



Programa de Pós-Graduação em Engenharia  
de Recursos Naturais da Amazônia

## **DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO VIA MEF PARA ANÁLISE DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS, LAGOS E ESTUÁRIOS**

**Rômulo Correa Lima**

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia, PRODERNA/ITEC, da Universidade Federal do Pará, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia de Recursos Naturais.

Orientadores: André Luiz Amarante Mesquita  
Claudio José Cavalcante Blanco

Belém  
Março de 2012

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO VIA MEF PARA ANÁLISE DA  
DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS, LAGOS E ESTUÁRIOS**

Rômulo Correa Lima

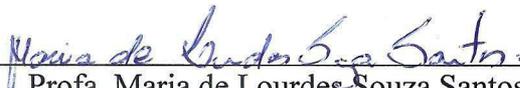
TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE RECURSOS NATURAIS DA AMAZÔNIA (PRODERNA/ITEC) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM ENGENHARIA DE RECURSOS NATURAIS.

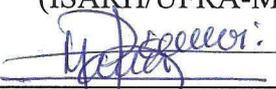
Aprovada por:

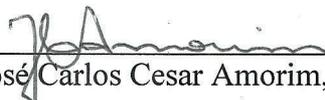
  
\_\_\_\_\_  
Prof. André Luiz Amarante Mesquita, Dr.Ing.  
(FEM/UFPA-Orientador)

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Claudio José Cavalcante Blanco, Ph.D.  
(FAESA/UFPA-Orientador)

  
\_\_\_\_\_  
Prof. Emanuel Negrão Macêdo, D.Sc.  
(FEQ/UFPA-Membro)

  
\_\_\_\_\_  
Profa. Maria de Lourdes Souza Santos, D.Sc.  
(ISARH/UFRA-Membro)

  
\_\_\_\_\_  
Dra. Maria de Lourdes Cavalcanti Barros, D.Sc.  
(PEC/UFRJ-Membro)

  
\_\_\_\_\_  
Prof. José Carlos Cesar Amorim, Dr.Ing.  
(SE-2/IME-Membro)

BELÉM, PA - BRASIL

MARÇO DE 2012

**Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)**  
**Instituto de Tecnologia/Programa de Pós-graduação em**  
**Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia**

---

Lima, Rômulo Correa, 1975-

Desenvolvimento de um modelo via MEF para análise da dispersão de poluentes em rios, lagos e estuários / Rômulo Correa Lima. - 2012. Orientador: André Luiz Amarante Mesquita; Coorientador: Claudio José Cavalcante Blanco.

Tese (Doutorado) - Universidade Federal do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Naturais da Amazônia, Belém, 2012.

1. Água - Poluição. 2. Massa - Transferência. 3. Simulação (Computadores). 4. Método dos elementos finitos. I. Título.

CDD 23. ed. 363.7394

---

*À minha esposa Elisângela e aos meus pais  
Reginaldo e Celeste que são meus portos  
seguros.*

## AGRADECIMENTOS

A DEUS, força maior onde encontro esperança em todos os momentos da minha vida.

À minha esposa Elisângela que esteve ao meu lado em muitos momentos difíceis.

Aos meus pais Reginaldo e Celeste pelo apoio, confiança e dedicação na minha criação e formação.

Aos professores André Mesquita e Claudio Blanco pela orientação e incentivo dispensados durante a realização deste trabalho.

Ao professor Erb pelo auxílio e sugestões ao longo do desenvolvimento deste trabalho.

Aos meus amigos Alvino, Bené, Inaldo, Paulão, Reimar, Venâncio, Mariane e Patrícia pelo incentivo e amizade.

À UFPA e ao PRODERNA pela oportunidade proporcionada ao meu desenvolvimento profissional.

À FAPESPA pelo apoio financeiro fundamental para a dedicação a esta composição.

A todos aqueles que colaboraram direta ou indiretamente na realização deste trabalho.

Resumo da Tese apresentada ao PRODERNA/UFPA como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Engenharia de Recursos Naturais (D.Eng.)

## **DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO VIA MEF PARA ANÁLISE DA DISPERSÃO DE POLUENTES EM RIOS, LAGOS E ESTUÁRIOS**

**Rômulo Correa Lima**

Março/2012

Orientadores: André Luiz Amarante Mesquita e Claudio José Cavalcante Blanco

Área de Concentração: Uso e Transformação de Recursos Naturais

Água doce de boa qualidade é um pré-requisito para o desenvolvimento social e econômico de uma dada região. Paradoxalmente, este mesmo desenvolvimento é, normalmente, responsável pela poluição de suas fontes hídricas, através de despejo de resíduos domésticos ou industriais sem tratamento, ou através de atividades agrícolas. Desta forma, o monitoramento e o gerenciamento destas fontes são de extrema importância para o bem estar da população. Entre as possíveis ferramentas para auxiliar este gerenciamento, encontra-se a simulação computacional de transporte de poluentes nos meios hídricos. Neste contexto, o presente trabalho apresenta um procedimento para a solução computacional da equação de advecção-difusão-reação em 2D, a qual é a base para todos os modelos de transporte de massa. O processo consiste na união entre os métodos de elementos finitos e de diferenças finitas na discretização das componentes espaciais e temporal, respectivamente. Esta metodologia foi avaliada em testes com dados sintéticos e também reais. No primeiro considerou-se o caso de transporte de massa por advecção pura para certificar a estabilidade nos casos em que as formulações clássicas falham. No segundo simulou-se o transporte de um poluente hipotético em um trecho de rio e obtiveram-se os efeitos próprios do arraste devido à advecção e o espalhamento devido à difusão. O último teste examinou o transporte de fósforo total no lago Água Preta a partir das águas bombeadas do rio Guamá e de fontes pontuais localizadas nas margens deste reservatório. O resultado da simulação mostrou a potencialidade do algoritmo em tratar casos mais próximos da realidade.

Abstract of Thesis presented to PRODERNA/UFPA as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Natural Resources Engineering (D.Eng.)

**DEVELOPMENT OF A MODEL VIA FEM FOR THE ANALYSIS OF THE  
POLLUTANT DISPERSION IN RIVERS, LAKES AND ESTUARIES**

**Rômulo Correa Lima**

March/2012

Advisors: André Luiz Amarante Mesquita and Claudio José Cavalcante Blanco

Research Area: Use and Transformation of Natural Resources

Freshwater of good quality is a pre-requisite for social and economic development of a given region. Paradoxically, this same development is normally responsible for the pollution of their water sources, through domestic or industrial waste dumping without treatment, or through agricultural activities. In this way, the monitoring and the management of that sources are extremely important for the wellbeing of the people living in that region. Among the possible tools to auxiliary this management is the computational simulation of pollutant transport in the hydro medium. In this context, this work presents a computational procedure for the solution of the 2D advection-diffusion-reaction equation, which is the basis for all the mass transport models. This process consists in the union of the finite elements and finite difference methods in the discretization of the spatial and temporal components, respectively. This methodology was evaluated with the help of tests with synthetic and real data. First one considered the case of mass transport by pure advection to ensure its stability in cases where the classical formulations fail. Second test simulated the transport of a hypothetical pollutant in a piece of a river and showed the correct effect of the drag due to advection and spreading due to diffusion. The last test evaluated the transport of total phosphorus in Água Preta Lake from the pumped water of the Guamá river and point sources located at the margins of the reservoir. The result of the simulation showed the potential of the algorithm to deal with cases closer to the reality.

## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO</b> .....	1
1.1 - MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS.....	1
1.2 - ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO .....	2
<b>CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA</b> .....	4
2.1 - QUALIDADE DA ÁGUA E DISPERSÃO DO FÓSFORO .....	4
2.1.1 – Modelos matemáticos da qualidade da água .....	4
2.1.3 - Dispersão do fósforo .....	8
2.2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO .....	14
<b>CAPÍTULO 3 - A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA</b> .....	17
3.1 - MODELO HIDRODINÂMICO.....	17
3.1.1 - Condições de contorno e inicial .....	19
3.2 - A EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO .....	20
3.3 - A EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO EM MEIOS TURBULENTOS.....	22
3.4 – CONDIÇÃO INICIAL E CONDIÇÕES DE CONTORNO .....	24
3.4.1 - Condição inicial .....	24
3.4.2 - Condições de contorno .....	24
3.5 – A EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO.....	26
<b>CAPÍTULO 4 - MODELO DE TRANSPORTE DE POLUENTES</b> .....	28
4.1 – OS TERMOS FONTES E SUMIDOUROS.....	28
4.1.1 - Processos ambientais não reativos .....	28
4.1.2 - Processos ambientais reativos .....	29
4.1.3 - Transformações físicas.....	30
4.1.4 - Transformação química.....	31
4.1.5 - Transformação biológica.....	31
4.2 - CINÉTICA DE REAÇÃO .....	31
4.2.1 - Reações elementares .....	32

<b>CAPÍTULO 5 - SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO 2D</b> .....	36
5.1 – DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL.....	36
5.1.1 – O método $\theta$ .....	36
5.1.2 – Condições de estabilidade do método $\theta$ .....	37
5.2 – DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL.....	38
5.2.1 – Formulação variacional.....	38
5.3.2 – Discretização por elementos finitos.....	41
5.3.3 – O método SUPG.....	44
<b>CAPÍTULO 6 - MODELAGEM COMPUTACIONAL</b> .....	49
6.1 - SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA.....	49
6.2 - SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE MASSA.....	50
6.3 - VISUALIZAÇÃO DOS RESULTADOS.....	51
<b>CAPÍTULO 7 - RESULTADOS NUMÉRICOS</b> .....	53
7.1 – ADVECCÃO PURA EM UM CAMPO ROTACIONAL.....	53
7.2 – ADVECCÃO E DIFUSÃO EM MALHAS NÃO ESTRUTURADAS.....	64
7.3 – DISPERSÃO DE FÓSFORO NO LAGO ÁGUA PRETA.....	74
7.3.1 - Apresentação do problema.....	74
7.3.2 - Dados experimentais disponíveis.....	79
7.3.3 - Modelagem do problema.....	84
7.3.4 - Resultados e discussões.....	93
<b>CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E PESQUISAS FUTURAS</b> .....	101
8.1 - CONCLUSÕES.....	101
8.2 - SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS.....	102
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> .....	103

