

UNIVERSIDADE FEDERAL DE PELOTAS
Centro de Engenharias
Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais



Dissertação

**Modelagem da dispersão de poluentes em rios e canais sob a perspectiva das
abordagens GILTT e separação de variáveis**

Bettina Rodrigues Machado

Pelotas, 2019

Bettina Rodrigues Machado

**Modelagem da dispersão de poluentes em rios e canais sob a perspectiva das
abordagens GILTT e separação de variáveis**

Dissertação apresentada ao Programa de
Pós-Graduação em Ciências Ambientais da
Universidade Federal de Pelotas, como re-
quisito à obtenção do título de Mestre em
Ciências Ambientais

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Daniela Buske
Coorientadora: Prof^a. Dr^a. Tirzah Moreira Siqueira

Pelotas, 2019

Universidade Federal de Pelotas / Sistema de Bibliotecas
Catalogação na Publicação

M149m Machado, Bettina Rodrigues

Modelagem da dispersão de poluentes em rios e canais sob a perspectiva das abordagens GILTT e separação de variáveis / Bettina Rodrigues Machado ; Daniela Buske, orientadora ; Tirzah Moreira Siqueira, coorientadora. — Pelotas, 2019.

57 f.

Dissertação (Mestrado) — Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, Centro de Engenharias, Universidade Federal de Pelotas, 2019.

1. Transformada integral. 2. Modelagem matemática. 3. Dispersão de poluentes. 4. Corpos hídricos. I. Buske, Daniela, orient. II. Siqueira, Tirzah Moreira, coorient. III. Título.

CDD : 551.48

**MODELAGEM DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS E CANAIS SOB A
PERSPECTIVA DAS ABORDAGENS GILTT E SEPARAÇÃO DE VARIÁVEIS**

por

Bettina Rodrigues Machado

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, PPGCamb, do
Centro de Engenharias, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Mestre em Ciências Ambientais

Banca Examinadora:

Prof^a. Dr^a. Daniela Buske (UFPel)

Prof^a. Dr^a. Tirzah Moreira Siqueira (UFPel)

Prof. Dr. Régis Sperotto de Quadros (UFPel)

Prof. Dr. Guilherme Jahnecke Weymar (UFPel)

Prof. Dr. Hugo Alexandre Soares Guedes (UFPel)

Pelotas, 20 de março de 2019.

RESUMO

RODRIGUES MACHADO, Bettina. **Modelagem da dispersão de poluentes em rios e canais sob a perspectiva das abordagens GILTT e separação de variáveis**. 2019. 57 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Ambientais) – Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, Centro de Engenharias, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2019.

Episódios envolvendo despejos de resíduos líquidos e degradação dos corpos hídricos vem sendo recorrentes ao longo da história. Tendo em vista a preservação dos recursos hídricos, faz-se necessária a utilização de ferramentas ambientais que reproduzam os fenômenos de transporte de poluentes, de modo a antever a dispersão do poluente e ter uma reação em um tempo-resposta adequado. Dentre as ferramentas ambientais merece destaque os modelos matemáticos pela praticidade e pela reprodução adequada destes fenômenos. O trabalho tem como objetivo apresentar e comparar as soluções utilizando as abordagens analíticas GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e separação de variáveis, que modelam o problema da dispersão de poluentes em rios e canais. Para tanto, é considerado um modelo bidimensional, no plano longitudinal e vertical. Por fim, são apresentadas simulações numéricas, comparações com dados experimentais e com resultados numéricos disponíveis. Como esperado, os resultados obtidos no estudo demonstram que a adoção dos coeficientes variáveis promove um incremento na qualidade da abordagem utilizada. Desta forma, a abordagem que melhor representou as situações hipotéticas foi a abordagem GILTT.

Palavras-chave: Transformada integral, Modelagem matemática, Dispersão de poluentes, Corpos hídricos.

ABSTRACT

RODRIGUES MACHADO, Bettina. **Pollutant dispersion modelling in rivers and channels under GILTT and separation of variables approaches**. 2019. 57 f. Dissertação (Mestrado em Ciências Ambientais) – Programa de Pós-Graduação em Ciências Ambientais, Centro de Engenharias, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2019.

Events involving disposal of liquids wastes and water resources degradation has been repeated over the years. Bearing in mind, the preservation of the water resources it's necessary the application of ambiental tools that reproduce the pollutant's phenomenon of transport, in this way is possible anticipate the pollutant dispersion and have a reaction in an adequate time. Among the ambiental tools deserves particular emphasis the mathematical models for practicality and reproducibility of these phenomenon's. These work aim's to present and compare the solutions using the analytical approach of GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) and separation of variables, which model the problem of dispersion of contaminants in rivers and channels. Therefore, is considered the two-dimensional, in the longitudinal vertical plane model. Finally are presented numerical simulations and some comparisons between experimental data and numerical results available in literature. As expected, the results obtained in these study demonstrate that the adoption of variable coefficients promotes an increase in the quality of the approach used. In this way, the approach that best represents the hypothetical situations was the GILTT approach.

Keywords: Integral transformation, Mathematical modeling, Pollutant dispersion, Water bodies.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1	a) Transporte puramente advectivo, considerando a velocidade real média (v_a) e caminho percorrido médio; b) deslocamento sofrido por um pulso de soluto no tempo ; c) relação entre concentração e posição. Fonte: Kinzelbach(1987).	13
Figura 2	Experimento de liberação de uma substância em canal aberto com fluxo turbulento. Fonte: Roberts e Webster (2001).	14
Figura 3	Variação temporal de um pico de concentração devido à difusão molecular; a) sem o deslocamento de fluido e, b) com deslocamento de fluido. Fonte: Kinzelbach (1986).	14
Figura 4	Esquema da dispersão de poluentes. Fonte: Machado (2006).	16
Figura 5	Perfil de velocidade turbulenta em função da profundidade. Fonte: Oliveira (2015).	40
Figura 6	Perfil de difusividade vertical turbulenta em função da profundidade. Fonte: Oliveira (2015).	40
Figura 7	Validação do modelo analítico bidimensional em $Z = 0,1$ comparado com dados da literatura.	42
Figura 8	Validação do modelo analítico bidimensional em $Z = 0,3$ comparado com os dados experimentais.	44
Figura 9	Comportamento da concentração de poluentes C em $Z = 0,1$ para as distâncias $X = (10, 30, 50)$ para a abordagem GILTT.	45
Figura 10	Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para três posições de fonte a) $Z_s = 0,1$; b) $Z_s = 0,5$; c) $Z_s = 0,9$	46
Figura 11	Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para quatro posições de fonte a) $Z_s = 0,2$; b) $Z_s = 0,5$; c) $Z_s = 0,75$ e d) $Z_s = 1$	47
Figura 12	Comportamento da concentração de poluente C em $Z = 0,1$ para as distâncias $X = (10, 30, 50)$ para a abordagem SV.	48
Figura 13	Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para três posições de fonte a) $Z_s = 0,1$; b) $Z_s = 0,5$; c) $Z_s = 0,9$	49
Figura 14	Perfil vertical da concentração de poluentes C para quatro distâncias ($X = 0,5$; $X = 2$ e $X = 10$) com a posição da fonte em a) $Z_s = 0,2$; b) $Z_s = 0,5$; c) $Z_s = 0,75$ e d) $Z_s = 1,0$ para a abordagem SV.	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1	Parâmetros hidráulicos do experimento 1.	38
Tabela 2	Parâmetros hidráulicos do experimento 2.	39
Tabela 3	Avaliação estatística dos métodos GILTT e SV utilizando o experimento 1.	43
Tabela 4	Avaliação estatística dos métodos GILTT e SV utilizando o experimento 2.	44

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

A, B	Matrizes de coeficientes do problema transformado
c	Concentração de um contaminante
c_o	Concentração inicial de um contaminante
$\overline{C}$	Concentração média de um contaminante
$\overline{C}_n$	Coeficiente da expansão em série do problema bidimensional
C	Concentração adimensional de um contaminante
C_o	Concentração observada experimentalmente
C_p	Concentração predita pelo modelo
C_{eq}	Concentração de equilíbrio
$CITT$	<i>Classic Integral Transform Technique</i>
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 $F = A^{-1}B$
G	Matriz dos autovetores da matriz F
$GITT$	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
$GILTT$	<i>Generalized Integral Laplace Transform Technique</i>
h	Profundidade do rio ou canal
I	Matriz identidade
K	Número de pontos considerado na Quadratura Gaussiana
l	Largura do rio ou canal
$M(x)$	Matriz da transformada inversa de Laplace $E(x)$
N	Número de autovalores no somatório do problema bidimensional
Q	Intensidade da fonte
S	Termo fonte

SV	Separação de Variáveis
u	Velocidade instantânea do escoamento na direção x
U	Perfil de velocidade adimensional 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

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	9
2	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	11
2.1	Poluição das águas	11
2.2	Advecção	12
2.3	Difusão turbulenta	13
2.4	Difusão molecular	14
2.5	Dispersão de poluentes	15
2.6	Classificação dos modelos matemáticos	16
2.7	Equação da advecção-difusão	17
2.8	Evolução das soluções analíticas	22
2.8.1	Abordagem GILTT	27
2.8.2	Abordagem SV	28
3	MODELAGEM MATEMÁTICA	29
3.1	Hipóteses fundamentais	29
3.2	Resolução do problema sob a perspectiva da abordagem GILTT	30
3.3	Resolução do problema sob a perspectiva da abordagem SV	35
3.3.1	Solução da equação (59)	35
3.3.2	Solução da equação (60)	36
4	DADOS PARA A VALIDAÇÃO DOS MODELOS	38
4.1	Dados experimentais	38
4.1.1	Experimento 1	38
4.1.2	Experimento 2	39
4.2	Parametrizações	39
4.2.1	Perfil de velocidade	39
4.2.2	Coeficiente de difusão	40
4.3	Análise estatística	41
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	42
5.1	Validação e comparação entre as abordagens	42
5.2	Resultados obtidos pela abordagem GILTT	45
5.3	Resultados obtidos pela abordagem SV	47
6	CONCLUSÃO	51
	REFERÊNCIAS	52

1 INTRODUÇÃO

A utilização crescente dos recursos hídricos pode gerar uma série de impactos negativos capazes de comprometer o equilíbrio ambiental e gerar conflitos, uma vez que o aumento na demanda pela água tem como consequência a ampliação das descargas de recursos hídricos contaminados (TUCCI, 2008). Dentre as principais fontes de poluição das águas estão a falta de saneamento básico, o lançamento de efluentes industriais tratados indevidamente e a exploração dos recursos hídricos para fins energéticos (BARROS, 2004).

A poluição é caracterizada por ser uma alteração indesejável das características físico-químicas e biológicas de um sistema que cause ou possa causar prejuízo à saúde, sobrevivência ou atividades dos seres humanos e outras espécies ou deteriorar materiais (BRAGA et al., 2005). Quando se trata de um recurso essencial à vida, investigar as consequências da poluição sobre o ecossistema é imprescindível para preservar a saúde humana e o equilíbrio ambiental. Porém, somente em 1970, com o aprimoramento da legislação ambiental em âmbito mundial, que estes estudos ganharam relevância (YOSHINARI, 2015).

Os corpos d'água superficiais constituem parte fundamental do processo de disposição dos resíduos gerados pelas atividades humanas, sendo de grande importância o conhecimento antecipado dos tipos e da magnitude dos danos que o despejo de cargas poluidoras pode causar aos ambientes aquáticos (EIGER, 2003). Logo, entender a dinâmica das substâncias no ambiente natural é de suma importância para tomar ações efetivas. Porém, os processos que governam o transporte e a difusão de poluentes são numerosos e de uma complexidade tal que não é possível descrevê-los sem a utilização de modelos matemáticos, que resultam, então, em um instrumento técnico indispensável para a gestão ambiental e segurança das pessoas (RAMOS et al., 2014).

Os modelos matemáticos contribuem de forma relevante em projetos de estações de tratamento de esgoto, na determinação da influência de obras hidráulicas na qualidade da água, vazamentos acidentais de resíduos tóxicos, na previsão do aumento de temperatura da água causado pela geração de energia termoelétrica, assim como a

previsão de alterações aquáticas causadas pelo uso do solo da bacia hidrográfica contribuinte (FISCHER et al., 1979). De uma forma geral, os modelos se mostram mais eficientes quando comparados às pesquisas experimentais por serem econômicos e não apresentarem problemas operacionais (OLIVEIRA, 2015).

Para solucionar as equações que compõem um modelo, empregam-se normalmente, métodos analíticos, semi-analíticos ou métodos numéricos. A obtenção de soluções analíticas para equações diferenciais parciais, quando possível, é de fundamental importância, pois permite uma análise mais precisa, uma vez que revela os parâmetros adimensionais que controlam a solução do modelo (VIDAL et al., 2015), enquanto as soluções numéricas são mais gerais dificultando a verificação dos possíveis erros existentes no modelo (EL-SADEK, 2009).

A escolha do modelo matemático deve atender as necessidades e peculiaridades do sistema a ser modelado, bem como o tipo e as fontes de poluentes mais relevantes. Uma vez que, os modelos não são adequados a todas as situações (BITTENCOURT et al., 1999).

Por estas razões, é de extrema importância aprimorar não só os modelos físicos, adicionando complexidades na formulação que sejam de importância física, mas também, as técnicas de solução que serão utilizadas na simulação computacional.

