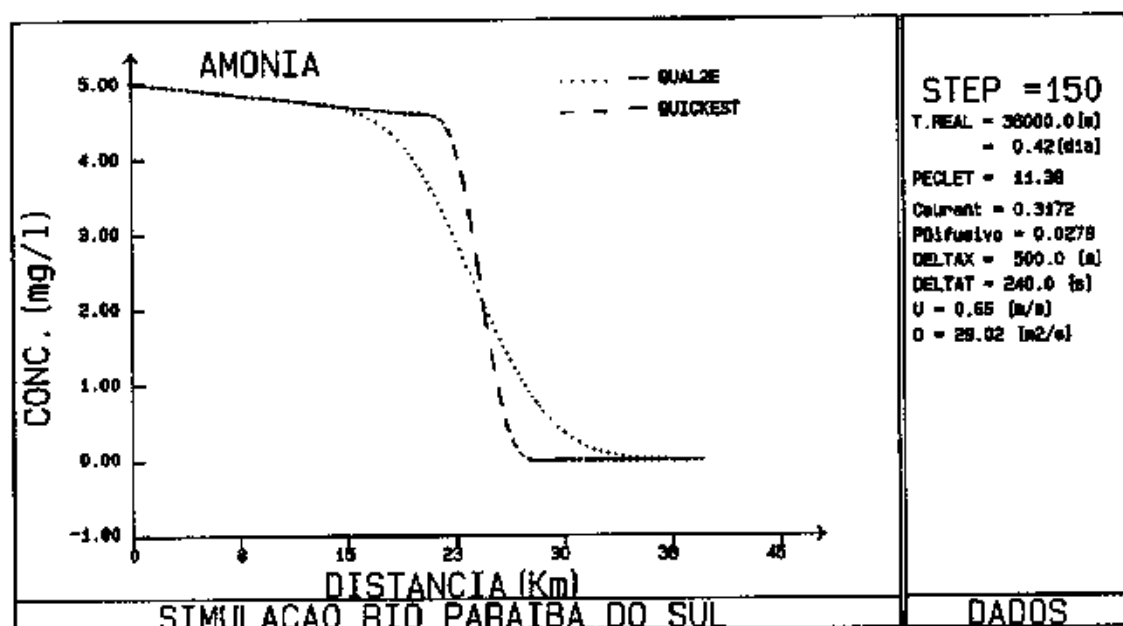


Fig.V.59- Comparação com QUAL2E para Amônia

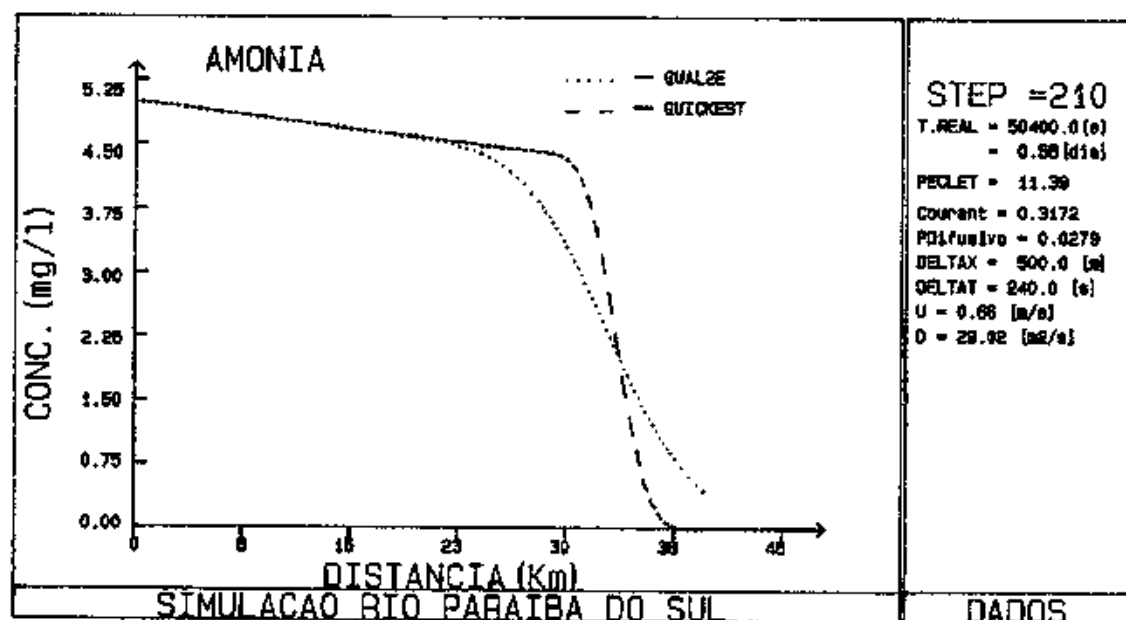


Fig.V.60- Comparação com QUAL2E para Amônia

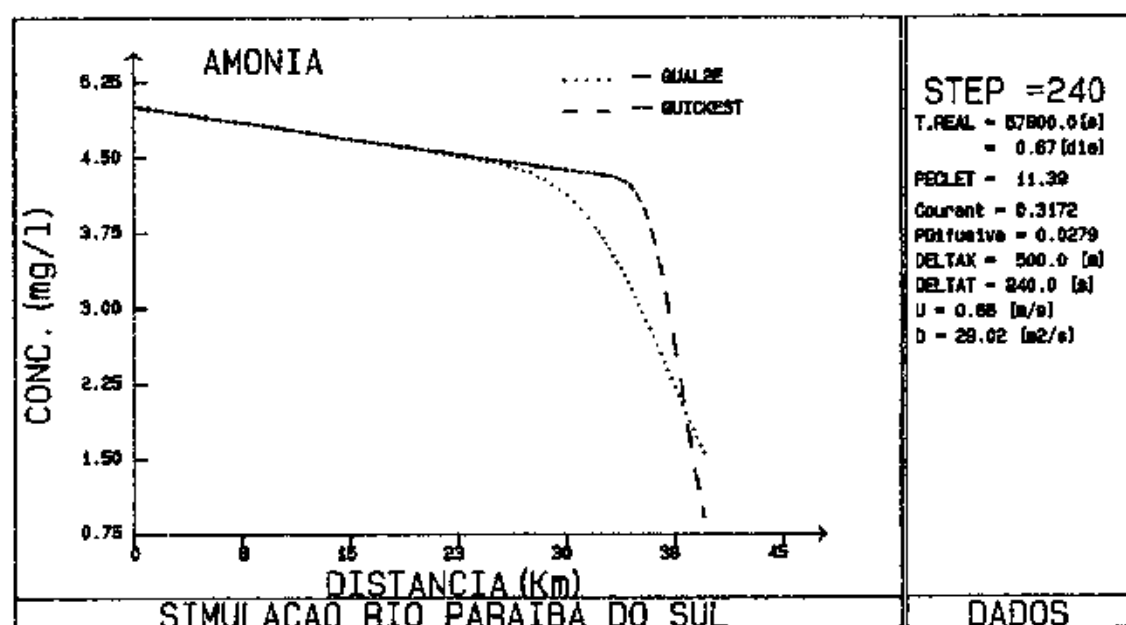


Fig. V. 61- Comparação com QUAL2E para Amônia

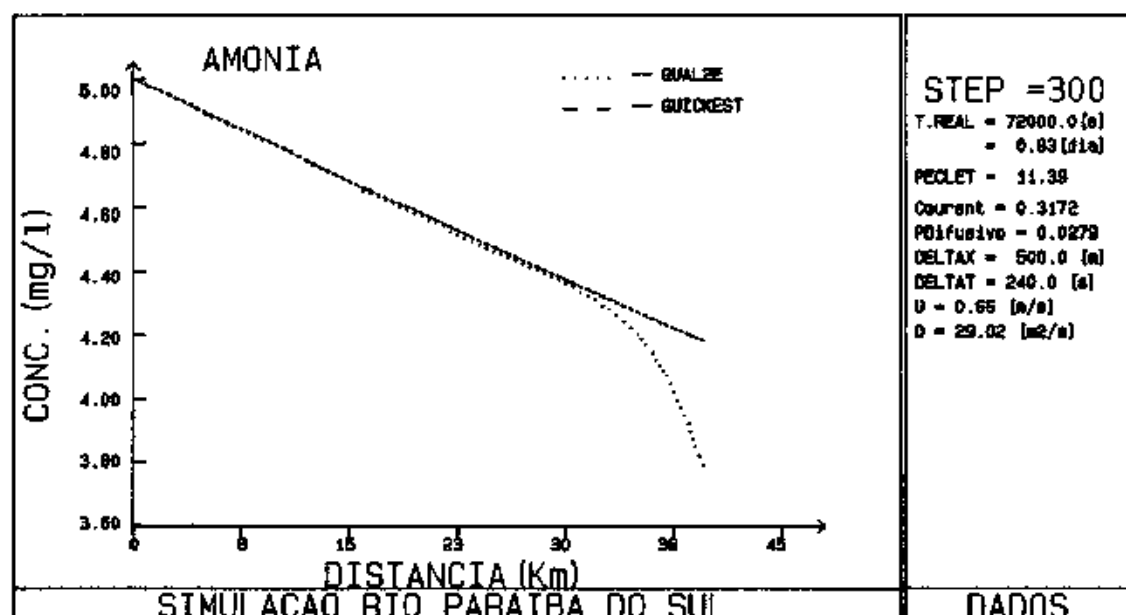


Fig. V. 62- Comparação com QUAL2E para Amônia

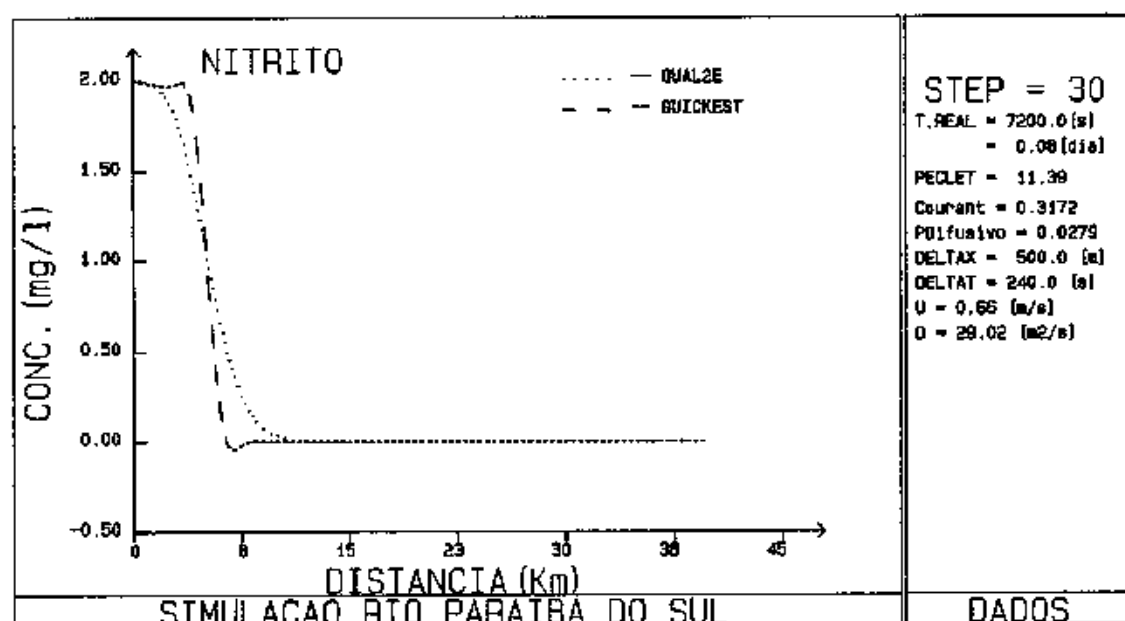


Fig. V. 63- Comparação com QUAL2E para Nitrito

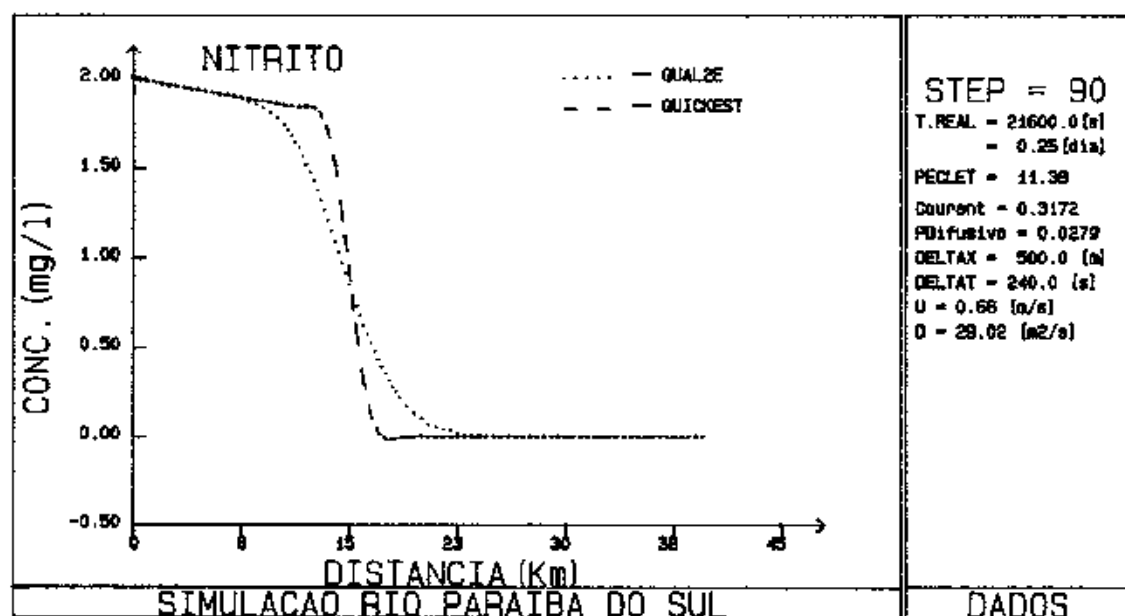