## LISTA DE FIGURAS

<b>Figura 2.1</b>	Ciclo do fósforo em sistemas aquáticos naturais.....	9
<b>Figura 3.1</b>	Descrição do problema para a obtenção das equações de Saint-Venant.....	18
<b>Figura 3.2</b>	Representação de uma célula da malha de elementos finitos na solução do modelo hidrodinâmico. Fonte: Adaptado de HENICHE <i>et al.</i> (2000).....	19
<b>Figura 3.3</b>	Esquema do fluxo associado ao volume de controle para o desenvolvimento da equação de advecção-difusão. Fonte: Adaptado de SOCOLOFSKY e JIRKA (2004).....	20
<b>Figura 5.1</b>	Malha de elementos finitos $\Omega_h$ , composta por elementos $\Omega_e$ triangulares e quadrilaterais, discretizando um domínio $\Omega$ . Fonte: Adaptado de BECKER <i>et al.</i> (1981).....	42
<b>Figura 5.2</b>	Exemplo de células de elementos finitos triangulares e quadrilaterais, geradores de polinômios lineares e quadráticos. Fonte: Adaptado de BECKER <i>et al.</i> (1981).....	43
<b>Figura 6.1</b>	Fluxograma do procedimento computacional adotado na solução numérica da equação de advecção-difusão.....	52
<b>Figura 7.1</b>	Campo de velocidade, isolinhas da condição inicial e cortes nas direções $x_1$ (horizontal) e $x_2$ (vertical).....	54
<b>Figura 7.2</b>	Representação da condição inicial (e também solução exata) na forma de superfície.....	55
<b>Figura 7.3</b>	Solução do problema obtida pelo método de Galerkin após uma rotação completa em volta do centro do modelo.....	56
<b>Figura 7.4</b>	Resultado numérico obtido pelo método de $\theta$ /SUPG após uma rotação completa em volta do centro do modelo.....	57
<b>Figura 7.5</b>	Comparação entre as soluções exata, SUPG e Galerkin, na direção $x_1$ .....	58
<b>Figura 7.1</b>	Comparação entre as soluções exata, SUPG e Galerkin, na direção $x_2$ .....	59

<b>Figura 7.7</b>	Solução final obtida pelo método $\theta$ /SUPG para uma rotação completa em uma malha 61X61.....	61
<b>Figura 7.8</b>	Comparação entre as soluções exatas e $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61 na direção $x_1$ .....	62
<b>Figura 7.9</b>	Comparação entre as soluções exatas e $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61 na direção $x_2$ .....	63
<b>Figura 7.10</b>	Descarga por uma fonte pontual na margem de um rio distante do trecho modelado. Fonte: Adaptado de SOCOLOFSKY e JIRKA (2004).....	64
<b>Figura 7.11</b>	Malha não estruturada de elementos finitos do modelo teste Trout River, fornecido pelo pacote Modeleur /Hydrosim.....	66
<b>Figura 7.12</b>	Campo de velocidade do modelo teste Trout River fornecido no pacote de simulação hidrodinâmica Modeleur/Hydrosim.....	66
<b>Figura 7.13</b>	Condição inicial do problema. A concentração é constante em 10 u.c. entre 20 e 110 m sobre o contorno de entrada do modelo.....	67
<b>Figura 7.14</b>	Distribuição da concentração após 13 minutos de simulação.....	69
<b>Figura 7.15</b>	Configuração da concentração após a simulação de 50 minutos.....	70
<b>Figura 7.16</b>	Comportamento da distribuição da substância após 83 minutos.....	71
<b>Figura 7.17</b>	Distribuição da concentração após a simulação de 127 minutos de transporte da substância.....	72
<b>Figura 7.18</b>	Complexo hídrico de abastecimento da região metropolitana de Belém. Fonte: Adaptado do Google Earth (2012).....	75
<b>Figura 7.19</b>	Detalhe do lago Bolonha. Fonte: Adaptado de Google Earth (2012).....	77
<b>Figura 7.20</b>	Detalhe do lago Água Preta. Fonte: Adaptado de Google Earth (2012).....	77
<b>Figura 7.22</b>	Curvas da média mensal e do acumulado para a precipitação pluviométrica para os dados apresentados na Tabela 7.3.....	80
<b>Figura 7.22</b>	Altura da lâmina de água do lago (H) e vazão de bombeamento da água do Rio Guamá (Q).....	82

<b>Figura 7.23</b>	Representação gráfica dos valores de concentração do fósforo total (mg/L) mostrados na Tabela 7.5.....	83
<b>Figura 7.24</b>	Malha hidrodinâmica do Lago Água Preta gerada no <i>Modeleur</i> .....	86
<b>Figura 7.25</b>	Campo de velocidade gerado pelo simulador hidrodinâmico Hydrosim, à esquerda, e seu módulo.....	87
<b>Figura 7.26</b>	Localização dos pontos de amostragem para análise do campo de velocidade.....	88
<b>Figura 7.27</b>	Módulo da velocidade nos três pontos de amostragem ao longo do tempo de simulação.....	89
<b>Figura 7.28</b>	Indicação das localizações das fontes pontuais, as quais representam emissários de esgotos não tratados.....	91
<b>Figura 7.29</b>	Condição da distribuição inicial do fósforo total.....	92
<b>Figura 7.30</b>	Evolução temporal da concentração no contorno de saída do modelo, obtida na simulação da a obtenção da condição inicial.....	93
<b>Figura 7.31</b>	Evolução temporal da simulação do transporte de fósforo introduzido pelas águas do rio Guamá e por fontes pontuais.....	97
<b>Figura 7.32</b>	Comparação dos dados observados e calculados da concentração de fósforo ao longo do tempo em um ponto sobre o contorno de saída do modelo.....	99

## LISTA DE TABELAS

<b>Tabela 7.1</b>	Valores máximos e mínimos das concentrações para as soluções exata, $\theta$ /SUPG, Galerkin, Lax-Wendroff/Galerkin, TG2 e TG3..	60
<b>Tabela 7.2</b>	Valores máximos e mínimos das concentrações para as soluções exatas e $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61.....	63
<b>Tabela 7.3</b>	Médias mensais e acumuladas, em milímetros, da pluviometria da região do lago Água Preta para o período de novembro de 2008 a outubro de 2009. Fonte: SECTAM - EMBRAPA.....	79
<b>Tabela 7.4</b>	Médias mensais da altura da lâmina de água e vazão bombeada para o lago Água Preta. Fonte: COSANPA.....	81
<b>Tabela 7.5</b>	Dados de concentração de fósforo total (em mg/L) coletados na adutora de entrada e no canal de saída das águas do lago Água Preta. Fonte: SILVA (2010).....	83
<b>Tabela 7.6</b>	Variação temporal das concentrações nas fontes pontuais ao longo do período analisado.....	90

## LISTA DE SÍMBOLOS

$A$	Crescimento de alga;
$a_P$	Proporção do consumo de fosfato na biomassa de alga;
$c$	Velocidade das ondas;
$C$	Concentração;
$\mathbf{C}$	Vetor contendo os valores nodais da concentração;
$C_0(x)$	distribuição inicial de $C$ ;
$C_N$	Concentração de nitrogênio na forma de nitrito/nitrato (mg/L);
$C_P$	Concentração do fósforo inorgânico;
$C_{PO}$	Concentração de fósforo orgânico;
$C_{PP}$	Concentrações de fósforo na forma particulada;
$C_{Phy}$	Concentração de biomassa de fitoplâncton;
$C_s$	Concentração média na superfície dentro da subcamada de reação;
$C_{SRP}$	Concentrações de fósforo na forma reativa solúvel;
$D$	Coefficiente de difusão turbulenta;
$D_{ij}$	Coefficiente de difusão molecular;
$d_x$	Fluxo difusivo;
$E_a$	Energia de ativação;
$f_c$	Fator de Couriolis;
$f_d$	Fração de dia que a taxa de crescimento máximo das algas é aplicada;
$f_{Phy,PO}$	Fração de mortalidade dos fitoplânctons;
$f_{PO,d}$	Fração de fósforo orgânico dissolvido;
$f_R$	Fonte difusiva ou termo de reação;
$F_{[PP]}$	Fonte de fósforo particulado;
$F_{[SRP]}$	Fonte de fósforo solúvel;
$g$	Aceleração da gravidade;
$H$	Profundidade do corpo hídrico;
$h$	Tamanho local do elemento da malha;
$J$	Fluxo total;
$k$	Constante ou coeficiente de reação;
$k_M$	Coefficiente da taxa de mortalidade dos fitoplânctons;
$k_{PO}$	Taxa de reação do fósforo orgânico a 20° C (1/dia);

$K_P$	Constante de meia saturação para o fosfato (mg/L);
$K_N$	Constante de meia saturação para o nitrato (mg/L);
$l$	Coefficiente de regeneração linear;
$\dot{m}_{entra}$	Fluxo da massa na face de entrada no volume de controle;
$\dot{m}_{sai}$	Fluxo da massa na face de saída no volume de controle;
$M$	Massa;
$\vec{n}$	Vetor unitário normal à face do volume de controle;
$\mathbf{n}$	Vetor na normal ao contorno;
$\mathbf{N}$	Vetor das funções bases;
$p(\mathbf{N})$	Termo de perturbação;
$p$	Porosidade;
$Pr$	Captação de fósforo durante a produção primária;
$\mathbf{q}$	Vetor da vazão específica;
$q_x, q_y$	Componentes do vetor vazão específica nas direções $x$ e $y$ ;
$R$	Constante dos gases ideais;
$s$	Fator de segurança;
$S$	Fontes Pontuais;
$t$	Tempo;
$t_0$	Instante inicial;
$t_f$	Instante final;
$T$	Temperatura absoluta;
$\mathbf{u}$	Vetor velocidade;
$u, v$	Componentes do vetor velocidade nas direções $x$ e $y$ ;
$V$	Volume;
$w$	Função peso;
$\mathbf{x}$	Vetor das coordenadas cartesianas;
$x, y, z$	Componentes do vetor das coordenadas cartesianas;
$z_f$	Nível do fundo com respeito a um nível de referência;

## LETRAS GREGAS

$\gamma$	Número de Courant;
$\Gamma$	Fronteira do domínio;