Sendo assim, o presente trabalho tem como objetivo resolver um problema bidimensional de dispersão de poluentes em rios e canais, utilizando duas abordagens de resolução: GILTT (*Generalized Integral Laplace Transform Technique*) e Separação de Variáveis (SV), e assim apresentar soluções analíticas para a concentração de poluentes.

É realizada uma comparação entre as abordagens afim de investigar a influência dos parâmetros de velocidade e difusão turbulenta na acurácia dos métodos.

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 Poluição das águas

A preocupação do homem com a qualidade dos corpos hídricos é milenar e, remonta a épocas em que o sistema sensorial era o único critério de avaliação de qualidade. A água é um elemento determinante para sustentação da vida, propulsora do desenvolvimento cultural e econômico da sociedade, sua multiplicidade de usos e funções tende a gerar conflitos em virtude das diferentes demandas de quantidade e qualidade de água (TUNDISI, 2003).

O crescimento populacional aliado ao desenvolvimento econômico configura um aumento progressivo na demanda por água. Sabe-se que os corpos hídricos superficiais são uma das principais fontes de disposição dos efluentes ou águas residuárias gerados pelas atividades antrópicas, o que interfere negativamente na qualidade dos recursos hídricos (ASHBY, 2013).

No Brasil, os maiores problemas ambientais relacionados com a poluição das águas surgiram na década de 70 junto com o desenvolvimento industrial. O aumento da demanda hídrica fez com que a capacidade de diluição dos corpos naturais fosse insuficiente com isso, os eventos críticos de poluição tornam-se frequentes (NEVES, 2012). A poluição tem como característica alterar significativamente as características físicas, químicas e biológicas da água, podendo inviabilizar o seu uso para diversas finalidades, provocar prejuízo aos ecossistemas aquáticos e transmitir doenças às populações. A poluição hídrica decorre do lançamento direto ou indireto de efluentes/ águas residuárias gerados pela atividade humana no ambiente.

As fontes de poluição diferem entre si quanto à fonte e origem (VON SPERLING, 2005).

Quanto à fonte, os poluentes podem se dispersar através de fontes pontuais ou de fontes difusas. As fontes pontuais são semelhantes a um ponto, usualmente são fixas e atingem o corpo hídrico de maneira concentrada, a exemplo disso, a saída de uma tubulação de esgoto.

Já nas fontes difusas os poluentes se dispersam no corpo hídrico ao longo de

parte da sua extensão. É de difícil detecção uma vez que, não é possível identificar exatamente o seu ponto de origem (LAURENTIS, 2004).

Quanto aos poluentes de maior incidência no ambiente natural, merecem destaque:

- Lançamento de esgoto sanitário *in natura*.

Os efluentes ou esgotos sanitários são as águas servidas provenientes das residências, dos edifícios residenciais, comerciais e públicos, dos clubes esportivos, dos restaurantes. São originados a partir do uso da água para higiene pessoal, cocção de alimentos, lavagem de utensílios, roupas, pisos e limpeza em geral. Apresenta uma composição pouco variável e predomínio de matéria orgânica biodegradável (ASHBY, 2013). Segundo os dados da Pesquisa Nacional por Amostra de Domicílio do Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (Pnad-IBGE, 2015), o Brasil possuía 97.2% dos domicílios com acesso a água, e somente 65.3% deles com esgotamento sanitário (coleta de esgoto).

- Efluentes industriais com tratamento inadequado.

São gerados nas atividades industriais, as características físico-químicas do efluente dependem do tipo de atividade industrial.

- Exploração dos recursos hídricos para fins energéticos.

Alteram a qualidade das águas, a sua morfologia, o seu regime fluvial através da construção de reservatórios, retificação de cursos de água, desmatamentos e lançamentos de cargas poluidoras.

2.2 Advecção

O transporte de solutos pelo fluido em movimento é denominado advecção ou convecção. Ocorre devido às componentes de velocidades existentes, por exemplo, em regimes turbulentos devido à existência de velocidades paralelas, mas pode existir no regime laminar também.

O transporte puramente advectivo provoca o deslocamento de partículas de soluto com a velocidade real (v_a) do fluido na direção do escoamento. Uma injeção instantânea no instante $t = t_0$ é deslocada por advecção em um intervalo de tempo Δt para uma nova posição, sem alterar a geometria do pulso (Figura 1) (ASHBY, 2013).

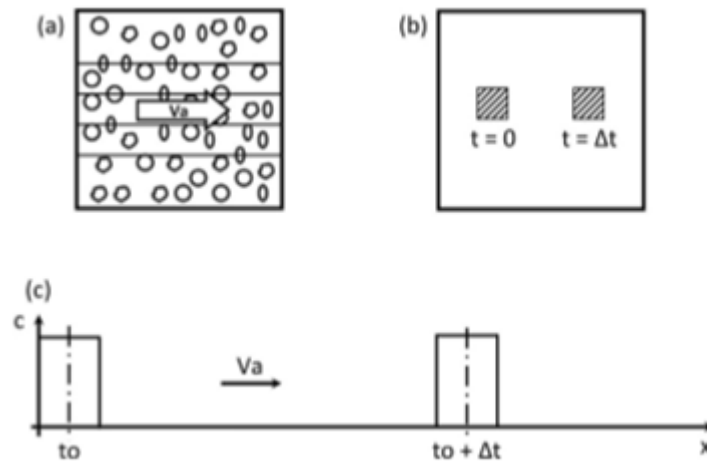


Figura 1: a) Transporte puramente advectivo, considerando a velocidade real média (v_a) e caminho percorrido médio; b) deslocamento sofrido por um pulso de soluto no tempo ; c) relação entre concentração e posição.

Fonte: Kinzelbach(1987).

Seguindo esse raciocínio, sem fluxo de fluido, o deslocamento de soluto não seria possível. Analisando somente a componente advectiva do transporte de solutos, fica evidente que as partículas de soluto são transportadas com a velocidade do campo de fluxo, acompanhando as partículas de fluido (ASHBY, 2013).

2.3 Difusão turbulenta

Os estudos da difusão turbulenta permitem prever os níveis de concentração de poluentes na atmosfera ou na água, além de alertarem para os riscos de exposição nestes ambientes.

Os fluxos turbulentos apresentam características de imprevisibilidade, rápida difusividade, altos níveis de vorticidade e dissipação de energia cinética (ROBERTS e WEBSTER, 2001). A imprevisibilidade dos fluxos turbulentos faz com que seus movimentos devam ser determinados através de cálculos estatísticos onde a velocidade de um fluxo turbulento é determinado pela velocidade média, enquanto que a intensidade de turbulência é descrita através da variância da velocidade (PESSOLI, 2006).

O processo de mistura em um fluxo turbulento ocorre devido à distorção, estiramento e convolução do fluxo original, o que dá origem a redemoinhos ou vórtices de diversos tamanhos, distribuindo o volume de forma irregular sobre outro volume de maior tamanho. Os redemoinhos gerados em fluxos turbulentos e de tamanhos menores ao fluxo estão em constante mudança e são responsáveis pelo decréscimo da concentração (PESSOLI, 2006).

A Figura 2 mostra o comportamento da difusão. Uma substância é liberada em um canal aberto, com fluxo turbulento, onde percebe-se o espalhamento da substância, o

que resulta em um decréscimo na concentração dessa substância.

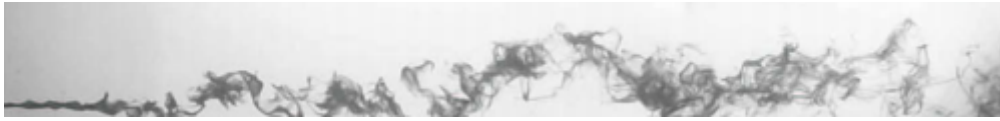


Figura 2: Experimento de liberação de uma substância em canal aberto com fluxo turbulento.
Fonte: Roberts e Webster (2001).

2.4 Difusão molecular

Diferentemente do fenômeno de advecção, a difusão molecular pode ocorrer sem que haja deslocamento de fluido. O transporte difusivo ocorre quando as moléculas do efluente se dispersam entre as camadas do fluido devido ao gradiente de concentração existente entre as diferentes regiões do escoamento. Pode ser chamado de movimento térmico das moléculas ou movimento Browniano, o qual conduz ao equilíbrio de concentração em um meio. O fenômeno deixa de ocorrer quando a concentração de um determinado soluto é a mesma em todos os pontos do meio (ASHBY, 2013).

A difusão molecular provoca uma redução no pico de concentração, independentemente do fluido estar em repouso (Figura 3a) ou em movimento (Figura 3b) (ASHBY, 2013).

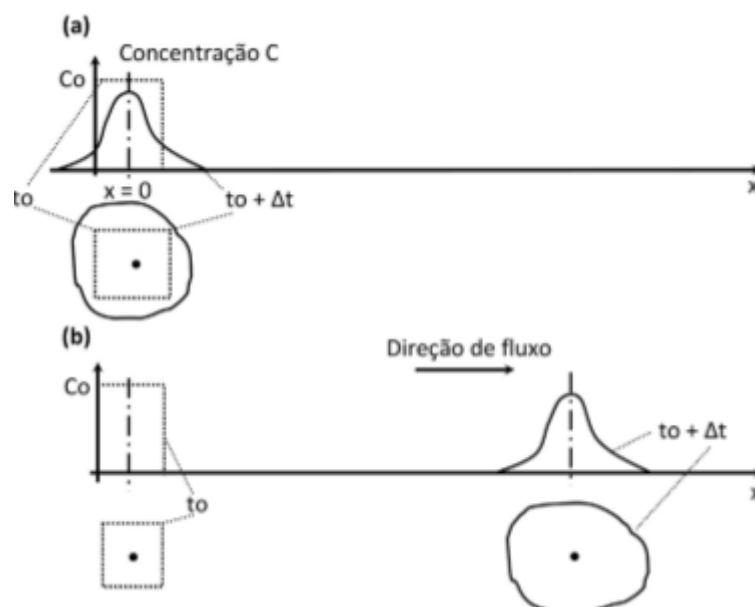


Figura 3: Variação temporal de um pico de concentração devido à difusão molecular; a) sem o deslocamento de fluido e, b) com deslocamento de fluido.

Fonte: Kinzelbach (1986).

Com o auxílio de modelos mais elaborados e o desenvolvimento de metodologias flexíveis de solução das equações de convecção (ou advecção) e difusão, ou seja, equações que regem o comportamento da mistura do poluente com o meio, pode-se ter uma noção e uma melhor compreensão do fenômeno de transporte de contaminantes (BARROS, 2004).

2.5 Dispersão de poluentes

A dispersão é definida como o fenômeno de transporte de efluentes causado pela ocorrência conjunta de difusão molecular e/ou turbulenta e da advecção (também chamada de convecção). Embora estes fenômenos estejam sempre presentes durante a dispersão dos efluentes, existem situações em que apenas um predomina (NEVES, 2012). Os parâmetros que levam em consideração a difusão do poluente são chamados de coeficientes de dispersão (COX, 2003).

Em 1967, Fischer elaborou uma metodologia para predição da taxa de dispersão longitudinal em correntes naturais. Foram apresentados diversos valores de coeficientes de dispersão determinados em laboratório para diferentes condições de escoamento.

Já em 1974, Nordin e Sabol, verificaram que os escoamentos que ocorrem no meio ambiente não apresentam coeficientes de dispersão constantes.

A utilização de coeficientes variáveis na modelagem representa uma aproximação mais realista do fenômeno. Porém, obter soluções analíticas completas para a equação de advecção-difusão, com perfil de velocidade não uniforme nem sempre é possível e vários métodos aproximados podem ser utilizados.

Fischer et al. (1979) constataram que o coeficiente de difusão transversal é da ordem de dez vezes maior que o coeficiente de difusão vertical. Esse fato pode ser explicado pela presença de contornos sólidos e da superfície livre que afetam o tamanho dos turbilhões (NADAOKA e YAGI, 1998). Essa restrição física dos contornos e do tamanho dos turbilhões implica que esses devem ser mais alongados nas direções em que o canal tem maiores dimensões. Dessa forma, um canal com largura bem maior que a profundidade, tende a apresentar o coeficiente de difusividade turbulenta bem maior na direção da própria largura (PORTO et al., 1991), explicando assim a razão pela qual canais e rios com profundidades menores que a largura tendem a apresentar valores maiores para os coeficientes de difusão turbulentos na direção transversal, ou seja, na direção da largura.

O fenômeno de dispersão de poluentes em rios pode ser explicado conforme mostra a Figura 4.

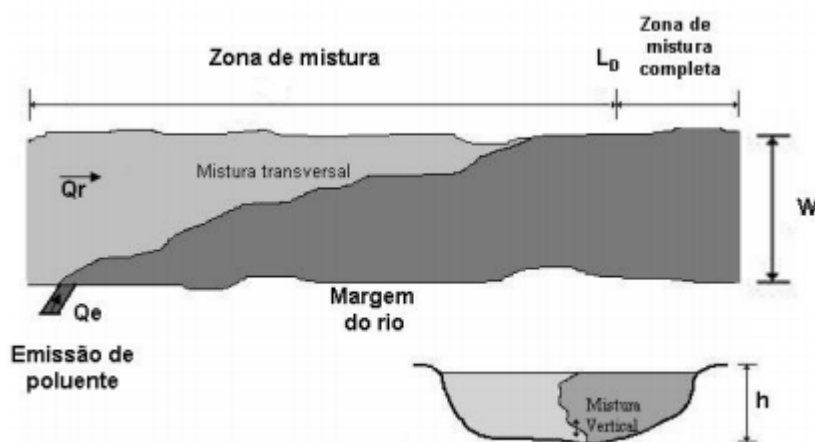


Figura 4: Esquema da dispersão de poluentes. Fonte: Machado (2006).

