UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Instituto de Física e Matemática
Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática

Dissertação

Dispersão de contaminantes em rios e canais através do método GILTT

Renata Engrácio de Oliveira

Pelotas, 2015

Renata Engrácio de Oliveira

Dispersão de contaminantes em rios e canais através do método GILTT

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática do Instituto de Física e Matemática da Universidade Federal de Pelotas, como requisito parcial à obtenção do título de Mestre em Modelagem Matemática.

Orientador: Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros
Coorientador: Prof. Dr. Fabrício Pereira Härter

Pelotas, 2015

Dados de catalogação na fonte:
Ubirajara Buddin Cruz – CRB 10/901
Biblioteca de Ciência & Tecnologia - UFPel

O48d Oliveira, Renata Engrácio de
Dispersão de contaminantes em rios e canais através do método GILTT / Renata Engrácio de Oliveira. – 59f. : il. – Dissertação (Mestrado). Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática.Universidade Federal de Pelotas. Instituto de Física e Matemática, 2015. – Orientador Régis Sperotto de Quadros ; coorientador Fabrício Pereira Härter.

1.GILTT. 2.Solução analítica. 3.Dispersão de contaminantes. 4.Advecção-difusão. 5.Meios aquáticos. I.Quadros, Régis Sperotto de. II.Härter, Fabrício Pereira. III.Título.

CDD: 628.168

Banca examinadora:

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros (Orientador)

Prof. Dr. Cláudio Zen Petersen

Profª. Drª. Daniela Buske

Prof. Msc. Guilherme Jahnecke Weymar

Prof. Dr. Hugo Alexandre Soares Guedes

Dedico este trabalho aos meus pais.

AGRADECIMENTOS

A Deus pela vida e por me dar forças para superar as dificuldades;

Aos meus pais, Renato e Rosa, pelo amor, dedicação e apoio incondicional prestados no decorrer de toda a minha vida;

Ao meu noivo Christian, pelo companherismo e incentivo;

A minha família, especialmente a minha irmã Rafaela e a minha avó Maria, pelo carinho e motivação;

Aos professores Régis e Daniela pela orientação, confiança e ensinamentos compartilhados durante a realização deste trabalho;

Aos meus colegas de mestrado e colegas de trabalho pela amizade e palavras de incentivo ao longo desta etapa;

A UFPel pela oportunidade de estudo e pelo incentivo à qualificação;

E as pessoas que de alguma forma contribuíram para a realização e conclusão deste trabalho.

A todos, muito obrigada!

RESUMO

OLIVEIRA, Renata Engrácio de. **Dispersão de contaminantes em rios e canais através do método GILTT**. 2015. 59 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2015.

Diante do contexto atual de poluição e escassez da água, várias pesquisas têm estudado a questão da dispersão de poluentes em meios aquáticos. Tendo em vista que pesquisas experimentais são caras e apresentam problemas operacionais, a modelagem matemática se mostra uma ferramenta útil para o entendimento desses fenômenos. O principal objetivo deste trabalho é apresentar uma solução analítica para a equação de advecção-difusão, a qual modela o problema da dispersão de contaminantes em rios e canais. Para tanto, são considerados os modelos bidimensional, no plano longitudinal e vertical, e tridimensional em regime permanente com perfis de velocidade e coeficientes de difusividade turbulenta não uniformes. A abordagem utilizada para a resolução dos modelos é o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Por fim, são apresentadas simulações numéricas e algumas comparações com dados experimentais e resultados numéricos disponíveis na literatura.

Palavras-chave: GILTT; solução analítica; advecção-difusão; dispersão de contaminantes; meios aquáticos.

ABSTRACT

OLIVEIRA, Renata Engrácio de. **Dispersion of contaminants in rivers and channels through the method GILTT**. 2015. 59 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Matemática) – Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2015.

In today's context of water pollution and scarcity, several research have studied the issue of pollutants dispersion in aquatic environments. Given that experimental research are expensive and present operational problems, mathematical modeling proves a useful tool for understanding these phenomena. The aim of this work is to present an analytical solution for advection-diffusion equation, which models the problem of contaminant dispersion in rivers and canals. Therefore, are considered the two-dimensional, in the longitudinal vertical plane, and three-dimensional models in steady state with velocity profiles and turbulent diffusivity coefficients non-uniform. The approach for the resolution of models is the GILTT method (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). Finally, are presented numerical simulations and some comparisons with experimental data and numerical results available in literature.

Keywords: GILTT; analytical solution; advection-diffusion; contaminants dispersion; aquatic environments.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 Ilustração do modelo conceitual para o caso bidimensional no plano longitudinal e vertical. 26

Figura 2 Perfil de velocidade turbulenta em função da profundidade. 38

Figura 3 Perfil de difusividade vertical turbulenta em função da profundidade. 38

Figura 4 Validação do modelo analítico bidimensional em Z = 0,1 comparado com resultados da literatura (BARROS, 2004) e (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984). 42

Figura 5 Gráfico de espalhamento dos dados de concentração observados no experimento 1 (C_o) em comparação com os dados preditos pelo modelo (C_p). 43

Figura 6 Comportamento da concentração de poluentes C em Z = 0,1 para as distâncias X = 10; 30; 50. 45

Figura 7 Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para quatro posições de fonte (Z_s = 0,2; Z_s = 0,5; Z_s = 0,75; Z_s = 1) e três profundidades: (a) Z = 0,1; (b) Z = 0,5; (c) Z = 0,9. 46

Figura 8 Perfil vertical da concentração de poluentes C para três distâncias (X = 0,5; X = 2; X = 10) e quatro posições de fonte: (a) Z_s = 0,2; (b) Z_s = 0,5; (c) Z_s = 0,75; (d) Z_s = 1. 48

Figura 9 Validação do modelo analítico bidimensional em Z = 0,3 comparado com resultados da literatura (BARROS, 2004) e (NOKES; WOOD, 1988). 49

Figura 10 Gráfico do comportamento da concentração de poluentes C considerando a fonte poluidora localizada no ponto (0; 0; 0,75). 51

Figura 11 Gráfico do comportamento da concentração de poluentes C considerando a fonte poluidora localizada no ponto (0; 0,5; 0,75). 52

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 Parâmetros hidráulicos do experimento 1 36
Tabela 2 Parâmetros hidráulicos do experimento 2 37

Tabela 3 Avaliação estatística do modelo bidimensional utilizando o experimento 1 42
Tabela 4 Comportamento da concentração de poluentes C em Z = 0,1 para as distâncias X = 10; 30; 50 44
Tabela 5 Comportamento da concentração de poluentes C em Y = 0 e Z = 0,5 para as distâncias X = 10; 40; 80 50
Tabela 6 Comportamento da concentração de poluentes C em Y = 0,05 e Z = 0,5 para as distâncias X = 10; 40; 80 50

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

A, B	matrizes de coeficientes do problema transformado
c	concentração de um contaminante
c_0	concentração inicial de um contaminante
$\bar{c}$	concentração média de um contaminante
$\overline{c}_n$	coeficiente da expansão em série do problema bidimensional
$\overline{c}_j$	coeficiente da expansão em série do problema tridimensional
C	concentração adimensional de um contaminante
C_o	concentração observada experimentalmente
C_p	concentração predita pelo modelo
C_{eq}	concentração de equilíbrio
$CITT$	*Classic Integral Transform Technique*
COR	coeficiente de correlação
d	comprimento do rio ou canal
D	matriz diagonal dos autovalores da matriz F
$E(x)$	matriz de incógnitas do problema transformado
EDO	Equação Diferencial Ordinária
F	matriz de coeficientes do problema transformado na qual $F = A^{-1}B$
$FA2$	fator de dois
FB	fração de inclinação
FS	desvio fracional padrão
G	matriz dos autovetores da matriz F
$GITT$	*Generalized Integral Transform Technique*
$GILTT$	*Generalized Integral Laplace Transform Technique*
h	profundidade do rio ou canal
I	matriz identidade
J	número de autovalores no somatório do problema tridimensional

K_y coeficiente de difusão turbulenta transversal adimensional

K_z coeficiente de difusão turbulenta vertical adimensional

l largura do rio ou canal

$M(x)$ matriz da transformada inversa de $E(x)$

N número de autovalores no somatório do problema bidimensional

$NMSE$ erro quadrático médio normalizado

Q intensidade da fonte

S termo fonte

u velocidade instantânea do escoamento na direção x

U perfil de velocidade adimesional na direção x

$\bar{u}$ componente média do escoamento na direção x

u' componente turbulenta do escoamento na direção x

u^* velocidade de atrito

$\overline{u'c'}$ fluxo turbulento do contaminante na direção x

$\overline{v'c'}$ fluxo turbulento do contaminante na direção y

$\overline{w'c'}$ fluxo turbulento do contaminante na direção z

v velocidade instantânea do escoamento na direção y

$\bar{v}$ componente média do escoamento na direção y

v' componente turbulenta do escoamento na direção y

x componente longitudinal

X componente longitudinal adimensional

y componente lateral

y_s posição da fonte poluidora na direção y

w velocidade instantânea do escoamento na direção z

$\bar{w}$ componente média do escoamento na direção z

w' componente turbulenta do escoamento na direção z

z componente vertical

Z componente vertical adimensional

z_s posição da fonte poluidora na direção z

LISTA DE SÍMBOLOS

α_j	autovalores do problema de Sturm-Liouville na variável y
β_n	autovalores do problema de Sturm-Liouville na variável z
δ	função delta de Dirac
γ	coeficiente de degradação química adimensional
ε_x	coeficiente de difusão turbulenta longitudinal
ε_y	coeficiente de difusão turbulenta transversal
ε_z	coeficiente de difusão turbulenta vertical
κ	constante de Von Kármán
λ	coeficiente de degradação química da substância
ρ	densidade do fluido
σ_o	desvio padrão observado
σ_p	desvio padrão predito
τ_0	tensão de cisalhamento
Φ_j	autofunções do problema de Sturm-Liouville na variável y
Ψ_n	autofunções do problema de Sturm-Liouville na variável z

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO 13

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA 15

3 MODELO MATEMÁTICO 21
3.1 A equação de advecção-difusão 21
3.2 Modelo bidimensional no plano longitudinal e vertical 25
3.2.1 Solução do modelo 27
3.3 Modelo tridimensional 31
3.3.1 Solução do modelo 32

4 DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO 36
4.1 Dados experimentais 36
4.1.1 Experimento 1 36
4.1.2 Experimento 2 37
4.2 Parametrizações 37
4.2.1 Perfil de velocidade 37
4.2.2 Coeficiente de difusão 38
4.3 Dados estatísticos 39

5 RESULTADOS 41
5.1 Modelo bidimensional no plano longitudinal e vertical 41
5.2 Modelo tridimensional 49

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS 54

REFERÊNCIAS 55

1 INTRODUÇÃO

Apontada como um dos principais problemas ambientais da atualidade, a poluição das águas, causada principalmente pelo crescimento populacional acelerado e pelo desenvolvimento industrial, vem se tornando tema de debates no mundo inteiro.

Destacam-se como principais fatores que contribuem para a degradação dos corpos hídricos os despejos de esgotos, aterros sanitários, pesticidas utilizados na agricultura e diversos tipos de efluentes industriais (BRAGA et al., 2005). Comumente, as substâncias geradas por essas atividades são lançadas nos meios aquáticos sem nenhuma forma de tratamento e acabam comprometendo não só a água, como também a saúde humana e o meio ambiente (REN et al., 2013).

Outra questão que vem gerando preocupações é a escassez da água, pois apesar de ser encontrada em abundância na natureza, ocupando 71% da superfície do planeta, apenas 0,63% desse total está disponível na forma de água potável (MAIA NETO, 1997).

A falta de cuidado no descarte de poluentes, somada ao aumento do consumo e do desperdício da água, afetam a qualidade e a durabilidade dos recursos hídricos.

Diante desses problemas, torna-se necessário estudar e entender os fenômenos que controlam o transporte e a dispersão de poluentes imersos em meios aquáticos, com o objetivo de prever os riscos de contaminação e os impactos provocados pelas fontes poluidoras sobre os diversos ecossistemas.

Uma ferramenta particularmente útil para estimar o campo de concentração de poluentes é a modelagem matemática, uma vez que pesquisas experimentais apresentam problemas operacionais e altos custos. Além disso, outra vantagem é a capacidade dos modelos matemáticos se adaptarem, de maneira fácil e rápida, a inúmeros cenários (FLECK; TAVARES; EYNG, 2013).

Dentre os modelos que podem ser usados para simular a dispersão de poluentes, destacam-se: o Lagrangiano, no qual as mudanças na concentração seguem o movimento do fluido, e o Euleriano, em que o comportamento da concentração é descrito em relação a um ponto fixo no espaço (MUNSON; YOUNG; OKIISHI, 2004). Neste estudo será utilizado o modelo Euleriano, o qual tem como característica principal a

solução da equação de advecção-difusão.

Portanto, o objetivo principal deste trabalho é obter uma solução analítica para a equação de advecção-difusão, que simula a dispersão de contaminantes em rios e canais. Para isso, são considerados os modelos bidimensional, no plano longitudinal e vertical, e tridimensional em regime permanente com perfis de velocidade e coeficientes de difusividade turbulenta não uniformes. A abordagem utilizada para a resolução desses modelos é o método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*).

A presente dissertação está estruturada da seguinte maneira: no capítulo 2 é realizada uma revisão dos trabalhos referentes à modelagem da dispersão de contaminantes em rios e canais. O capítulo 3 apresenta a equação que descreve o fenômeno da dispersão de poluentes, bem como os modelos matemáticos utilizados e as soluções obtidas através do método GILTT. No capítulo 4 são descritos os dados experimentais e as parametrizações utilizadas nos modelos. Os resultados numéricos e estatísticos obtidos com os modelos através do método GILTT são discutidos no capítulo 5. Por fim, no capítulo 6, são apresentadas as considerações finais e as sugestões para trabalhos futuros.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Na literatura encontram-se inúmeros trabalhos que utilizam métodos numéricos para solucionar o problema da dispersão de contaminantes em meios aquáticos (NOKES; HUGHES, 1994); (LIN; SHIONO, 1995); (CROUCHER; O´ SULLIVAN, 1998); (MAZUMDER; DALAL, 2000); (HANCU et al., 2002).

Embora esses métodos sejam ferramentas eficientes para resolver problemas complexos, as soluções analíticas[1] ainda são utilizadas em muitas pesquisas porque normalmente não possuem os problemas de dispersão numérica que frequentemente ocorrem nas simulações numéricas. Além disso, tais soluções permitem analisar explicitamente todos os parâmetros de um problema, facilitando a investigação de suas influências (COSTA; CASTRO, 2005).