$\delta_s$	Profundidade da subcamada de reação;
$\delta t$	Incremento no tempo;
$\delta x, \delta y, \delta z$	Incremento no espaço nas direções $x, y$ e $z$ ;
$\Delta t_c$	Limite do passo de tempo para a componente convectiva;
$\Delta t_d$	Limite do passo de tempo para a componente difusiva;
$\zeta_P$	Fluxo de fósforo inorgânico do leito sedimentar;
$\zeta_{PO}$	Fluxo de fósforo orgânico do leito sedimentar;
$\eta$	nível da superfície da água;
$\theta$	Parâmetro de determinação do esquema de diferenças finitas;
$\Lambda$	Área da face do volume de controle;
$\mu$	Taxa de crescimento máximo das algas (1/dia);
$\rho$	Densidade da água;
$\sigma_x, \sigma_y$	Componentes do stress no plano horizontal;
$\tau$	Parâmetro de estabilização do esquema de elementos finitos;
$\varphi$	Temperatura adimensional;
$\phi$	Propriedade aleatória;
$\bar{\phi}$ e $\phi'$	Quantidades média e flutuante de $\phi$ ;
$\omega_{PO}$	Velocidade de deposição do fósforo orgânico;
$\Omega$	Domínio aberto;

# CAPÍTULO 1

## INTRODUÇÃO

### 1.1 - MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS

A qualidade de vida das pessoas de uma região está diretamente relacionada à qualidade dos recursos hídricos disponíveis. Além disso, os corpos de águas superficiais tem enorme contribuição para o crescimento da indústria, agricultura, cultura e lazer desta região, tornando-se assim uma fonte crucial para o desenvolvimento social e econômico local. Entretanto, este mesmo desenvolvimento é fonte de poluição para os corpos de água do qual ele depende, causando sérios problemas à qualidade da água presente nestes meios. Os possíveis efeitos resultantes da introdução de poluentes no meio aquático dependem da natureza do poluente, da trajetória que este poluente faz no meio e do uso que se faz do corpo aquático. Alguns componentes químicos são poluentes aquáticos por natureza, como por exemplo, o mercúrio, o chumbo e o arsênio. Outros, entretanto, passam à condição de poluente pelo desequilíbrio causado pelo excesso de sua concentração no meio, como por exemplo, os nutrientes, os quais são elementos essenciais para a produção da biomassa de algas e de outros produtores primários, tais como, plantas aquáticas. Uma possível consequência desta poluição é a eutrofização (também denominado de eutroficação), que é o crescimento excessivo de algas e plantas aquáticas, devido a um aumento na quantidade de nutrientes, tais como nitrogênio e fósforo. Estes nutrientes podem ser despejados por esgotos industriais e domésticos, tornando o processo de eutrofização largamente acelerado. A produção excessiva de biomassa pode afetar a qualidade da água, especialmente se ela produzir condições anaeróbicas e assim prejudicar o consumo, a recreação e o uso ecológico.

A degradação da qualidade da água também é um aspecto de grande relevância no que tange a questões econômicas, de saúde pública e da manutenção do sistema ecológico dependente de uma fonte hídrica. A maioria dos usuários de água depende de um nível adequado da qualidade desta. As medidas de gerenciamento da qualidade da água são ações tomadas para que a descarga de poluentes totais nos corpos aquáticos não exceda a habilidade destes corpos de assimilar estas cargas enquanto mantém os níveis de qualidade aceitáveis, os quais são definidos por um conjunto de parâmetros

indicadores. Entre as ferramentas que podem ser utilizadas no auxílio deste gerenciamento, bem como no planejamento de medidas de prevenção ou remediação deste problema, encontra-se a modelagem matemática e computacional.

Existem vários modelos matemáticos propostos para o estudo da qualidade da água. Estes modelos variam em complexidade dependendo do objetivo do estudo que será feito. Especificamente, para a simulação do transporte de contaminantes, o ponto de partida é a equação de advecção-difusão-reação, a qual faz parte de vários modelos de transporte em ambientes hidrodinâmicos, como por exemplo, o transporte de sedimentos.

Tendo em vista o contexto exposto, o presente trabalho objetiva o desenvolvimento de uma ferramenta de solução numérica de forma a produzir simulações computacionais que representem o fenômeno de transporte advectivo-difusivo de poluentes, bem como as reações sofridas por estes, em corpos de águas superficiais.

Mais especificamente, tem-se os seguintes objetivos:

- Aplicação do método  $\theta$ /SUPG na simulação de transporte de poluentes com o desenvolvimento de um código;
- Interação entre o pacote computacional Modeleur/Hidrosym, responsável pela geração da malha de elementos finitos, bem como também, o campo de velocidade hidrodinâmico e o código computacional produzido;
- Utilização da metodologia para a análise de um caso real de dispersão de poluentes.

## **1.2 - ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO**

Este trabalho apresenta, no Capítulo 2, uma revisão bibliográfica a respeito da problemática do transporte de poluentes bem como um apanhado geral sobre os modelos matemáticos para o transporte destes e, mais especificamente, a modelagem do fósforo por ser, um dos elementos químicos responsáveis pela eutrofização de lagos. Além disso, neste capítulo será feita a revisão da evolução do método de elementos finitos para a solução da equação de advecção-difusão.

O Capítulo 3 exhibe a equação do transporte de massa, partindo das equações hidrodinâmicas para águas rasas, as quais produzem o campo de velocidade necessário

na formulação da equação de advecção-difusão, a qual, posteriormente, é incluída o termo que representa as reações sofridas pelo elemento de interesse.

O quarto capítulo mostra o modelo de transporte de poluentes, explicitando os termos fontes e/ou sumidouros, presentes na equação de advecção-difusão-reação, através da explicação dos diferentes tipos de transformações.

Posteriormente, o Capítulo 5 exhibe a metodologia para a solução numérica estável do problema de transporte de massa com reação, através da discretização em duas fases, uma devido à componente temporal, utilizando o método da família  $\theta$ , e outra devido às componentes espaciais, pela utilização do método SUPG dos elementos finitos.

No Capítulo 6 é apresentada a modelagem computacional necessária para obtenção da simulação do transporte de poluentes, desde a simulação hidrodinâmica, passando pela explicação da utilização do código computacional produzido, até a etapa de visualização e análise dos resultados obtidos.

No Capítulo 7 são mostrados os resultados numéricos obtidos pela implementação da metodologia descrita, com a aplicação desta em três casos, a saber: o exemplo clássico do transporte puramente advectivo em um campo rotacional para a verificação da estabilidade do código implementado; a simulação da introdução de um contaminante produzido por uma fonte contínua em um rio, localizada em um ponto anterior ao trecho modelado, em que o campo de velocidade é estacionário; e por último, a simulação do transporte do elemento fósforo no lago Água Preta com a ajuda de dados coletados em dois pontos deste reservatório, mensalmente, em um intervalo de um ano.

Finalmente, as conclusões e as sugestões para possíveis estudos futuros aparecem no último capítulo do trabalho.

## CAPÍTULO 2

### REVISÃO DA LITERATURA E O ESTADO DA ARTE

#### 2.1 - QUALIDADE DA ÁGUA E DISPERSÃO DO FÓSFORO

##### 2.1.1 – Modelos matemáticos da qualidade da água

Segundo JAIN e SINGH (2003), o artigo apresentado por STREETER e PHELPS (1925) foi a tentativa mais antiga de tentar modelar a qualidade da água em rios. Neste estudo, eles desenvolveram um balanço entre a taxa do fornecimento de oxigênio dissolvido (OD) por aeração e a taxa de seu consumo a partir da estabilização do despejo de resíduo orgânico no rio Ohio. Neste trabalho, a taxa de desoxigenação pela demanda bioquímica de oxigênio (DBO) foi expressa como uma reação de primeira ordem. Este modelo é hoje conhecido como o modelo clássico para o oxigênio dissolvido.

CHAPRA (1997) considerou o desenvolvimento da modelagem matemática da qualidade da água dividido em quatro fases. A primeira delas surge com a publicação de STREETER e PHELPS (1925) e vai até 1960. Neste período, os modelos estudavam questões pontuais de descargas urbanas não tratadas e efluentes primários despejados em rios e estuários, considerando problemas unidimensionais, com geometria simples e cinéticas lineares os quais eram resolvidos por soluções analíticas e sendo OD/DBO os parâmetros analisados.

Na década de 1960 começa a segunda fase. Com o auxílio dos computadores digitais, a modelagem sofre um avanço nos modelos e em suas aplicações a sistemas mais complexos. Os focos das pesquisas nesse período ainda eram OD/DBO, porém começam a aparecer as soluções numéricas e problemas bidimensionais envolvendo largos estuários e baías, para efluentes primários e secundários.

Segundo CHAPRA (1997), no período de 1970 a 1977 a preocupação ambiental começa a crescer e o foco das pesquisas é redirecionado para os mecanismos de representação dos processos biológicos, com a poluição por nutrientes e a consequente eutrofização de rios, riachos e estuários, em modelos tridimensionais, resolvidos através de métodos numéricos. Dentre os estudos na modelagem matemática da qualidade da água deste período, é possível citar o trabalho de DI TORO *et al.* (1971) o qual avaliou

a dinâmica da população de fitoplâncton e as consequências da eutrofização no delta do rio San Joaquin, Califórnia. Após este estudo inicial, vários novos modelos foram rapidamente desenvolvidos para aplicações práticas no gerenciamento ambiental, por exemplo, JØRGENSEN (1976) comparou os resultados obtidos por diferentes modelos (dinâmica da população de fitoplâncton e um modelo baseado na cinética de Monod) com dados medidos no lago Glumsø, o qual apresentava excessivo crescimento de algas, ele concluiu que as respostas dos modelos eram ainda insuficientes, porém, a solução do modelo baseado na dinâmica da população apresentava uma concordância maior com os dados obtidos no lago.