De acordo com a Figura 4, o poluente é lançado com uma dada vazão constante Q_e na lateral do rio que escoar com uma vazão também constante Q_r . À medida que percorre o leito do rio, a pluma formada de poluente vai se expandindo ao longo da zona de mistura, de comprimento L_D , até atingir uma zona de mistura completa, onde não há mais dispersão significativa. A partir deste ponto, apenas as reações de decomposição da substância em estudo, caso seja um componente degenerativo, devem ser levadas em consideração (MACHADO, 2006).

2.6 Classificação dos modelos matemáticos

Os modelos matemáticos vêm sendo frequentemente utilizados para prever o transporte de poluentes e avaliar o risco de poluição, e representam uma aproximação do fenômeno de transporte real (EL-SADEK, 2009).

A disponibilidade de dados, os objetivos a serem alcançados, os recursos técnicos, financeiros e computacionais acessíveis e o prazo de implantação são fatores que em geral delimitam a complexidade do modelo matemático a ser utilizado na simulação de um sistema hídrico (GARCIA, 2009).

Nenhum modelo isolado é o melhor para todas as situações, de forma que as necessidades e peculiaridades de cada sistema a ser modelado, bem como o tipo e as fontes de poluentes mais relevantes, devem orientar a seleção do modelo mais adequado para o sistema (BITTENCOURT et al., 1999).

Dentre as abordagens que podem ser utilizadas 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 et al., 2004).

A distribuição espacial e temporal da concentração de um poluente obtida com o

emprego de um modelo Euleriano pode ser comparada diretamente com os dados de monitoramento ambiental, permitindo efetuar a verificação da evolução temporal de um determinado parâmetro em uma localização específica (GARCIA, 2009).

De acordo com Garcia (2009), os problemas envolvendo a dispersão de poluentes em meio aquático podem ser tratados matematicamente empregando modelos transientes e estacionários.

Os modelos transientes são utilizados em situações de derramamentos de poluentes advindos de acidentes no transporte rodoviário e hidroviário, rompimentos de tubulações, tanques de armazenamento de substâncias químicas e estações de tratamento de efluentes líquidos. Além de estimar a correta duração de uma interrupção emergencial de captação das águas de um corpo hídrico atingido por derramamentos acidentais, haja vista os transtornos da suspensão do abastecimento, os modelos matemáticos para descargas acidentais são essenciais à análise de risco de fontes potenciais de degradação ambiental.

Os modelos estacionários podem ser empregados em situações em que o campo de velocidade pode ser considerado permanente. Para o caso estacionário, a equação da advecção-difusão é solucionada sem o termo da variação temporal da concentração.

Neste estudo será utilizado um modelo Euleriano, o qual tem como característica principal a solução da equação de advecção-difusão.

2.7 Equação da advecção-difusão

A teoria dos fenômenos de transporte é de grande importância na engenharia ambiental. Para realizar qualquer tipo de análise de risco e de impacto ambiental, se faz necessário prever o comportamento da dispersão de poluentes emitidos. O ingrediente fundamental para a compreensão do transporte de contaminantes está no conhecimento dos fenômenos físicos, acoplados a ferramentas analíticas da matemática aplicada (NAZAROFF e COHEN, 2001).

Logo, o problema da análise e da previsão do transporte de poluentes num dado escoamento está fortemente ligado a processos físicos de difusão e advecção. Esse tipo de problema é abordado pelo princípio de conservação de massa do poluente transportado, e os escoamentos que despertam maior interesse na engenharia, em geral, têm caráter turbulento (por exemplo, canais, condutos, oceanos, atmosfera, lagos e estuários).

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:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + u \frac{\partial c}{\partial x} + v \frac{\partial c}{\partial y} + w \frac{\partial c}{\partial z} + S = 0 \quad (1)$$

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.

Se o processo de transporte de massa ocorre em um escoamento turbulento, as distribuições para a concentração e para a velocidade são irregulares dificultando o cálculo exato e instantâneo do potencial. Estas distribuições irregulares tendem a oscilar em torno de seus valores médios, de instante a instante (NEVES, 2012). Para contornar este problema, Reynolds propôs um modelo conceitual em 1895 com uma abordagem estatística que vem sendo amplamente utilizada até o presente. De acordo com Reynolds, uma variável turbulenta instantânea, como a velocidade e a concentração de massa, pode ser decomposta em um valor médio e uma flutuação em torno deste valor médio (TENNEKES e LUMLEY, 1983).

Aplicando 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):

$$\begin{aligned} u &= \bar{u} + u' ; \\ v &= \bar{v} + v' ; \\ w &= \bar{w} + w' ; \\ c &= \bar{c} + c' . \end{aligned} \quad (2)$$

Substituindo a equação (2) em (1):

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

Expandindo os termos da equação (3):

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial c'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial c'}{\partial x} + u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + u' \frac{\partial c'}{\partial x} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial c'}{\partial y} + \\ v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + v' \frac{\partial c'}{\partial y} + \bar{w} \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + \bar{w} \frac{\partial c'}{\partial z} + w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} + w' \frac{\partial c'}{\partial z} + S = 0 . \end{aligned} \quad (4)$$

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

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

Tomando a média da equação (4) e aplicando a propriedade P2, obtêm-se:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c}'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \overline{u \frac{\partial c'}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial c'}{\partial x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \overline{v \frac{\partial c'}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial c'}{\partial y}} + \\
\overline{w \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w \frac{\partial c'}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial c'}{\partial z}} + \bar{S} = 0.
\end{aligned} \quad (5)$$

Aplicando as propriedades de Reynolds na equação (5), tem-se:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \frac{\partial \bar{c}'}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial x} + \overline{u' \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}} + \overline{u' \frac{\partial c'}{\partial x}} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}}{\partial y} + \bar{v} \frac{\partial \bar{c}'}{\partial y} + \overline{v' \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}} + \overline{v' \frac{\partial c'}{\partial y}} + \\
\overline{w \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w \frac{\partial c'}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}} + \overline{w' \frac{\partial c'}{\partial z}} + \bar{S} = 0.
\end{aligned} \quad (6)$$

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

$$\bar{c}' = \bar{u}' = \bar{v}' = \bar{w}' = 0. \quad (7)$$

Substituindo a equação (7) em (6), chega-se a:

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

Para reescrever os termos dos fluxos turbulentos da equação (8) serão consideradas as seguintes relações:

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

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

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

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

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

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

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 . \quad (13)$$

Aplicando a decomposição de Reynolds:

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

Expandindo os termos da equação (14):

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial u'}{\partial x} + \frac{\partial v'}{\partial y} + \frac{\partial w'}{\partial z} = 0 . \quad (15)$$

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

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}'}{\partial z} = 0 . \quad (16)$$

Aplicando as propriedades de Reynolds na equação (16):

$$\frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} + \frac{\partial \bar{u}'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}'}{\partial z} = 0 . \quad (17)$$

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

$$\begin{aligned} \frac{\partial \bar{u}'}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}'}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}'}{\partial z} &= 0 , \\ \frac{\partial \bar{u}}{\partial x} + \frac{\partial \bar{v}}{\partial y} + \frac{\partial \bar{w}}{\partial z} &= 0 . \end{aligned} \quad (18)$$

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

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

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

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

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

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

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:

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

na qual $\bar{c}$ denota a concentração média do contaminante ($g.m^{-3}$), u , v e w são as componentes cartesianas do escoamento médio ($m.s^{-1}$) 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 ($g.s^{-1}.m^{-2}$) nas direções longitudinal, transversal (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 de advecção-difusão 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 de concentração é proporcional à magnitude do gradiente de concentração média (SEINFELD e PANDIS, 1997). Logo:

$$\begin{aligned} \overline{u'c'} &= -\varepsilon_x \frac{\partial \bar{c}}{\partial x}; \\ \overline{v'c'} &= -\varepsilon_y \frac{\partial \bar{c}}{\partial y}; \\ \overline{w'c'} &= -\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z}, \end{aligned} \quad (23)$$

onde ε_x , ε_y e ε_z são os coeficientes de difusão turbulenta ($m^2.s^{-1}$) 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 a equação (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):

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

onde $\bar{c}$ representa a concentração média do contaminante ($g.m^{-3}$); $\bar{u}$, $\bar{v}$ e $\bar{w}$ representam a velocidade média do fluxo ($m.s^{-1}$) nas direções x , y e z , respectivamente; ε_x , ε_y e ε_z representam os coeficientes de difusão turbulenta ($m^2.s^{-1}$) 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).

2.8 Evolução das soluções analíticas

Neste tópico apresenta-se uma revisão acerca dos trabalhos encontrados na literatura que tenham como objetivo solucionar um problema de dispersão de contaminantes em meio aquático tendo como foco as soluções analíticas.

Os modelos unidimensionais podem ser de grande utilidade para uma primeira estimativa, uma vez que existe uma grande quantidade de soluções analíticas para essa classe de problema (ZOPPOU e KNIGHT, 1997; DIAS, 2003; GANDOLFI e FACCHI, 2001; VAN GENUCHTEN et al., 2013; SANSKRITYAYN et al., 2018). Estes modelos são simples e é possível obter resultados satisfatórios, porém, tais formulações unidimensionais só são válidas para certas condições (BARROS, 2004).

Para modelos unidimensionais é normal considerar que, após uma determinada 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).

Em 1996 Runkel (1996) utilizou um modelo unidimensional, com coeficiente de difusividade longitudinal e velocidade constantes, considerando os tipos de fonte (contínua de duração infinita e de duração finita), o problema foi resolvido analiticamente.

Considerando problema semelhante, Gandolfi e Facchi (2001) solucionaram 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. O problema foi resolvido analiticamente através do uso da Transformada de Laplace.

Em (1997), Zoppou e Knight 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 mais relevante do que o processo difusivo. Na sequência, o termo de difusão longitudinal é considerado. Os autores destacam que soluções analíticas são de extrema importância, pois são usadas para validar problemas mais complexos resolvidos por métodos numéricos.

Dias (2003), com modelo unidimensional, obteve uma solução analítica para a equação de advecção-difusão com decaimento de primeira ordem pelo método da transformação de similaridade generalizada. O método proposto proporciona uma forma sistemática de encontrar as variáveis de similaridade que reduzem o problema a uma equação diferencial ordinária com solução conhecida, o que completa a obtenção da solução desejada.

Em Seo e Cheong (2001) 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 afirmam que esse modelo demonstra limitações, pois só pode ser usado para situações muito distantes da fonte poluidora.

Utilizar o modelo adequado é imprescindível para obter resultados satisfatórios e realistas. Para determinar o modelo de dispersão adequado se faz necessário considerar: a configuração geométrica do rio, o trecho que 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 e RAMALDES, 2012). Além disso, deve-se considerar que o transporte de um poluente em um rio não é geralmente um fenômeno unidimensional. Considerando um lançamento pontual de efluente em um canal, ambos com a mesma densidade, o poluente espalha-se de forma tridimensional próximo a fonte (EIGER, 2003). À medida que o poluente desloca-se para jusante e passa a ocupar uma região cada vez maior, o fenômeno tende a tornar-se bidimensional, ocorrendo uma uniformização de concentração ao longo da direção vertical (FISCHER et al., 1979). Por estas razões, é prática comum utilizar modelos com duas ou três dimensões para locais próximos à fonte poluidora (WEYMAR et al., 2010; NE-

VES, 2012).

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

Quando se tratam dos modelos bidimensionais, são classificados de acordo com os processos de transporte. Modelos horizontais são aqueles os quais consideram o transporte no plano x (direção longitudinal) e y (direção transversal); já os modelos verticais consideram o transporte no plano x (direção longitudinal) e z (direção vertical). A escolha desses dois modelos depende do tipo de fonte poluidora e da ordem de grandeza dos fluxos difusivos.

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). A hipótese de mistura completa do poluente na seção transversal só é válida quando a razão de aspecto da largura pela profundidade seja grande e que o efeito da distribuição de velocidades na direção lateral seja mais significativo que o efeito do perfil de velocidades na profundidade (BASHA, 1997).

A maioria dos modelos bidimensionais assim como os unidimensionais, assume o perfil de velocidade e coeficientes de difusão turbulenta uniforme. Isto pode ser observado em Vilhena e 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. Este fato demonstra a importância de considerar a velocidade variável em determinadas situações.

De modo semelhante, Lew, Mills e 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 determinam-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 ressaltam 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. Como demonstram Wang, Mc-Millan e 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 e Xia (1994) também foi estudada a dispersão em um canal bidimensional. Os perfis de velocidade utilizados são os mesmos de Wang, MC-Millan e Chen (1978), uma vez que eles permitem, através da mudança de um valor de um parâmetro da expressão, a 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 pode haver variações da seção transversal ao longo do percurso do rio (CHOW, 1959; XIA, 1997; BOGLE, 1997).