Fig. V. 64- Comparação com QUAL2E para Nitrito

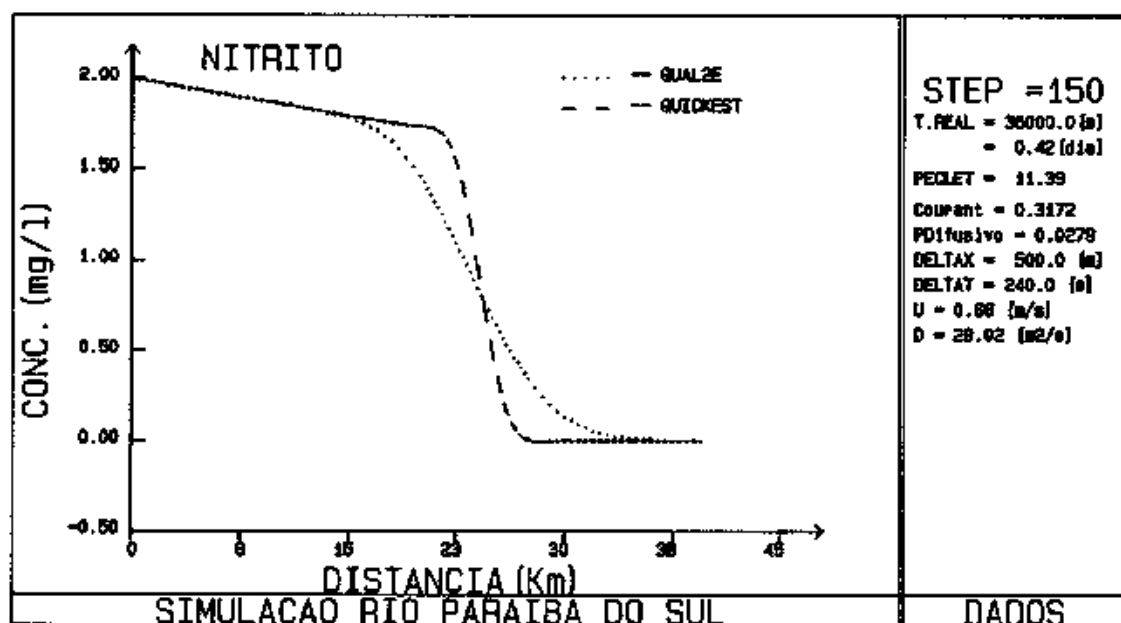


Fig.V.65- Comparação com QUAL2E para Nitrito

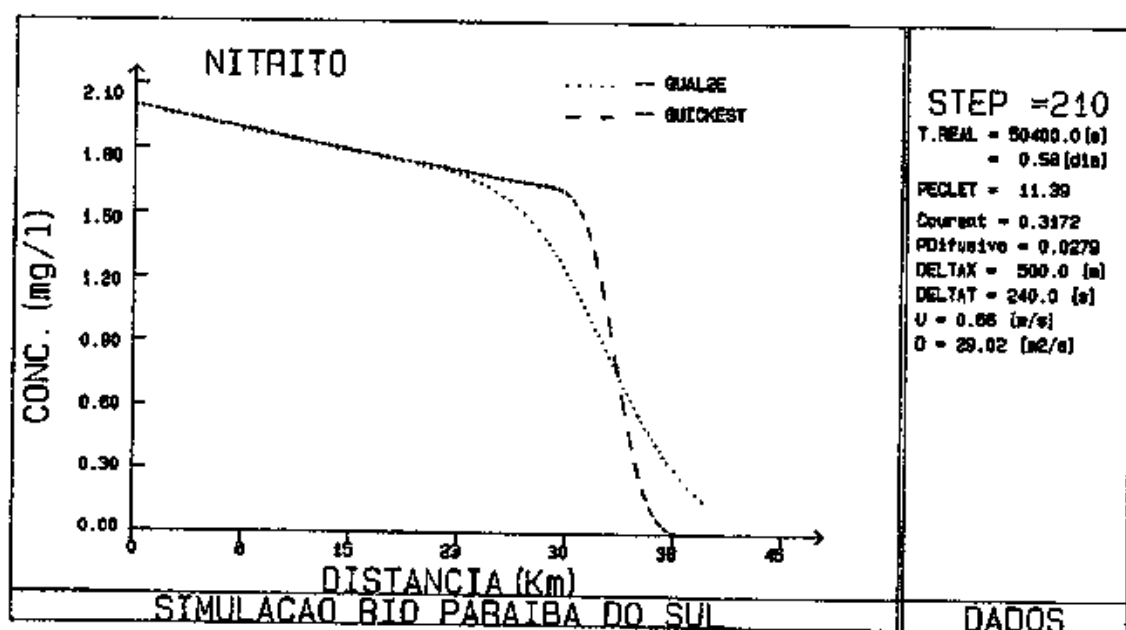


Fig.V.66- Comparação com QUAL2E para Nitrito

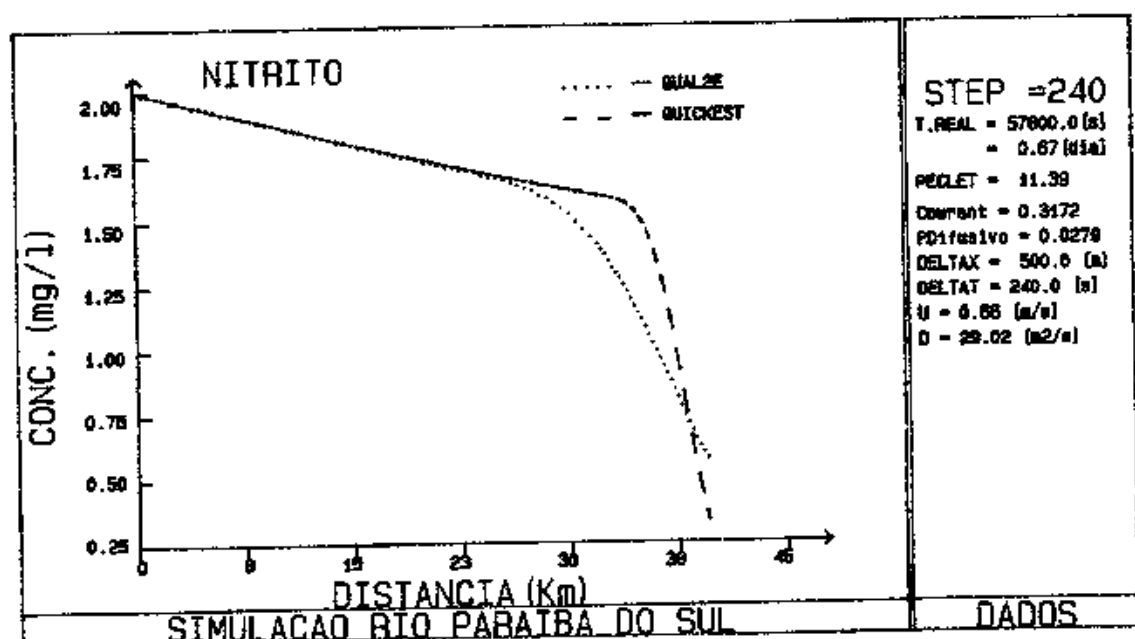


Fig.V.67- Comparação com QUAL2E para Nitrito

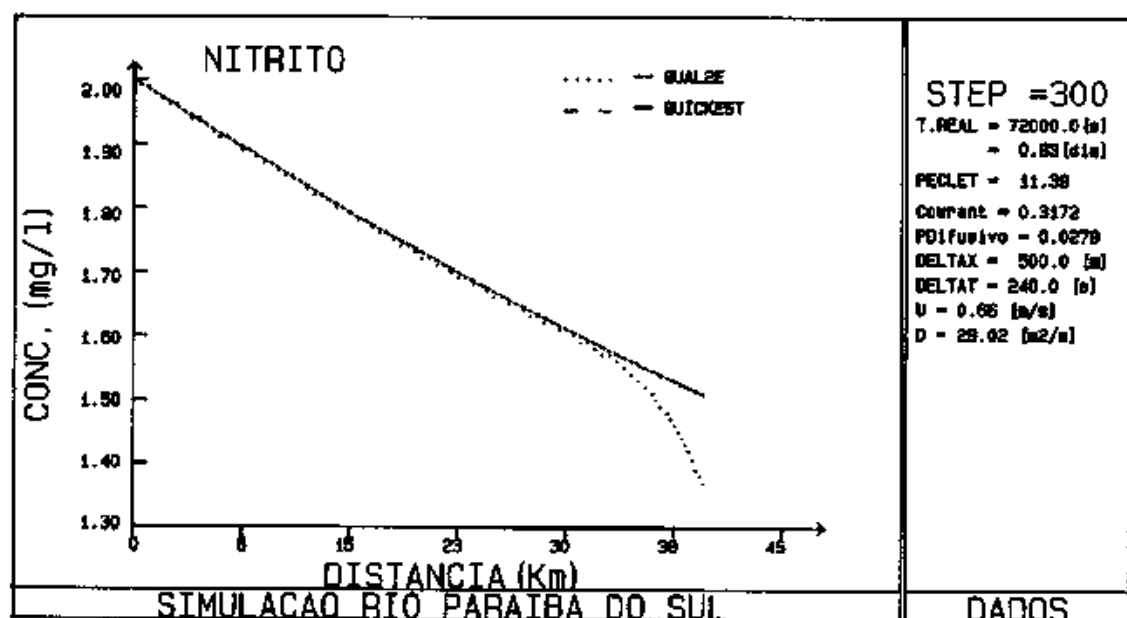


Fig.V.68- Comparação com QUAL2E para Nitrito

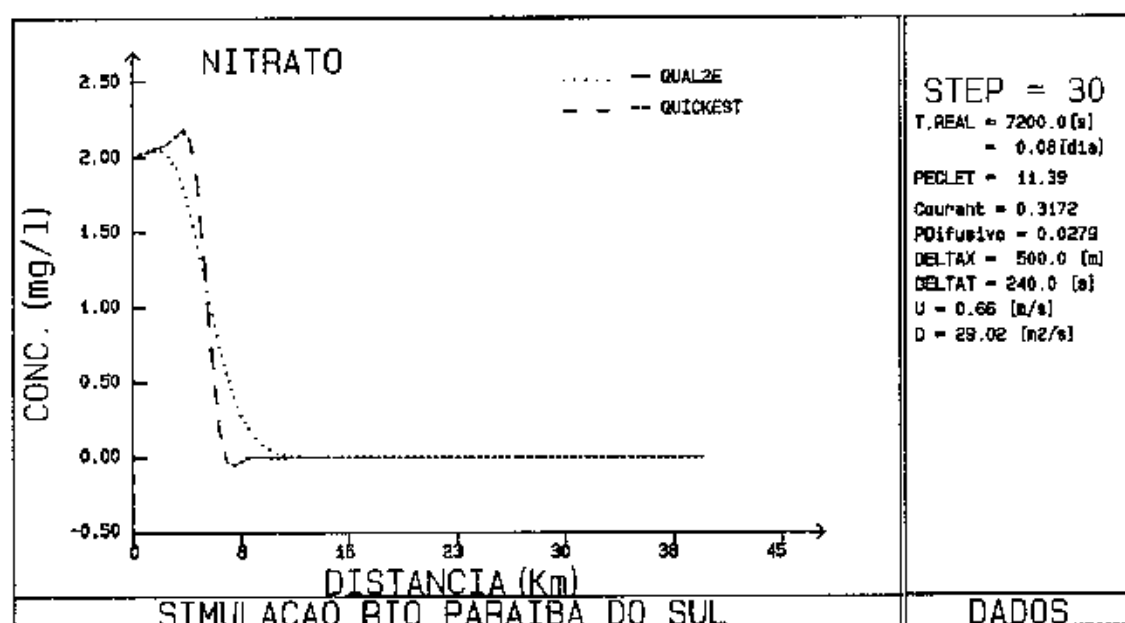


Fig. V.69- Comparação com QUAL2E para Nitrato