Sendo assim, neste capítulo apresenta-se uma revisão sobre os trabalhos referentes à dispersão de contaminantes em rios e canais, tendo como foco principal as soluções analíticas da equação de advecção-difusão encontradas na literatura.

Os modelos unidimensionais têm sido extensivamente utilizados, apesar de suas limitações, para descrever o fenômeno de transporte de resíduos devido a sua simplicidade e facilidade em obter resultados satisfatórios (GANDOLFI; FACCHI, 2001).

Para esses modelos é normal considerar que, após uma determinanda distância a jusante do ponto de despejo, o poluente estará distribuído uniformemente no rio ou canal tanto na direção transversal quanto na direção vertical ao longo do domínio físico (EIGER, 2003).

Deste modo, os modelos unidimensionais podem ser de grande utilidade para uma primeira estimativa, uma vez que diversas referências podem ser encontradas para essa classe de problemas (VAN GENUCHTEN; ALVES, 1982); (RUNKEL, 1996); (ZOPPOU; KNIGHT, 1997); (DIAS, 2003); (NEVES, 2012).

Runkel (RUNKEL, 1996) resolveu analiticamente um problema unidimensional, com coeficiente de difusividade longitudinal e velocidade constantes, considerando dois tipos de condição de fonte (fonte contínua de duração infinita e de duração finita).

[1] Cabe salientar que, ao longo desse trabalho, o termo *solução analítica* será entendido como *solução com representação em forma analítica.*

Um problema similar foi resolvido por (GANDOLFI; FACCHI, 2001), que formularam um modelo unidimensional de dispersão, advecção e decaimento com coeficientes constantes para o transporte de solutos em um rio considerando uma fonte pontual variável no tempo. A solução analítica do problema foi obtida através do uso da Transformada de Laplace.

Outros autores também apresentaram soluções analíticas para equações unidimensionais, porém adotaram coeficientes variáveis em seus modelos. (ZOPPOU; KNIGHT, 1997) solucionaram analiticamente um modelo unidimensional com velocidade dependente da direção longitudinal para o transporte de poluentes em um canal. Apesar de incluir uma variação espacial no modelo, inicialmente o coeficiente de difusão longitudinal foi desprezado sob a hipótese de que o transporte advectivo é muito mais relevante do que o processo difusivo. Na sequência, o termo de difusão longitudinal é considerado. Esses autores destacaram que soluções analíticas são de extrema importância, pois são usadas para validar problemas mais complexos resolvidos por métodos numéricos.

Em (SEO; CHEONG, 1998) foi desenvolvido um estudo para estimar o coeficiente de dispersão longitudinal em correntes naturais. O modelo unidimensional utilizado é descrito por uma equação diferencial parcial, na direção longitudinal e no tempo, com coeficientes constantes. Apesar de utilizar tal modelo, os autores afirmaram que ele é limitado, pois só pode ser usado para situações muito distantes da fonte poluidora.

Diante disso, percebe-se que as formulações unidimensionais são válidas somente para determinadas condições. Para a simulação do processo inicial de descarga de um poluente em um rio é adequado utilizar modelos com duas ou três dimensões.

Para determinar qual modelo de dispersão é o mais apropriado para ser utilizado é necessário considerar: a configuração geométrica do rio, o trecho no qual se deseja analisar, o tipo de fonte poluidora (pontual, linear ou plana) e as razões de aspectos entre a profundidade e a largura (BARROS, 2004).

Entendem-se como fonte pontual as fontes similares a um ponto, na qual a área de emissão não é muito significativa. As fontes lineares são aquelas em que duas das três dimensões da fonte emissora são desprezáveis e as fontes planas são aquelas representadas por uma área específica (SOARES; RAMALDES, 2012).

Os modelos bidimensionais, por sua vez, podem ser divididos em dois tipos: modelos horizontais, que simulam o processo de transporte no plano longitudinal e transversal, e modelos verticais, que simulam o transporte no plano longitudinal e vertical.

Os modelos horizontais são utilizados para rios muito largos e para casos em que o fluxo difusivo na direção vertical é muito menor que o fluxo na direção transversal. Este tipo de abordagem assume que o poluente ao ser despejado no meio se difunde instantaneamente para o leito do rio (EIGER, 2003).

Assim como nos trabalhos apresentados anteriormente, a maioria dos modelos

bidimensionais encontrados na literatura assume o perfil de velocidade e o coeficiente de difusão turbulenta uniformes tendo em vista à obtenção da solução analítica do problema. Isso pode ser visto em (VILHENA; SEFIDVASH, 1985), que realizaram um trabalho de caráter experimental com o objetivo de validar o modelo teórico.

O trabalho experimental foi realizado no rio Jacuí, situado no sul do Brasil. Para a determinação dos coeficientes de dispersão utilizou-se uma técnica com traçador radioativo, em seguida os dados obtidos foram usados no modelo matemático. Para esse modelo foram considerados valores uniformes para a velocidade e para o coeficiente de difusão. A solução do problema matemático foi encontrada através do uso da Transformada de Laplace. Segundo os autores, os resultados obtidos pelo modelo teórico e aqueles medidos em campo não foram satisfatórios, havendo divergências entre os resultados, uma vez que a velocidade do rio variou em 46% ao longo da largura do mesmo. Esse fato demonstra a importância de se considerar a velocidade variável ao longo do rio em determinadas situações.

De modo semelhante, (LEW; MILLS; LOH, 1999) modelaram o problema bidimensional de difusão e advecção de poluentes para rios largos e não muito profundos. Para determinar os perfis de concentração do despejo de resíduos de cloro em rios foi utilizado o software RIVRISK. Esse software utiliza modelos de dispersão de poluentes em rios em diversos tipos de cenários, e a partir dos resultados simulados determina-se os riscos associados. O modelo bidimensional considerado assume a hipótese de que a velocidade do rio e o coeficiente de difusão turbulenta são uniformes e não variáveis, ou seja, independem do espaço e do tempo. A solução foi obtida através do método CITT (*Classic Integral Transform Technique*).

Diversos autores têm ressaltado em seus trabalhos a importância da inclusão de um perfil de velocidade não uniforme nos modelos de dispersão de poluentes em rios e correntes naturais. É o caso de (WANG; MCMILLAN; CHEN, 1978), que resolveram analiticamente um modelo bidimensional para canais rasos considerando uma fonte pontual e instantânea. Os autores consideraram um perfil de velocidade variável ao longo da largura do rio ou canal. A expressão para esse perfil pode ser generalizada para ajustar distribuições de velocidade mais realistas em rios e correntes naturais, e o procedimento de ajuste é explicado detalhadamente no artigo.

Em (MAZUMDER; XIA, 1994) também foi estudada a dispersão em um canal bidimensional. Os perfis de velocidade utilizados são os mesmos que em (WANG; MCMILLAN; CHEN, 1978), uma vez que eles permitem, através da mudança de um valor de um parâmetro da expressão, à obtenção de perfis simétricos e assimétricos. Isso é de grande interesse prático, uma vez que perfis não uniformes para a distribuição do campo de velocidade são comuns em rios, devido a sua geometria irregular. A solução analítica do modelo foi obtida usando o método dos momentos de Aris.

Medidas realizadas em campo mostram como o perfil de velocidade varia de uma

margem para outra e da superfície da água para o leito, mas também podem haver variações da seção transversal ao longo do percurso do rio (BOGLE, 1997); (XIA, 1997); (CHOW, 1959).

Em (YOTSUKURA; SAYRE, 1976) foi resolvido um modelo bidimensional no plano horizontal em regime permanente, onde se provou, a partir de comparações com medidas efetuadas em campo, que em rios que apresentam meandros a variação da componente transversal da velocidade é fundamental no fenômeno de mistura.

Apesar de alguns trabalhos apresentarem modelos que incluam essa não uniformidade na velocidade, aparentemente ainda são escassos na literatura modelos que incluam variações também no campo da difusividade turbulenta para rios rasos.

Visando estimar o coeficiente de difusão turbulenta na direção horizontal, (HOLLEY; ABRAHAM, 1973) desenvolveram alguns trabalhos experimentais feitos com traçadores para investigar essas taxas de mistura transversal em canais que simulam as condições de um rio. No mesmo trabalho, estudou-se o efeito da turbulência que ocorre no leito, através do coeficiente de difusão. Os autores demonstraram que é inadequado considerar o coeficiente de difusão turbulenta transversal constante, sobretudo em casos onde a profundidade varia.

Mais tarde, (NOKES; WOOD, 1988) apresentaram uma tabela com coeficientes de difusão turbulenta na direção transversal, retirados da literatura, enfatizando a importância desse coeficiente no processo de mistura do poluente com o meio e destacaram que desprezá-lo pode acarretar erros significativos na previsão do campo de concentração. Estes erros podem ser explicados a partir dos trabalhos de (FISCHER et al., 1979) e (PORTO et al., 1991).

Nessa mesma linha de raciocínio, (GHARBI; VERRETTE, 1998) mostraram que em boa parte dos escoamentos em rios e canais, o coeficiente de difusão na direção longitudinal é desprezável quando comparado a direção transversal, uma vez que o transporte longitudinal é praticamente convectivo.

De acordo com as referências apresentadas, pode-se perceber que a maioria dos modelos encontrados na literatura não assume a variação da velocidade e da difusividade turbulenta na direção horizontal.

Esse fato pode ser observado no trabalho de (CODELL; KEY; WHELAN, 1982), que mostraram que o modelo mais adequado, tanto do ponto de vista teórico quanto prático, é o bidimensional com velocidade variável para o termo de convecção na direção do escoamento, difusividade turbulenta variável na direção horizontal do rio e inclusão do termo de decaimento ou transformação química. Apesar de julgar esse modelo como sendo mais adequado, os autores consideraram todos os coeficientes constantes a fim de obter uma solução analítica trabalhando num domínio infinito na direção do escoamento. O método adotado neste estudo foi o da transformada de Fourier.

Em contrapartida, a teoria da difusividade vertical para os modelos bidimensionais verticais está bem consolidada. Esses modelos são normalmente utilizados para rios estreitos e profundos cuja difusão turbulenta lateral é muito menor que a vertical.

Em (YEH; TSAI, 1976) foi resolvido analiticamente um modelo bidimensional vertical em regime permanente. Foram utilizadas expressões aproximadas, por leis de potência, para os campos de velocidade e difusividade verticais. Os autores mostraram as diferenças entre os resultados simulados com os perfis variáveis e os resultados simulados com valores uniformes para a velocidade e o coeficiente de difusão.

Considerando um modelo idêntico ao descrito em (YEH; TSAI, 1976), (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984) apresentaram uma solução aproximada através de um método semi-analítico. Os dois modelos desprezaram a inclusão do termo de degradação da substância química, sendo que, dependendo do poluente em questão, é de extrema importância que este termo seja considerado. Uma conclusão importante encontrada em (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984) é que os resultados obtidos em seu trabalho, através da simulação usando o perfil logarítmico, pouco diferem daqueles adquiridos com a aproximação do perfil de velocidade por leis de potência.

Esse mesmo problema, um modelo bidimensional vertical, foi resolvido por (HABEL; MENDOZA; BAGTZOGLOU, 2002), só que incluindo o termo do transiente da concentração e acoplando o modelo com o transporte e aprisionamento do poluente no leito poroso. Parte do material despejado pode ficar temporariamente retido na subcamada viscosa, onde os efeitos difusivos dominam. Uma das maneiras de contornar esse problema é a utilização de modelos conservativos, em que se considera o pior caso possível, porém ainda não existe um modelo satisfatório para se avaliar este fenômeno.

Recentemente, (WEYMAR et al., 2010) desenvolveram um modelo bidimensional em regime permanente, com perfil de velocidade e coeficiente de difusividade variáveis, para modelar a dispersão de poluentes em rios e canais. O problema foi resolvido analiticamente através do método GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*). No mesmo trabalho, os autores realizaram uma comparação entre os resultados obtidos pelo modelo e os resultados encontrados na literatura.

Observa-se, ainda, que soluções tridimensionais que envolvem tratamento analítico, especialmente nos casos em que são consideradas as variações no campo da velocidade e nas difusividades transversal e vertical, também são escassas na literatura. (ZOPPOU; KNIGHT, 1999) solucionou analiticamente, para alguns perfis de natureza simples, um modelo tridimensional com coeficientes variáveis que dependem das dimensões espaciais.

Um modelo mais completo é apresentado por (BARROS, 2004), que estudou modelos multidimensionais (modelos bidimensionais e tridimensionais) em regime permanente de dispersão de poluentes em rios e canais. A solução numérico-analítica

foi obtida através do uso da técnica GITT (*Generalized Integral Transform Technique*). Para os modelos desenvolvidos foram utilizados coeficientes não uniformes, incluindo variações de velocidade ao longo do escoamento e na seção transversal. Também foram usadas fontes planas, lineares e pontuais nas condições de entrada do poluente.

Garcia (GARCIA, 2009) apresentou soluções exatas para um modelo difusivo de dispersão de poluentes baseado na equação KDV (Kortweg-de Vries). O método utilizado baseia-se em três restrições diferenciais de primeira ordem a partir das quais são encontradas transformações auto-Bäcklund para a equação advectiva-difusiva tridimensional em regime estacionário. As transformações de Bäcklund produzem mapeamentos entre soluções de duas equações diferenciais. Se uma solução exata de uma equação diferencial denominada equação auxiliar é conhecida, torna-se possível transformá-la em solução de uma outra equação diferencial denominada equação alvo, pela aplicação de operadores diferenciais. Quando a equação auxiliar e a equação alvo são idênticas, este procedimento é denominado transformação auto-Bäcklund.

De acordo com a teoria discutida, percebe-se que diversos métodos são aplicados com a finalidade de encontrar soluções analíticas para o problema de dispersão de poluentes em rios e canais. Neste estudo será utilizado o método GILTT.

Esse método está bem estabelecido e tem sido aplicado com grande sucesso para modelar a dispersão de poluentes na atmosfera (WORTMANN et al., 2005); (TIRABASSI et al., 2009); (MOREIRA et al., 2009); (BUSKE et al., 2011); (VILHENA et al., 2012). Sendo assim, pretende-se com este trabalho estender a aplicação dessa técnica para modelar a dispersão de contaminantes em rios e canais.

A GILTT é usada para prever o comportamento do poluente dispersado, sendo um método espectral que combina uma expansão em série com uma integração. Essa técnica compreende basicamente os seguintes passos: construção de um problema auxiliar de Sturm-Liouville associado ao problema estacionário, determinação da técnica da transformada integral em uma série truncada usando como base as autofunções do problema de Sturm-Liouville resolvido, substituição desta expansão no problema original. Tomando momentos, obtêm-se um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO) e aplica-se a Transformada de Laplace, o que resulta em um sistema algébrico. A matriz dos coeficientes do sistema transformado é decomposta em seus autovalores e autovetores. Após, esta matriz é invertida para se obter a solução do sistema algébrico. Esta inversão é analítica e sem custo computacional por se tratar de uma matriz diagonalizada. Dessa forma, a solução analítica do problema transformado é finalmente encontrada (BUSKE, 2008). Uma revisão completa do método GILTT é encontrada em (MOREIRA et al., 2009).