Já no trabalho de Yotsukura e Sayre (1976) foi solucionado 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 a 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 e 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 e Wood (1988) apresentaram uma tabela com coeficientes de difusão turbulenta na direção transversal, retirados da literatura, enfatizando a importância deste 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). Seguindo esta mesma linha de raciocínio, Gharbi e Verrette (1998) mostraram que em boa parte dos escoamentos em rios e canais, o coeficiente de difusão na direção longitudinal é desprezável quando comparado à 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 e 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.

No trabalho de Yeh e 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 e Tsai (1976), Nokes, McNulty e 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 e 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 e Bagtzoglou (2002), porém 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.

2.8.1 Abordagem GILTT

A técnica da GILTT é utilizada para predição do comportamento de um poluente dispersado. É um método espectral que combina uma expansão em série com uma integração. A técnica compreende 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 seus 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).

O método GILTT encontra-se bem estabelecido e é aplicado com grande sucesso para modelar a dispersão de poluentes na atmosfera (WORTMANN et al., 2005; MOREIRA et al., 2009; TIRABASSI et al., 2009; BUSKE et al., 2011; VILHENA et al., 2012). Os esforços concentram-se em ampliar a aplicação da técnica para dispersão de poluentes em meio aquático.

Neste sentido, uma série de trabalhos com o objetivo de aperfeiçoar e estender a técnica podem ser encontrados na literatura. A exemplo disso, o trabalho de Weymar et al. (2010) desenvolve 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.

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. De acordo com a teoria discutida, percebe-se que diferentes métodos podem ser utilizados com a mesma finalidade, ou seja, encontrar soluções analíticas para o

problema de dispersão de poluentes em rios e canais.

O estudo desenvolvido por Oliveira (2015) apresenta modelos multidimensionais (modelos bidimensionais e tridimensionais) para a dispersão de contaminantes em rios e canais, em regime permanente, com perfis de velocidade e coeficientes de difusividade turbulenta não uniformes. As soluções analíticas foram obtidas através da técnica GILTT.

Estudos mais recentes como o de Buske et al. (2017) apresentaram uma solução analítica para o problema de dispersão de poluentes em rios e canais, considerando um modelo bidimensional vertical e tridimensional estacionário com perfil de velocidade e difusividade turbulenta variáveis.

Já no estudo de Machado et al. (2018) foram apresentadas duas técnicas de soluções analíticas ao problema da dispersão de poluentes em um corpo hídrico, sendo as soluções apresentadas via GILTT e SV. Foi observada a acurácia das técnicas em representar um fenômeno de dispersão.

Os trabalhos citados acima demonstram a aplicabilidade da técnica GILTT e sua acurácia em resolver problemas de dispersão de poluentes em água.

O presente estudo tem como objetivo não somente estender a aplicação da técnica, mas, também demonstrar e comprovar sua performance.

2.8.2 Abordagem SV

Uma das técnicas aplicadas à resolução do problema de dispersão bidimensional de poluentes em rios é a abordagem SV. Esse método é de grande utilidade para resolver problemas de valor de contorno no campo da física-matemática para problemas homogêneos e foi detalhadamente descrito em Özisik (1993). Tal método foi formulado com base nos conceitos e processos físicos que governam o fenômeno e é válido para perfis de velocidades e difusividade constantes tanto para o modelo unidimensional quanto para o modelo bidimensional (NEVES, 2012).

O método também é conhecido como de Fourier e é o mais clássico dos métodos para determinar soluções particulares de EDP's lineares. Basicamente permite reduzir o problema da procura de soluções de certos tipos de EDP's a problemas de resolução de EDO's. A abordagem pode ser resumida da seguinte maneira: a abordagem SV substitui uma função inicial, antes dependente de duas variáveis (EDP), por um produto de duas novas funções, cada uma delas dependente somente de uma variável (EDO's) (LEITHOLD, 1994).

O método encontra-se largamente difundido na literatura. Trabalhos como o de Neves (2012) demonstram a aplicabilidade da metodologia nos problemas de dispersão de poluentes em corpos hídricos. Utilizando esta abordagem pretende-se chegar em uma solução analítica para a equação da advecção-difusão aplicada ao problema da dispersão de poluentes em rios e canais.

3 MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1 Hipóteses fundamentais

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

As hipóteses fundamentais adotadas nesse estudo 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 poluente através destes contornos;
- O efeito difusivo na direção longitudinal é desprezível 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 desprezível em relação à velocidade longitudinal do rio ou canal.

3.2 Resolução do problema sob a perspectiva da abordagem GILTT

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

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{c}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_z \frac{\partial \bar{c}}{\partial z} \right) - \mu \bar{c}. \quad (25)$$

Sendo:

$\bar{c}$ é concentração do poluente $[M.L^{-3}]$;

ε_z é o coeficiente de dispersão transversal $[L^2.T^{-1}]$;

x e z são as coordenadas do ponto de exposição $[L]$;

$\bar{u}$ é o perfil de velocidade do fluxo $[L.T^{-1}]$;

μ é a constante de decaimento de primeira ordem do poluente $[T^{-1}]$;

t tempo $[T]$.

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

$$\frac{\partial \bar{c}}{\partial z} = 0 \text{ em } z = 0, \quad (26)$$

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

Condição de fonte:

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

E condição inicial:

$$\bar{c} = 0 \text{ em } t = 0. \quad (29)$$

Inicialmente é aplicada na equação (25) a transformada de Laplace na variável temporal, t , e utilizando a condição inicial (29), tem-se:

$$r\bar{C} + \bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) - \mu \bar{C}, \quad (30)$$

onde $\bar{C}(x, z, r)$ denota a transformada de Laplace na variável t ($\bar{C}(x, z, r) = \bar{c}(x, z, t)$; $t \rightarrow r$, r é complexo), reescrevendo a equação (30) com a substituição de $\lambda = \mu + r$, obtém-se:

$$\bar{u} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\varepsilon_z \frac{\partial \bar{C}}{\partial z} \right) - \lambda \bar{C}. \quad (31)$$

Para resolver a equação (31) é feita a escolha do problema auxiliar de Sturm-

Liouville:

$$\Psi_n''(z) + \beta_n^2 \Psi_n(z) = 0 \text{ em } 0 < z < h, \quad (32)$$

Cujas condições de contorno são as mesmas do problema original:

$$\Psi_n'(z) = 0 \text{ em } z = 0 \text{ e } z = h. \quad (33)$$

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

$$\Psi_n(z) = \cos(\beta_n z), \quad (34)$$

onde $\beta_n = \frac{n\pi}{h}$.

A seguir, expande-se a concentração de poluentes em uma série, utilizando como base as autofunções do problema de Sturm-Liouville:

$$\bar{C}(x, z, r) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \Psi_n(z). \quad (35)$$

Para determinar o coeficiente $\bar{c}_n(x, r)$ substitui-se (35) em (32):

$$\bar{u} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}'_n(x, r) \Psi_n(z) = \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \frac{\partial(\varepsilon_z \Psi'_n(z))}{\partial z} - \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \Psi_n(z). \quad (36)$$

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 $\int_0^h (\cdot) \Psi_m(z) dz$:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}'_n(x, r) \int_0^h \bar{u} \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz &= \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \int_0^h \varepsilon'_z \Psi'_n(z) \Psi_m(z) dz \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \int_0^h \varepsilon_z \Psi''_n(z) \Psi_m(z) dz - \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \int_0^h \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz. \end{aligned} \quad (37)$$

Da equação de Sturm-Liouville tem-se que $\Psi_n''(z) = -\beta_n^2 \Psi_n(z)$, logo:

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}'_n(x, r) \int_0^h \bar{u} \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz &- \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \int_0^h \varepsilon'_z \Psi'_n(z) \Psi_m(z) dz \\ &+ \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \beta_n^2 \int_0^h \varepsilon_z \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz + \lambda \sum_{n=0}^{\infty} \bar{c}_n(x, r) \int_0^h \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz = 0. \end{aligned} \quad (38)$$

A equação (38) pode ser escrita na forma matricial. Sendo $E(x, r)$ um vetor com as componentes $\bar{c}_n(x, r)$ e:

$$a_{n,m} = \int_0^h \bar{u} \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz; \quad (39)$$

$$b_{n,m} = - \int_0^h \varepsilon'_z \Psi'_n(z) \Psi_m(z) dz + \beta_n^2 \int_0^h \varepsilon_z \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz + \lambda \int_0^h \Psi_n(z) \Psi_m(z) dz.$$

Logo, a equação (39) escrita na forma matricial é dada por:

$$AE'(x, r) + BE(x, r) = 0, \quad (40)$$

Assumindo que a matriz A não é singular, multiplica-se a equação (40) pela matriz inversa de A :

$$AA^{-1}E'(x, r) + A^{-1}BE(x, r) = 0 \longrightarrow E'(x, r) + A^{-1}BE(x, r) = 0, \quad (41)$$

$$E'(x, r) + FE(x, r) = 0. \quad (42)$$

sendo $F = A^{-1}B$. A equação (42) está sujeita à condição de fonte:

$$\bar{c}(0, z, r) = \frac{\delta(z - z_s)}{r}. \quad (43)$$

Para obter $E(0, r)$ aplica-se o mesmo procedimento utilizado anteriormente. Inicialmente, expande-se a condição de fonte em série, substituindo (35) em (28):

$$\sum \bar{c}_n(0, r) \psi_n(z) = \frac{\delta(z - z_s)}{r}. \quad (44)$$

Aplicando o operador $\int_0^h (\cdot) \psi_m(z) dz$ e truncando a série:

$$\sum \bar{c}_n(0, r) \int_0^h \psi_n(z) \psi_m(z) dz = \frac{1}{r} \int_0^h \delta(z - z_s) \psi_m(z) dz. \quad (45)$$

Deste modo, a condição de fonte pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} E(0, r) = \bar{c}_n(0, r) &= \frac{\psi_m(z_0)}{rh} \text{ para } n = 0; \\ E(0, r) = \bar{c}_n(0, r) &= \frac{\psi_m(z_0)}{rh/2} \text{ para } n \neq 0. \end{aligned} \quad (46)$$

Aplicando a Técnica da Transformada de Laplace no problema transformado apresentado na equação (42), obtém-se:

$$sE(s, r) + FE(s, r) = E(0, r), \quad (47)$$

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

$$F = GDG^{-1}. \quad (48)$$

onde D é a matriz diagonal de autovalores de F e G é a matriz dos respectivos autovetores. Substituindo a matriz F (48) na equação (47):

$$sE(s, r) + GDG^{-1}E(s, r) = E(0, r). \quad (49)$$

Rearranjando os termos, tem-se:

$$(sI + GDG^{-1})E(s, r) = E(0, r), \quad (50)$$

onde I é a matriz identidade. Lembrando que: $GG^{-1} = G^{-1}G = I$, a equação (50) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} (sGG^{-1} + GDG^{-1})E(s, r) &= E(0, r), \\ G(sI + D)G^{-1}E(s, r) &= E(0, r). \end{aligned} \quad (51)$$

A equação (51) tem a seguinte solução:

$$E(s, r) = G(sI + D)^{-1}G^{-1}E(0, r), \quad (52)$$

Aplicando a Transformada Inversa de Laplace na equação (52), tem-se:

$$E(s, r) = GL^{-1}(sI + D)^{-1}G^{-1}E(0, r). \quad (53)$$

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

A matriz $(sI + D)$ é escrita como:

$$(sI + D) = \begin{pmatrix} s + d_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s + d_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + d_n \end{pmatrix},$$

onde d_n são os autovalores da matriz F . A matriz inversa da matriz diagonal $(sI + D)$ é:

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

Fazendo a inversão da Transformada de Laplace de $(sI + D)^{-1}$ e usando os resultados padrões da teoria da Transformada de Laplace, que podem ser encontrados

tabelados no livro (ÖZISIK, 1993), obtém-se:

$$L^{-1}(sI + D)^{-1} = M(x) = \begin{pmatrix} e^{-d_1 x} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{-d_2 x} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & e^{d_n x} \end{pmatrix}.$$

Finalmente, substituindo a matriz $L^{-1}(sI + D)^{-1}$ em (53), é obtida a solução do problema transformado da equação (53), que é dada por:

$$E(x, r) = GM(x)G^{-1}E(0, r). \quad (54)$$

Uma vez que o vetor $E(x, r)$ é obtido, a concentração do poluente dada pela equação (54) está bem determinada, desta forma há condições de inverter a solução pela transformada inversa de Laplace para obter $\bar{c}(x, z, t)$, este procedimento resulta:

$$\bar{c}(x, z, t) = L^{-1}\bar{C}(x, z, r); r \rightarrow t = \frac{1}{2\pi} \sum_{n=0}^M \int_0^h \bar{c}_n(x, r) \Psi_n(z) e^{rt} dr. \quad (55)$$

Cabe salientar que nenhuma aproximação numérica foi feita durante a derivação da solução até aqui, exceto pelo truncamento do somatório da equação (38). Aqui será apresentada uma solução aproximada da integral acima utilizando uma inversão numérica, pelo método da quadratura de Gauss-Legendre (STROUD e SECREST, 1966). Portanto, a solução final do problema bidimensional é dada pela expressão:

$$\bar{c}(x, z, t) = \sum_{k=0}^K \frac{p_k}{t} a_k \sum_{n=0}^M c_n(x, \frac{p_k}{t}) \Psi_n(z). \quad (56)$$

onde a_k e p_k são os pesos e as raízes da Quadratura Gaussiana, respectivamente, e são tabulados em Stroud e Secrest 1966, e K é o número de pontos considerado na Quadratura Gaussiana.