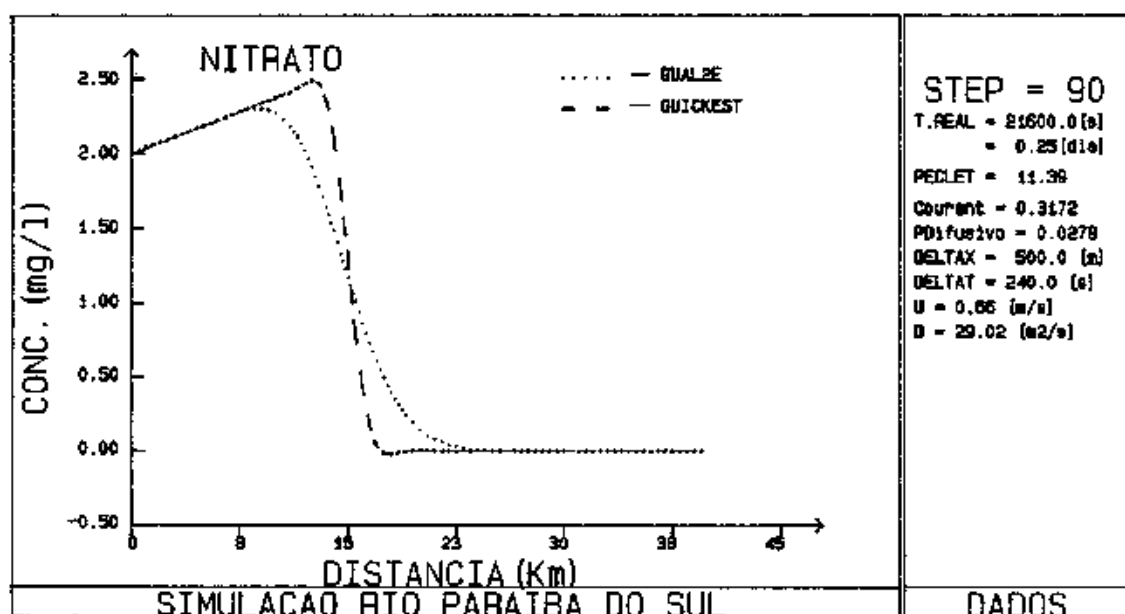


Fig. V.70- Comparação com QUAL2E para Nitrato

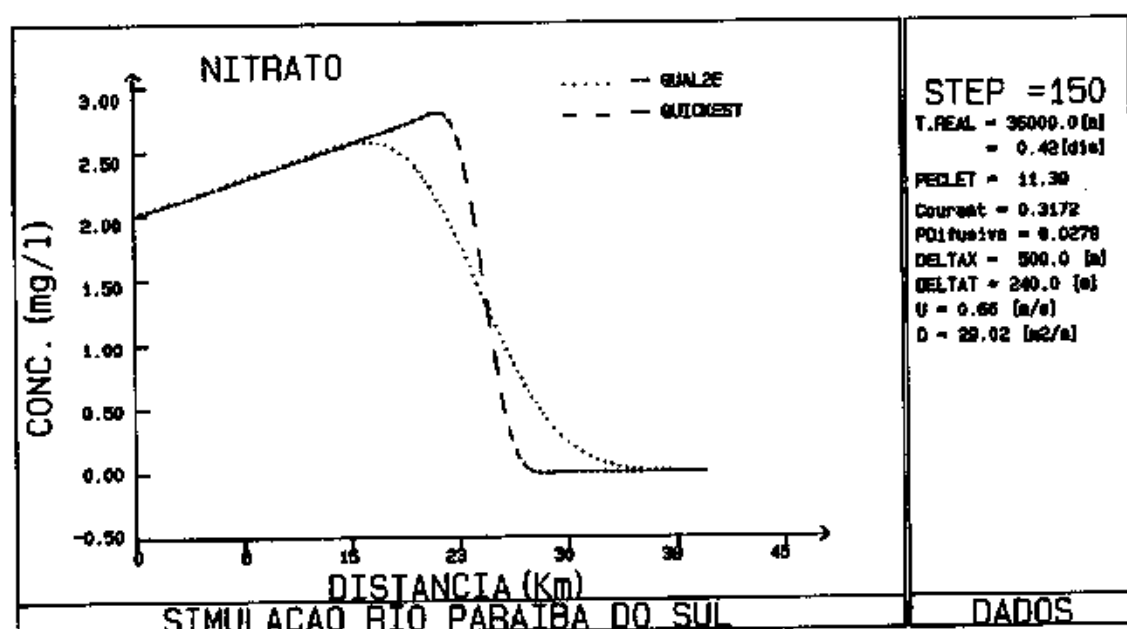


Fig. V.71- Comparação com QUAL2E para Nitrato

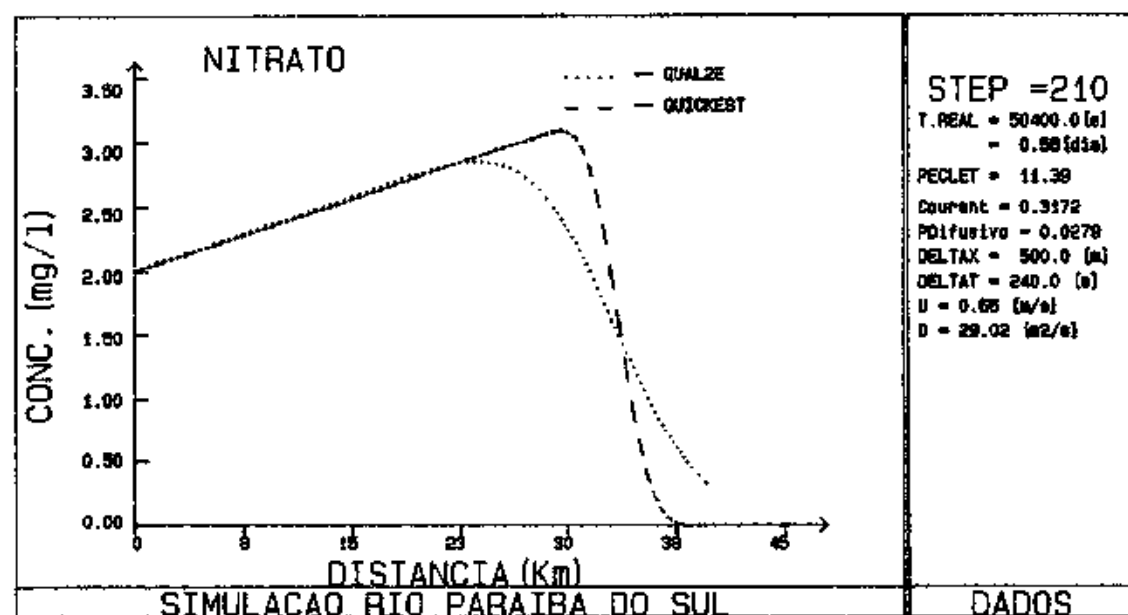


Fig. V.72- Comparação com QUAL2E para Nitrato

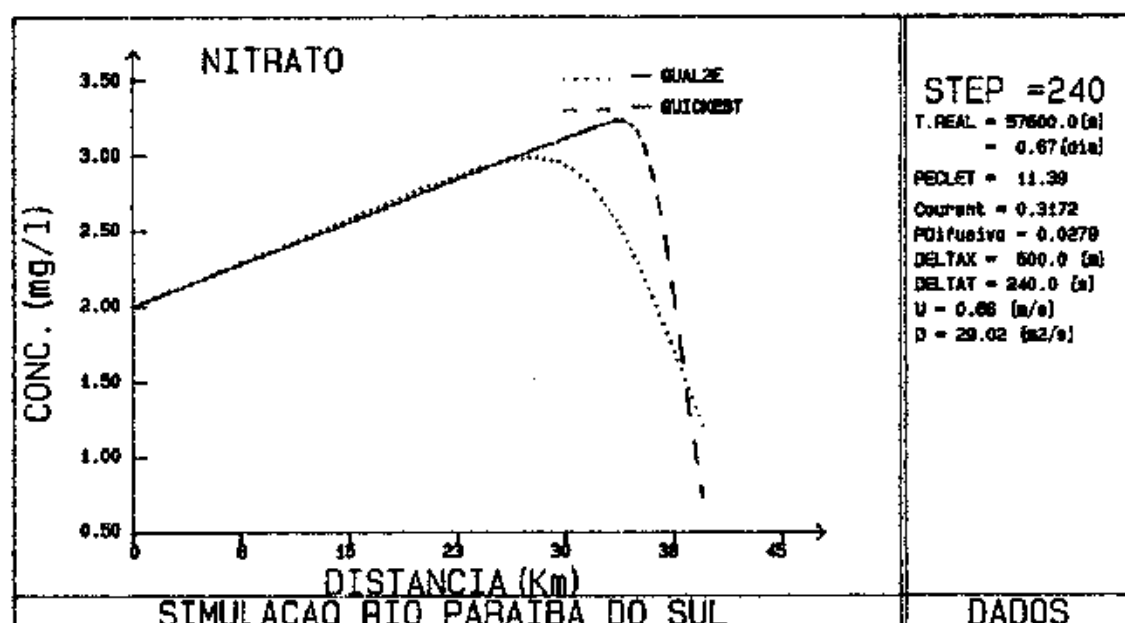


Fig.V.73- Comparação com QUAL2E para Nitrato

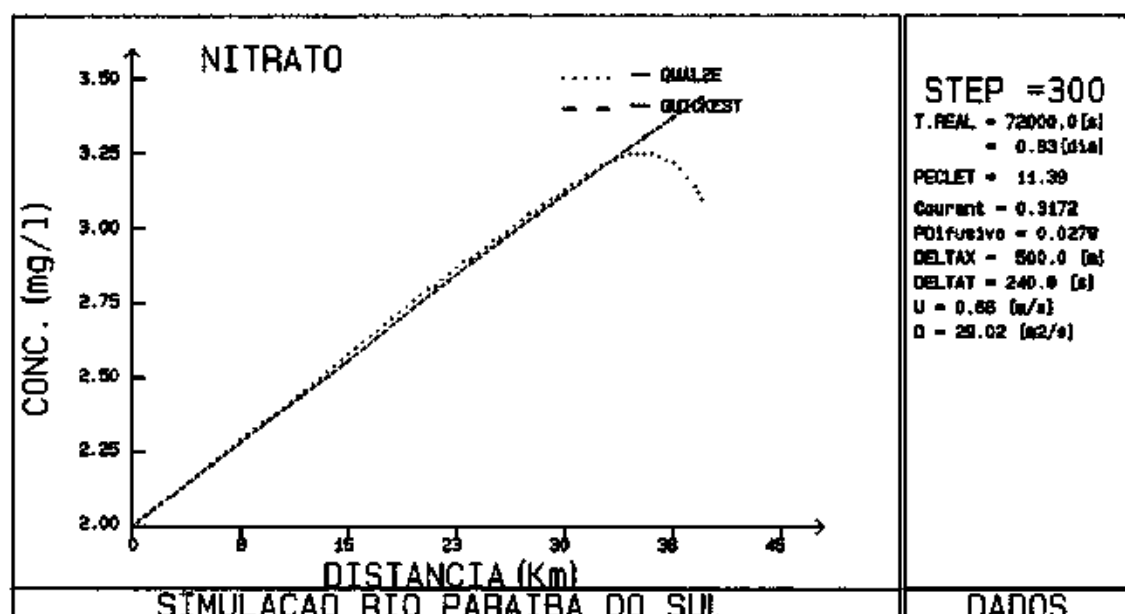


Fig.V.74- Comparação com QUAL2E para Nitrato

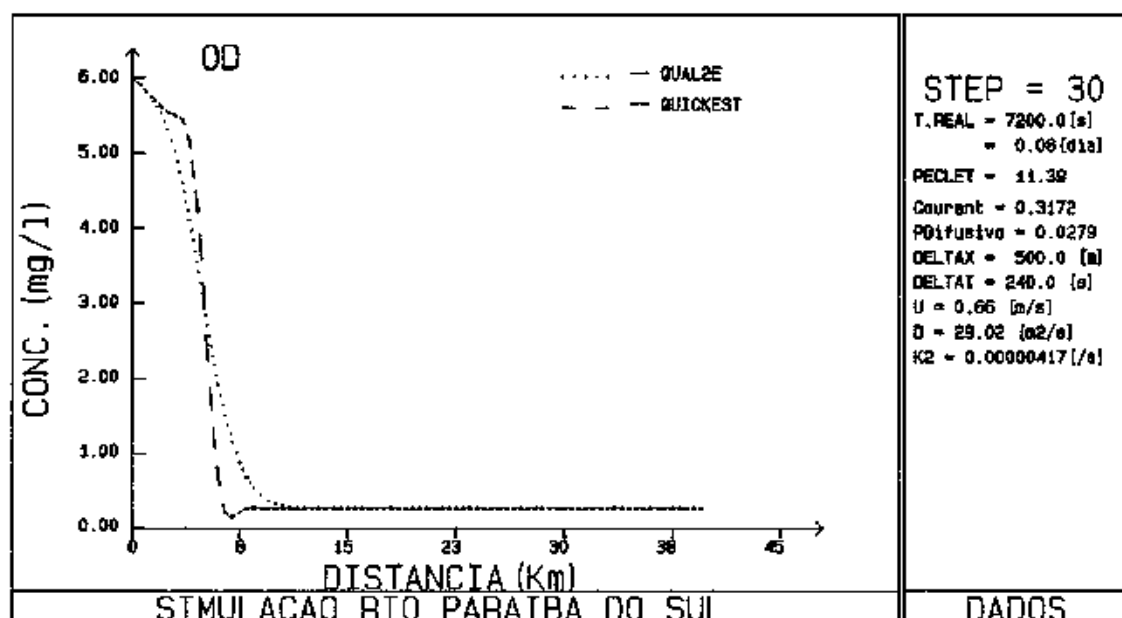


Fig. V. 75- Comparação com QUAL2E para OD