Sendo assim, espera-se que o presente trabalho possa contribuir na obtenção de soluções analíticas para o problema de dispersão de contaminantes em rios e canais.

3 MODELO MATEMÁTICO

Neste capítulo são apresentadas a equação que descreve o processo de dispersão de poluentes, a formulação matemática dos modelos de dispersão para rios e canais e as soluções obtidas através do método GILTT.

3.1 A equação de advecção-difusão

A equação que descreve o fenômeno da dispersão de poluentes é obtida a partir da equação de conservação de massa (equação da continuidade). Considerando uma espécie genérica c que se conserve em meios aquáticos, tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u\frac{\partial c}{\partial x} + v\frac{\partial c}{\partial y} + w\frac{\partial c}{\partial z} + S = 0 \ , \tag{1}$$

onde c é a concentração de poluentes; u, v e w representam as componentes das velocidades instantâneas do escoamento nas direções x, y e z, respectivamente, e S representa o termo fonte.

Considerando os efeitos da turbulência, é aplicada a decomposição de Reynolds para as variáveis de interesse, ou seja, essas variáveis são expressas como a soma de suas médias de *ensemble* (denotadas por uma barra superior) e flutuações (denotadas pela linha) (ARYA, 1999):

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' \, ; \\ v &= \bar{v} + v' \, ; \\ w &= \bar{w} + w' \, ; \\ c &= \bar{c} + c' \, . \end{aligned} \tag{2}$$

Substituindo (2) em (1):

$$\frac{\partial(\bar{c}+c')}{\partial t} + (\bar{u}+u')\frac{\partial(\bar{c}+c')}{\partial x} + (\bar{v}+v')\frac{\partial(\bar{c}+c')}{\partial y} + (\bar{w}+w')\frac{\partial(\bar{c}+c')}{\partial z} + S = 0 \ . \tag{3}$$

Expandindo os termos da equação (3):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u}\frac{\partial c'}{\partial x} + u'\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + u'\frac{\partial c'}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v}\frac{\partial c'}{\partial y} + v'\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + v'\frac{\partial c'}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w}\frac{\partial c'}{\partial z} + w'\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + w'\frac{\partial c'}{\partial z} + S = 0 \ . \tag{4}$$

Para fins de simplificação, consideram-se as seguintes propriedades da média de Reynolds, válidas para um sistema euleriano:

$$\begin{aligned} P1) &\quad \bar{\bar{\phi}} = \bar{\phi}\,; \\ P2) &\quad \overline{\phi + \varphi} = \bar{\phi} + \bar{\varphi}\,; \\ P3) &\quad \overline{\bar{\phi} \cdot \varphi} = \bar{\phi} \cdot \bar{\varphi}\,; \\ P4) &\quad \overline{\frac{\partial \phi}{\partial x}} = \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x}\,; \\ P5) &\quad \overline{cte} = cte \ . \end{aligned}$$

Tomando a média da equação (4) e aplicando a propriedade $P2$:

$$\overline{\frac{\partial \bar{c}}{\partial t}} + \overline{\frac{\partial c'}{\partial t}} + \overline{\bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{\bar{u}\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{u'\frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{\bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{\bar{v}\frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{v'\frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{\bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{\bar{w}\frac{\partial c'}{\partial z}} + \overline{w'\frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}} + \overline{S} = 0 \ . \tag{5}$$

Aplicando as propriedades de Reynolds na equação (5):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{c'}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u}\frac{\partial \overline{c'}}{\partial x} + \overline{u'}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v}\frac{\partial \overline{c'}}{\partial y} + \overline{v'}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w}\frac{\partial \overline{c'}}{\partial z} + \overline{w'}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}} + S = 0 \ . \tag{6}$$

Observe que a média de uma flutuação é igual a zero, pois $\phi = \bar{\phi} + \phi'$ então $\bar{\phi} = \bar{\phi} + \overline{\phi'}$, implicando que $\overline{\phi'} = 0$. Dessa forma, pode-se considerar que:

$$\overline{c'} = \overline{u'} = \overline{v'} = \overline{w'} = 0 \ . \tag{7}$$

Substituindo (7) em (6):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}} + S = 0 \ . \tag{8}$$

Para reescrever os termos dos fluxos turbulentos da equação (8) serão considera-

das as seguintes relações:

$$\frac{\partial(u'c')}{\partial x} = u'\frac{\partial c'}{\partial x} + c'\frac{\partial u'}{\partial x}\,; \tag{9}$$

$$\frac{\partial(v'c')}{\partial y} = v'\frac{\partial c'}{\partial y} + c'\frac{\partial v'}{\partial y}\,; \tag{10}$$

$$\frac{\partial(w'c')}{\partial z} = w'\frac{\partial c'}{\partial z} + c'\frac{\partial w'}{\partial z}\,. \tag{11}$$

Somando (9), (10) e (11), chega-se em:

$$\frac{\partial(u'c')}{\partial x} + \frac{\partial(v'c')}{\partial y} + \frac{\partial(w'c')}{\partial z} = u'\frac{\partial c'}{\partial x} + v'\frac{\partial c'}{\partial y} + w'\frac{\partial c'}{\partial z} + c'\left(\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z}\right)\,. \tag{12}$$

Ademais, note que a equação da continuidade aplicada a um fluido incompressível e com densidade constante é representada por:

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0\,. \tag{13}$$

Aplicando a decomposição de Reynolds:

$$\frac{\partial(\bar{u} + u')}{\partial x} + \frac{\partial(\bar{v} + v')}{\partial y} + \frac{\partial(\bar{w} + w')}{\partial z} = 0\,. \tag{14}$$

Expandindo os termos da equação (14):

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0\,. \tag{15}$$

Tomando a média da equação (15) e aplicando a propriedade $P2$:

$$\overline{\frac{\partial \bar{u}}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial \bar{v}}{\partial y}} + \overline{\frac{\partial \bar{w}}{\partial z}} + \overline{\frac{\partial u'}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial v'}{\partial y}} + \overline{\frac{\partial w'}{\partial z}} = 0\,. \tag{16}$$

Aplicando as propriedades de Reynolds em (16):

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'}}{\partial z} = 0\,. \tag{17}$$

Substituindo (7) em (17), tem-se:

$$\frac{\partial \overline{u'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'}}{\partial z} = 0\,,$$

e consequentemente

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} = 0 \ . \tag{18}$$

Substituindo (18) em (15), resulta em:

$$\frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0 \ . \tag{19}$$

Com isso, substituindo (19) em (12), a equação é reduzida para:

$$\frac{\partial u'c'}{\partial x} + \frac{\partial v'c'}{\partial y} + \frac{\partial w'c'}{\partial z} = u'\frac{\partial c'}{\partial x} + v'\frac{\partial c'}{\partial y} + w'\frac{\partial c'}{\partial z} \ . \tag{20}$$

Tomando a média de (20) e aplicando a propriedade $P2$:

$$\overline{\frac{\partial u'c'}{\partial x}} + \overline{\frac{\partial v'c'}{\partial y}} + \overline{\frac{\partial w'c'}{\partial z}} = \overline{u'\frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{v'\frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{w'\frac{\partial c'}{\partial z}} \ . \tag{21}$$

Substituindo (21) em (8) e aplicando a propriedade $P4$, chega-se na equação de advecção-difusão tridimensional em regime transiente que descreve as concentrações a partir de uma fonte contínua:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \frac{\partial \overline{u'c'}}{\partial x} + \frac{\partial \overline{v'c'}}{\partial y} + \frac{\partial \overline{w'c'}}{\partial z} + S = 0 \, , \tag{22}$$

na qual $\bar{c}$ denota a concentração média do contaminante (g/m^3), $\overline{u}$, $\overline{v}$, $\overline{w}$ são as componentes cartesianas do escoamento médio (m/s) orientado nas direções x $(0 < x < d)$, y $(0 < y < l)$ e z $(0 < z < h)$. Os termos $\overline{u'c'}$, $\overline{v'c'}$ e $\overline{w'c'}$ representam o fluxo turbulento do contaminante (g/sm^2) nas direções longitudinal, lateral e vertical, respectivamente. O termo de difusão molecular será desconsiderado, pois a turbulência domina os processos de transporte e dispersão.

A equação (22) apresenta quatro variáveis desconhecidas (os fluxos turbulentos e a concentração $\bar{c}$), por isso não pode ser resolvida diretamente. Uma das maneiras mais utilizadas para solucionar o problema de fechamento da equação é baseada na hipótese de transporte por gradiente (ou teoria K) que, em analogia com a lei de Fick da difusão molecular, assume que o fluxo turbulento do poluente é proporcional à magnitude do gradiente da concentração (SEINFELD; PANDIS, 1997). Logo:

$$\overline{u'c'} = -\varepsilon_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} \, ;$$

$$\overline{v'c'} = -\varepsilon_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} \, ; \tag{23}$$

$$\overline{w'c'} = -\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\,,$$

onde ε_x, ε_y e ε_z são os coeficientes de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções x, y e z, respectivamente. No fechamento de primeira ordem, toda a informação da complexidade da turbulência está contida nesses coeficientes de difusão.

Finalmente, substituindo (23) em (22), obtêm-se a equação de advecção-difusão tridimensional, com fechamento Fickiano da turbulência, para um sistema de coordenadas cartesianas em que a direção x coincide com a direção do fluxo, dada por (ARYA, 1999):

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{v}\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial x}\left(\varepsilon_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\right) + S\,, \qquad (24)$$

onde $\bar{c}$ representa a concentração média do contaminante (g/m^3); $\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{w}$ representam a velocidade média do fluxo (m/s) nas direções x, y e z, respectivamente; ε_x, ε_y, ε_z representam os coeficientes de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções x, y e z, respectivamente, e S representa o termo fonte.

Do lado esquerdo da equação (24), o primeiro termo é dependente do tempo e os três termos restantes descrevem o transporte devido à advecção. Já no lado direito, os três primeiros termos representam a difusão turbulenta e o último termo representa a taxa de emissão da fonte.

O termo fonte é considerado na equação quando o poluente sofre transformações, sejam elas através de processos físicos, químicos ou biológicos. Nesses casos, os poluentes são classificados como não conservativos. Quando o poluente é dito conservativo, ou seja, quando sua concentração permanece inerte, exceto por difusão ou advecção, o termo S é desconsiderado (EIGER, 2003).

A justificativa de concentrações médias para a equação (24) é dada em (SEINFELD; PANDIS, 1997) e (ARYA, 1999).

3.2 Modelo bidimensional no plano longitudinal e vertical

Os modelos bidimensionais no plano longitudinal e vertical são normalmente utilizados para rios ou canais cuja profundidade tem um papel relevante no processo de difusão e advecção de massa. Esses modelos podem ser usados para rios estreitos e profundos cuja difusão turbulenta lateral é muito menor que a vertical dependendo do tipo da fonte poluidora.

Tal modelo faz uso da hipótese de desprezar correntes secundárias de forma que o perfil de velocidade é descrito pela componente longitudinal, a qual pode variar ao longo das direções x e z. O coeficiente de difusão turbulenta também varia nas mesmas direções. Além disso, considera-se que o poluente é introduzido no rio é através

de uma fonte pontual e que esse poluente está sujeito a sofrer degradação química.

As hipóteses fundamentais adotadas para esse modelo são (BARROS, 2004):

- O fluxo de massa na direção vertical é muito maior que na direção transversal, ou seja, $\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \gg \varepsilon_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}$;
- A superfície e o leito do rio não são dispersivos, ou seja, não há migração do contaminante através destes contornos;
- O efeito difusivo na direção longitudinal é desprezável quando comparado com o termo advectivo;
- O lançamento do poluente é contínuo;
- A área transversal do rio varia gradualmente com a direção longitudinal e a variação de sua altura é desprezível;
- As substâncias poluidoras são dissolvidas e têm a mesma densidade do fluido receptor;
- A velocidade de descarga do poluente é considerada desprezável em relação a velocidade longitudinal do rio ou canal.

A Figura 1 apresenta um esquema do domínio físico no qual o modelo é empregado.

Figura 1: Ilustração do modelo conceitual para o caso bidimensional no plano longitudinal e vertical.

Aplicando as hipóteses fundamentais na equação (24), obtêm-se a equação bidimensional em regime permanente que descreve matematicamente este problema:

$$\bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\right) - \lambda \bar{c}\ . \tag{25}$$

A equação (25) está sujeita as condições de contorno:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em\ z = 0\,, \tag{26}$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em\ z = h\,, \tag{27}$$

e condição de fonte:

$$\bar{c} = \delta(z - z_s) \qquad em\ x = 0\,, \tag{28}$$

sendo $\bar{c}$ a concentração média do contaminante (g/m^2); $\bar{u}$, $\bar{w}$ representam a velocidade média do escoamento (m/s) nas direções x e z, respectivamente; ε_z representa o coeficiente de difusão turbulenta (m^2/s) na direção z; λ representa o coeficiente de degradação química do poluente (s^{-1}); h é a profundidade do rio (m); δ corresponde a função delta de Dirac e z_s é a posição da fonte poluidora (m) na direção z.

3.2.1 Solução do modelo

Para resolver o modelo bidimensional no plano longitudinal e vertical será aplicado o método GILTT na variável z. Conforme o procedimento descrito anteriormente, inicialmente é feita a escolha do problema auxiliar de Sturm-Liouville:

$$\Psi_n''(z) + \beta_n^2 \Psi_n(z) = 0 \quad em\ \ 0 < z < h\,, \tag{29}$$

cujas condições de contorno são as mesmas do problema original:

$$\Psi_n'(z) = 0 \quad em\ z = 0\ e\ z = h\ . \tag{30}$$

A solução analítica do problema auxiliar (ÖZISIK, 1993) é dada por:

$$\Psi_n(z) = cos(\beta_n z)\,, \tag{31}$$

em que $\beta_n = \frac{n\pi}{h}$ $(n = 0, 1, 2, ...)$ são as raízes positivas da expressão $sen(\beta_n h) = 0$.

Análogo ao sistema de equações lineares, os valores de β_n para os quais o sistema de Sturm-Liouville tem uma solução não-trivial são chamados de autovalores e as soluções correspondentes $\Psi_n(z)$ são as suas autofunções. O conjunto de todos os autovalores de um sistema de Sturm-Liouville é chamado de espectro do sistema (HONIG, 1978).