Com o nascimento e desenvolvimento da ecotoxicologia, ramo da toxicologia que estuda os efeitos dos produtos tóxicos nos organismos biológicos, surge a quarta fase na modelagem da qualidade da água, entre 1977 e 1990, em que as pesquisas passam a ser focadas no problema de poluição das águas causada por elementos orgânicos e tóxicos e, menos extensivamente, pelas chuvas ácidas. O maior avanço na modelagem da qualidade da água neste período é o reconhecimento da importância das interações entre as partículas sólidas e tóxicas. O artigo de MILLER (1978) é um exemplo de modelagem desta época. Neste trabalho, o autor apresenta um modelo para a simulação do caminho percorrido pelo mercúrio até chegar ao homem, pelo consumo de peixe contaminado. Também neste período, NYHOLM (1978) desenvolveu um modelo para simulação para o crescimento do fitoplâncton e os ciclos do fósforo e do nitrogênio e o aplicou em lagos eutróficos rasos. Além destes, outros trabalhos publicaram estudos voltados para os modelos matemáticos da qualidade das águas de ambientes lacustres (DI TORO e MATYSTIK, 1980; DI TORO e CONNOLLY, 1980). BECK (1981) identificou um conflito entre duas linhas de pesquisa no estudo da modelagem da qualidade da água em lagos e rios; uma das escolas defendia o pensamento na melhoria da exatidão das soluções através do aumento do tamanho e da complexidade dos modelos, a outra defendia a pesquisa para a aplicabilidade através da simplificação dos modelos existentes até então. ORLOB (1983) reuniu vários trabalhos que tratavam das diversas áreas da modelagem da qualidade da água até então, com aplicações em rios, lagos e reservatórios. Outra obra que pode ser citada neste período é o trabalho de JØRGENSEN *et al.* (1986) que aplicaram um modelo geral de eutrofização em um amplo estudo de casos que analisou este problema em lagos rasos e profundos, bem como, estuários em condições climáticas temperadas e tropicais adaptando o modelo básico de acordo com as características de cada ecossistema considerado.

Mais recentemente CHAPRA (2011) acrescentou mais um período em sua classificação. Nesta etapa, que se estende desde 1990 até os dias atuais, o autor indica os esforços vigentes para a unificação dos modelos que englobem os estágios anteriores (OD, computador, eutrofização e substâncias tóxicas, respectivamente) em um modelo abrangente unificado. Para isso, o autor manifesta a existência de três fatores como base para o desenvolvimento deste modelo: a legislação, o avanço científico e o avanço computacional.

O primeiro destes fatores indica a quantidade máxima de carga poluente que pode ser despejada em corpos aquáticos para se manterem os padrões da qualidade da água destes corpos em níveis seguros. Com relação ao segundo fator, o autor aponta que as pesquisas estão avançando significativamente, em particular, na caracterização mecânica das interações entre água-sedimento e a hidrodinâmica, de tal forma que eles podem ser efetivamente integrados em modelos de qualidade da água. Finalmente, relativamente ao avanço computacional, o autor enuncia que nas últimas duas décadas o desenvolvimento tecnológico proporcionou uma revolução em hardwares e softwares, possibilitando interfaces gráficas e sistemas de suporte de decisão de tal forma a facilitar a geração e a visualização das saídas dos modelos. Além disso, a evolução dos hardwares removeram antigas limitações, como por exemplo, modelos bi e tridimensionais com cinéticas não-lineares, os quais podem ser simulados a um custo razoável.

Dentre os inúmeros trabalhos produzidos neste período, podem ser citados, JAIN e SINGH (2003) os quais fizeram um grande estudo sobre a utilização de modelos matemáticos para o gerenciamento e a tomada de decisões dos recursos hídricos, tanto superficiais como subterrâneos, levando em consideração os aspectos econômicos, ambientais e sociais. Nesta mesma linha, JØRGENSEN, LÖFFLER *et al.* (2005) descreveram a utilização de modelos matemáticos aplicados como ferramenta em vários problemas de gerenciamento e avaliação de risco ambiental em lagos e reservatórios. Outro trabalho que merece ser destacado, é o estudo de LOUCKS, BEEK *et al.* (2005), o qual mostra alguns dos modelos mais comumente usados no planejamento, gerenciamento e na predição da quantidade e qualidade dos sistemas de recursos hídricos. Dentre os modelos apresentados, encontram-se aqueles que utilizam métodos de otimização, estatísticos, probabilísticos e determinísticos.

Vários trabalhos continuaram os estudos de modelos eutróficos em rios, lagos e reservatórios para a análise da qualidade da água, por exemplo, HAMILTON e

SCHLADOW (1997) descreveram um modelo unidimensional que combinava um modelo hidrodinâmico com descrições numéricas da produção de fitoplâncton, os ciclos dos nutrientes, provisão de oxigênio e a dinâmica das partículas, entre outros. Outros trabalhos focaram seus estudos em parâmetros diferentes da qualidade da água, como por exemplo, STEFAN e FANG (1994), que formularam um modelo determinístico para o oxigênio dissolvido unidimensional, formulado para simular a estratificação no verão do OD em uma grande variedade de lagos nos Estados Unidos para estudar os potenciais impactos das mudanças climáticas globais. PEÑA *et al.* (2010) aplicaram a equação de advecção-difusão para estudar a dinâmica do OD e a condição de hipóxia, aquela em que a concentração de oxigênio é muito baixa, em meios marinhos.

O carbono orgânico dissolvido (COD) foi analisado por GRIEVE (1991), que formulou um modelo preditivo para avaliar o papel das características das descargas, das variações sazonais e da captação no controle das concentrações do COD em pequenos rios. KELLER e HOOD (2011) investigaram fontes sazonais naturais de carbono e nitrogênio orgânicos dissolvidos em uma zona eutrófica da baía de Chesapeake, usando um modelo que inclui interações físicas e biogeoquímicas. Este modelo foi resolvido numericamente, usando o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Mais recentemente, PENHA-LOPES *et al.* (2012) empregaram o uso da modelagem para averiguar a dinâmica do carbono orgânico em um áreas alagadas construído para o processamento de águas residuais ricas em matérias orgânicas e nutrientes na Tanzânia.

Outro parâmetro muito estudado na pesquisa de qualidade da água é o nitrogênio. Por exemplo, LORENZEN *et al.* (1997) utilizaram um modelo matemático para investigar o impacto da atividade de criação de camarão no gerenciamento da dinâmica do nitrogênio na coluna de água. O modelo descreve a entrada de amônia, sua assimilação pelo fitoplâncton e a perda de nitrogênio através da sedimentação, volatilização e descarga. FILOSO *et al.* (2004) simularam o transporte de nitrogênio para avaliar os efeitos de possíveis cenários da utilização do terreno na bacia do rio Ipswich, em Massachusetts, sobre a qualidade da água do rio e concluíram que, em um cenário de substituição total da vegetação desta área por terreno urbanizado, a concentração de nitrogênio teria seus valores duplicados dos dados presentes até então. ANI *et al.* (2011), implementaram a solução analítica da equação de advecção-difusão juntamente com um modelo de transformações, responsável pelos processos físicos e químicos sofridos pela amônia e nitratos. Para representar a dinâmica do nitrogênio, um modelo

de predição das taxas de transformação de nitrificação e denitrificação como função da sazonalidade foi formulada. Além disso, foi considerado o transporte de quatro tipos de poluentes simultaneamente (nitrato, amônia, fósforo reativo solúvel e fósforo orgânico) em oposição a maioria dos modelos analíticos, até então, que eram focados na simulação de um único poluente.

Além destes, muitos trabalhos sobre modelagem matemática da qualidade da água podem ser encontrados em vasta literatura para estes e outros parâmetros.

### **2.1.3 - Dispersão do fósforo**

Especificamente, o elemento fósforo (P) é um dos constituintes de ossos e dentes dos seres vivos e também faz parte do material genético. Além disso, ele um nutriente limitante para os produtores primários, isto significa que o crescimento populacional dos produtores primários está ligada diretamente à concentração de fósforo disponível no meio. Logo, torna-se um grande problema ambiental se sua concentração começa a ser elevada nos corpos de águas superficiais, pois, contribui para o estímulo do florescimento exagerado de algas nestes ambientes (eutrofização).

Antes de expor os trabalhos referentes à modelagem e simulação do comportamento do fósforo, será apresentado o ciclo deste elemento em corpos aquíferos (superficiais e subsuperficiais) para a compreensão da complexidade deste circuito.

O fósforo é um elemento químico muito reativo, ele reage com vários cátions, como por exemplo, ferro e cálcio, e também com os sólidos suspensos na coluna de água (JI, 2008). Ele não possui fase gasosa, sendo seu ciclo basicamente sedimentar e suas principais fontes são as rochas fosfatadas. Desta forma, a liberação destes fosfatos ocorre através de processos erosivos sendo, posteriormente, utilizada pelos produtores primários. Todavia, uma parte destes fosfatos é conduzida para os oceanos e perdida pela sua sedimentação à grandes profundidades ou é consumida pelo fitoplâncton (BRAGA, 2005).

O fósforo total é composto das formas particulado e dissolvido, as quais podem ser agrupados da seguinte forma (CHAPRA, 1997):

Fósforo inorgânico dissolvido: Denominados de ortofosfatos, ou fosfato reativo, é a principal forma assimilada pelos produtores aquáticos.

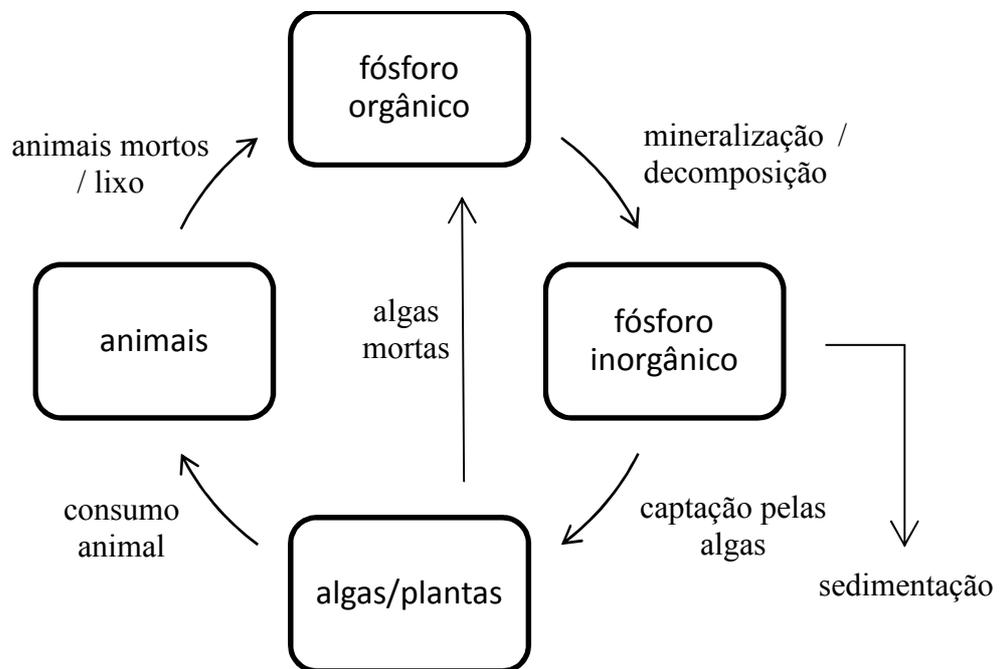
Fósforo orgânico particulado: É a forma presente nos seres vivos e nos detritos orgânicos;

Fósforo orgânico não particulado: São derivados pela transformação do fósforo orgânico particulado decompostos;

Fósforo inorgânico particulado: Formado por fosfatos minerais, fosfatos adsorvidos e absorvidos e fosfato complexado com material orgânico;

Fósforo inorgânico não particulado: fosfatos condensados como os presentes em detergentes.