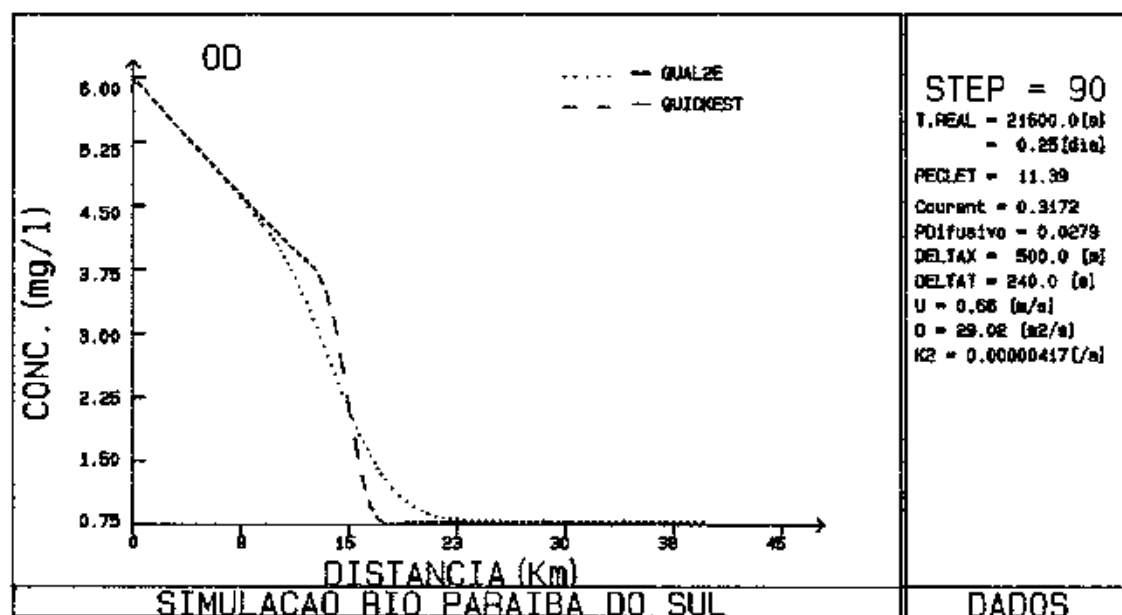


Fig. V. 76- Comparação com QUAL2E para OD

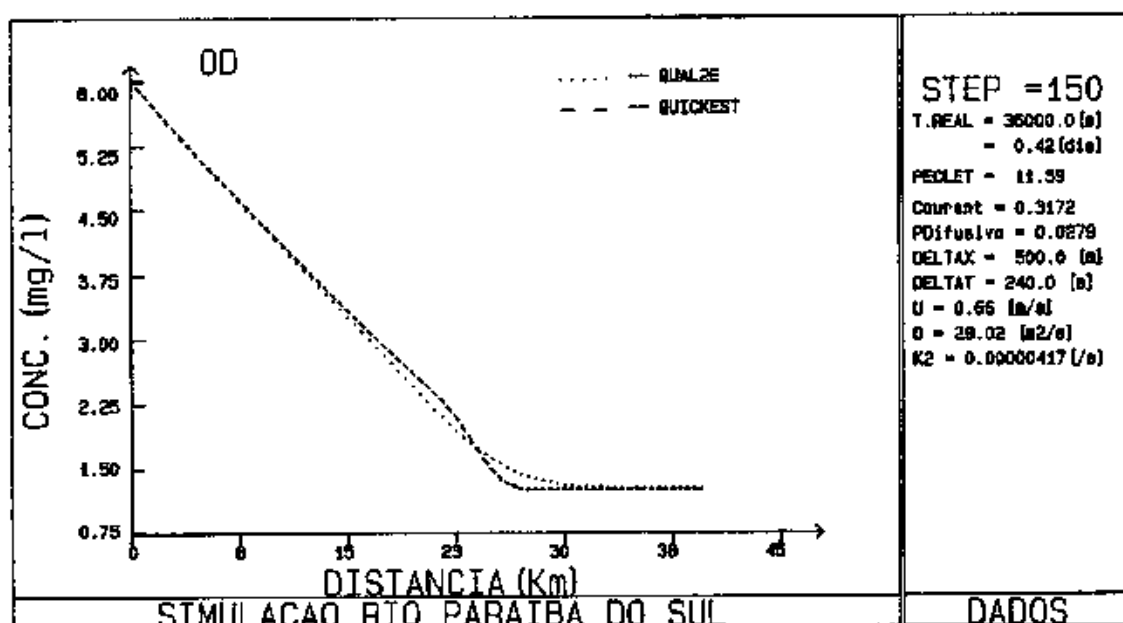


Fig.V.77- Comparação com QUAL2E para OD

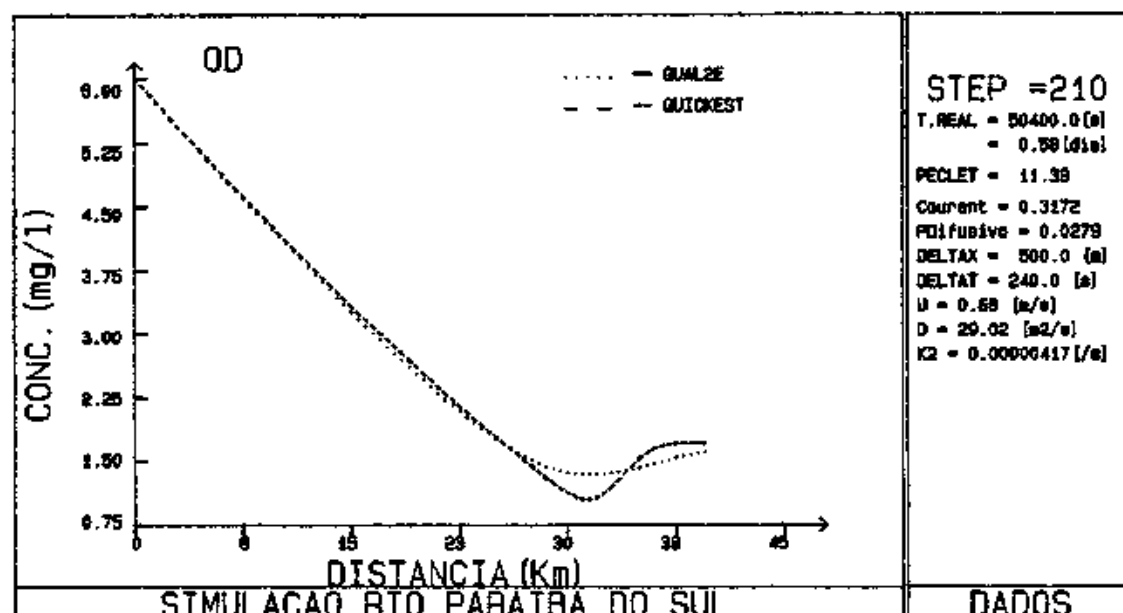


Fig.V.78- Comparação com QUAL2E para OD

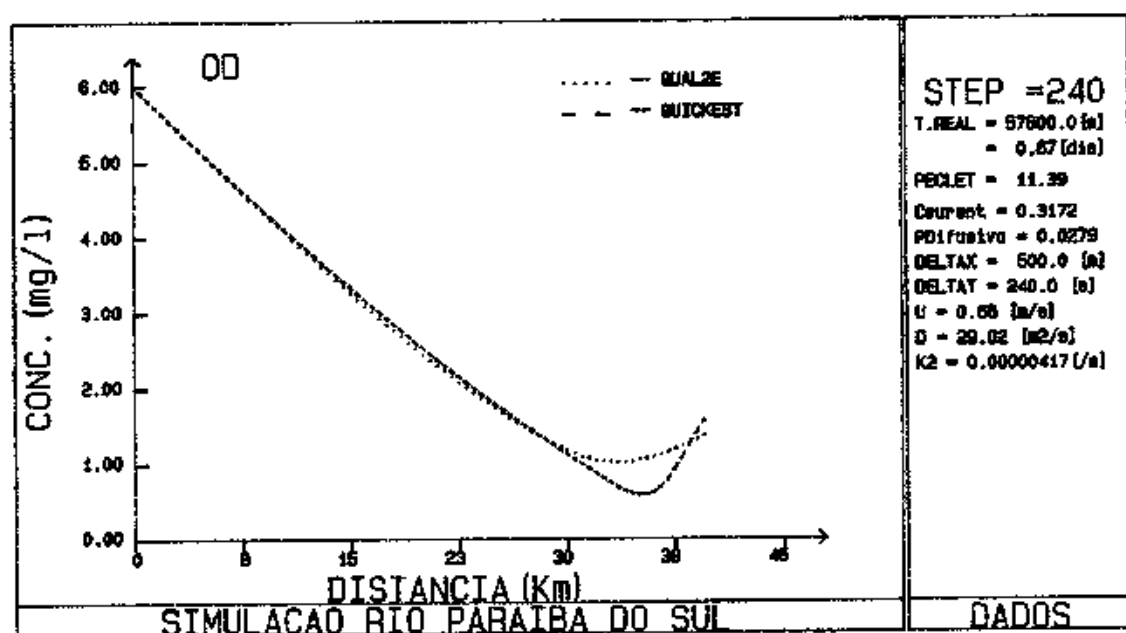


Fig. V.79- Comparação com QUAL2E para OD

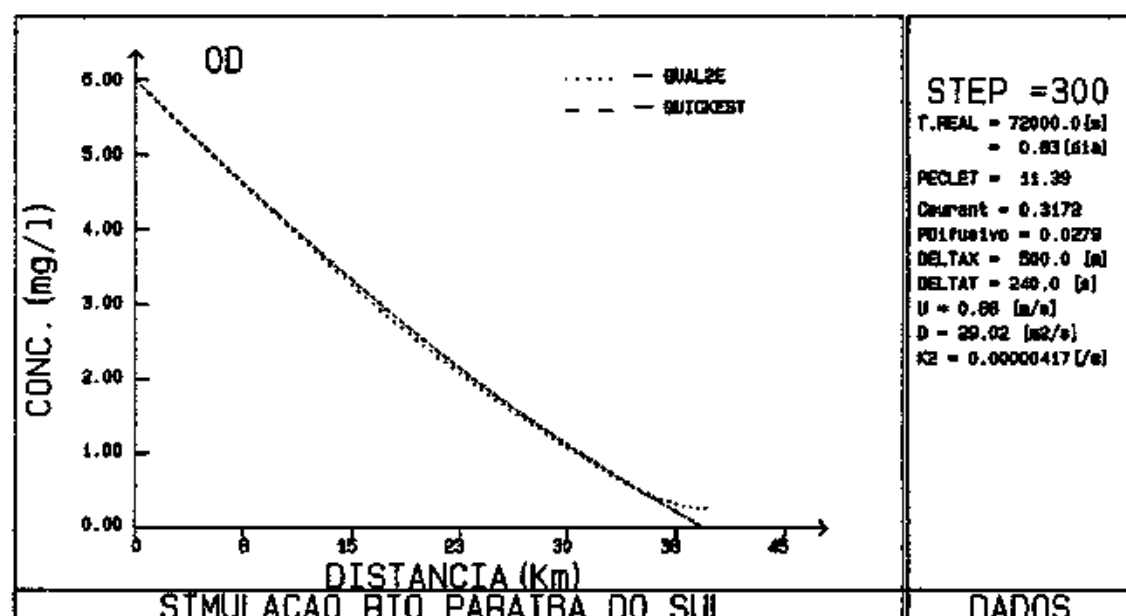


Fig. V.80- Comparação com QUAL2E para OD