A seguir, expande-se a concentração de poluentes em uma série, utilizando como

base as autofunções do problema de Sturm-Liouville, como segue:

$$\overline{c}(x,z) = \sum_{n=0}^{\infty} \overline{c}_n(x)\Psi_n(z) \ . \tag{32}$$

Para determinar o coeficiente $\overline{c}_n(x)$ substitui-se (32) em (25):

$$\begin{aligned} \bar{u}\sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}'_n(x)\Psi_n(z) \quad &+ \quad \bar{w}\sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\Psi'_n(z) = \\ \sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\frac{\partial}{\partial z}\left[\varepsilon_z\Psi'_n(z)\right] \quad &- \quad \lambda\sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\Psi_n(z) \ . \end{aligned} \tag{33}$$

Fazendo uso da propriedade de ortogonalidade das autofunções, integra-se o resultado em todo o domínio da variável transformada, ou seja, multiplica-se pelo operador $\int_0^h(.)\Psi_m(z)dz$:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}'_n(x)\int_0^h \bar{u}\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz \quad &+ \quad \sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\int_0^h \bar{w}\Psi'_n(z)\Psi_m(z)dz = \\ \sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\int_0^h \varepsilon'_z\Psi'_n(z)\Psi_m(z)dz \quad &+ \quad \sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\int_0^h \varepsilon_z\Psi''_n(z)\Psi_m(z)dz - \\ \lambda\sum_{n=0}^{\infty}\overline{c}_n(x)\int_0^h \Psi_n(z)\Psi_m(z)dz \ . \end{aligned} \tag{34}$$

Lembrando da equação (29) que $\Psi''_n(z) = -\beta_n^2\Psi_n(z)$ e truncando a série, tem-se:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{N}\overline{c}'_n(x)\int_0^h \bar{u}\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz \quad &+ \quad \sum_{n=0}^{N}\overline{c}_n(x)\int_0^h \bar{w}\Psi'_n(z)\Psi_m(z)dz - \\ \sum_{n=0}^{N}\overline{c}_n(x)\int_0^h \varepsilon'_z\Psi'_n(z)\Psi_m(z)dz \quad &+ \quad \sum_{n=0}^{N}\overline{c}_n(x)\beta_n^2\int_0^h \varepsilon_z\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz + \\ \lambda\sum_{n=0}^{N}\overline{c}_n(x)\int_0^h \Psi_n(z)\Psi_m(z)dz = 0 \ . \end{aligned} \tag{35}$$

A equação (35) pode ser escrita na forma matricial:

$$AE'(x) + BE(x) = 0\,, \tag{36}$$

onde $E(x)$ o vetor cujas componentes são $\overline{c}_n(x)$ e $A = a_{n,m}$, $B = b_{n,m}$ as matrizes

cujas entradas são dadas, respectivamente, por:

$$\begin{aligned} a_{n,m} &= \int_0^h \bar{u}\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz\,; \\ b_{n,m} &= \int_0^h \bar{w}\Psi_n'(z)\Psi_m(z)dz - \int_0^h \varepsilon_z'\Psi_n'(z)\Psi_m(z)dz + \\ &\quad \beta_n^2\int_0^h \varepsilon_z\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz + \lambda\int_0^h \Psi_n(z)\Psi_m(z)dz\ . \end{aligned} \tag{37}$$

Assumindo que a matriz A é não-singular, multiplica-se a equação (36) pela matriz inversa de A e obtêm-se:

$$E'(x) + FE(x) = 0\,, \tag{38}$$

onde $F = A^{-1}B$.

A equação (38) está sujeita a condição de fonte:

$$E(0) = \overline{c}(0,z) = \delta(z - z_s)\ . \tag{39}$$

Para a obtenção de $E(0)$ aplica-se o mesmo procedimento utilizado anteriormente. Inicialmente, expande-se a condição de fonte em série:

$$\sum_{n=0}^{\infty} \overline{c}_n(0)\Psi_n(z) = \delta(z - z_s)\ . \tag{40}$$

Aplicando o operador $\int_0^h(.)\Psi_m(z)dz$ e truncando a série, tem-se:

$$\sum_{n=0}^{N} \overline{c}_n(0)\int_0^h \Psi_n(z)\Psi_m(z)dz = \int_0^h \delta(z - z_s)\Psi_m(z)dz\ . \tag{41}$$

Pela propriedade da Delta de Dirac:

$$\int_0^h \delta(z - z_s)\Psi_m(z)dz = \Psi_m(z_s)\ . \tag{42}$$

Desse modo, a condição de fonte pode ser escrita da forma:

$$E(0) = \frac{\psi_0(z_0)}{h} \quad para\ \ n = 0\,;$$

$$E(0) = \frac{\psi_n(z_0)}{h/2} \quad para\ \ n \neq 0\ . \tag{43}$$

Aplicando a técnica da Transformada de Laplace no problema transformado, repre-

sentado na equação (38), obtêm-se:

$$sE(s) + FE(s) = E(0)\,, \tag{44}$$

onde $E(s)$ denota a Transformada de Laplace do vetor $E(x)$.

Assumindo que a matriz F é não-defectiva, utiliza-se o processo de diagonalização e decompõe-se a matriz da forma:

$$F = GDG^{-1}\,, \tag{45}$$

onde D é a matriz diagonal de autovalores de F e G é a matriz dos respectivos autovetores.

Substituindo a matriz F na equação (44):

$$sE(s) + GDG^{-1}E(s) = E(0)\,, \tag{46}$$

ou ainda,

$$(sI + GDG^{-1})E(s) = E(0)\,, \tag{47}$$

na qual I é a matriz identidade. Lembrando que $I = GG^{-1}$, a equação (47) pode ser escrita:

$$G(sI + D)G^{-1}E(s) = E(0)\ . \tag{48}$$

Desse modo, a equação (48) tem a seguinte solução:

$$E(s) = G(sI + D)^{-1}G^{-1}E(0)\ . \tag{49}$$

Aplicando a Transformada Inversa de Laplace na equação (49):

$$E(s) = G\mathscr{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\}G^{-1}E(0)\,, \tag{50}$$

onde $\mathscr{L}^{-1}$ denota o operador Transformada Inversa de Laplace.

Observe que a matriz $sI+D$ e sua inversa $(sI+D)^{-1}$ são escritas, respectivamente, da seguinte forma:

$$sI + D = \begin{bmatrix} s + d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & s + d_N \end{bmatrix}\ ;$$

$$(sI + D)^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s+d_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s+d_2} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{s+d_N} \end{bmatrix},$$

onde d_N são os autovalores da matriz F.

Fazendo a inversão da Transformada de Laplace para a matriz $(sI + D)^{-1}$:

$$\mathscr{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\} = M(x) = \begin{bmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & 0 & e^{-d_N x} \end{bmatrix}.$$

Finalmente, substituindo a matriz $\mathscr{L}^{-1}\{(sI + D)^{-1}\}$ em (50), é obtida a solução do problema transformado da equação (38), que é dada por:

$$E(x) = GM(x)G^{-1}E(0)\ . \tag{51}$$

Portanto, a solução final do problema bidimensional é dada pela expressão:

$$\bar{c}(x, z) = \sum_{n=0}^{\infty} \overline{c}_n(x)\Psi_n(z)\,, \tag{52}$$

onde $\Psi_n(z) = cos(\beta_n z)$ e $\overline{c}_n(x)$ é dado pela equação (51).

Note que nenhuma aproximação é realizada durante o desenvolvimento da solução, exceto o erro de truncamento.

3.3 Modelo tridimensional

Os modelos tridimensionais são conceitualmente os mais adequados para a simulação de escoamentos, uma vez que eles representam de forma mais realista os eventos da natureza. Tais modelos podem ser aplicados em qualquer corpo d'água.

As hipóteses fundamentais adotadas neste modelo são (BARROS, 2004):

- Não há restrições quanto às razões de aspecto do rio ou canal;
- A densidade do poluente é considerada aproximadamente igual a do fluido;
- O efeito advectivo na direção longitudinal é muito maior que o difusivo na mesma direção;

- A velocidade de descarga do poluente é considerada desprezável em relação a velocidade longitudinal do rio ou do canal;
- O despejo é feito em longos períodos de tempo de forma que o processo seja analisado em regime permanente;
- O poluente considerado está sujeito a sofrer degradação química;
- As margens, a superfície e o leito do rio são não-dispersivos, ou seja, não há migração do contaminante através desses contornos;
- A componente da velocidade na direção transversal será desprezada;
- O coeficiente de difusividade turbulenta lateral ε_y não depende da variável y.

Aplicando as hipóteses fundamentais na equação (24), obtêm-se a equação tridimensional em regime permanente que descreve matematicamente este problema:

$$\bar{u}\frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{w}\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}\right) + \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}\right) - \lambda \bar{c}\ . \tag{53}$$

A equação (53) está sujeita as condições de contorno:

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial y} = 0 \quad em\ y = 0\ e\ y = l\,, \tag{54}$$

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \quad em\ z = 0\ e\ z = h\,, \tag{55}$$

e condição de fonte:

$$\bar{u}\bar{c} = Q\delta(y - y_s)\delta(z - z_s) \quad em\ x = 0\,, \tag{56}$$

sendo $\bar{c}$ a concentração média do contaminante (g/m^3); $\bar{u}$, $\bar{v}$, $\bar{w}$ representam a velocidade média do escoamento (m/s) nas direções x, y e z, respectivamente; ε_y, ε_z representam o coeficiente de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções y e z, respectivamente; λ representa o coeficiente de degradação química do poluente (s^{-1}); l é a largura do rio ou canal (m); h é a profundidade do rio ou canal (m), Q é a intensidade da fonte por área (g/sm^2); δ corresponde a função Delta de Dirac e y_s, z_s representam a posição da fonte poluidora (m) nas direções y e z, respectivamente.

3.3.1 Solução do modelo

Para resolver o modelo tridimensional inicialmente será aplicado o método GILTT na variável y. Desse modo, é feita a escolha do problema auxiliar de Sturm-Liouville associado:

$$\Phi_j''(y) + \alpha_j^2 \Phi_j(y) = 0 \quad em\ \ 0 < y < l\,, \tag{57}$$

cujas condições de contorno são as mesmas do problema original:

$$\Phi_j'(y) = 0 \quad em \;\; y = 0 \; e \; y = l \; . \tag{58}$$

A solução do problema auxiliar de Sturm-Liouville são as autofunções ortogonais, dadas por:

$$\Phi_j(y) = cos(\alpha_j y) \, , \tag{59}$$

em que $\alpha_j = \frac{j\pi}{l}$ $(j = 0, 1, 2, ...)$ são os autovalores associados (ÖZISIK, 1993).

Expandindo a concentração em uma série em termos das autofunções, tem-se:

$$\bar{c}(x, y, z) = \sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x, z)\Phi_j(y) \; . \tag{60}$$

Substituindo (60) em (53):

$$\bar{u}\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial x}\Phi_j(y) + \bar{w}\sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\Phi_j(y) = \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_y \overline{c}_j(x,z)\Phi_j'(y)\right) + \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z \frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\Phi_j(y)\right) - \lambda\sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\Phi_j(y) \; . \tag{61}$$

Fazendo uso da propriedade de ortogonalidade das autofunções, multiplica-se a equação (61) pelo operador $\int_0^l (.)\Phi_i(y)dy$:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u}\frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial x}\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy \;\; &+ \;\; \sum_{j=0}^{\infty} \bar{w}\frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy = \\ \sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\int_0^l \varepsilon_y'\Phi_j'(y)\Phi_i(y)dy \;\; &+ \;\; \sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\int_0^l \varepsilon_y\Phi_j''(y)\Phi_i(y)dy + \\ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z\frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\right)\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy \;\; &- \;\; \lambda\sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy \; . \end{aligned} \tag{62}$$

Da equação (57) tem-se que $\Phi_j''(y) = -\alpha_j^2\Phi_j(y)$, então:

$$\begin{aligned} \sum_{j=0}^{\infty} \bar{u}\frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial x}\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy \;\; &+ \;\; \sum_{j=0}^{\infty} \bar{w}\frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy - \\ \sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\int_0^l \varepsilon_y'\Phi_j'(y)\Phi_i(y)dy \;\; &+ \;\; \sum_{j=0}^{\infty} \alpha_j^2\overline{c}_j(x,z)\int_0^l \varepsilon_y\Phi_j(y)\Phi_i(y)dy - \\ \sum_{j=0}^{\infty} \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z\frac{\partial \overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\right)\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy \;\; &+ \;\; \lambda\sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy = 0 \; . \end{aligned} \tag{63}$$

Escrevendo as integrais que aparecem na equação (63) da forma:

$$\xi_{j,i} = \int_0^l \Phi_j(y)\Phi_i(y)dy\,;$$

$$\theta_{j,i} = \int_0^l \varepsilon'_y\Phi'_j(y)\Phi_i(y)dy\,;$$

$$\eta_{j,i} = \int_0^l \varepsilon_y\Phi_j(y)\Phi_i(y)dy\ .$$

Reescrevendo a equação (63):

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left[\xi_{j,i}\bar{u}\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial x} + \xi_{j,i}\bar{w}\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial z} - \theta_{j,i}\overline{c}_j(x,z) + \eta_{j,i}\alpha_j^2\overline{c}_j(x,z) - \right.$$
$$\left.\xi_{j,i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\right) + \xi_{j,i}\lambda\overline{c}_j(x,z)\right] = 0\ . \tag{64}$$

Fazendo uso da hipótese que o coeficiente de difusividade turbulenta lateral ε_y não depende da variável y, tem-se que $\theta_{j,i} = 0$ e $\eta_{j,i} = \varepsilon_y\xi_{j,i}$. Substituindo esses termos na equação (64):

$$\sum_{j=0}^{\infty}\left[\xi_{j,i}\bar{u}\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial x} + \xi_{j,i}\bar{w}\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial z} + \xi_{j,i}(\varepsilon_y\alpha_j^2+\lambda)\overline{c}_j(x,z) - \xi_{j,i}\frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\right)\right] = 0\ . \tag{65}$$

Truncando a série da equação (65) em um valor conveniente J obtêm-se $\bar{c}_j = (\bar{c_0}, \bar{c_1}, \bar{c_2}, ..., \bar{c_J})$, o que leva a um conjunto de J+1 equações advectivas-difusivas bidimensionais, como segue:

$$\bar{u}\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial x} + \bar{w}\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial z}\left(\varepsilon_z\frac{\partial\overline{c}_j(x,z)}{\partial z}\right) - (\varepsilon_y\alpha_j^2+\lambda)\overline{c}_j(x,z)\ . \tag{66}$$

Note que a equação (66) é análoga a equação do problema bidimensional apresentado na seção anterior, a qual é resolvida através da aplicação do método GILTT na variável z. A solução desse problema já é conhecida e dada pela equação (25).