O fósforo sofre contínuas transformações e ciclos repetidos dentro de um sistema aquático, contribuindo para o crescimento da atividade biológica, antes de ser removido do sistema transportado pelo fluxo que sai deste ou por sedimentação. A Figura 2.1 mostra o ciclo do fósforo, o qual envolve interações físicas, químicas e biológicas.



**Figura 2.1** - Ciclo do fósforo em sistemas aquáticos naturais. Fonte: Adaptado de JI (2008).

Em ambientes aquáticos não poluídos os compostos fosfatados apresentam concentrações muito baixas e suas principais fontes são as rochas e a decomposição de materiais orgânicos. Porém, a ação humana está aumentando a disponibilidade destes compostos para o meio ambiente, entre as maiores fontes antropogênicas pode-se incluir o despejo de esgotos não tratados, a mineração e a utilização de fertilizantes e agrotóxicos (SARAVANAN *et al.*, 2005; JI, 2008; MIHELICIC, *et al.*, 1999).

A aplicação intensa de fósforo no solo eleva a concentração deste elemento podendo assim contaminar os corpos de águas subterrâneos e também superficiais, pela

infiltração e pelo escoamento superficial das águas pluviais, respectivamente. Como este tipo de fonte não pode ser definida em um ponto, ela recebe a denominação de fonte difusa. Por outro lado, as descargas diretas de esgotos urbanos e industriais em corpos de águas superficiais, recebem a denominação de fontes pontuais, uma vez que elas possuem localização bem definida. A quantidade excessiva de fósforo nos ambientes aquáticos superficiais pode causar o crescimento exagerado de algas e plantas aquáticas. Este processo é designado de eutrofização, e como consequência ele produz a diminuição da qualidade da água desses ambientes através do aumento da turbidez, baixa concentração de oxigênio dissolvido, diminuição na altura da coluna de água e baixa biodiversidade (BRAGA, 2005; JØRGENSEN, LÖFFLER *et al.*, 2005).

Assim, tendo em vista o ciclo do fósforo e o processo de eutrofização, vários modelos matemáticos foram propostos na literatura, entre os quais é possível citar o trabalho de LUNG, *et al.* (1976) que desenvolveram um modelo que incorporava as duas formas do fósforo, particulada e dissolvida, e a interação dinâmica entre o fósforo e sedimentos na coluna de água. Os autores utilizaram extensivos dados de campo, obtidos em um lago altamente eutrófico, o lago White, em Michigan, para a determinação dos coeficientes e dos parâmetros definidos na formulação do modelo, e concluíram que seus resultados apresentavam uma boa concordância com os dados observados.

HALFON e LAM (1978) também consideraram o fósforo solúvel e particulado em sua modelagem, e propuseram as seguintes equações para modelar as variações das duas formas do elemento:

$$\frac{dC_{SRP}}{dt} = -Pr + lC_{PP} + F_{[SRP]},$$

$$\frac{dC_{PP}}{dt} = Pr - lC_{PP} + F_{[PP]},$$

onde  $C_{SRP}$  e  $C_{PP}$ , são as concentrações de fósforo na forma reativa solúvel e particulada, respectivamente,  $Pr$  denota a captação de fósforo durante a produção primária, este termo é considerado como sendo uma função não linear da temperatura da água, da luz solar, albedo (que é a relação de energia radiante refletida e recebida por uma superfície), duração do dia, turbidez da água e a concentração  $C_{SRP}$ ,  $l$  é o coeficiente de regeneração linear, e  $F_{[SRP]}$  e  $F_{[PP]}$  são as fontes de  $C_{SRP}$  e  $C_{PP}$ . Os autores utilizaram o método de diferenças finitas para simular o transporte advectivo-difusivo do fósforo em modelos hidrodinâmicos tridimensionais. Esta simulação foi usada para analisar o

cenário de um aumento hipotético de dez vezes da carga de fósforo em dois locais do lago Superior e concluíram que o modelo e as hipóteses apresentavam algumas fraquezas, como por exemplo, o modelo biológico é muito simples e deve ser ampliado para incluir o comportamento de outros nutrientes à medida que o lago torna-se mais eutrófico. Além disso, eles consideraram o padrão de repetição anual das correntes, temperaturas e luz, o que poderia produzir previsões não acuradas para escalas de tempos menores.

Um modelo bidimensional integrado na profundidade para a simulação hidrodinâmica, bem como, para o transporte de massa foi usado para estudar a variação espacial e temporal do fósforo total e dos sólidos suspensos no pântano Cootes Paradise por TSANIS *et al.* (1998). Os autores compararam a distribuição da concentração do fósforo a partir de duas hipóteses, com e sem a sedimentação deste elemento, considerada a única fonte de perda, com os dados coletados em campo e obtiveram uma concordância razoavelmente boa. Com relação aos sólidos suspensos, o modelo considerou as contribuições das partículas materiais devido à resuspensão causada por carpas e vento, e concluíram, de acordo com seus resultados computacionais, que cada um destes elementos contribui com, aproximadamente, um terço da concentração de partículas suspensas dentro do pântano.

LOUCKS *et al.* (2005) apresentaram um grandes estudo sobre o planejamento e o gerenciamento de sistemas de utilização de recursos hídricos, com ênfase na modelagem da qualidade da água, passando por análise de questões de âmbito social, econômico e ambiental. Neste trabalho os autores indicam que um modelo simplificado do ciclo do fósforo pode ser relacionado à eutrofização a partir das seguintes equações cinéticas para os fósforos orgânico e inorgânico:

$$\frac{dC_{PO}}{dt} = -k_{PO}\phi_{PO}^{(T-20)}C_{PO},$$

$$\frac{dC_P}{dt} = -\mu f_d \phi_A^{(T-20)} \left[ \frac{C_P}{C_P + K_P} \right] \times \left[ \frac{C_N}{C_N + K_N} \right] a_P A,$$

onde  $C_{PO}$  é a concentração de fósforo orgânico (mg/L),  $k_{PO}$  é a taxa de reação do fósforo orgânico a 20°C (1/dia),  $A$  é o crescimento da alga (mg/L),  $C_P$  é a concentração do fósforo inorgânico (mg/L),  $C_N$  é a concentração de nitrogênio na forma de nitrito/nitrato (mg/L),  $\mu$  é a taxa de crescimento máximo das algas (1/dia),  $f_d$  é a fração de um dia em que  $\mu$  é aplicada,  $K_P$  e  $K_N$  são as constantes de meia saturação para fosfato e nitrato (mg/L),  $a_P$  é a proporção do consumo de fosfato na biomassa de alga.

Estas equações devem ser associadas às equações de reações de outros parâmetros da qualidade da água, como por exemplo, a biomassa de algas, nitrogênio na forma orgânica, amônia e nitrato.

WU (2007) apresentou o seguinte modelo:

$$\frac{dC_{PO}}{dt} = k_M a_{PC} f_{Phy,PO} C_{Phy} - k_{PO} C_{PO} - \frac{\omega_{PO}}{H} (1 - f_{PO,d}) PO - \frac{\zeta_{PO}}{H},$$

$$\frac{dC_P}{dt} = k_M a_{PC} (1 - f_{Phy,PO}) C_{Phy} + k_{PO} C_{PO} - k_M a_{PC} C_{Phy} - \frac{\zeta_P}{H},$$

em que  $k_M$  representa o coeficiente da taxa de mortalidade dos fitoplânctons, o qual é afetado pela temperatura,  $f_{Phy,PO}$  é a fração de mortalidade dos fitoplânctons,  $f_{PO,d}$  é a fração de fósforo orgânico dissolvido,  $a_{PC}$  é a razão de fitoplâncton devido ao fósforo e o carbono,  $C_{Phy}$  é a concentração de biomassa de fitoplâncton,  $\zeta_{PO}$  e  $\zeta_P$  são os fluxos de fósforos orgânico e inorgânico do leito sedimentar, respectivamente, e  $H$  é a profundidade do corpo hídrico.

O lado direito da primeira destas equações representa a produção de fósforo orgânico devido à morte e a respiração do fitoplâncton, perdas devido à mineralização, sedimentação do fósforo orgânico particulado e trocas com a superfície do fundo, respectivamente. Os termos do lado direito da segunda equação representam a produção de fósforo inorgânico devido à morte e respiração dos fitoplânctons, ganhos devido à mineralização, captação para o crescimento dos fitoplânctons e a troca na superfície de fundo, respectivamente.

Desta forma, vários trabalhos e artigos foram publicados com o interesse no estudo da modelagem do transporte do fósforo em corpos de águas superficiais subterrâneos e também superficiais e seus potenciais impactos. Dentre estes estudos, é possível citar a pesquisa de HALFON e LAM (1978), que simularam uma possível mudança no lago Superior, na fronteira entre os EUA e o Canadá, que até então era oligotrófico, tornando-se eutrófico pelo suposto aumento da carga de fósforo despejada no lago. O modelo utilizado consistia da combinação da equação de advecção-difusão com a dinâmica da reação definida para o fósforo solúvel e particulado em funções não lineares da temperatura da água, luz solar, albedo (medida relativa da quantidade de luz refletida), turbidez da água e das concentrações do fósforo solúvel.

KIM (1994) descreveu um modelo estacionário unidimensional para a dinâmica do fósforo em rios. As equações diferenciais governantes eram baseadas no balanço de massa e resolvidas analiticamente. A ideia principal do esquema de solução era reduzir

as equações governantes fortemente acopladas, EDO's de segunda ordem, para uma única EDO de ordem superior. Em suas conclusões o autor indica que devido às características dinâmicas de um ecossistema torna-se necessário avaliar a variação espacial do conteúdo de fósforo em suas várias fases, as quais são denominadas de compartimentos, e então derivar as quantidades características dos perfis de fósforos.