Os dados utilizados na calibração do modelo de qualidade de água foram obtidos fundamentalmente de ensaios "in situ" com traçadores [15], realizados no rio Paraíba do Sul. Foram realizadas 4 (quatro) campanhas com traçadores fluorescentes para diferentes condições de escoamento, com vazões variando de 272 a 639 m³/s. A partir desses ensaios foi possível determinar os parâmetros de transporte e dispersão nas várias seções do rio e suas características hidrodinâmicas.

Ensaio de Campo

Um ensaio de traçadores consiste, basicamente, na injeção instantânea da substância traçadora em uma das seções do rio e na medição das respectivas concentrações do traçador nas seções a jusante, figura(V.81) .

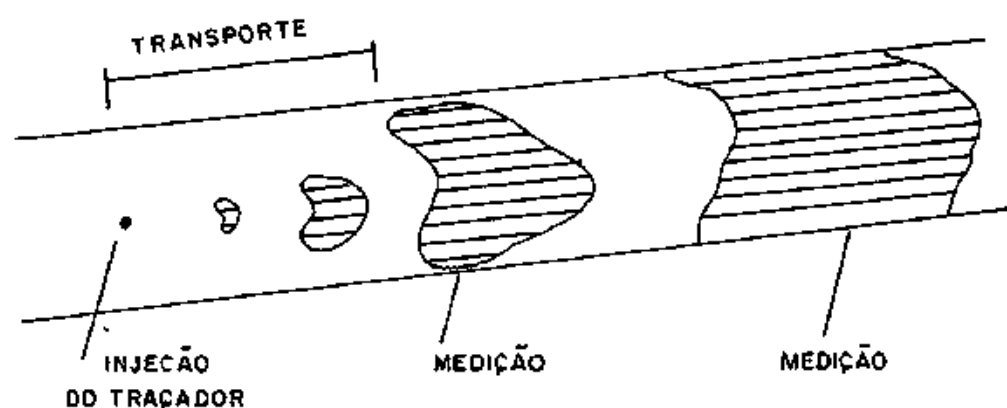


Fig. V.81- Esquema de ensaio de traçador.

Após a injeção e sob o efeito da advecção, as partículas de traçador misturadas com a água deslocam-se para jusante. Simultaneamente, sob o efeito conjunto da difusão molecular e da difusão turbulenta, inicia-se o processo de dispersão do traçador nas tres direções do espaço.