Logo, as matrizes do problema transformado para o caso tridimensional são escritas da forma:

$$\begin{aligned}
A &= \int_0^h \bar{u}\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz\,;\\
B &= \int_0^h \bar{w}\Psi'_n(z)\Psi_m(z)dz - \int_0^h \varepsilon'_z\Psi'_n(z)\Psi_m(z)dz + \beta_n^2\int_0^h \varepsilon_z\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz +\\
&\quad \alpha_j^2\int_0^h \varepsilon_y\Psi_n(z)\Psi_m(z)dz + \lambda\int_0^h \Psi_n(z)\Psi_m(z)dz\ .
\end{aligned} \tag{67}$$

Aplicando o mesmo procedimento para a equação (56), a condição de fonte é escrita da forma:

$$E(0) = \overline{c}_{j,n}(0) = Q\Psi_n(z_s)\Phi_j(y_s)A^{-1} \ . \tag{68}$$

Portanto, a solução final do problema tridimensional é dada pela expressão:

$$\bar{c}(x,y,z) = \sum_{j=0}^{\infty} \overline{c}_j(x,z)\Phi_j(y) \, , \tag{69}$$

onde $\Phi_j(y) = cos(\alpha_j y)$ e $\overline{c}_j(x,z)$ é dado pela equação (52).

As variáveis consideradas nos modelos são escritas na forma adimensional, sendo definidas do seguinte modo (BARROS, 2004):

$$C = \frac{\bar{c}}{c_0} \ , \ X = \frac{x}{h} \ , \ Z = \frac{z}{h} \ , \ Y = \frac{y}{l} \ ,$$

$$U = \frac{u}{\bar{u}} \ , \ K_Z = \frac{\varepsilon_z}{\bar{u}h} \ , \ K_y = \frac{\varepsilon_y}{\bar{u}l} \ , \ \gamma = \frac{\lambda h}{\bar{u}} \ ,$$

onde C é a concentração adimensional, $\bar{c}$ é a concentração média (g/m^3), c_0 é a concentração inicial (g/m^3), h é a profundidade do rio ou canal (m), l é a largura do rio ou canal (m), u é o perfil de velocidade (m/s), $\bar{u}$ é a velocidade média (m/s), ε_y e ε_z são os coeficientes de difusão turbulenta (m^2/s) nas direções y e z, respectivamente, e λ é o coeficiente de degradação química da substância (s^{-1}).

Uma vez encontrada a solução analítica para os problemas bidimensional e tridimensional, resta-nos identificar os parâmetros desconhecidos nas equações (25) e (53). Assim, no próximo capítulo serão apresentadas as parametrizações empregadas para a validação do modelo e implementação dos resultados.

4 DADOS PARA A VALIDAÇÃO DO MODELO

Neste capítulo são apresentados os dados experimentais, as parametrizações do coeficiente de difusão e do perfil de velocidade e os índices estatísticos adotados neste trabalho.

4.1 Dados experimentais

A verificação do modelo utilizado com os dados experimentais são fundamentais para que exista consistência entre os resultados preditos pelo modelo e os valores reais do sistema estudado. A seguir são apresentados os experimentos empregados para validação do modelo bidimensional no plano horizontal e vertical.

4.1.1 Experimento 1

Em (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984) foi desenvolvido um modelo que não incorpora variações longitudinais nem termos de decaimento químico. Os autores simularam a dispersão de uma solução contendo NaCl em um canal de 15 m de comprimento e profundidade de 0,15 m. A largura do canal era de 0,56 m e sua velocidade média é de 0,55 m/s. A constante de Von Kármán, κ, é de 0,35 e a velocidade de atrito, u^*, é de 0,055 m/s. Estes dados, κ e u^*, foram extraídos de medidas experimentais e foram utilizados por (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984). A fonte poluidora é pontual e está localizada na posição adimensional Z_s = 0,75. Os parâmetros hidráulicos utilizados nesse experimento estão apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Parâmetros hidráulicos do experimento 1

d (m)	h (m)	l (m)	$\overline{u}$ (ms^{-1})	u^* (ms^{-1})	κ	Z_s
15	0,15	0,56	0,55	0,055	0,35	0,75

4.1.2 Experimento 2

Em (NOKES; WOOD, 1988) foi simulada a dispersão de uma solução diluída de NaCl em um canal com 0,05 m de profundidade e 0,559 m de largura. Tal modelo não incorpora variações longitudinais nem termos de decaimento químico. A velocidade média do escoamento é de 0,236 m/s e a velocidade de atrito, u^*, é de 0,014 m/s. A constante de Von Kármán, κ, foi medida experimentalmente e tem valor igual a 0,34. O despejo é pontual e a fonte está localizada na posição Z_s = 0,24. Os parâmetros hidráulicos empregados nesse experimento estão apresentados na Tabela 2.

Tabela 2: Parâmetros hidráulicos do experimento 2

h (m)	l (m)	$\overline{u}$ (ms^{-1})	u^* (ms^{-1})	κ	Z_s
0,05	0,559	0,236	0,014	0,34	0,24

4.2 Parametrizações

Os modelos de dispersão de poluentes são extremamente dependentes das parametrizações de turbulência e de escoamento escolhidas. Isso ocorre pelo fato de que são esses parâmetros que contêm, em princípio, todas as informações da física do problema. Assim, essa seção apresenta as parametrizações escolhidas para o perfil de velocidade e para o coeficiente de difusão turbulenta.

4.2.1 Perfil de velocidade

O perfil de velocidade turbulenta, já adimensionalizado, adotado na simulação dos modelos segue aproximadamente o perfil da lei logarítmica, dado por (FISCHER et al., 1979):

$$U(Z) = 1 + \frac{u^*}{\bar{u}\kappa}[1 + ln(Z)]\,, \tag{70}$$

sendo que

$$u^* = \sqrt{\frac{\tau_0}{\rho}}\,.$$

Notação: u^* é a velocidade de atrito (m/s), $\bar{u}$ é a velocidade média do escoamento (m/s), κ é a constante de Von Karman, τ_0 é a tensão de cisalhamento no fundo do rio (Kg/m^2s) e ρ é a densidade do fluido (Kg/m^3).

A Figura 2 apresenta o comportamento do perfil de velocidade do escoamento.

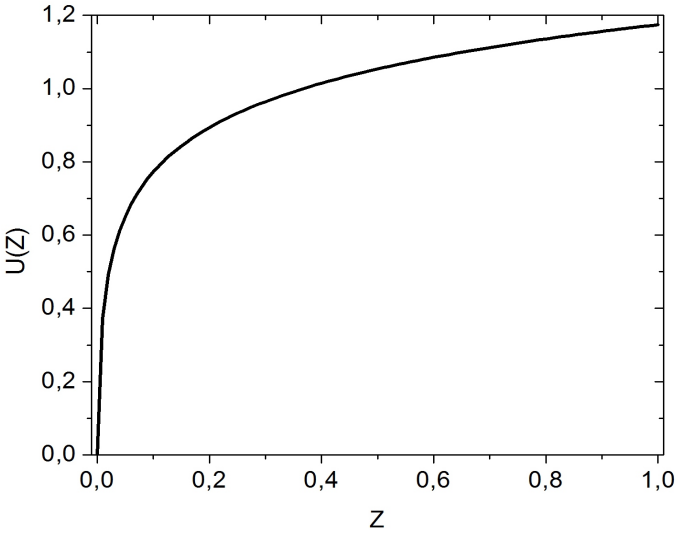

Figura 2: Perfil de velocidade turbulenta em função da profundidade.

4.2.2 Coeficiente de difusão

O coeficiente de difusão vertical, já adimensionalizado, utilizado na simulação dos modelos pode ser derivado a partir do perfil de velocidade, dado por (FISCHER et al., 1979):

$$K_z(Z) = \frac{\bar{u}\kappa}{u^*} Z(1-Z) \ . \tag{71}$$

Notação: $\bar{u}$ é a velocidade média do escoamento (m/s), κ é a constante de Von Karman e u^* é a velocidade de atrito (m/s).

O comportamento do coeficiente de difusão é representado na Figura 3.

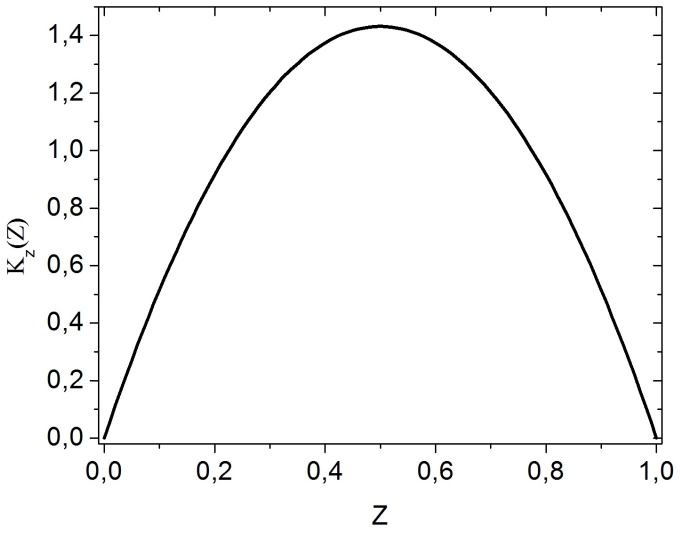

Figura 3: Perfil de difusividade vertical turbulenta em função da profundidade.

A expressão para o coeficiente de difusão transversal empregado no modelo tridimensional é dada, na forma adimensional, por (FISCHER et al., 1979):

$$K_y = 0.15 \frac{hu^*}{\bar{u}l} \ . \tag{72}$$

O coeficiente de difusividade transversal é um parâmetro empírico, o qual é obtido através de uma média aproximada de resultados experimentais.

4.3 Dados estatísticos

Usualmente utilizam-se índices estatísticos para avaliar o desempenho do modelo. Esses índices descrevem a concordância entre os dados de concentração simulados e os dados observados nos experimentos trabalhados.

Os índices estatísticos aplicados neste estudo são definidos do seguinte modo (HANNA, 1989):

1. Erro quadrático médio normalizado (*Normalized Mean Square Error*): informa sobre todos os desvios entre as concentrações dos modelos e as concentrações observadas. Esse índice é uma estatística adimensional e seu valor deve ser o menor possível para um bom modelo:

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o}\,\overline{C_p}} \ . \tag{73}$$

2. Coeficiente de correlação: descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para uma boa performance o seu valor ideal é 1:

$$COR = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p} \ . \tag{74}$$

3. Fração de Inclinação (*Fractional Bias*): informa a tendência do modelo de superestimar ou subestimar as concentrações observadas. O valor ótimo para este índice é zero:

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \ . \tag{75}$$

4. Desvio fracional padrão (*Fractional Shift*): compara os desvios-padrão observados e simulados. O valor ideal para este índice é zero:

$$FS = \frac{\sigma_0 - \sigma_p}{0,5(\sigma_0 + \sigma_p)} \ . \tag{76}$$

Notação: C é a concentração de poluentes adimensional, σ é o desvio padrão e os índices o e p indicam as quantidades observadas e preditas, respectivamente.

5 RESULTADOS

Neste capítulo são apresentados os resultados numéricos e estatísticos obtidos com o método GILTT.

Para a obtenção dos resultados numéricos utilizou-se a linguagem de programação FORTRAN 90. Todas as variáveis consideradas nesta análise estão na forma adimensional, conforme definição no Capítulo 3.

5.1 Modelo bidimensional no plano longitudinal e vertical

Nesta seção são apresentados os resultados para o modelo analítico bidimensional vertical. Para a obtenção da concentração de poluentes foram utilizados os dados do experimento 1 e as parametrizações apresentadas no Capítulo 4.

Inicialmente é feita a validação do modelo através da comparação com dois modelos bidimensional de transporte de poluentes em rios e canais encontrados na literatura (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984) e (BARROS, 2004).

O modelo desenvolvido por Barros (BARROS, 2004) utiliza as mesmas hipóteses e parametrizações adotadas neste trabalho, com a diferença que a solução do problema é obtida através do método numérico GITT. O modelo apresentado por Nokes (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984) utiliza os dados do experimento 1, descrito na subseção 4.1.1.

O gráfico apresentado na Figura 4 mostra o resultado analítico obtido através do método GILTT confrontado com os resultados numérico, obtidos via GITT (BARROS, 2004), e experimental (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984).

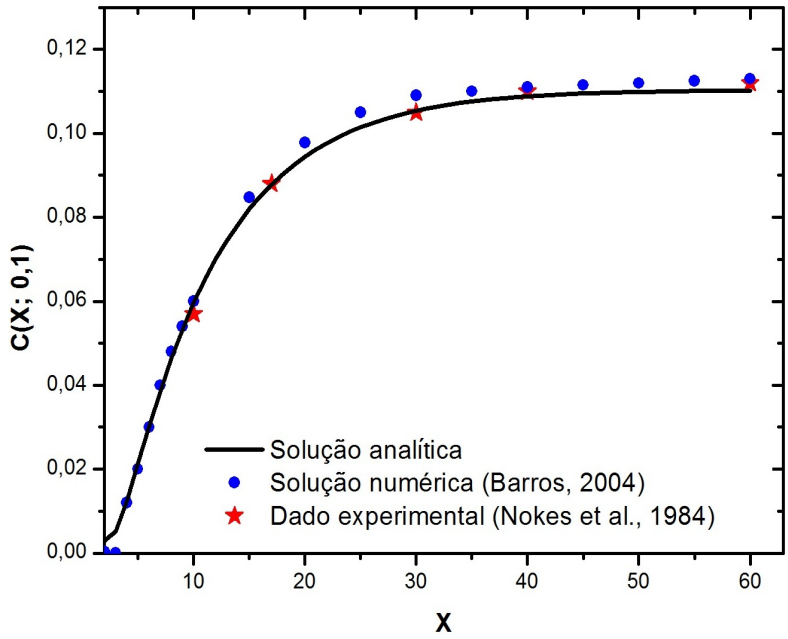

Figura 4: Validação do modelo analítico bidimensional em Z = 0,1 comparado com resultados da literatura (BARROS, 2004) e (NOKES; MCNULTY; WOOD, 1984).

Através do gráfico percebe-se que há uma boa concordância entre os resultados. Além disso, verifica-se que os dados da concentração preditos pelo modelo se aproximam mais dos dados experimentais do que os resultados apresentados por (BARROS, 2004). Isso pode ser explicado pelo fato de que o método GITT apresenta uma solução aproximada para o problema de dispersão vertical, enquanto que a solução obtida pela GILTT é completamente analítica.