O trabalho de TSANIS, PRESCOTT *et al.* (1998) usou um modelo hidrodinâmico e de transporte de massa bidimensional, integrado na profundidade, para estudar a distribuição temporal e espacial da concentração de fósforo e sólidos suspensos no pântano Cootes Paradise. Para a simulação da matéria em suspensão o modelo considerou a contribuição de partículas sólidas devido a presença de carpas e também a resuspensão dos sedimentos de fundo pelo vento. O modelo foi resolvido numericamente pelo método de diferenças finitas o qual obteve uma boa concordância com valores coletados em campo para a concentração de fósforo. Além disso, os autores concluíram que, de acordo com os resultados computacionais, as carpas e o vento contribuem com aproximadamente um terço, cada um deles, para a concentração dos sólidos suspensos no pântano.

HONGPING e JIANYI (2002) aplicaram um modelo dinâmico para algas para descrever o ecossistema de um lago raso e eutrófico. O modelo consistia de treze variáveis de estado incluindo a biomassa para quatro principais tipos de algas e seus respectivos conteúdos de fósforo, a biomassa de zooplâncton e seu conteúdo de fósforo, ortofósforo, fósforo em detritos e fósforo em sedimentos. A simulação do modelo foi feita em escala de tempo em anos para descrever a dinâmica das mudanças de algas e zooplânctons. Foram criados vários cenários para a avaliação do comportamento da biomassa sujeita à mudança na qualidade da água devido à quantidade de água, conteúdo de fósforo e diminuição na quantidade de sedimentos.

Mais recentemente, WHITEHEAD *et al.* (2011) utilizaram um programa denominado INCA-P na simulação dos fluxos de fósforo em um sistema formado pelo rio Black e o lago Simcoe em Ontario, Canadá. Este programa possuía, até então, um histórico de doze anos e seria a evolução do programa INCA, o qual é um modelo baseado em processos dinâmicos que prediz a quantidade e a qualidade da água em rios e bacias. As modificações aplicadas nas equações, permitiram que o fósforo particulado e o solúvel, assim como o fósforo total dissolvido pudessem ser calculados, ao invés de apenas o fósforo total. Os resultados obtidos pelas simulações de fluxos de fósforos

indicaram os locais com maiores prioridades de implementação de práticas melhores de gerenciamento daquela bacia hidrográfica.

## **2.2 - MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO**

A solução numérica da equação de advecção-difusão quando o termo advectivo, identificado pela componente de primeira ordem na equação diferencial do modelo, é dominante, tem sido fonte de muitos estudos desde a década de 1970. Isto se deve ao fato de que os métodos numéricos tradicionais falham totalmente para este tipo de problema. É o caso dos métodos da diferença central para solução por diferenças finitas, ou por volumes finitos, e de Galerkin na solução por elementos finitos, os quais apresentam oscilações globais espúrias, e sem significado físico, se certos parâmetros excederem alguns valores limites, causando a perda severa de precisão e estabilidade. Entretanto, foi descoberto que soluções livres destas oscilações poderiam ser obtidas pela adição de uma difusão artificial na resolução da componente advectiva pelo método das diferenças finitas centrais. Esta inclusão de difusão artificial é obtido pelo método de diferenças finitas "*upwind*".

Segundo BROOKS (1981), a inclusão da difusão artificial no termo advectivo, no âmbito dos elementos finitos, foi inicialmente formulada no artigo publicado por Christie *et al.* (1976) para a equação de advecção-difusão, empregando funções pesos modificadas para alcançar o efeito *upwind*. Na essência, o método consistia em aplicar uma função peso de tal forma que um elemento posterior a um nó, na direção do fluxo, receberia um peso maior que o elemento anterior a este nó. Posteriormente, este método foi empregado em um caso bidimensional por Heinrich *et al.* (1977) (apud BROOKS (1981)). Como essas metodologias aplicavam a função peso modificada em todos os termos da equação, essas formulações foram denominadas de métodos residuais ponderados consistente de Petrov-Galekin. HUGHES (1978) exibiu um método simples para a geração de elementos *upwinds*, o qual fazia uso de uma regra de quadratura modificada para o termo convectivo. Após este trabalho, Hughes e Atkinson (1978) mostraram um método *upwind* ótimo que foi derivado de um princípio variacional, demonstrando que os métodos *upwinds* poderiam ser desenvolvidos de uma base teórica firme.

Muitas das formulações upwinds apresentadas até então recebiam fortes críticas, pois, em situações mais complexas, como por exemplo, problemas multidimensionais, as soluções sempre exibiam difusão excessiva na direção perpendicular ao fluxo. Na tentativa de solucionar este problema, BROOKS e HUGHES (1982) propuseram a formulação SUPG (Streamline upwind/Petrov Galerkin), que possuía as qualidades dos métodos upwinds clássicos, porém adicionava a difusão artificial somente na direção do fluxo. Devido à função peso modificada ser aplicada em todos os termos da equação, a formulação resultante também era consistente. A partir deste trabalho inicial, houve uma expansão nas pesquisas para melhorar o desempenho do método SUPG e suas aplicações. Hughes foi um dos grandes expoentes nestas pesquisas. Em uma série de publicações ele e seus colaboradores analisaram, expandiram e sugeriram novas formulações derivadas a partir do método SUPG. Dentre estes vários estudos destacamos, HUGHES *et al.* (1986), que adicionaram um termo de captura de descontinuidade à função peso deste método para a equação de advecção-difusão para aumentar a habilidade do método SUPG para produzir aproximações suaves para as camadas limite e interna. HUGHES e MALLETT (1986) construíram uma generalização apropriada do conceito do método para sistemas advectivos-difusivos para casos multidimensionais. Posteriormente, HUGHES, FRANCA *et al.* (1987) fizeram a análise da convergência para a formulação SUPG generalizada para os sistemas advectivos-difusivos lineares, multidimensionais e instacionários, onde utilizaram o método de Galerkin descontínuo para a discretização temporal. HUGHES, FRANCA *et al.* (1989) introduziram o método de elementos finitos denominado de Galerkin/least-square na solução de sistemas advectivo-difusivo estacionários e instacionários. Esta metodologia era uma simplificação conceitual do método SUPG e coincidia com este para os casos hiperbólicos.

Vários métodos foram desenvolvidos para a solução numérica por elementos finitos estáveis da equação de advecção-difusão, que surgiram nos anos 1990 e continuam até os dias atuais, foram inspirados nos estudos iniciados nos trabalhos dos anos 1980 supracitados. Entre as inúmeras metodologias criadas nesse período, pode-se citar o método *Characteristic Galerkin* (DOUGLAS e RUSSELL (1982), ZIENKIEWICZ e CODINA (1996), além do método *Taylor-Galerkin* (DONEA (1984)), também o método *subgrid scale* (SGS) (HUGHES (1995)), o método de *estabilização incomum* (*unusual stabilized method*, em inglês) (FRANCA e VALENTIN (2000)), entre outros.

Listas mais detalhadas destes e adicionais métodos, suas revisões e referências, aplicados à solução estável da equação de advecção-difusão pelos métodos de elementos finitos podem ser encontradas em CODINA (1998), FRANCA, HAUKE *et al.* (2006) e JOHN e KNOBLOCK (2007).

## CAPÍTULO 3

### A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE MASSA

#### 3.1 - MODELO HIDRODINÂMICO

A solução da equação do transporte de massa em meios hidrodinâmicos exige o conhecimento a priori do campo de velocidade ao longo do domínio a ser modelado. Especificamente, para grandes corpos de águas superficiais, como por exemplo, rios, lagos, estuários, etc., pode-se assumir que um modelo hidrodinâmico bidimensional é uma boa representação, uma vez que suas dimensões horizontais (comprimento e largura) são muito maiores que sua componente vertical (profundidade). Para este propósito, usa-se uma adaptação das equações de Navier-Stokes para fluidos incompressíveis assumindo que:

- A coluna de água é bem misturada na direção vertical;
- As ondas possuem pequenas amplitudes e longos períodos (ondas de marés);
- A componente vertical da aceleração é negligenciável, permitindo uma aproximação da pressão hidrostática;
- A velocidade é assumida constante na direção vertical.

Levando em conta os pontos citados anteriormente, as equações de Navier-Stokes tridimensionais para um fluido turbulento incompressível são integradas na componente vertical produzindo assim as conhecidas equações bidimensionais de Saint-Venant, também denominadas equações hidrodinâmicas para águas rasas. Estas são as equações governantes para a conservação de massa e de momento e podem ser escritas na forma conservativa, respectivamente, como (HENICHE *et al.*, 2000):