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

$$C = \frac{\bar{c}}{c_0}; X = \frac{x}{h}; Z = \frac{z}{h}; U = \frac{u}{\bar{u}}; K_Z = \frac{\varepsilon_z}{\bar{u}h}; \gamma = \frac{\lambda h}{\bar{u}}. \quad (57)$$

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 ($m.s^{-1}$), $\bar{u}$ é a velocidade média ($m.s^{-1}$), ε_z é o coeficiente de difusão turbulenta nas direções y e z , respectivamente, e o λ é o coeficiente de degradação química da substância (s^{-1}).

3.3 Resolução do problema sob a perspectiva da abordagem SV

A abordagem do método SV é detalhadamente descrita por Özisik (1993). A solução final para o caso tridimensional é citada por Siqueira (2017), porém o desenvolvimento da solução não é demonstrado no trabalho. O foco do trabalho está em modelos bidimensionais longitudinal e vertical, logo, a equação que descreve o fenômeno de dispersão bidimensional é:

$$\frac{D_x}{R} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + \frac{D_z}{R} \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{v}{R} \frac{\partial c}{\partial x} - \mu c = \frac{\partial c}{\partial t} \quad (58)$$

Observe que a equação (58) é a mesma utilizada pela abordagem GILTT (25), substituindo os parâmetros por: $\frac{D_z}{R} = \varepsilon_z$; $\frac{v}{R} = \bar{u}$ e $\frac{D_x}{R} = \varepsilon_x$. Para solucionar a equação (58) pela abordagem SV separa-se a concentração em duas funções da seguinte forma:

$$c(x, z, t) = f_1(x, t) f_2(z, t). \quad (59)$$

Substituindo a equação (58) na equação (59), pode-se separar as variáveis de forma a obter o seguinte conjunto de EDP's:

$$\frac{1}{f_1(x, t)} \frac{\partial f_1(x, t)}{\partial t} + \frac{1}{f_1(x, t)} \bar{u} \frac{\partial f_1(x, t)}{\partial x} = \frac{1}{f_1(x, t)} \varepsilon_x \frac{\partial^2 f_1(x, t)}{\partial x^2} - \mu, \quad (60)$$

$$\frac{1}{f_2(z, t)} \frac{\partial f_2(z, t)}{\partial t} = \frac{1}{f_2(z, t)} \varepsilon_z \frac{\partial^2 f_2(z, t)}{\partial z^2}. \quad (61)$$

3.3.1 Solução da equação (59)

Para solucionar a equação (59), utiliza-se a troca de variável $f_1(x, t) = \bar{f}_1(x, t) e^{-\mu t}$, fazendo a substituição proposta tem-se:

$$\frac{\partial \bar{f}_1(x, t) e^{-\mu t}}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{f}_1(x, t) e^{-\mu t}}{\partial x} = \varepsilon_x \frac{\partial^2 \bar{f}_1(x, t) e^{-\mu t}}{\partial x^2} - \mu \bar{f}_1(x, t) e^{-\mu t}, \quad (62)$$

simplificando a equação (62), tem-se:

$$\frac{\partial \bar{f}_1}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \bar{f}_1}{\partial x} = \varepsilon_x \frac{\partial^2 \bar{f}_1}{\partial x^2}. \quad (63)$$

Considerando que $\bar{f}_1(x, t)$ está definido e, é dado por $\bar{f}_1(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{D_x t/R}} g_1\left(\frac{x}{\sqrt{D_x t/R}}\right)$:

$$\frac{\partial \left[\frac{M}{A\sqrt{D_x t/R}} g_1\left(\frac{x}{\sqrt{D_x t/R}}\right) \right]}{\partial t} + \bar{u} \frac{\partial \left[\frac{M}{A\sqrt{D_x t/R}} g_1\left(\frac{x}{\sqrt{D_x t/R}}\right) \right]}{\partial x} + \varepsilon_x \frac{\partial^2 \left[\frac{M}{A\sqrt{D_x t/R}} g_1\left(\frac{x}{\sqrt{D_x t/R}}\right) \right]}{\partial x^2}. \quad (64)$$

Para resolver a EDP (64), aplica-se então uma substituição de variável de similaridade:

$$\beta = \frac{x - vt/R}{\sqrt{D_x t/R}}, \quad (65)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial x} = \frac{1}{\sqrt{D_x t/R}}, \quad (66)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = -\frac{v}{R\sqrt{D_x t/R}} - \frac{\beta}{2t}. \quad (67)$$

Substituindo as equações (64), (65) e (66) na equação (64) e realizando as operações de simplificação, chega-se a seguinte equação diferencial ordinária:

$$\frac{d}{d\beta} \left(\frac{dg_1}{d\beta} + \frac{1}{2}\beta g_1 \right) = 0. \quad (68)$$

Integrando em relação à β e admitindo $C_1 = 0$, tem-se:

$$\frac{dg_1}{d\beta} + \frac{1}{2}\beta g_1 = 0 \quad (69)$$

A EDO é facilmente resolvida por SV, a solução obtida é dada na forma: $g_1(\beta) = K_1 e^{-\beta^2/4}$.

Assim, a função $\bar{f}_1(x, t)$ é:

$$\bar{f}_1(x, t) = \frac{M}{A\sqrt{D_x t/R}} K_1 e^{-\beta^2/4}. \quad (70)$$

sendo $\beta = \frac{x-vt/R}{\sqrt{D_x t/R}}$.

Portanto, $f_1(x, t) = \bar{f}_1 e^{-\mu t}$, está bem definida:

$$f_1(x, t) = \frac{MK_1}{A\sqrt{D_x t/R}} e^{-\left(\frac{(x-vt/R)^2}{4D_x t/R}\right)} e^{-\mu t}. \quad (71)$$

Admitindo $K_1 = \frac{A}{2M\sqrt{\pi}}$, a solução para $f_1(x, t)$ é dada pela equação abaixo:

$$f_1(x, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_x t/R}} e^{-\left[\left(\frac{(x-vt/R)^2}{2D_x t/R}\right) - \mu t\right]}. \quad (72)$$

3.3.2 Solução da equação (60)

De maneira similar ao item 3.3.1, considera-se $f_2(z, t) = \frac{M}{A\sqrt{D_z t/R}} g_2\left(\frac{z}{\sqrt{D_z t/R}}\right)$ e utiliza-se uma substituição de variável, conforme as equações a seguir:

$$\beta = \frac{z}{\sqrt{D_z t/R}}; \quad (73)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial z} = \frac{1}{\sqrt{D_z t/R}}; \quad (74)$$

$$\frac{\partial \beta}{\partial t} = -\frac{\beta}{2t}. \quad (75)$$

Chega-se a seguinte EDO:

$$\frac{d^2 g_2}{d\beta^2} + \frac{1}{2} \frac{d[\beta g_2]}{d\beta} = 0. \quad (76)$$

A EDO (75) é resolvida de forma semelhante a equação (67), logo:

$$f_2(z, t) = \frac{MK_1}{A\sqrt{D_z t/R}} e^{\left[-\frac{z^2}{4D_z t/R}\right]}. \quad (77)$$

Sendo, $K_1 = \frac{A}{2M\sqrt{\pi}}$, A solução para $f_2(z, t)$ é dada pela equação:

$$f_2(z, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_z t/R}} e^{\left[-\frac{z^2}{4D_z t/R}\right]}. \quad (78)$$

Assim, para o caso bidimensional transiente, no plano longitudinal e vertical a solução final é escrita substituindo as equações (72) e (78) na equação (59), ou seja,

$$c(x, z, t) = \frac{1}{2\sqrt{\pi D_x t/R}} e^{\left(-\frac{(x-vt)^2}{2D_x t/R}\right) - \mu t} \frac{1}{2\sqrt{\pi D_z t/R}} e^{\left[-\frac{z^2}{4D_z t/R}\right]}. \quad (79)$$

4 DADOS PARA A VALIDAÇÃO DOS MODELOS

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 dos modelos utilizados com os dados experimentais é fundamental 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 dos modelos bidimensionais no plano horizontal e vertical.

4.1.1 Experimento 1

Em Nokes, MCNulty e 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 0,15 m de comprimento e profundidade de 0,15 m. A largura do canal era de 0,56 m e velocidade média de 0,55 m.s⁻¹. A constante de Von Kármán, k , é de 0,35 e a velocidade de atrito, u^* , é de 0,055 m.s⁻¹. Os dados, k e u^* , foram extraídos de medidas experimentais e foram utilizados por Nokes, MCNulty e 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.

$d(m)$	$h(m)$	$l(m)$	$\bar{u}(m.s^{-1})$	$u^*(m.s^{-1})$	k	Z_s
0,15	0,15	0,56	0,55	0,055	0,35	0,75

4.1.2 Experimento 2

Em Nokes, MCNulty e Wood (1988) foi simulada a dispersão de uma simulação 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⁻¹ e a velocidade de atrito, u^* , é de 0,014 m.s⁻¹. A constante de Von Kármán, k , foi medida experimentalmente e tem valor igual a 0,34.

O lançamento 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.

$h(m)$	$l(m)$	$\bar{u}(m.s^{-1})$	$u^*(m.s^{-1})$	k	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):

$$U(Z) = 1 + \frac{u^*}{\bar{u}k} [1 + \ln(z)] \quad (80)$$

sendo que

$$u^* = \frac{\sqrt{\tau_0}}{\rho} \quad (81)$$

Notação: u^* é a velocidade de atrito (m.s⁻¹); $\bar{u}$ é a velocidade média do escoamento (m.s⁻¹); k é a constante de Von Kármán, τ_0 é a tensão de cisalhamento no fundo do rio (Kg.m⁻².s⁻¹) e ρ é a densidade do fluido (Kg.m⁻³). A Figura 5 apresenta o comportamento do perfil de velocidade do escoamento.

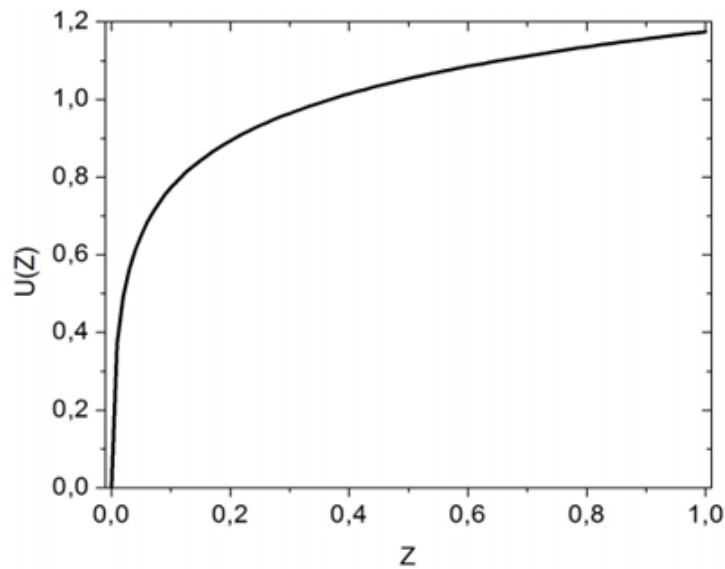


Figura 5: Perfil de velocidade turbulenta em função da profundidade. Fonte: Oliveira (2015).

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):

$$\varepsilon_z(Z) = \frac{u^*}{\bar{u}k} Z(1 - Z) \quad (82)$$

Notação: u^* é a velocidade de atrito ($m.s^{-1}$); $\bar{u}$ é a velocidade média do escoamento ($m.s^{-1}$); k é a constante de Von Kármán. O comportamento do coeficiente de difusão é representado na Figura 6.

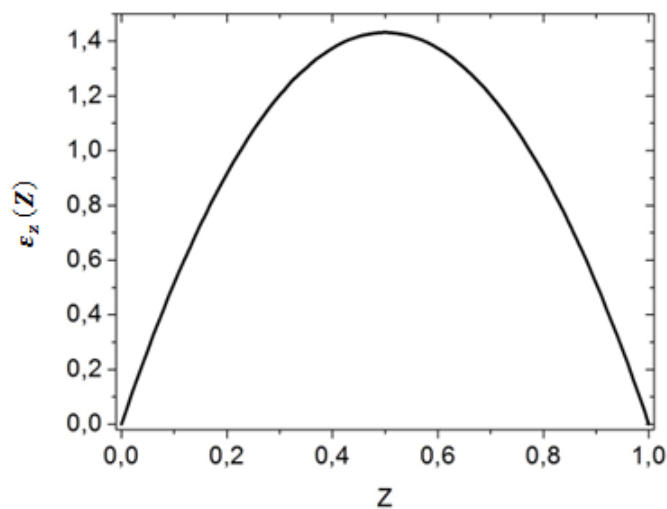


Figura 6: Perfil de difusividade vertical turbulenta em função da profundidade. Fonte: Oliveira (2015).

4.3 Análise estatística

A fim de avaliar o desempenho das abordagens utilizadas no estudo, uma análise estatística é realizada (HANNA, 1989). Os índices estatísticos descrevem a concordância entre os dados de concentração simulados pelas abordagens utilizadas e os dados observados experimentalmente.