A seguir, é feita a análise estatística do modelo bidimensional a fim de avaliar o seu desempenho. A Tabela 3 apresenta os valores dos índices estatísticos, obtidos pelo método GILTT, para o experimento 1.

Tabela 3: Avaliação estatística do modelo bidimensional utilizando o experimento 1

Modelo	NMSE	COR	FB	FS
GILTT	0,00	0,99	0,00	-0,069

A partir dos resultados obtidos pelo modelo observa-se um erro quadrático médio (NMSE) nulo e coeficiente de correlação (COR) próximo ao valor ideal, indicando bons resultados. Com isso, pode-se afirmar que o modelo simula satisfatoriamente as concentrações observadas no experimento 1.

A Figura 5 mostra o gráfico de espalhamento, onde tem-se as concentrações observadas experimentalmente em função das concentrações preditas pelo modelo.

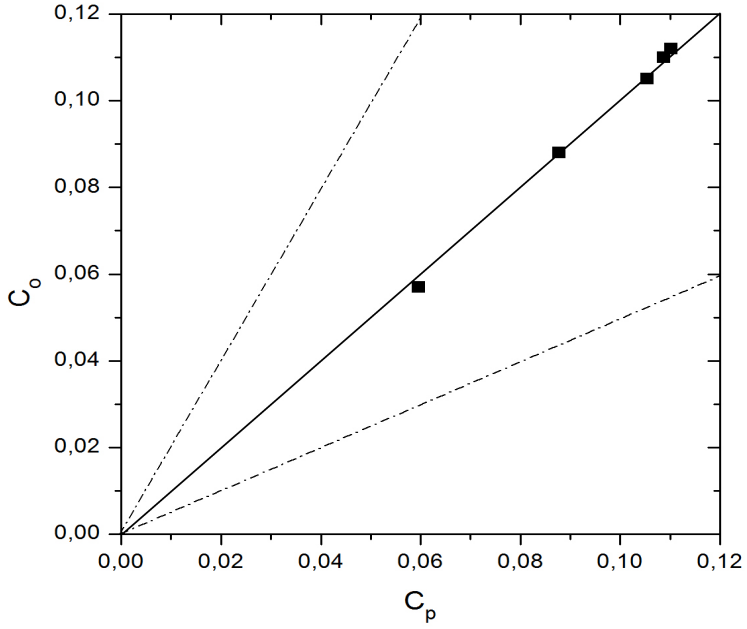

Figura 5: Gráfico de espalhamento dos dados de concentração observados no experimento 1 (C_o) em comparação com os dados preditos pelo modelo (C_p).

Na análise de gráficos de espalhamento, se todos os resultados obtidos estiverem entre as retas pontilhadas constata-se que o modelo apresenta um bom desempenho. As retas pontilhadas indicam o fator de dois (FA2), que é calculado por $0,5 \leq \frac{C_p}{C_o} \leq 2$. Os dados apresentados abaixo ou acima da reta central mostram se o modelo está subestimando ou superestimando em relação as concentrações observadas experimentalmente. Desse modo, analisando o gráfico da Figura 5, pode-se concluir que os resultados obtidos pelo modelo são satisfatórios.

Utilizando o mesmo experimento, verifica-se o comportamento da concentração de poluentes C em função do número de autovalores N para diferentes distâncias da fonte poluidora. Os resultados obtidos para a concentração são apresentados na Tabela 4.

Tabela 4: Comportamento da concentração de poluentes C em Z = 0,1 para as distâncias X = 10; 30; 50

N	C(10; 0,1)	C(30; 0,1)	C(50; 0,1)
5	0,075658469	0,104485091	0,106099946
10	0,076143327	0,104508681	0,106101307
15	0,076389101	0,104522289	0,106102093
20	0,076307520	0,104518365	0,106101866
25	0,076242823	0,104514791	0,106101660
30	0,076273258	0,104516240	0,106101744
35	0,076301404	0,104517795	0,106101834
40	0,076286333	0,104517083	0,106101792
45	0,076271224	0,104516248	0,106101744
50	0,076279813	0,104516651	0,106101768
55	0,076288860	0,104517152	0,106101799
60	0,076283578	0,104516905	0,106101782
65	0,076277838	0,104516587	0,106101764
70	0,076281203	0,104516744	0,106101773
75	0,076284923	0,104516950	0,106101781
80	0,076282786	0,104516851	0,106101779
85	0,076280430	0,104516720	0,106101771
90	0,076281686	0,104516778	0,106101775
95	0,076282997	0,104516850	0,106101779
100	0,076282549	0,104516830	0,106101778

A partir dos valores encontrados para a concentração pode-se observar uma estabilidade do modelo na medida em que se aumenta a ordem de truncamento da série. Além disso, percebe-se que para distâncias mais afastadas da fonte poluidora a concentração de poluentes fica estável mais rapidamente, uma vez que o poluente já se encontra distribuído uniformemente no meio. Para a obtenção dos resultados numéricos do problema bidimensional utilizou-se N = 100 autovalores na solução em série. O tempo computacional gasto para a simulação de cada resultado é em média 10 segundos.

Os dados apresentados na Tabela 4 encontram-se na Figura 6, que mostra o comportamento da concentração de poluentes em função do número de autovalores N.

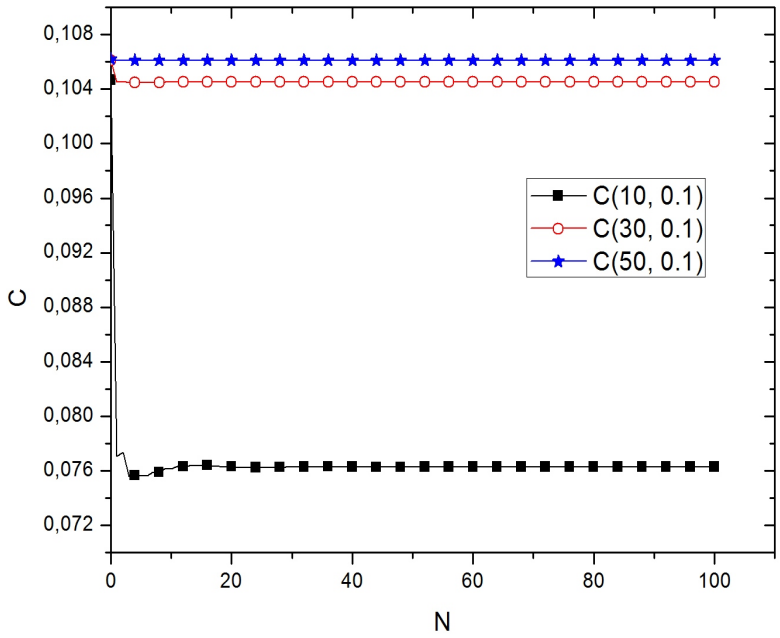

Figura 6: Comportamento da concentração de poluentes C em Z = 0,1 para as distâncias X = 10; 30; 50.

No estudo da dispersão de poluentes é muito importante ter conhecimento do local onde ocorre a concentração máxima das substâncias poluidoras, uma vez que os modelos de dispersão são utilizados com o intuito de prever as zonas críticas de poluição. Sendo assim, na Figura 7 analisam-se os gráficos da concentração em função da distância X considerando diferentes alturas de fonte (Z_s = 0,2; Z_s = 0,5; Z_s = 0,75; Z_s = 1).

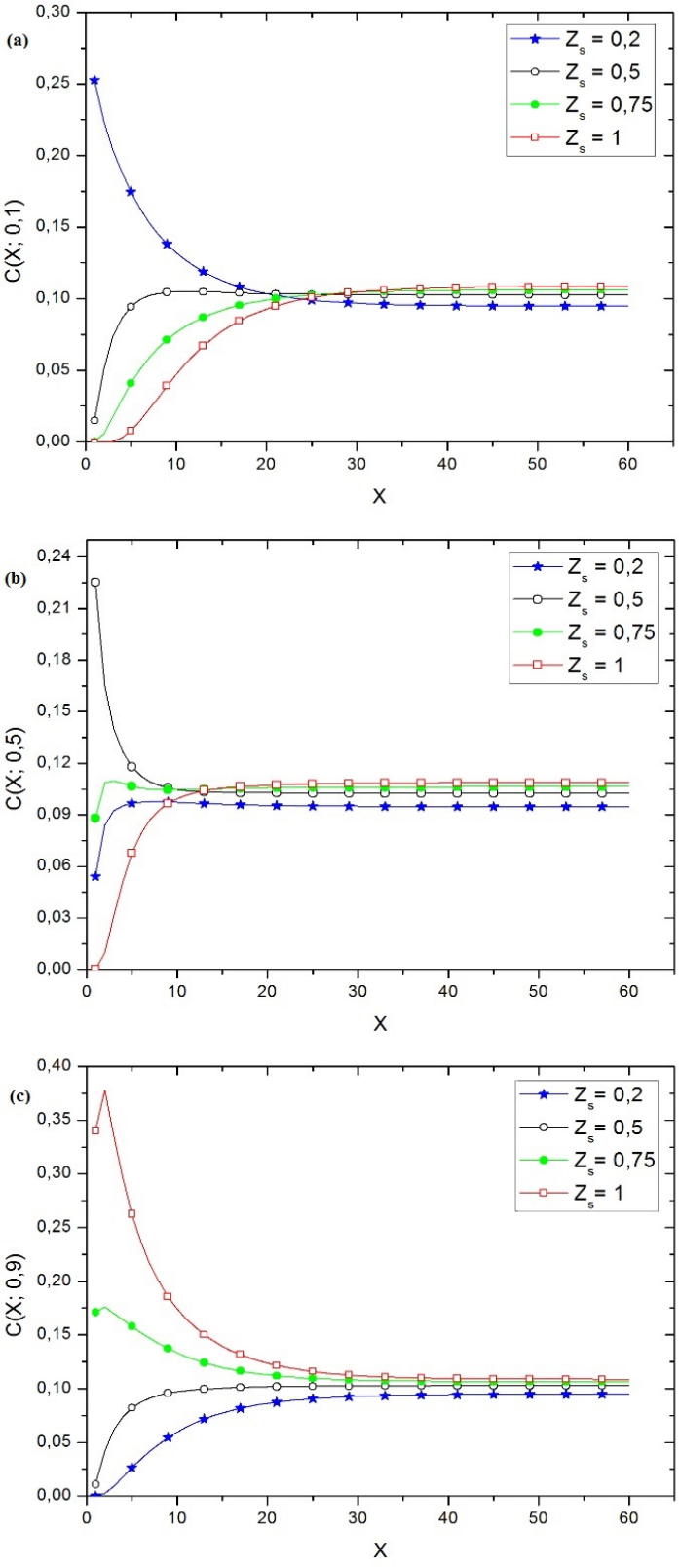

Figura 7: Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para quatro posições de fonte (Z_s = 0,2; Z_s = 0,5; Z_s = 0,75; Z_s = 1) e três profundidades: (a) Z = 0,1; (b) Z = 0,5; (c) Z = 0,9.

Para a profundidade Z = 0,1 (Figura 7a), percebe-se que, conforme era esperado, a concentração é maior quando a fonte está localizada na altura Z_s = 0,2 porque a concentração está sendo medida próxima da fonte de poluição. Em contrapartida, para as demais alturas de fonte, a concentração é máxima para distâncias mais afastadas. Verifica-se também que para distâncias maiores que X = 30 a concentração praticamente não apresenta variações de valores, mostrando que o poluente já está dissolvido no meio.

Supondo Z = 0,5 (Figura 7b), observa-se que a concentração é mais acentuada quando a fonte está na altura Z_s = 0,5 para distâncias próximas do ponto inicial de lançamento do poluente. Contudo, para as demais alturas de fonte, a concentração é máxima também para distâncias próximas. Constata-se, também para esse caso, que a homogeneização do poluente com o meio ocorre já para as distâncias a partir de X = 10.

Considerando Z = 0,9 (Figura 7c), nota-se que a concentração é mais acentuada na altura de fonte Z_s = 0,9 para uma área próxima ao local de emissão do poluente. Já para a altura de fonte Z_s = 0,5 a concentração é máxima também para distâncias próximas, enquanto que para as outras alturas a concentração é maior para distâncias mais afastadas. Percebe-se ainda que para distâncias maiores que X = 30 a concentração praticamente se mantêm constante, indicando que o poluente está completamente misturado com o meio.

Na Figura 8, apresentam-se os gráficos da profundidade em função da concentração para três distâncias (X = 0,5; X = 2; X = 10) em diferentes alturas de fonte (Z_s = 0,2; Z_s = 0,5; Z_s = 0,75; Z_s = 1).

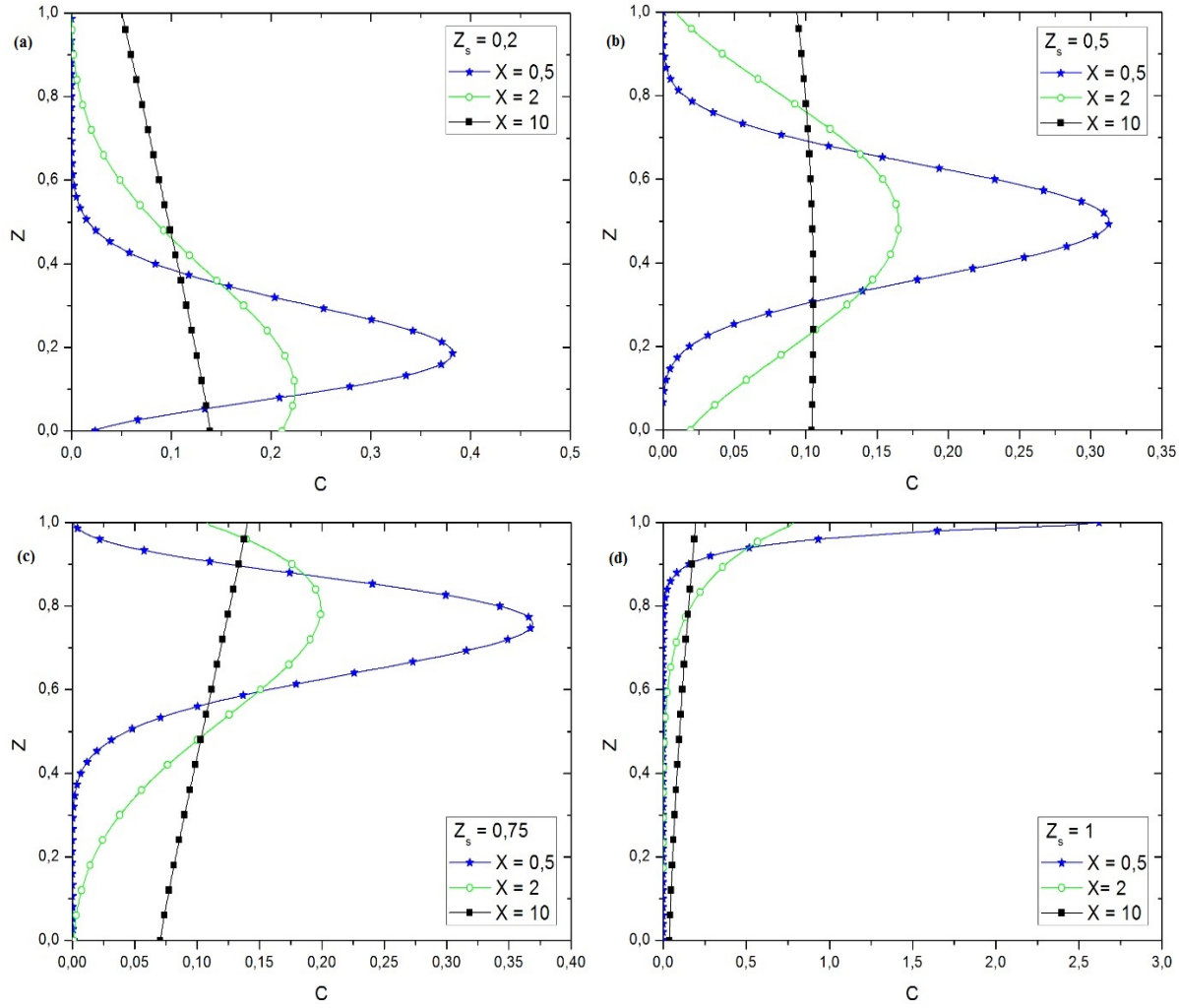

Figura 8: Perfil vertical da concentração de poluentes C para três distâncias (X = 0,5; X = 2; X = 10) e quatro posições de fonte: (a) Z_s = 0,2; (b) Z_s = 0,5; (c) Z_s = 0,75; (d) Z_s = 1.