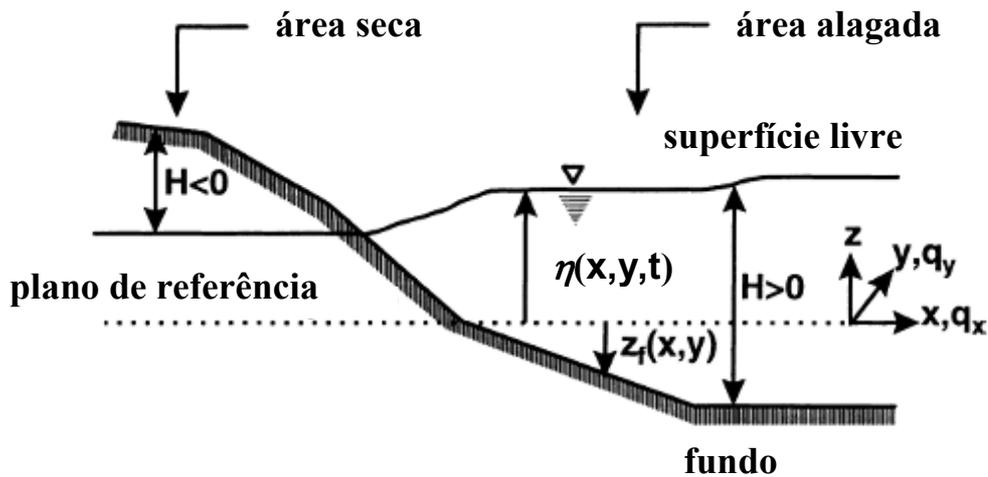
$$\frac{\partial p H}{\partial t} + \frac{\partial q_x}{\partial x} + \frac{\partial q_y}{\partial y} = 0, \quad (3.1)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial(pq_x)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left( \frac{q_x q_x}{H} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( \frac{q_x q_y}{H} \right) + c^2 \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial}{\partial x} (H \sigma_{xx}) + \frac{\partial}{\partial y} (H \sigma_{xy}) - \sigma_x^b + \sigma_x^p s \right) \\ - f_c q_y = 0, \end{aligned} \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial(pq_y)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{q_y q_x}{H}\right) + \frac{\partial}{\partial y}\left(\frac{q_y q_y}{H}\right) + c^2 \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{1}{\rho} \left( \frac{\partial}{\partial x}(H\sigma_{yx}) + \frac{\partial}{\partial y}(H\sigma_{yy}) - \sigma_y^b + \sigma_y^s \right) + f_c q_x = 0, \quad (3.3)$$

onde  $\mathbf{x} = (x, y)$  são as componentes cartesianas,  $\mathbf{q} = (q_x, q_y)$  é a vazão específica,  $\eta$  é o nível da superfície da água,  $t$  é o tempo,  $p$  é a porosidade,  $z_f$  nível do fundo com respeito a um nível de referência,  $H = \eta - z_f$  é a profundidade da água,  $g$  é a aceleração da gravidade,  $c = \sqrt{gH}$  é a velocidade das ondas,  $f_c$  é o fator de Couriolis,  $\sigma_x = (\sigma_{xx}, \sigma_{xy})$  e  $\sigma_y = (\sigma_{yx}, \sigma_{yy})$  são as componentes do stress no plano horizontal,  $\rho$  é a densidade da água. A Figura 3.1 mostra a descrição do problema para a modelagem hidrodinâmica bidimensional. A partir da solução deste sistema obtém-se o vetor  $\mathbf{q}$  contendo as vazões nas direções  $x$  e  $y$ , e com isso torna-se possível calcular as componentes do vetor velocidade

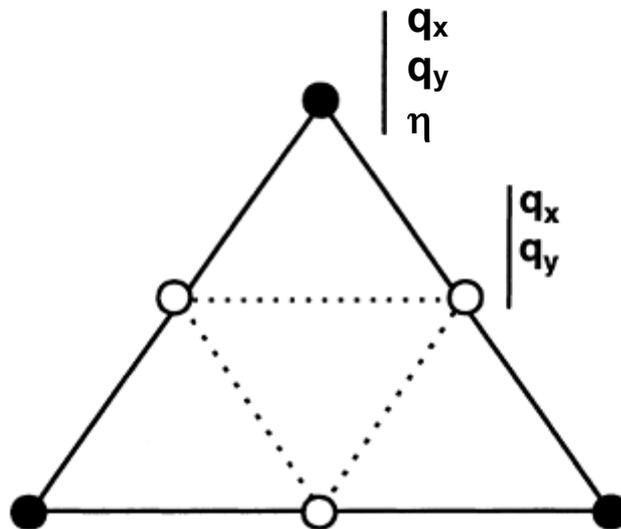
$$\mathbf{u} = (u, v) = \left( \frac{q_x}{H}, \frac{q_y}{H} \right) \quad (3.4)$$



**Figura 3.1** - Descrição do problema para a obtenção das equações de Saint-Venant.  
Fonte: Adaptado de HENICHE *et al.* (2000).

Neste trabalho, as simulações hidrodinâmicas foram feitas com o auxílio do pacote computacional MODELEUR/HYDROSIM, o qual foi desenvolvido no centro de pesquisa INRS-ETE da universidade de Quebec, Canadá (SECRETAN e LECLERCK, 1998). Este software consiste na união de um gerador numérico do terreno (Modeleur), que utiliza o método dos elementos finitos combinado com um sistema de informação geográfica, e um módulo (Hydrosim) destinado à solução das equações bidimensionais

de Saint-Venant. A malha de elementos finitos é constituída por elementos triangulares quadráticos, isto significa que cada triângulo é formado por seis pontos, três deles localizados nos vértices, onde são representados o nível da água  $\eta$  e a descarga específica  $q$ , e outros três localizados nos pontos médios de cada lado do triângulo, onde é novamente especificada a descarga  $q$ , como mostrado na Figura 3.2.



**Figura 3.2** - Representação de uma célula da malha de elementos finitos na solução do modelo hidrodinâmico. Fonte: Adaptado de HENICHE *et al.* (2000).

### 3.1.1 - Condições de contorno e inicial

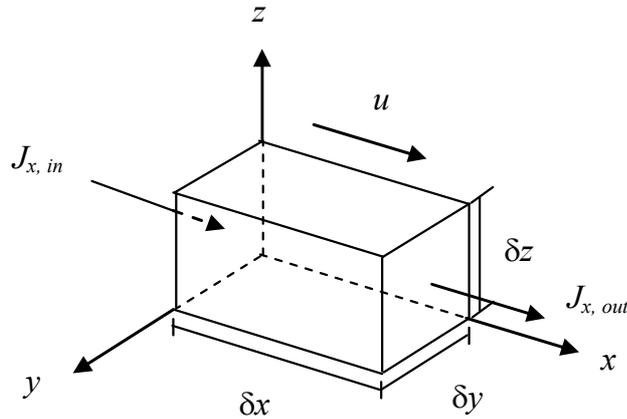
Segundo HENICHE *et al.* (2002) a condição inicial que deve ser adotada no módulo Hydrosim é  $q_x = q_y = 0$  e uma distribuição espacial da superfície livre da água,  $\eta = \eta(x,y)$ . Além disso, são necessárias informações sobre as condições de contornos do modelo hidrodinâmico, isto pode ser obtido pela medida quantitativa da altura da coluna de água ou sua vazão nas fronteiras líquidas na entrada do domínio analisado. Por outro lado, nas fronteiras de saída deve-se impor o nível de água, que pode ser variável com o tempo.

O modelo de elevação do terreno juntamente com o modelo de rugosidade e as condições de contorno fornecem os dados necessários para a solução das equações bidimensionais de Saint-Venant, que por sua vez, fornece o campo de velocidade e os níveis d'água para o modelo hidrodinâmico. Maiores detalhes sobre a aplicação do pacote *Modeleur/Hydrosim* podem ser encontrados em SECRETAN e LECLERC (1998) e SECRETAN *et al.* (2000).

### 3.2 - A EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO

Na natureza, o transporte de massa ocorre em fluidos através da combinação dos processos de advecção e de difusão. Como estes fenômenos são independentes, ou seja, um processo não interfere no outro, pode-se aplicar o princípio da superposição, em outras palavras, eles podem ser somados (SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004).

Devido à condução difusiva, cada molécula se moverá uma determinada distância  $\delta x$  para a esquerda ou para a direita, ou seja,  $\pm \delta x$ , no intervalo de tempo  $\delta t$ . Por outro lado, devido à condução advectiva, cada molécula também se moverá a uma distância  $u\delta t$ , onde  $u$  é a velocidade do fluido, na direção do fluxo, como mostrado no esquema abaixo na Figura 3.3.



**Figura 3.3** – Esquema do fluxo associado ao volume de controle para o desenvolvimento da equação de advecção-difusão. Fonte: Adaptado de SOCOLOFSKY e JIRKA (2004).

O movimento total da molécula é  $u\delta t \pm \delta x$  e assim o fluxo total  $J_x$ , na direção  $x$ , deve ser

$$J_x = uC + d_x = uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.5)$$

em que  $d_x$  é o fluxo difusivo, dado pela lei de Fick,  $D$  é a difusividade do material e  $C$  é a concentração dada por

$$C = \frac{M}{V} \quad (3.6)$$

com  $M$  e  $V$  representando, respectivamente, a massa de interesse e o volume da mistura.

O fluxo de massa através do volume de controle, como mostrado na Figura 3.3, é dado por:

$$\frac{\partial M}{\partial t} = \sum \dot{m}_{entra} - \sum \dot{m}_{sai} \quad (3.7)$$

sendo  $\dot{m}_{entra}$  e  $\dot{m}_{sai}$  a razão do fluxo da massa na face de entrada e de saída do fluido no volume de controle, sendo definido por (SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004)

$$\dot{m} = \iint J \cdot \vec{n} d\Lambda \quad (3.8)$$

onde  $\vec{n}$  é o vetor unitário normal à face de entrada do volume de controle de área  $\Lambda$ .

Assim, para a direção  $x$  tem-se:

$$\delta \dot{m}|_x = \left( uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_e \delta y \delta z - \left( uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_s \delta y \delta z \quad (3.9)$$

note que os subscritos  $e$  e  $s$  representam as faces de entrada e de saída do volume de controle, os sinais referem-se ao sentido do fluxo e da normal às faces e a área é dada por  $\Lambda = \delta y \delta z$ .

Utilizando-se a série de Taylor pode-se expandir os termos do fluxo na face de saída com relação à face de entrada, ou seja,

$$uC|_s = uC|_e + \frac{\partial(uC)}{\partial x} \Big|_e \delta x \quad (3.10.1)$$

e

$$D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_s = D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial(uC)}{\partial x} \right) \Big|_e \delta x \quad (3.10.2)$$

Substituindo-se (3.10.1) e (3.10.2) em (3.9), obtém-se:

$$\begin{aligned} \delta \dot{m}|_x = & \left( uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Big|_e \delta y \delta z \\ & - \left[ \left( uC|_e + \frac{\partial(uC)}{\partial x} \Big|_e \delta x \right) - \left( D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e + \frac{\partial}{\partial x} \left( D \frac{\partial(uC)}{\partial x} \right) \Big|_e \delta x \right) \delta y \delta z \end{aligned} \quad (3.11)$$

que, após algumas manipulações algébricas, resulta em

$$\delta \dot{m}|_x = - \frac{\partial(uC)}{\partial x} \delta x \delta y \delta z + \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial(uC)}{\partial x} \right) \delta x \delta y \delta z \quad (3.12)$$

O fluxo de massa nas direções  $y$  e  $z$  é calculado de modo semelhante, com as componentes do vetor velocidade e a difusividade referente à respectiva direção, dando

$$\delta \dot{m}|_y = -\frac{\partial(vC)}{\partial y} \delta x \delta y \delta z + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial(vC)}{\partial y} \right) \delta x \delta y \delta z \quad (3.13)$$

$$\delta \dot{m}|_z = -\frac{\partial(wC)}{\partial z} \delta x \delta y \delta z + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_z \frac{\partial(wC)}{\partial z} \right) \delta x \delta y \delta z \quad (3.14)$$

Substituindo-se as equações (3.12), (3.13) e (3.14) em (3.7), e lembrando que  $M = C \delta x \delta y \delta z$ , obtém-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) = \nabla \cdot (D \nabla C) \quad (3.15)$$

ou, em notação indicial,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (3.16)$$

### 3.3 - A EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DIFUSÃO EM MEIOS TURBULENTOS

A Eq. (16) pode ser estendida para um meio que apresenta turbulência. Para isso, é necessário aplicar a decomposição de Reynolds nas variáveis que aparecem na equação de advecção-difusão. Esta decomposição é dada, para uma determinada propriedade  $\phi$ , por:

$$\phi = \bar{\phi} + \phi' \quad (3.17)$$

em que  $\bar{\phi}$  e  $\phi'$ , representam, respectivamente, as quantidades média e flutuante de  $\phi$ .