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:

$$NMSE = \frac{\overline{(C_o - C_p)^2}}{\overline{C_o C_p}} \quad (83)$$

2. Coeficiente de correlação (COR): descreve o grau de associação ou concordância entre as variáveis. Para um bom desempenho o valor ideal é 1:

$$COR = \frac{\overline{(C_o - \overline{C_o})(C_p - \overline{C_p})}}{\sigma_o \sigma_p} \quad (84)$$

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:

$$FB = \frac{\overline{C_o} - \overline{C_p}}{0,5(\overline{C_o} + \overline{C_p})} \quad (85)$$

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

$$FS = \frac{\sigma_o - \sigma_p}{0,5(\sigma_o + \sigma_p)} \quad (86)$$

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 E DISCUSSÃO

Para a obtenção dos resultados numéricos utilizou-se a linguagem de programação FORTRAN 90. Todas as variáveis consideradas nesta análise estão na forma adimensional.

Neste capítulo são apresentados os resultados para o modelo bidimensional vertical obtido pelos métodos GILTT e SV.

5.1 Validação e comparação entre as abordagens

Primeiramente para a obtenção da concentração de poluentes foram utilizados os dados oriundos do experimento 1 descritos no subcapítulo 4.1.1.

O processo de validação das abordagens GILTT e SV foi realizado através da comparação com dois modelos bidimensionais de transporte de poluentes em rios e canais encontrados na literatura (NOKES et al., 1984; BARROS, 2004).

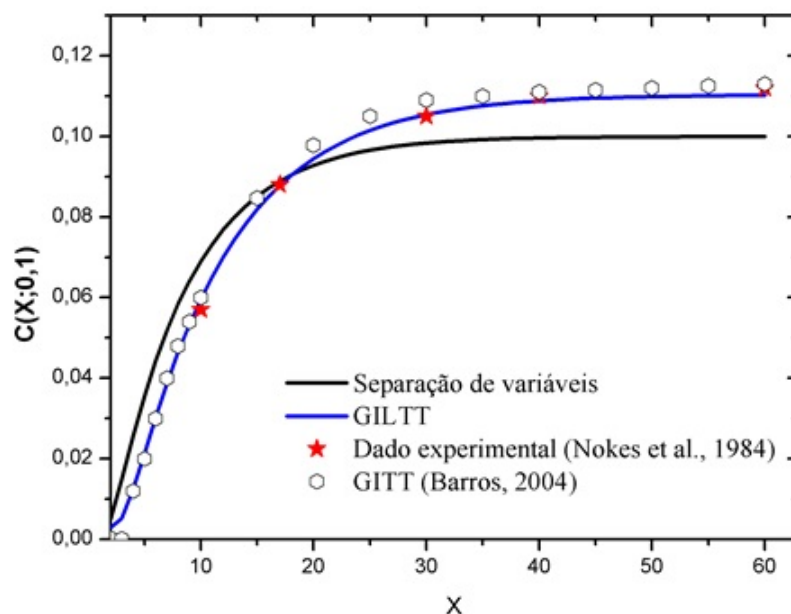


Figura 7: Validação do modelo analítico bidimensional em $Z = 0, 1$ comparado com dados da literatura.

Analisando a Figura 7, pode-se constatar a adequação entre os resultados obtidos pelas abordagens GILTT e SV com os dados da literatura. Verifica-se que os resultados da concentração preditas pela abordagem GILTT se apresentam mais próximos dos dados experimentais do que os resultados apresentados pelas abordagens SV e GITT. Isso é explicado pelo fato de que a abordagem GILTT considera as parametrizações da turbulência variáveis em relação a z , já para a abordagem SV em sua solução as parametrizações são consideradas constantes e a abordagem GITT utilizada por Barros (2004) representa uma solução aproximada ao problema de dispersão vertical.

Na Tabela 3, estão descritos os índices estatísticos obtidos pelas duas abordagens com base no experimento 1 assim como os resultados oriundos do experimento de Barros (2004).

Tabela 3: Avaliação estatística dos métodos GILTT e SV utilizando o experimento 1.

Modelo	NMSE	COR	FB	FS
GILTT	0,000	0,999	0,000	0,069
SV	0,010	0,996	0,035	0,539
Barros (2004)	0,001	0,999	-0,023	0,022

Com base na análise estatística, observa-se um NMSE para a abordagem GILTT no seu valor ideal e FB bem próximos ao valor de ótimo para ambas abordagens, o índice $COR \approx 1.0$ o que demonstra boa correlação entre os dados observados e preditos.

No que se refere ao índice estatístico FS, a abordagem GILTT demonstrou uma significativa melhora em relação a abordagem SV, lembrando que, o valor de ótimo para o índice FS é 0. Logo, pode-se inferir que para a abordagem SV os desvios-padrão dos dados observados e preditos apresentam certas discrepâncias. Os dados oriundos de Barros (2004) representam a abordagem GITT que é uma solução aproximada ao problema da dispersão, quando comparada as demais abordagens, percebe-se que os índices NMSE e COR estão próximos ao valor de ótimo, os demais índices FB e FS se apresentam um pouco distante do ideal. Novamente é realizada a comparação entre as abordagens porém, agora são utilizados os dados oriundos do experimento 2 descrito no subcapítulo 4.1.2.

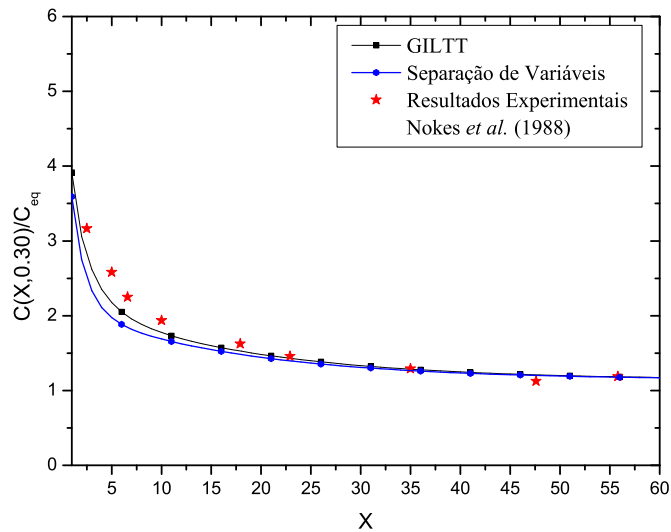


Figura 8: Validação do modelo analítico bidimensional em $Z = 0,3$ comparado com os dados experimentais.

Os resultados obtidos pelo segundo experimento também demonstram boa adequação das abordagens GILTT e SV quando comparados aos dados experimentais. Novamente a abordagem GILTT apresenta maior proximidade com os dados experimentais quando comparada a abordagem SV.

Tabela 4: Avaliação estatística dos métodos GILTT e SV utilizando o experimento 2.

Modelo	NMSE	COR	FB	FS
GILTT	0,014	0,995	0,077	0,259
SV	0,040	0,994	0,134	0,469

Quando analisa-se os índices estatísticos percebe-se que, o índice NMSE se apresenta acima do índice obtido no primeiro experimento para ambas abordagens. Analisando isoladamente o NMSE, percebe-se que ambas abordagens tiveram uma leve queda no seu desempenho em relação ao experimento 1. Tendo novamente a abordagem GILTT o melhor desempenho. O índice $COR \approx 1.0$ demonstra uma boa correlação entre os dados observados e preditos. Para o índice FB, a abordagem GILTT apresentou o melhor valor comparado a abordagem SV, o que indica que a abordagem GILTT está menos propensa a subestimar os dados. Para o índice FS, observa-se que ambas abordagens obtiveram um bom desempenho.

5.2 Resultados obtidos pela abordagem GILTT

Essa seção é destinada a discussão dos resultados obtidos através das simulações realizadas utilizando a abordagem GILTT e busca verificar a coerência dos resultados.

A Figura 9 mostra o comportamento da concentração de poluentes em função do número de autovalores N , foram utilizados $N = 100$. Percebe-se que nas distâncias mais afastadas da fonte poluidora ($X = 30$ e 50) a concentração de poluentes atinge a estabilidade mais rapidamente, sendo que em $X = 50$ observa-se a menor oscilação da concentração predita isto deve-se ao fato de que o poluente já encontra-se uniformemente disperso no meio.

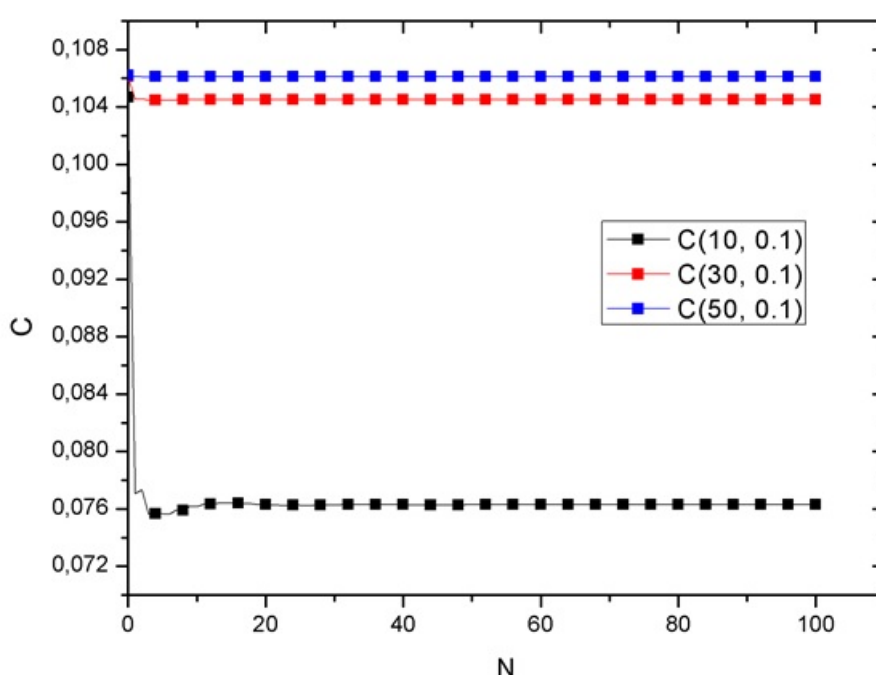


Figura 9: Comportamento da concentração de poluentes C em $Z = 0,1$ para as distâncias $X = (10, 30, 50)$ para a abordagem GILTT.

A Figura 10 apresenta a concentração de poluentes para quatro posições de fonte. Observa-se na Figura 10a) que a maior concentração do poluente está localizada próxima da fonte, ou seja, $Z_s = 0,2$. Nota-se que para as distâncias próximas de $X \approx 30$ o poluente encontra-se dissolvido.

Na Figura 10b) a fonte do poluente está localizada em $Z_s = 0,5$, a maior concentração do poluente ocorre imediatamente após o despejo e exatamente onde a fonte do poluente se encontra, sendo a menor concentração de poluente localizada em $Z_s = 1,0$; Após percorrida a distância de $X \approx 10$ a concentração do poluente tende a permanecer homogênea.

Quando analisa-se a Figura 10c) percebe-se que a maior concentração do poluente é observada imediatamente ao despejo e na altura mais próxima da localização da

fonte em $(Z_s = 1, 0)$ e que a concentração tende a homogeneidade a partir de $X \approx 30$.

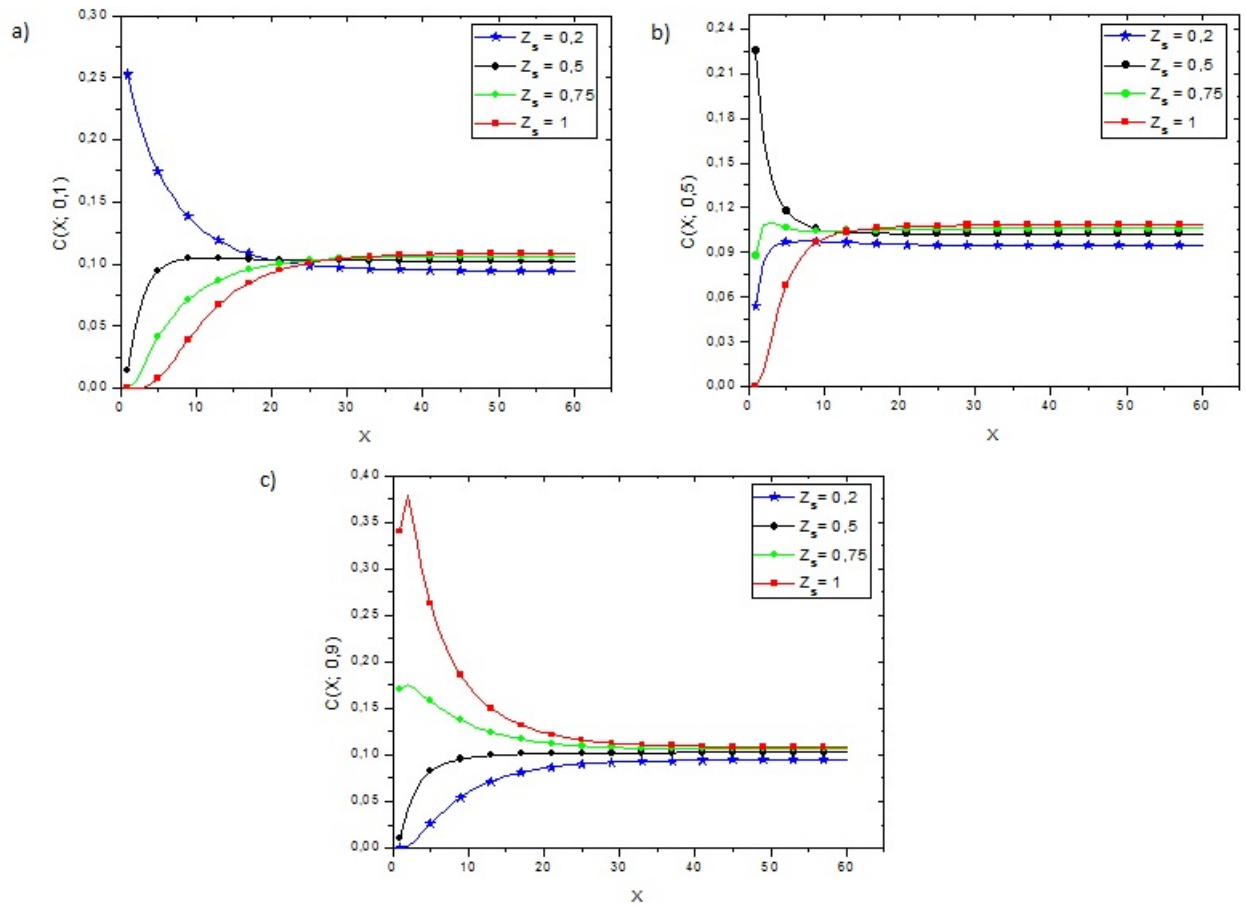


Figura 10: Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para três posições de fonte a) $Z_s = 0, 1$; b) $Z_s = 0, 5$; c) $Z_s = 0, 9$.