Através dos gráficos observa-se que, para todas as alturas de fonte analisadas, a concentração alcança o seu valor máximo na altura em que a fonte poluidora está localizada e que a concentração apresenta maiores valores para as distâncias próximas do local de despejo do contaminante. Além disso, verificou-se que para distâncias mais afastadas da fonte o perfil de concentração não apresenta grandes variações, ou seja, existe uma tendência à obtenção de um perfil homogêneo de concentração.

Para ilustrar outra aplicação do modelo bidimensional vertical é realizada a comparação entre os resultados obtidos pela GILTT e os resultados encontrados na literatura (BARROS, 2004) e (NOKES; WOOD, 1988). Para a obtenção desse resultado foram utilizados os dados do experimento 2.

O modelo desenvolvido por (BARROS, 2004) utiliza as mesmas hipóteses deste trabalho. O modelo apresentado por Nokes (NOKES; WOOD, 1988) utiliza os dados

do experimento 2, descrito na subseção 4.1.2.

A Figura 9 mostra a comparação entre o resultado analítico obtido via GILTT e os resultados numérico, obtidos via GITT (BARROS, 2004), e experimental (NOKES; WOOD, 1988). C_{eq} representa a concentração de equilíbrio e seu valor é aproximadamente igual a 0,1.

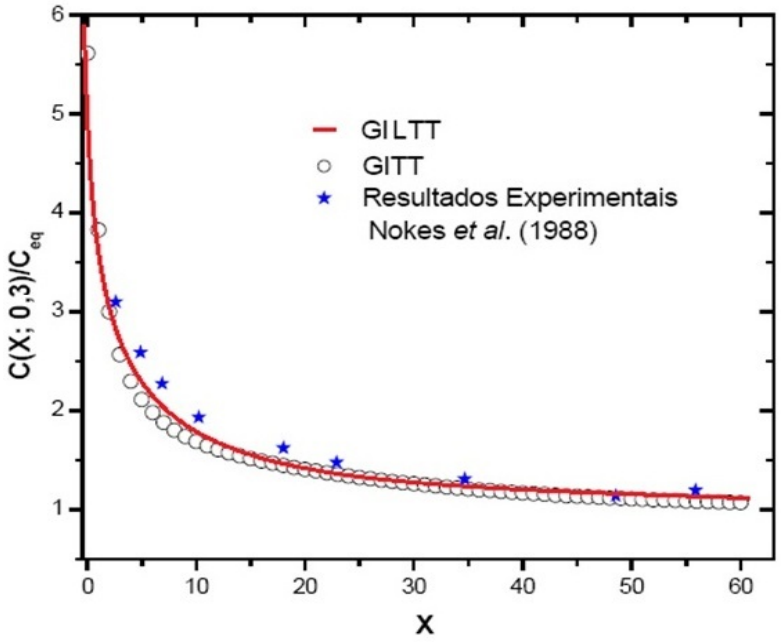

Figura 9: Validação do modelo analítico bidimensional em Z = 0,3 comparado com resultados da literatura (BARROS, 2004) e (NOKES; WOOD, 1988).

Através do gráfico percebe-se que há uma pequena discordância em relação ao resultado experimental para os valores pequenos de X. Essa diferença pode ser explicada pelo fato de que na região próxima à fonte poluidora, devido a turbulência do escoamento, a dispersão do poluente ocorre de forma tridimensional. Entretanto, a partir do ponto X = 20, pode-se observar que os resultados obtidos estão em boa concordância com os dados experimentais. Além disso, verifica-se que, assim como na comparação anterior, a solução analítica obtida pelo modelo simulado apresenta melhores resultados do que a solução numérica apresentada por (BARROS, 2004).

5.2 Modelo tridimensional

Nesta seção serão apresentados resultados preliminares para o modelo analítico tridimensional. Para a obtenção da concentração de poluentes foram utilizadas as parametrizações apresentadas no Capítulo 4 e os dados experimentais descritos na subseção 4.1.1, acrescentando o dado de entrada Q =1.

Primeiramente é feito um estudo do comportamento da concentração de poluentes em função do número de autovalores J para diferentes distâncias da fonte poluidora.

Para essa simulação utilizou-se N = 100 autovalores. Os resultados obtidos para a concentração são apresentados nas Tabelas 5 e 6.

Tabela 5: Comportamento da concentração de poluentes C em Y = 0 e Z = 0,5 para as distâncias X = 10; 40; 80

J	C(10; 0; 0,5)	C(40; 0; 0,5)	C(80; 0; 0,5)
5	0,057254139	0,049193008	0,041403595
10	0,095476741	0,063205832	0,045774913
15	0,116908961	0,064786305	0,045844870
20	0,126034199	0,064848009	0,045845003
25	0,128984988	0,064848830	0,045845003
30	0,129709867	0,064848834	0,045845003
35	0,129845190	0,064848834	0,045845003
40	0,129864396	0,064848834	0,045845003
45	0,129866469	0,064848834	0,045845003
50	0,129866640	0,064848834	0,045845003
55	0,129866650	0,064848834	0,045845003
60	0,129866651	0,064848834	0,045845003
65	0,129866651	0,064848834	0,045845003
70	0,129866651	0,064848834	0,045845003

Tabela 6: Comportamento da concentração de poluentes C em Y = 0,05 e Z = 0,5 para as distâncias X = 10; 40; 80

J	C(10; 0,05; 0,5)	C(40; 0,05; 0,5)	C(80; 0,05; 0,5)
5	0,050735511	0,044295973	0,037967404
10	0,063262211	0,049888450	0,040014280
15	0,054624238	0,049410302	0,039998359
20	0,046335234	0,049357213	0,039998248
25	0,043669203	0,049356423	0,039998248
30	0,043386944	0,049356421	0,039998248
35	0,043433756	0,049356421	0,039998248
40	0,043450804	0,049356421	0,039998248
45	0,043452727	0,049356421	0,039998248
50	0,043452802	0,049356421	0,039998248
55	0,043452799	0,049356421	0,039998248
60	0,043452798	0,049356421	0,039998248
65	0,043452798	0,049356421	0,039998248
70	0,043452798	0,049356421	0,039998248

Através dos valores obtidos observa-se uma estabilidade do modelo na medida em que se aumenta a ordem de truncamento da série. Além disso, percebe-se que para distâncias mais afastadas da fonte poluidora a concentração de poluentes fica estável mais rapidamente, uma vez que o poluente já se encontra distribuído uniformemente no meio. Para a obtenção dos resultados numéricos do problema tridimensional utilizou-se N = 100 e J = 40 autovalores na solução em série.

A seguir, apresentam-se os gráficos da distribuição da concentração de poluentes nas Figuras 10 e 11.

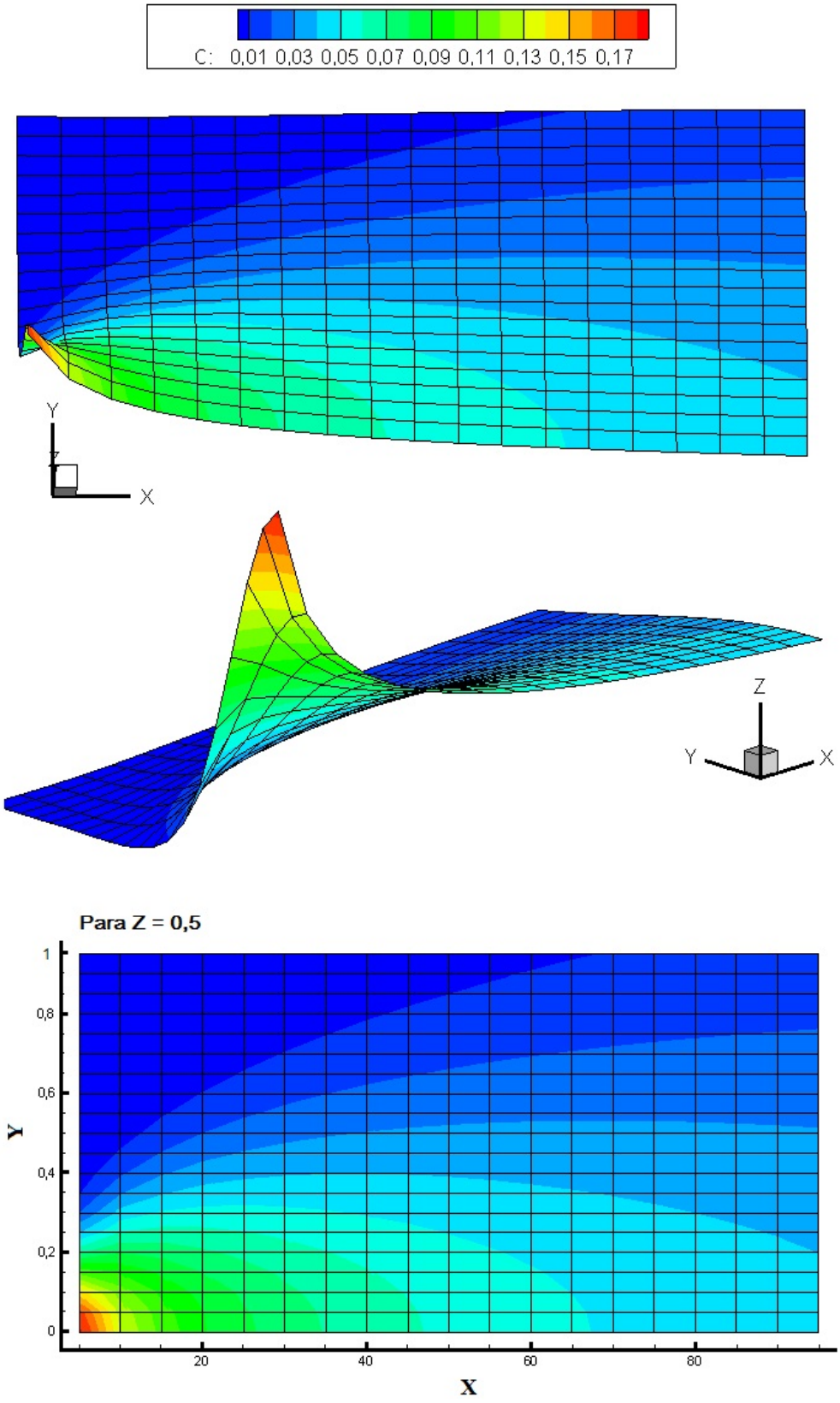

Figura 10: Gráfico do comportamento da concentração de poluentes C considerando a fonte poluidora localizada no ponto (0; 0; 0,75).

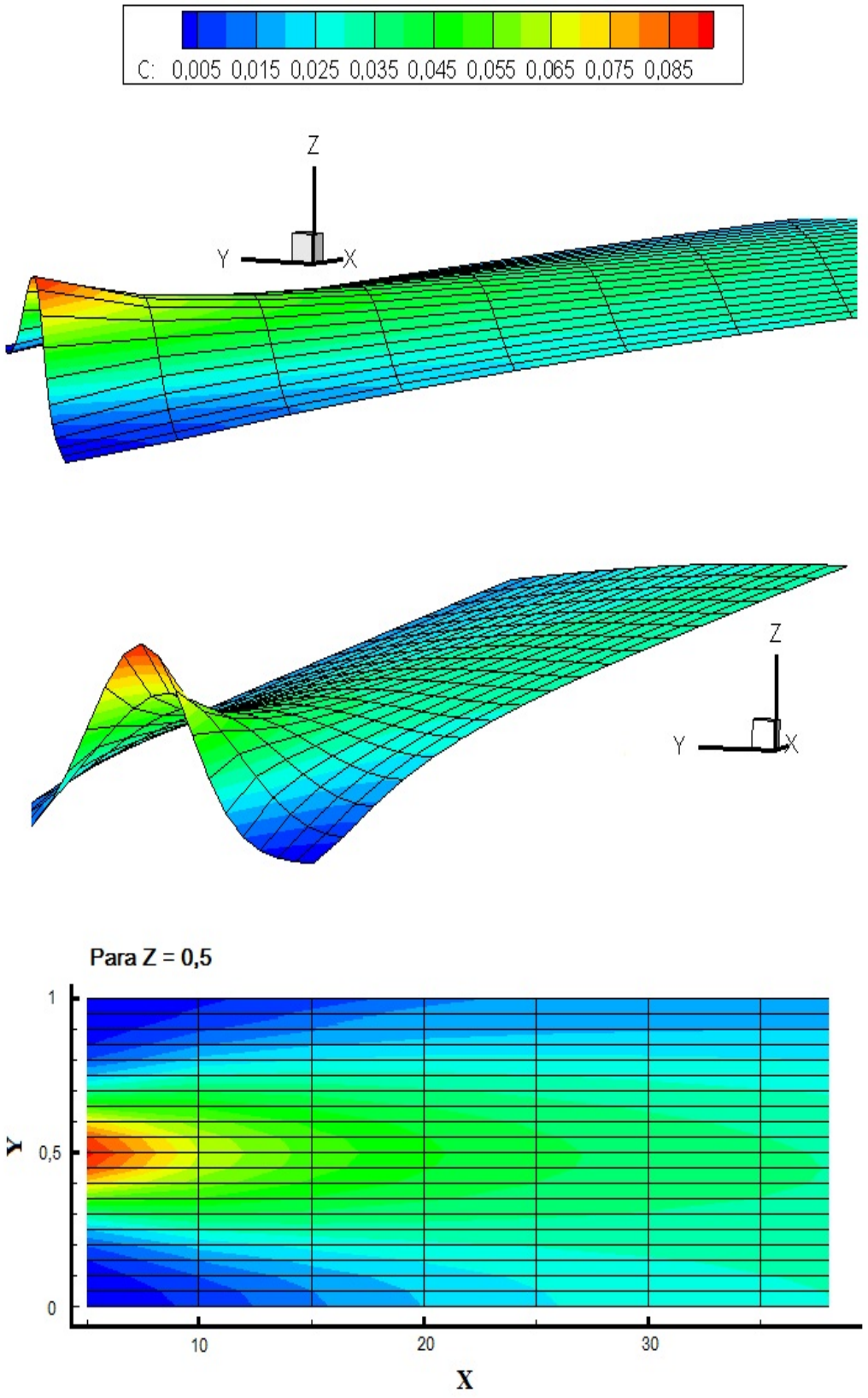

Figura 11: Gráfico do comportamento da concentração de poluentes C considerando a fonte poluidora localizada no ponto (0; 0,5; 0,75).