A dispersão na vertical completa-se rapidamente passando o processo a partir daí a ter características bidimensionais. A distância necessária para que a dispersão lateral se complete depende das características do rio e do escoamento. A dispersão longitudinal, quando se trata de substância conservativa, continua indefinidamente.

Os dois tipos de traçadores comumente utilizados em estudos ambientais são os radioativos e os fluorescentes.

Devido a facilidade de utilização e a maior economia, optou-se pela utilização de traçador fluorescente.

A medição das concentrações de traçador é feita tirando partido das suas características de fluorescência utilizando um aparelho específico , o fluorímetro .

O fluorímetro é um equipamento que mede a intensidade da luz emitida por uma amostra de água contendo uma substância fluorescente, sendo a intensidade da fluorescência emitida diretamente proporcional à quantidade de substância presente na amostra. Mediante calibração adequada, os valores de fluorescência dados pelo fluorímetro são transformados em valores de concentração de traçador.

SEÇÃO	LOCALIZAÇÃO	DISTÂNCIA A SEÇÃO INICIAL (Km)
0	Emissário da CSN	0.0
1	Pte. V. Redonda (RJ)	2.6
2	Pte. São Luís (BR-116)	9.8
3	Captação de Pinheral	19.3
4	Pte. Vargem Alegre	28.3
5	Captação Vargem Alegre	28.6
6	Elevatória de St ^a Cecília	39.6

Tabela V.1- Dados das seções de medição estabelecidas
no rio Paraíba do Sul



Fig. V.82- Localização das seções de medição
no rio Paraíba do Sul.

CAMPANHA N ^o	VAZÃO (m ³ /s)	SEÇÃO	D (m ² /s)	U (m/s)
1	272	1	10.80	0.72
		2	24.70	0.60
		3	28.50	0.63
		4	37.20	0.66
		5	38.00	0.64
		6	33.00	0.63
2	342	1	11.60	0.77
		2	28.20	0.84
		3	31.00	0.82
		4	28.70	0.86
		5	21.00	0.70
		6	31.00	0.85
3	639	1	6.30	0.72
		2	27.90	0.98
		3	—	—
		4	30.20	1.04
		5	28.00	0.96
		6	32.00	1.05
4	294	1	19.80	0.74
		2	31.00	0.79
		3	28.00	0.75
		4	31.70	0.78
		5	33.00	0.73
		6	36.00	0.75

Tabela V.2 - Resultados obtidos nas várias campanhas de medição.

5º EXEMPLO :

- Este exemplo visa comparar o modelo QUICKEST com os dados obtidos da Campanha Nº 4 realizada em 15/12/87 no rio Paraíba do Sul [15] para uma vazão de referência igual a $294 \text{ m}^3/\text{s}$. A figura (V.82) mostra a localização das seis seções situadas num trecho de 40 Km compreendido entre o ponto de confluência do emissário geral da CSN (Companhia Siderúrgica Nacional) com o rio Paraíba do Sul (Seção-0) e a elevatória de Santa Cecília em Barra do Piraí (Seção- 6). Os parâmetros U, D e A variam a cada trecho .

As figuras (V.83) a (V.86) mostram uma comparação entre as curvas de passagem medidas nas seções 3, 4, 5 e 6 e a calculada pelo modelo QUICKEST . O traçador utilizado é Sulforodamina B, simulado como conservativo. Os resultados simulados pelo modelo são bastante satisfatórios proporcionando um ajuste excelente aos dados obtidos no campo.