Na Figura 11, busca-se analisar a influência da distância na concentração do poluente. Quando analisa-se a Figura 11a), na qual o despejo é realizado em $Z_s = 0, 2$, observa-se que a maior concentração do poluente está localizada na posição da fonte e na menor distância ($X = 0, 5$). Para a distância de $X = 10$ não pode-se determinar um padrão visto que, a maior concentração está localizada em $Z_s \approx 0, 0$. Na Figura 11b), realizando-se o despejo do poluente em $Z_s = 0, 5$, novamente a menor distância ($X = 0, 5$) apresentou a maior concentração associada, seguida de $X = 2$. Pode-se notar que o poluente encontra-se quase todo distribuído nas demais Figuras (Figura 11c) e (Figura 11d).

Pode-se inferir que a distância desempenha um papel importante na dispersão do poluente.

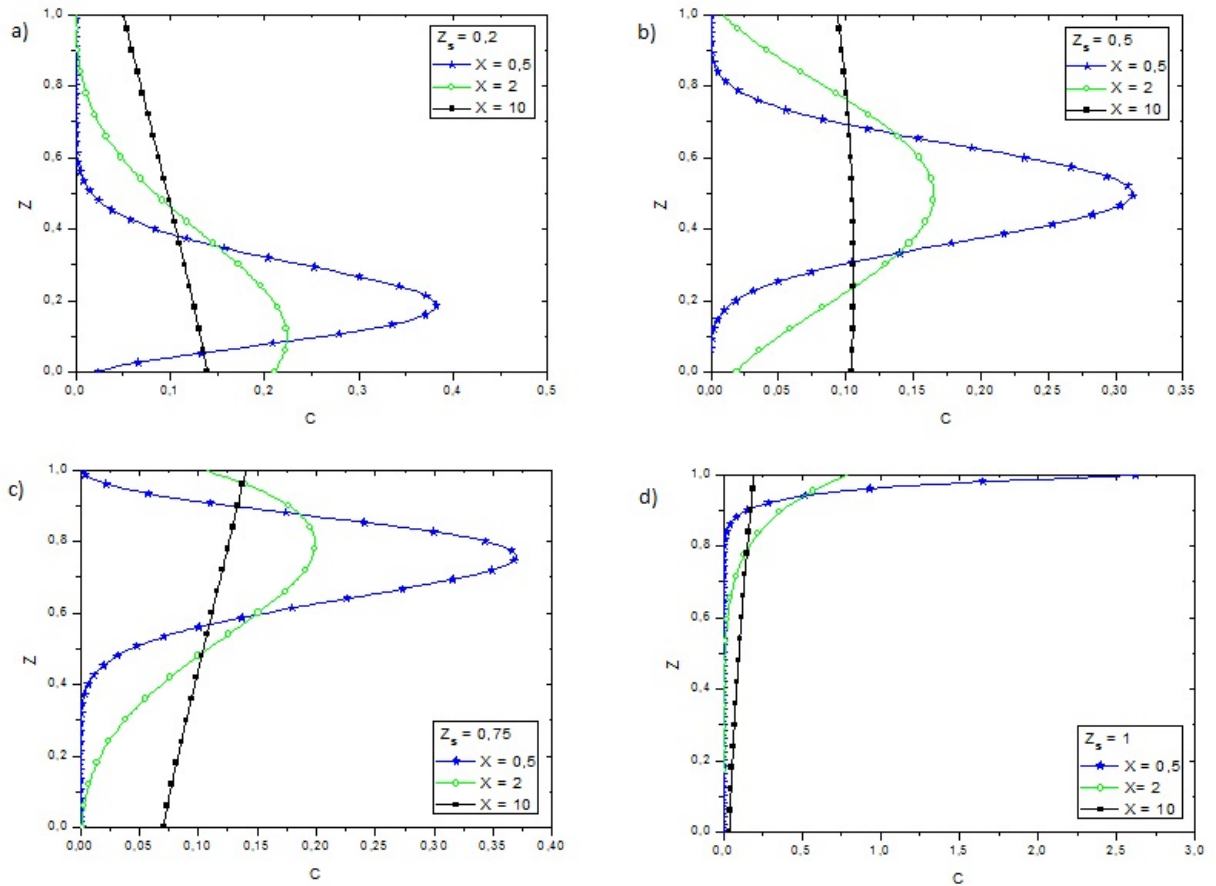


Figura 11: Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para quatro posições de fonte a) $Z_s = 0,2$; b) $Z_s = 0,5$; c) $Z_s = 0,75$ e d) $Z_s = 1$.

Em estudo muito semelhante porém em regime permanente, Oliveira (2015) também pode observar os mesmos padrões encontrados neste estudo, ou seja, como regra a concentração do poluente alcança o seu valor de máximo imediatamente ao despejo e na altura em que a fonte está localizada. Além disso, para distâncias mais afastadas como $X = 2$ e $X = 10$ são observadas respectivamente as menores concentrações preditas.

5.3 Resultados obtidos pela abordagem SV

Assim como para a abordagem GILTT, nesta seção será elaborada uma discussão a respeito dos resultados obtidos na utilização da abordagem SV.

A Figura 12 mostra o comportamento da concentração de poluentes em função do número de autovalores N , foram utilizados $N = 100$ autovalores. Percebe-se que quando comparado aos resultados da Figura 9 há maior oscilação nas concentrações preditas e que a uniformidade da concentração é atingida com um número maior de

autovalores. Novamente é perceptível que a distância mais afastada da fonte poluidora é o local onde há menos instabilidade na predição da concentração ($X = 50$). Observa-se maior instabilidade na abordagem quando comparada com os dados oriundos da abordagem GILTT (Figura 9) o que pode ser explicado pelo fato de que as parametrizações turbulentas na altura são consideradas constantes.

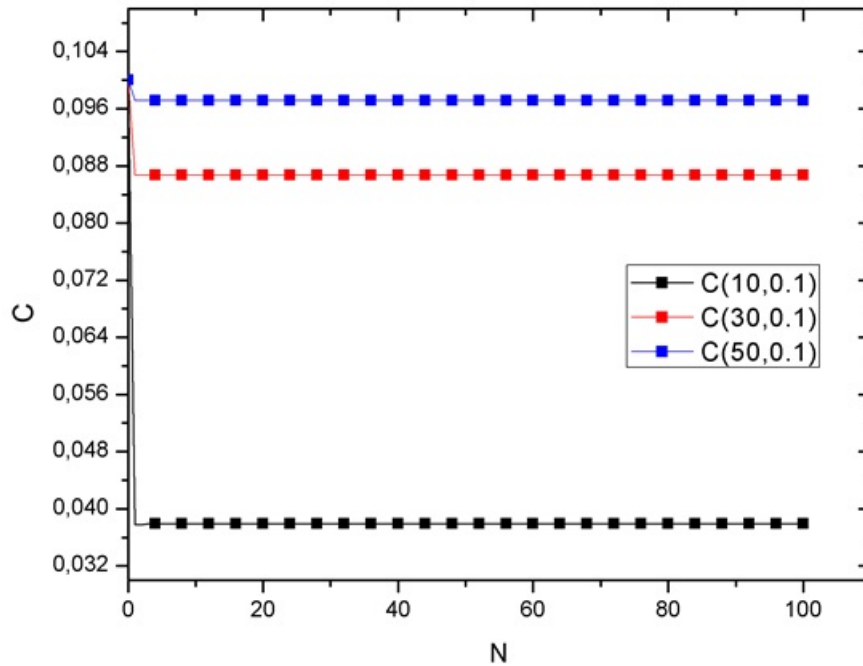


Figura 12: Comportamento da concentração de poluente C em $Z = 0,1$ para as distâncias $X = (10, 30, 50)$ para a abordagem SV.

Na Figura 13, são apresentados três gráficos com diferentes posições de fonte. Na Figura 13a), em que a fonte do despejo está localizada em $Z_s = 0,1$, observa-se padrão semelhante ao encontrado pela abordagem GILTT; a maior concentração do poluente ocorre em $Z_s = 0,2$ e imediatamente ao despejo. A concentração tende a ficar homogênea em $X \approx 40$. Para a Figura 13b), a fonte do poluente está localizada em $Z_s = 0,5$ e, é também a maior concentração associada a este despejo. O perfil da concentração tende a homogeneidade em $X \approx 10$. Na Figura 13c), a fonte do poluente está localizada em $Z_s = 0,9$ e a maior concentração associada a este despejo está localizada em $Z_s = 1,0$. A concentração tende a homogeneidade em $X \approx 50$.

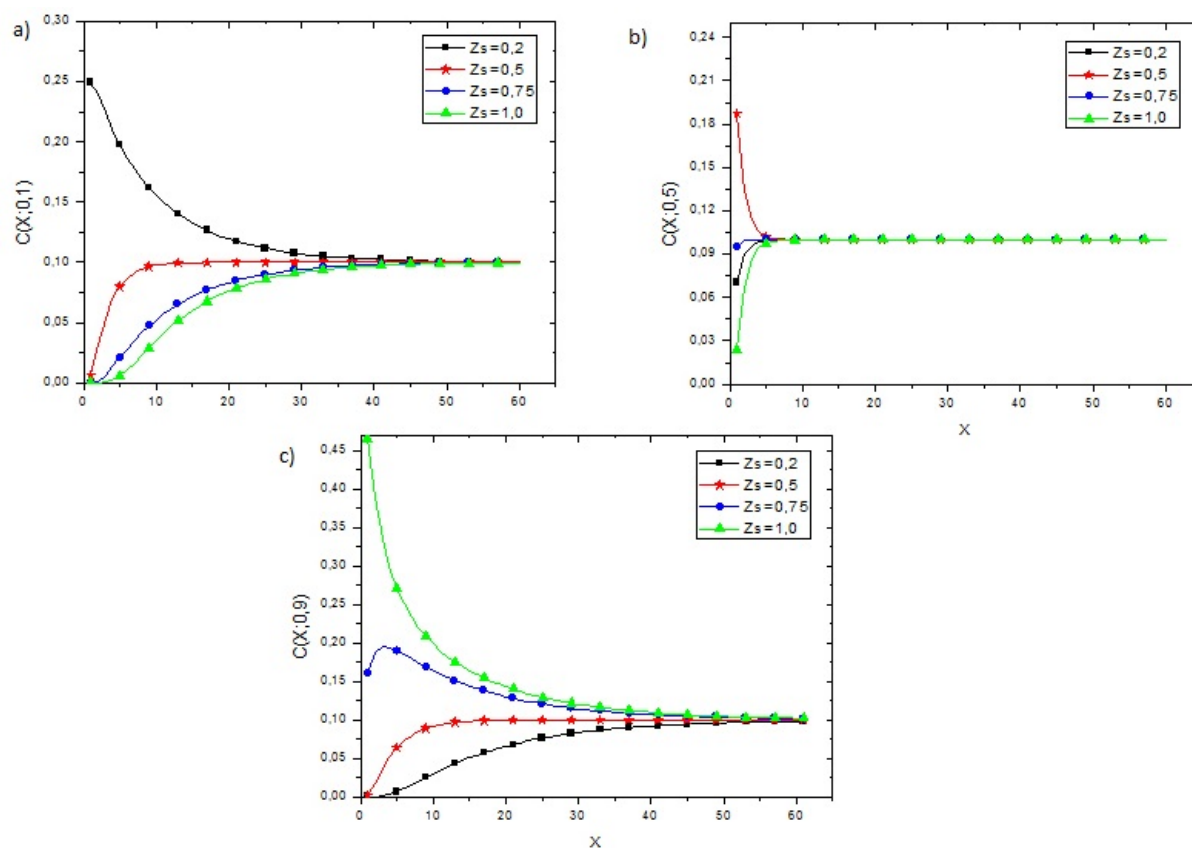


Figura 13: Gráfico da concentração de poluentes C em função da distância X para três posições de fonte a) $Z_s = 0, 1$; b) $Z_s = 0, 5$; c) $Z_s = 0, 9$.