Os gráficos apresentados na Figura 10 mostram, através de diferentes ângulos, como ocorre o processo de dispersão de contaminantes ao longo de um rio, no qual a fonte poluidora está localizada no ponto (0; 0; 0,75).

A partir desses gráficos observa-se que, conforme o esperado, a concentração de poluentes alcança o seu valor máximo próximo ao local de despejo e que o nível de concentração diminui a medida que aumenta a distância da fonte poluidora. Além disso, percebe-se que o poluente se dispersa mais rapidamente na direção longitudinal do rio, pois sofre a influência da velocidade do escoamento nessa direção. Outro aspecto relevante é que conforme a distância em X aumenta o poluente se aproxima da margem oposta ao despejo (Y = 1), atingindo-a após a distância X = 65.

De modo semelhante, os gráficos da Figura 11 apresentam o comportamento da concentração de contaminantes ao longo de um rio, sendo que a fonte de poluição está localizada no ponto (0; 0,5; 0,75).

Assim como no caso anterior, nota-se que o nível de concentração é mais acentuado próximo ao ponto de lançamento do poluente e que se dispersa mais rapidamente no sentido do escoamento. No entanto, nesse caso percebe-se, em relação ao eixo y, que a difusão ocorre de forma simétrica ao longo do rio, se aproximando de ambas as margens conforme distancia-se na direção longitudinal do ponto de despejo.

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho foi apresentada, através do método GILTT, uma solução analítica para os modelos bidimensional vertical e tridimensional em regime permanente, simulando o processo de dispersão de contaminantes em rios e canais. Dessa modo, é possível afirmar que o objetivo principal deste estudo foi alcançado.

Por meio de uma análise estatística, que investigou a concordância entre os dados experimentais e os dados simulados pelo modelo bidimensional vertical, constatou-se o bom desempenho desse modelo. Verificou-se também, para os casos estudados, que os resultados analíticos obtidos se mostraram, quando comparados com os dados experimentais, melhores que os resultados numéricos encontrados na literatura.

Quanto ao modelo tridimensional, observou-se que os resultados preliminares obtidos se mostraram coerentes com a física do problema, apresentando uma semelhança em relação aqueles encontrados para o problema bidimensional.

Dessa forma, pode-se concluir que o método GILTT é eficiente na resolução de problemas de modelagem da dispersão de contaminantes em rios e canais, demonstrando que essa técnica, que já teve êxito na simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, vem se mostrando promissora também nos meios aquáticos.

Para trabalhos futuros, propõe-se realizar novos testes para o modelo tridimensional estudado e confrontar os resultados obtidos com dados da literatura. Além disso, sugere-se buscar a solução analítica, via GILTT, para o modelo bidimensional no plano longitudinal e transversal em regime permanente. Outra extensão natural deste estudo é a implementação da solução para os modelos bidimensional e tridimensional em regime transiente.

REFERÊNCIAS

ARYA, S. P. **Air pollution meteorology and dispersion**. New York: Oxford University Press, 1999.

BARROS, F. **Modelos multidimensionais para dispersão de contaminantes em rios e canais**: soluções híbridas por transformação integral. 2004. Dissertação de Mestrado — COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro/RJ.

BOGLE, G. Stream velocity profiles and longitudinal dispersion. **Journal of Hydraulic Engineering**, v.123, n.9, p.816–820, 1997.

BRAGA, B.; HESPANHOL, I.; CONEJO, J.; BARROS, M.; SPENCER, M.; PORTO, M.; NUCCI, P.; JULIANO, N.; EIGER, S. **Introdução a Engenharia Ambiental**. 2.ed. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2005.

BUSKE, D. **Solução GILTT bidimensional em geometria cartesiana**: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera. 2008. Tese de Doutorado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; SEGATTO, C. F.; QUADROS, R. S. **A General Analytical Solution of the Advection-Diffusion Equation for Fickian Closure**. Birkhauser, Boston: Integral Methods in Science and Engineering: Techniques and Applications, Organized by: C. Constanda; P. Harris, 2011. v.1, p.25–34.

CHOW, V. T. **Open Channel Hydraulics**. New York: McGraw - Hill Book Company, 1959.

CODELL, R.; KEY, K.; WHELAN, G. A collection of mathematical models for dispersion in surface water and groundwater. **Nuclear Regulatory Commission**, 1982. NUREG-0868.

COSTA, C.; CASTRO, M. A. H. Estudo unidimensional do transporte de contaminantes utilizando uma metodologia numérico-analítica. **Águas Subterrâneas**, v.19, n.2, p.137–148, 2005.

CROUCHER, A.; O´ SULLIVAN, M. Numerical methods for contaminant transport in rivers and estuaries. **Computers & Fluids**, v.27, n.8, p.861–878, 1998.

DIAS, N. Obtenção de uma solução analítica da equação de difusão-advecção com decaimento de primeira ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, v.8, n.1, p.181–188, 2003.

EIGER, S. **Transporte de poluentes em meios aquáticos**: aspectos conceituais e de modelagem matemática. In: Reúso de Água. Coordenado por: Arlindo Philippi Jr., Editado por: P.C.S. Mancuso e H.F. dos Santos. Barueri: Manole, 2003. p.175–232.

FISCHER, H.; LIST, J.; KOH, R.; IMBERGER, J.; BROOKS, N. **Mixing in Inland and Coastal Waters**. London: Academic Press, 1979.

FLECK, L.; TAVARES, M.; EYNG, E. Principais modelos matemáticos de qualidade da água e suas aplicações: uma revisão. **Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia**, v.1, n.07, p.47–62, 2013.

GANDOLFI, C.; FACCHI, A. On the relative role of hydrodynamic dispersion for river water quality. **Water Resources Research**, v.37, n.9, p.2365–2375, 2001.

GARCIA, R. L. **Soluções exatas para problemas de dispersão de poluentes - modelo difusivo baseado na equação KDV**. 2009. Tese de Doutorado — UFRGS, Porto Alegre/RS.

GHARBI, S.; VERRETTE, J. Relation between longitudinal and transversal mixing coefficients in natural streams. **Journal of Hydraulic Research**, v.36, n.1, p.43–53, 1998.

HABEL, F.; MENDOZA, C.; BAGTZOGLOU, A. Solute transport in open channel flows and porous streambeds. **Advances in Water Resources**, v.25, n.4, p.455–469, 2002.

HANCU, S.; GHINDA T.AND MA, L.; LESNIC, D.; INGHAM, D. Numerical modeling and experimental investigation of the fluid flow and contaminant dispersion in a channel. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v.45, n.13, p.2707–2718, 2002.

HANNA, S. R. Confidence limit for air quality models as estimated by bootstrap and jacknife resampling methods. **Atmospheric Environment**, v.23, p.1385–1395, 1989.

HOLLEY, E.; ABRAHAM, G. Laboratory studies on transverse mixing in rivers. **Journal of Hydraulic Research**, v.11, n.3, p.219–253, 1973.

HONIG, C. **Análise Funcional e o Problema de Sturm-Liouville**. São Paulo: EDUSP, 1978.

LEW, C.; MILLS, W.; LOH, J. Power plant discharges of total residual chlorine and trihalomethanes into rivers: Potential for human health and ecological risks. **Hybrid Methods in Engineering**, v.1, p.19–36, 1999.

LIN, B.; SHIONO, K. Numerical modeling of solute transport in compound channel flows. **Journal of Hydraulic Research**, v.33, n.6, p.773–788, 1995.

MAIA NETO, R. Água para o desenvolvimento sustentável. **A Água em Revista**, v.5, n.9, p.21–32, 1997.

MAZUMDER, B.; DALAL, D. Contaminant dispersion from an elevated time dependent source. **Journal of Computational and Applied Mathematics**, v.126, n.1-2, p.185–205, 2000.

MAZUMDER, B.; XIA, R. Dispersion of pollutants in an asymmetric flow through a channel. **International Journal of Engineering Science**, v.32, n.9, p.1501–1510, 1994.

MOREIRA, D.; VILHENA, M.; BUSKE, D.; TIRABASSI, T. The state-of-art of the GILTT method to simulate pollutant dispersion in the atmosphere. **Atmospheric Research**, v.92, p.1–17, 2009.

MUNSON, B. R.; YOUNG, D.; OKIISHI, T. **Fundamentos da mecânica dos fluidos**. São Paulo: Edgard Blücher, 2004.

NEVES, C. S. **Um problema de dispersão de poluentes em rios e canais por meio do método de separação de variáveis**. 2012. Dissertação de Mestrado — FURG, Rio Grande/RS.

NOKES, R.; HUGHES, G. Turbulent mixing in uniform channels of irregular cross-section. **Journal of Hydraulic Research**, v.32, n.1, p.67–86, 1994.

NOKES, R.; MCNULTY, A.; WOOD, I. Turbulent dispersion from a steady two-dimensional horizontal source. **Journal of Fluid Mechanics**, v.149, p.147–159, 1984.

NOKES, R.; WOOD, I. Vertical and lateral turbulent dispersion: some experimental results. **Journal of Fluid Mechanics**, v.187, p.373–394, 1988.

ÖZISIK, M. **Heat Conduction**. 2 ed.ed. New York: John Wiley & Sons, 1993.

PORTO, R.; BRANCO, S.; CLEARY, R.; COIMBRA, R.; EIGER, S.; LUCA, S.; NOGUEIRA, V.; PORTO, M. **Hidrologia Ambiental**. São Paulo: Coleção ABRH de Recursos Hídricos, Parte 2, Ed. USP, 1991.

REN, Z.; ZENG, Y.; FU X.AND ZHANG, G.; CHEN, L.; CHEN, J.; CHOM, T.; WANG, Y.; WEI, Y. Modeling macrozooplankton and water quality relationships after wetland construction in the Wenyuhe River Basin, China. **Ecological Modelling**, v.252, n.1, p.97–105, 2013.

RUNKEL, R. Solution of the advection-dispersion equation: continuous load of finite duration. **Journal of Environmental Engineering**, v.122, n.9, p.830–832, 1996.

SEINFELD, J.; PANDIS, S. **Atmospheric chemistry and physics of air pollution**. New York: John Wiley & Sons, 1997.

SEO, I.; CHEONG, T. Predicting longitudinal dispersion coefficient in natural streams. **Journal of Environmental Engineering**, v.124, n.1, p.25–32, 1998.

SOARES, L. A.; RAMALDES, L. M. **Estudo comparativo dos modelos de dispersão atmosférica - CALPUFF e AERMOD - através da análise da qualidade do ar na Região Metropolitana da Grande Vitória**. 2012. Trabalho de Conclusão de Curso — UFES, Vitória/ES.

TIRABASSI, T.; TIESI, A.; BUSKE, D.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D. M. Some characteristics of a plume from a point source based on analytical solution of the two-dimensional advection-diffusion equation. **Atmospheric Environment**, v.43, p.2221–2227, 2009.

VAN GENUCHTEN, M.; ALVES, W. Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. **US Department of Agriculture, Technical Bulletin No. 1661**, p.151, 1982.

VILHENA, M.; SEFIDVASH, F. Two dimensional treatment of dispersion of pollutants in rivers. **The International Journal of Applied Radiation and Isotopes**, v.36, n.7, p.569–572, 1985.

VILHENA, M. T.; BUSKE, D.; DEGRAZIA, G. A.; QUADROS, R. S. An analytical model with temporal variable eddy diffusivity applied to contaminant dispersion in the atmospheric boundary layer. **Physica A: Statistical Mechanics and its Applications**, v.391, p.2576–2584, 2012.

WANG, S.; MCMILLAN, A. F.; CHEN, B. H. Dispersion of pollutants in channels with non-uniform velocity distribution. **Water Research**, v.12, n.6, p.389–394, 1978.

WEYMAR, G.; FURTADO, I.; BUSKE, D.; QUADROS, R. Solução de um modelo bidimensional para dispersão de contaminantes em rios e canais. **In: IX Encontro Regional de Matemática Aplicada e Computacional**, 2010.

WORTMANN, S.; VILHENA, M. T.; MOREIRA, D.; BUSKE, B. A new analytical approach to simulate the pollutant dispersion in the PBL. **Atmospheric Environment**, v.39, p.2171–2178, 2005.

XIA, R. Relation between mean and maximum velocities in a natural river. **Journal of Hydraulic Engineering**, v.123, n.8, p.720–723, 1997.

YEH, G.; TSAI, Y. Dispersion of water pollutants in a turbulent shear flow. **Water Resources Research**, v.12, n.6, p.1265–1270, 1976.

YOTSUKURA, N.; SAYRE, W. Transverse Mixing in Natural Channels. **Water Resources Research**, v.12, n.4, p.695–704, 1976.

ZOPPOU, C.; KNIGHT, J. Analytical solutions for advection and advection-diffusion equations with spatially variable coefficients. **Journal of Hydraulic Engineering**, v.123, n.2, p.144–148, 1997.

ZOPPOU, C.; KNIGHT, J. Analytical solutions spatially variable coefficient advection-diffusion equation in up to three dimensions. **Applied Mathematical Modelling**, v.23, n.9, p.667–685, 1999.