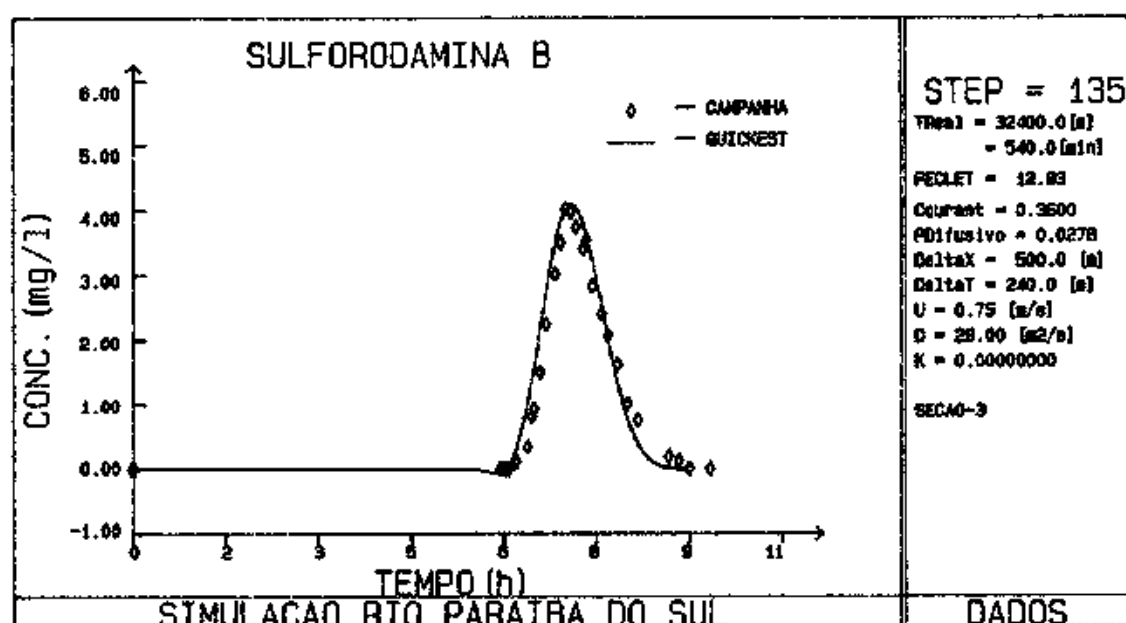


Fig.V.83- Curva de passagem medida e simulada na seção 3

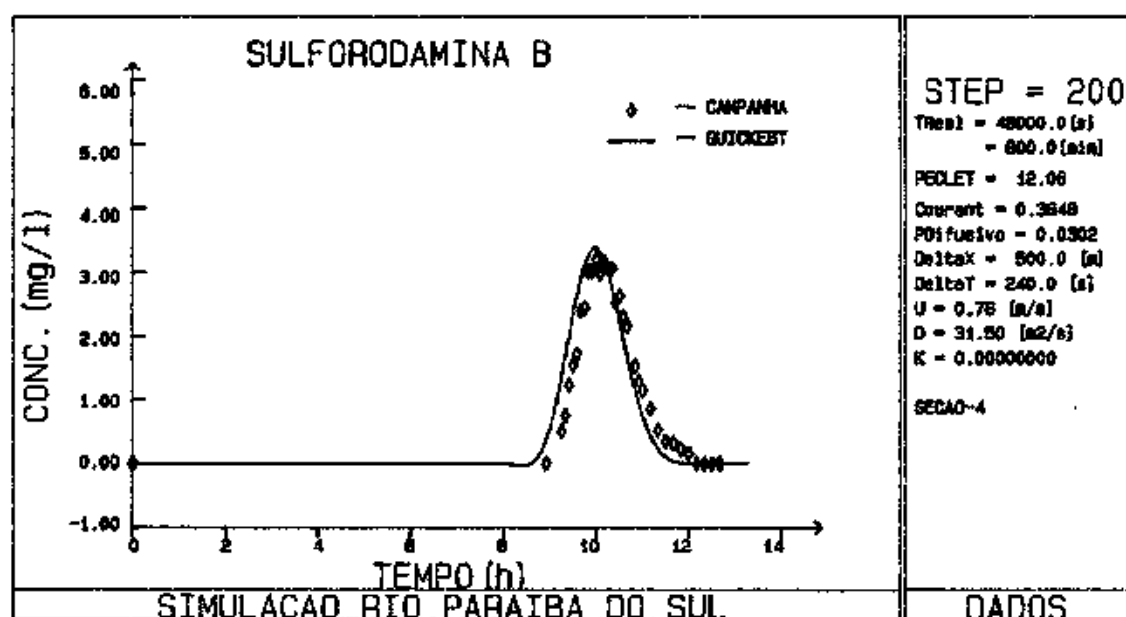


Fig.V.84- Curva de passagem medida e simulada na seção 4

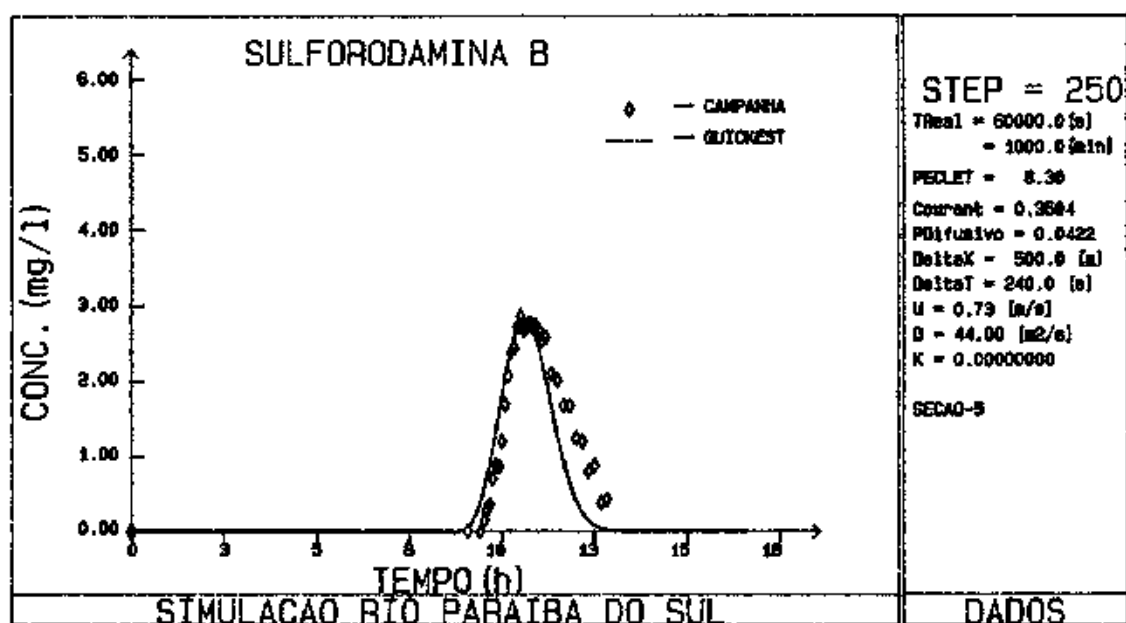


Fig.V.85- Curva de passagem medida e simulada na seção 5

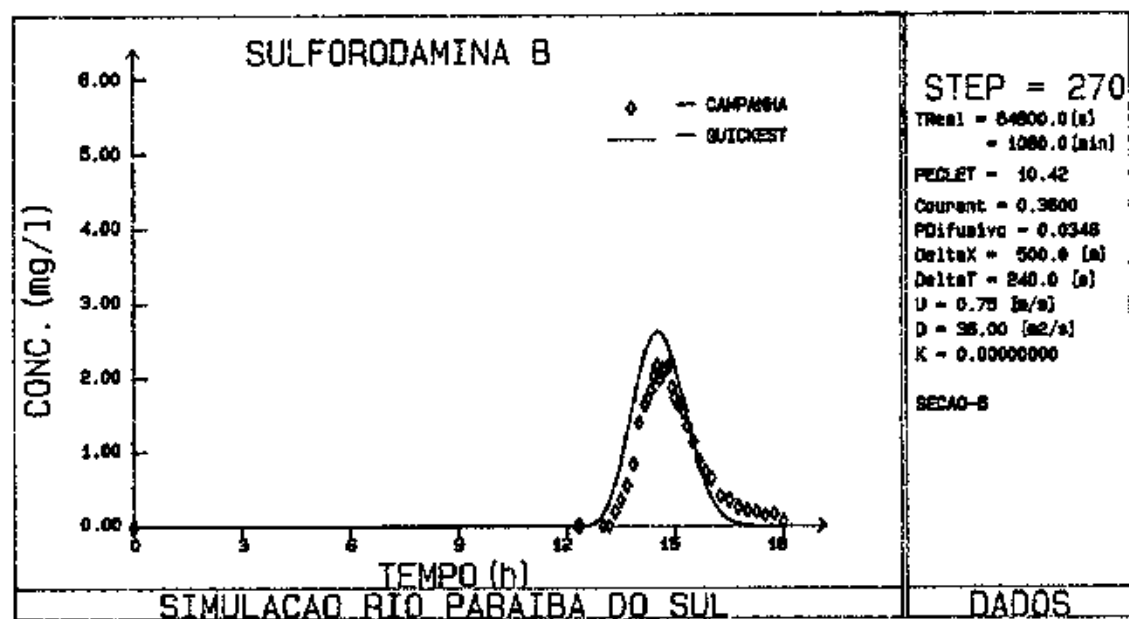


Fig.V.86- Curva de passagem medida e simulada na seção 6

CAPITULO VI

CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Um dos principais objetivos deste trabalho foi mostrar a potencialidade do esquema numérico QUICKEST de diferenças finitas aplicado à simulação do transporte e dispersão de poluentes biodegradáveis em rios.

Decidiu-se modelar oito efluentes de maior interesse (fenol, cianeto, demanda bioquímica de oxigênio, nitrogênio orgânico, amônia, nitrito, nitrato e oxigênio dissolvido) com base na equação de transporte de massa unidimensional, com termos de reação específicos para cada substância simulada. O modelo pode ser facilmente estendido para o estudo de outros efluentes, desde que se disponha de termos de reação adequados.

Os parâmetros de transporte e diluição utilizados foram obtidos anteriormente pelo Laboratório de Traçadores da COPPE/UFRJ através de medições realizadas no rio Paraíba do Sul [15].

O modelo é de fácil compreensão e versatilidade. O tempo de execução está relacionado com o número de constituintes do sistema e o número de passos de tempo simulados, mas o programa é suficientemente pequeno para poder ser usado em microcomputadores do tipo XT ou AT. Tipicamente, a solução do exemplo I demorou 1,5 minutos para 80 nós e 100 passos de tempo, em um micro-computador EBC/XT com co-processador aritmético.

Para se poder aplicar o modelo a um problema real faz-se necessária a obtenção de maior quantidade de dados geométricos e informações significativas de campo com relação aos dados de qualidade de água no trecho simulado, de forma a se obter uma calibração perfeita do modelo.

Baseado nos resultados obtidos com este trabalho, recomenda-se a utilização do modelo QUICKEST para controle e planejamento de poluição em rios, podendo ainda ser empregado para avaliar sua capacidade de recuperação para diferentes níveis de descarga de poluentes.

REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] LEONARD , B. P. , "A Stable and Accurate Convective Procedure Based on Quadratic Upstream Interpolation" . Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering, vol. 19, pp. 59-98, 1979.
- [2] FISCHER, H.B.; LIST, E.J.; KOH, R.C.Y.; IMBERGER, J. and BROOKS, N.H., Mixing in Inland and Coastal Waters, Academic Press, New York , 1979 .
- [3] JAMES, A. (Ed.), An Introduction to Water Quality Modelling, Wiley, Chichester, 1984.
- [4] BROWN, L.C. and BARNWELL Jr., T.O., Computer Program Documentation for the Enhanced Stream Water Quality Model QUAL2E, U. S. Environmental Protection Agency, Athens, Georgia, 1985.
- [5] HOLLY, F.M.; CUNGE, J.A.; VERWEY, A. , Practical Aspects of Computational River Hydraulics , Pitman Press, London, 1980 .
- [6] ROACHE, P. J., Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers, Albuquerque, New Mexico, USA, 1972.
- [7] WAITE, D. T., Principles of Water Quality, Academic Press, New York, 1984.

- [8] SMITH, G.D., Numerical Solution of Partial Differential Equations : Finite Difference Methods . Clarendon Press, Oxford , 3^aEdição, 1985 .
- [9] LAPIDUS, L. and PINDER, G.F., Numerical Solutions of Partial Differential Equations in Science and Engineering, Wiley , New York, 1982 .
- [10] TAYLOR, G.I. , Dispersion of Soluble Matter in Turbulent Flow through a Pipe, Proc. Royal Society of London, Series A, Vol. 223, pg. 446-468, 1954 .
- [11] WHITEHEAD, P.G., The Application of Mathematical Models of Water Quality and Pollutant Transport : an International Survey , UNESCO Technical Documents in Hydrology, Project IHP-II - A.1.7.1., Paris, 1984 .
- [12] VAN GENUCHTEN, M.Th.; ALVES, W. J. Analytical Solutions of The One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transporte Equation, Technical Bulletin 1661, United States Department of Agriculture, Riverside, California, USA, 1982 .
- [13] PRODANOFF, J.H.A., Modelo Matemático para Acompanhamento de Acidentes Ecológicos em Rios , Projeto Final de Curso, Escola de Engenharia. UFRJ, 1988.

- [14] BOGE, T.R., WROBEL, L.C. e PRODANOFF, J.H.A.,
 Comparação de Modelos Matemáticos de Qualidade de Água
 Aplicados ao Rio Paraíba do Sul. VIII Simpósio
 Brasileiro de Recursos Hídricos, Foz do Iguaçu, 1989.
- [15] ROLDÃO J.S.F. e SOARES, J.H.P., Determinação da
 Capacidade de transporte e Dispersão do Rio Paraíba
 do Sul (RJ) : Thecho Volta Redonda - Santa Cecília ,
Projeto COPPETEC ET-15296 , COPPE/UFRJ, Rio de
 Janeiro, 1988.
- [16] O'CONNOR, D.J. and DOBINS, W.E. , Mechanism of
 Reaeration in Natural Stream , Am. Soc. Civil
 Engineers Trans. , v. 123, p. 641-684, 1958.
- [17] The Paraíba do Sul River Water Quality Study ,
Hydroscience , Inc. BRA - 73/003 , Technical Report 6,
 New Jersey, U.S.A. , 1977.