Com base na Figura 13, independente do caso analisado, observa-se que a concentração alcança o seu valor máximo na altura em que a fonte poluidora está localizada e as maiores concentrações ocorrem na proximidade do local de lançamento do poluente. Além disso, verificou-se que nas distâncias mais afastadas da fonte o perfil de concentração não apresenta grandes variações, ou seja, existe uma tendência do poluente se dispersar e se tornar homogêneo.

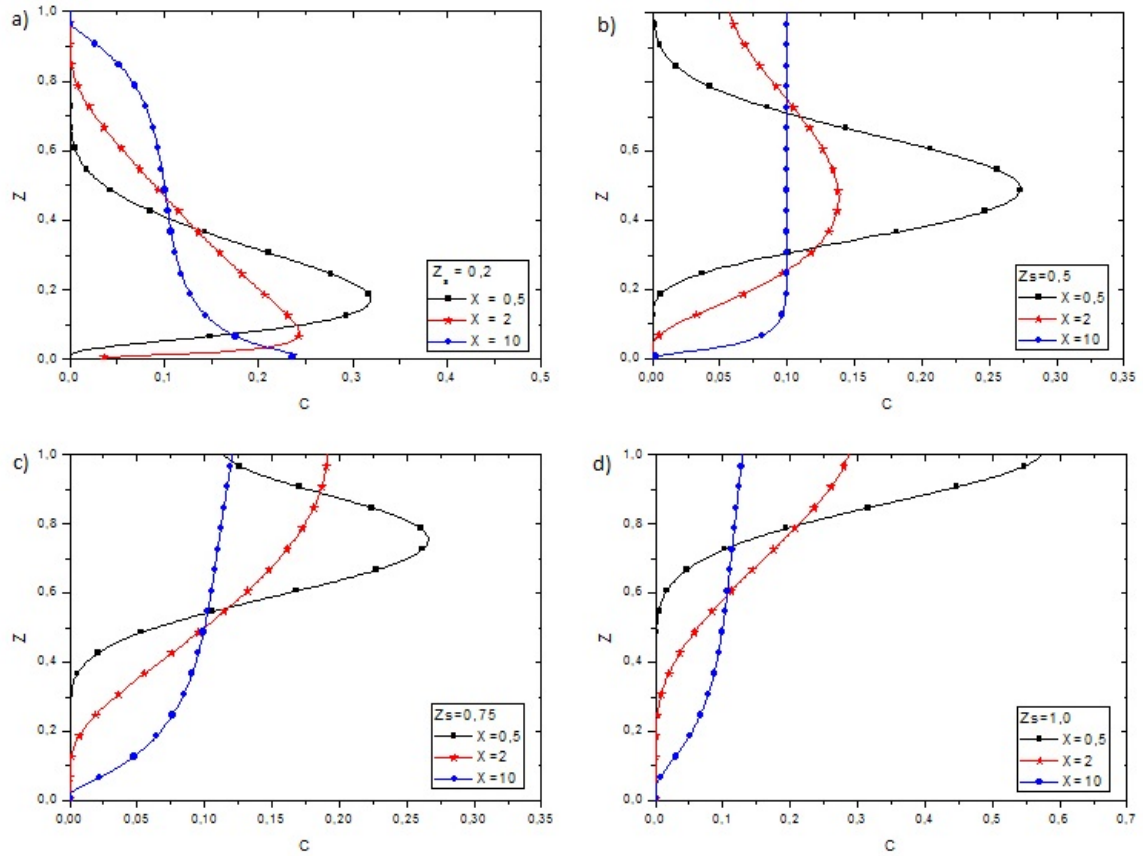


Figura 14: Perfil vertical da concentração de poluentes C para quatro distâncias ($X = 0,5$; $X = 2$ e $X = 10$) com a posição da fonte em a) $Z_s = 0,2$; b) $Z_s = 0,5$; c) $Z_s = 0,75$ e d) $Z_s = 1,0$ para a abordagem SV.

Pode-se perceber que, a abordagem se mostrou eficaz e coerente na obtenção dos resultados numéricos nos dois casos analisados porém, demonstrou melhor desempenho no experimento 2.

6 CONCLUSÃO

No presente estudo foram apresentadas, através das abordagens GILTT e SV, duas representações analíticas ao modelo bidimensional vertical em regime transiente, simulando o processo de dispersão de poluentes em rios e canais.

Pelos resultados obtidos observou-se uma boa concordância entre as duas abordagens, ou seja, ambas as abordagens são capazes de reproduzir adequadamente o fenômeno da dispersão de poluentes em corpos hídricos nos dois experimentos utilizados. Quando analisados os dois experimentos separadamente, percebe-se que as abordagens demonstraram maior acurácia nos resultados obtidos a partir do experimento 2.

As características apresentadas pela GILTT e SV são muito similares. Merece destaque o fato de que as duas abordagens representam os dados experimentais de uma forma coerente, desta forma constatou-se o bom desempenho do modelo utilizando as duas abordagens. Fazendo uma comparação entre as duas abordagens, percebe-se uma pequena melhora da abordagem GILTT, acredita-se que isto deva-se ao fato da abordagem GILTT utilizar as parametrizações turbulentas variáveis na altura.

A abordagem SV ao contrário da GILTT utiliza coeficientes constantes, pode-se inferir que, a utilização dos coeficientes constantes acarreta em certa limitação no desempenho da abordagem.

O presente estudo analisou e comparou as abordagens além de, ter expandido as técnicas para situações em que ocorra a dispersão de poluentes em corpos hídricos. Dentro deste contexto, as abordagens obtiveram resultados satisfatórios.

REFERÊNCIAS

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

ASHBY, M. F. **Engenharia ambiental: conceitos, tecnologia e gestão**. Elsevier, Rio de Janeiro, 2013.

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

BASHA, H. A. Analytical model of two dimensional dispersion in laterally non-uniform axial velocity, **Journal of Hydraulic Engineering**, vol. 123, p. 853–862, 1997.

BITTENCOURT, A. G.; PEREIRA, C. A. A. O.; TAKIISHI, M.; OLIVEIRA, L. H. W.; MERCER, G.; ROBERTS, M. **Desenvolvimento de Modelo Matemático de Qualidade da Água Para a Implantação da Agência da Bacia do Rio das Velhas**. In: 19º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, 1999.

BOGLE, G. Stream velocity profiles and longitudinal dispersion, **Journal of Hydraulic Engineering**, vol. 123(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**. Pearson Prentice Hall, São Paulo, 2 edition, 2005.

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

BUSKE, D.; QUADROS, R. S.; OLIVEIRA, R. E.; WEYMAR, G. J.; HARTER, F. P. Analytical solution for contaminant dispersion model in rivers and canals applying the method GILTT, **International Journal of Development Research**, vol. 7, p. 13857–13864, 2017.

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, 2011.

CHOW, V. T. **Open Channel Hydraulics**. McGraw - Hill Book Company, New York, 1 edition, 1959.

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

COX, B. A. A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers, **The Science of the Total Environment**, vol. , p. 314–316:335–377, 2003.

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**, vol. 8(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**, pages 175–232. Manole, Barueri, 2003.

EL-SADEK. Comparison between numerical and analytical solution of solute transport models, **Journal of African Earth Sciences**, vol. 55, p. 63–68, 2009.

FISCHER, H. B. The mechanics of dispersion in natural streams, **Journal Hydraulics Division Proceedings**, vol. 93(6), p. 187–216, 1967.

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

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

GARCIA, R. **Soluções Exatas para Problemas de Dispersão de Poluentes - Modelo Difusivo Baseado na Equação KDV**. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2009.

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

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

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

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

IBGE. **PESQUISA NACIONAL POR AMOSTRA DE DOMICÍLIOS: SÍNTESE DE INDICADORES (PNAD-IBGE)**. Coordenação de Trabalho e Rendimento, Rio de Janeiro/RJ, 2015.

LAURENTIS, D. G. **Modelagem matemática da qualidade de água em grandes bacias:sistema Taquari-Antas -RS**. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2004.

LEITHOLD, L. **O Cálculo com Geometria Analítica**. Harbra, São Paulo/SP, 3 edition, 1994.

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**, vol. 1, p. 19–36, 1999.

MACHADO, B. R.; BUSKE, D.; SIQUEIRA, T. M.; WEYMAR, G. J.; MORAES, R. K. **Comparação entre duas abordagens analíticas para a modelagem da dispersão de poluentes em um corpo hídrico**. In: XXI ENCONTRO NACIONAL DE MODELAGEM COMPUTACIONAL, 2018.

MACHADO, M. B. **Modelagem Tridimensional da Dispersão de Poluentes em Rios**. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Química, UNICAMP, São Paulo/SP, 2006.

MAZUMDER, B.; XIA, R. Dispersion of pollutants in an asymmetric flow through a channel, **International Journal of Engineering Science**, vol. 32(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**, vol. 92, p. 1–17, 2009.

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

NADAOKA, K.; YAGI, H. Shallow-water turbulence modeling and horizontal large-eddy computation of river flow, **Journal of Hydraulic Engineering**, vol. 124(5), p. 493–499, 1998.

NAZAROFF, W. W.; COHEN, L. A. **Environmental Engineering Science**. John Wiley & Sons, 2001.

NEVES, C. S. **Um problema de dispersão de poluentes em rios e canais por meio do método de separação de variáveis**. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional (PPGMC), Universidade Federal de Rio Grande, Rio Grande/RS, 2012.

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

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

NORDIN, C. F.; SABOL, B. V. Empirical data on longitudinal dispersion in rivers, **Geological Survey, Water Resources Division**, vol. , p. 20–74, 1974.

OLIVEIRA, R. E. **Dispersão de contaminantes em rios e canais através do método GILTT**. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Matemática, Instituto de Física e Matemática, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas/RS, 2015.

PESSOLI, L. **Modelagem da dispersão de poluentes leves em ambientes complexos**. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Computação Aplicada, Universidade do Vale do Rio dos Sinos, São Leopoldo/RS, 2006.

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

RAMOS, P. A.; FREIRE, C. D.; VILLAR, L. B. B. S.; CHAVES, L. V. C.; ALVES, N. J. J.; TAVATES NETO, H. I. J. **O Uso da Modelagem para Predizer a Dispersão de Nuvens Poluentes na Atmosfera**. In: ANAIS DO XX CONGRESSO BRASILEIRO DE ENGENHARIA QUÍMICA, 2014.

ROBERTS, P. J. W.; WEBSTER, D. R. **Turbulent Diffusion**. Environmental Fluid Mechanics -Theories and Applications, Atlanta, Georgia, 2001.

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

SANSKRITYAYN, A.; BHARATI, K. V.; KUMAR, N. Solute transport due to spatio-temporally dependent dispersion coefficient and velocity: Analytical solutions, **Journal of Hydrologic Engineering**, vol. 23, p. 41–61, 2018.

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

SIQUEIRA, T. M. Emprego de fontes de contaminação de diferentes geometrias nas estimativas do risco à saúde humana devido à ingestão de água subterrânea contaminada, **Revista Brasileira de ciências ambientais**, vol. 43, p. 85–10, 2017.

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**. Trabalho de conclusão de curso, UFES, Vitória/ES, 2012.

STROUD, A. H.; SECREST, D. **Gaussian quadrature formulas**. Englewood Cliffs, N. J., Prentice Hall Inc., 1966.

TENNEKES, H.; LUMLEY, J. L. **A First Course in Turbulence**. MIT Press, Cambridge/Massachussetts, 1983.

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

TUCCI, C. E. M. Águas urbanas, **Estudos Avançados**, vol. 22, p. 1–16, 2008.

TUNDISI, J. G. **Água no Século XXI: Enfrentando a Escassez**. RIMA, São Carlos, SP, 2ª edition, 2003.

VAN GENUCHTEN, M. T. H.; LEIJ, F. J.; SKAGGS, T. H.; TORIDE, N.; BRADFORD, S. A.; PONTEDEIRO, E. M. Exact analytical solutions for contaminant transport in rivers 2. Transient storage and decay chain solutions, **Journal Hydrology Hydromechanics**, vol. 61(3), p. 250–259, 2013.

VIDAL, T. F.; CHAGAS, P. F.; SOUZA, R. O. Equação da dispersão de poluentes em rios, para diferentes fontes de lançamentos, considerando os diversos parâmetros hidráulicos do corpo hídrico, **XI Fórum Ambiental da Alta Paulista**, vol. 11(6), p. 206–217, 2015.

VILHENA, M.; SEFIDVASH, F. Two dimensional treatment of dispersion of pollutants in rivers, **The International Journal of Applied Radiation and Isotopes**, vol. 36(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**, vol. 391, p. 2576–2584, 2012.

VON SPERLING, M. V. **Introdução à qualidade das águas e ao tratamento de esgotos**. DESA/UFMG, Belo Horizonte/MG, 2005.

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

WEYMAR, G. J.; FURTADO, I.; BUSKE, D.; QUADROS, R. **Solução de um modelo bidimensional para dispersão de contaminantes em rios e canais**, 2010.

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

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

YEH, G. T.; TSAI, Y. J. Dispersion of water pollutants in a turbulent shear flow, **Water Resources Research**, vol. 12(6), p. 1265–1270, 1976.

YOSHINARI, A. **Estudo comparativo entre o modelo analítico de Domenico (1987) e Wexler (1992) e suas implicações no gerenciamento de passivos ambientais**. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Geociências e Meio Ambiente, Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, São Paulo, Rio Claro/SP, 2015.

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

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

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