A quantidade média é definida como (RUBIN e ATKINSON, 2001);

$$\bar{\phi} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi \, d\tau \quad (3.18)$$

Sendo  $T$  um período de tempo considerado, que deve ser maior que o período de turbulência.

A média da quantidade flutuante é dada por

$$\overline{(\phi')} = \frac{1}{T} \int_t^{t+T} \phi' \, d\tau = 0 \quad (3.19)$$

Substituindo-se a decomposição de Reynolds na Eq. (3.15) ou (3.16), tem-se

$$\frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i + u'_i)(\bar{C} + C')}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial(\bar{C} + C')}{\partial x_j} \right) \quad (3.20)$$

Integrando esta equação no tempo obtém-se:

$$\frac{\partial(\bar{C} + \overline{C'})}{\partial t} + \frac{\partial(\bar{u}_i \bar{C} + \overline{u'_i C'} + \overline{u'_i \bar{C}} + \overline{u'_i C'})}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial(\bar{C} + \overline{C'})}{\partial x_j} \right) \quad (3.21)$$

Os termos  $\overline{u_i C'}$ ,  $\overline{u_i' \bar{C}}$  e  $\overline{C'}$  são nulos e  $\bar{\bar{C}} = \bar{C}$ . Assim,

$$\frac{\partial \bar{C}}{\partial t} + \frac{\partial \overline{u_i \bar{C}}}{\partial x_i} = -\frac{\partial \overline{u_i' C'}}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_j} \right) \quad (3.22)$$

O termo  $\overline{u_i' C'}$  representa o fluxo turbulento de massa e não se pode assumí-lo como sendo nulo.

A Eq. (3.22) não é fechada devido ao aparecimento do termo de correlação. Pode-se observar que este termo é da forma  $u_i C$ , o que representa um fluxo de massa. Além disso, como as componentes do termo  $\overline{u_i' C'}$  são flutuantes este termo está associado à turbulência. Reynolds descreveu este termo qualitativamente como uma forma de mistura rápida, desta forma, fazendo-se uma analogia direta com a lei de Fick para uma difusão turbulenta, tem-se:

$$-\overline{u_i' C'} = D \frac{\partial \bar{C}}{\partial x_i} \quad (3.23)$$

onde  $D$  é a difusividade turbulenta.

Substituindo-se (3.23) em (3.22) e omitindo-se a notação da barra, obtém-se o seguinte resultado:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial u_i C}{\partial x_i} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D \frac{\partial C}{\partial x_i} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left( D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (3.24)$$

Em geral  $D$  é muito maior que o coeficiente de difusão molecular  $D_{ij}$ , assim, o último termo pode ser negligenciado (SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004).

A Eq. (3.24) está definida no domínio aberto  $\Omega$  e em um intervalo de tempo  $t \in [0, t_f]$ , onde  $t_f$  é o tempo final de simulação deste modelo. Para a obtenção de uma solução particular, torna-se necessário a determinação da distribuição inicial  $C_0(\mathbf{x})$  do campo escalar  $C$  no instante inicial,  $t_0 = 0$ , em  $\Omega$ , além de condições impostas na fronteira  $\Gamma$  deste domínio. Ao longo do desenvolvimento deste trabalho adotaremos  $C$  como sendo a representação da concentração de massa.

### 3.4 – CONDIÇÃO INICIAL E CONDIÇÕES DE CONTORNO

#### 3.4.1 - Condição inicial

A resolução direta da equação diferencial (3.24) fornece uma família de soluções. Assim, com o intuito de se obter uma solução particular pertencente a esta família, torna-se necessária a informação da disposição inicial da concentração  $C$  dentro de todo o domínio de interesse. Isto é denotado por:

$$C(\mathbf{x}, 0) = C_0(\mathbf{x}) \text{ em } \Omega. \quad (3.25)$$

#### 3.4.2 - Condições de contorno

Para obter-se um problema bem posto, é necessário impor condições no contorno  $\Gamma$  do domínio. Segundo ZIENKIEWIECZ e TAYLOR (2000), os problemas de advecção-difusão permitem condições de contornos simples do tipo Dirichlet, também denominada de condição essencial, em que o valor da concentração é especificado na parte da fronteira  $\Gamma_D$  do domínio.

$$C = C_D \text{ em } \Gamma_D, \quad (3.26)$$

e Neumann, em que o gradiente normal à fronteira, na parte  $\Gamma_N$  desta, é especificado, ou seja:

$$-D(\mathbf{n} \cdot \nabla)C = b \text{ em } \Gamma_N, \quad (3.27)$$

onde  $\mathbf{n}$  é o vetor na normal ao contorno. Quando  $b = 0$ , diz-se que a condição é denominada condição natural ou homogênea.

A combinação linear destas condições também é possível, produzindo a condição do tipo Robin.

Observe que  $\Gamma = \partial\Omega = \Gamma_D \cup \Gamma_N$  é o contorno do domínio aberto  $\Omega$ ,  $\Gamma_D$  é a parte do contorno em que é aplicada a condição do tipo Dirichlet e  $\Gamma_N$  é a parte do contorno onde está aplicada a condição do tipo Neumann.

Estas condições de contorno são bem definidas em contornos físicos reais, por exemplo, nos contornos sólidos, onde não há o fluxo de fluido através deste contorno, o gradiente da concentração deve ser nulo. Na entrada do modelo, apesar de não ser um contorno real, é consenso que a concentração dissolvida no fluido pode ser prescrita como condição de contorno.

Por outro lado, o contorno de saída geralmente é um contorno artificial para limitar grandes domínios físicos, a fim de tornar viável o custo computacional de uma simulação. Vários trabalhos foram publicados para definir a condição apropriada no contorno de saída do modelo. Por exemplo, pode-se citar a teoria do “contorno absorvente”, apresentado por HALPERN (1986), que determina uma família de condições de contorno representadas por equações diferenciais parciais de primeira ordem na direção de propagação do fluido; “contorno aberto”, proposto por PADILLA *et al.* (1997), que considera que o gradiente da concentração deve ser contínuo na saída do domínio; “contorno livre”, proposto por PAPANASTASIOU *et al.* (1992), que advogou pela solução numérica da integral de contorno. Posteriormente outros autores, por exemplo, RENARDY (1997) e GRIFFITHS (1997), acharam mais apropriado renomear esta teoria para “no boundary condition”, uma vez que ela não preestabelece nenhuma condição para a concentração ou seu gradiente ou a combinação destes. Além destes trabalhos, existem outras linhas de estudos para esta condição de contorno (veja, por exemplo, NATAF e ROGIER (1994)).

Entretanto, se o contorno de saída está localizado em regiões onde o escoamento é completamente desenvolvido, sem a influência de objetos sólidos localizados externamente e/ou internamente ao modelo, uma aproximação clássica e fisicamente correta é a condição de “não-fluxo”, ou seja, a condição natural (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995; PAPANASTASIOU *et al.*, 1992; HALPERN, 1986; MASSABÓ *et al.*, 2011). Isto pode ser demonstrado da seguinte forma: seja a equação do balanço de massa nesta fronteira dada por

$$\left[ uC - D \frac{\partial C}{\partial x} \right]_{x=inside} = [uC]_{x=outside} \quad \text{em } x = B, \quad (3.28)$$

onde  $B$  é o contorno de saída e  $x = inside$  e  $x = outside$  significam, respectivamente, o fluxo dentro e fora do domínio. Entretanto,  $C_{x=outside}$  não é conhecida *a priori*. Uma

forma de resolver este problema é assumir que a concentração é contínua ao atravessar este contorno, isto é,  $C_{x=inside} = C_{x=outside}$ , substituindo isso na Eq. (3.28) resulta em

$$D \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_{x=inside} = 0 \quad \text{em } x = B, \quad (3.29)$$

Assim, o sistema formado pelas Eq. (3.24) e as condições dadas pelas equações (3.25) - (3.27) e (3.29) representa o modelo a ser resolvido. É importante observar que a Eq. (3.15), escrita desta forma, representa unicamente o transporte de uma distribuição de concentração pela combinação dos efeitos advectivo e difusivo em sistemas conservativos, ou seja, sem levar em consideração fontes e sumidouros, sendo eles dados por injeções de fluxo de massa ou reações biogeoquímicas.

### 3.5 – A EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO

Na seção anterior a concentração de massa mudava unicamente como resposta aos processos advectivo e difusivo, entretanto, este modelo é muito simplificado para representar o transporte de substâncias na natureza. Para obtermos um modelo mais próximo da realidade devemos acrescentar informações sobre sistemas não conservativos, causados por processos que adicionam ou removem massa de uma espécie de interesse da coluna de água. Estes processos, também denominados de transformações ou reações, podem ser de natureza física, química ou biológica. As transformações podem ser categorizadas como homogêneas ou heterogêneas. As reações homogêneas ocorrem dentro do volume de controle, assim, elas são incorporadas na equação diferencial do transporte pela adição de um termo fonte ou sumidor. Por outro lado, as reações heterogêneas ocorrem somente nas bordas fluidas e portanto são incorporadas através das condições de contorno da equação diferencial governante.

Sendo assim, para se incorporar estas informações, deve-se escrever a Eq. (3.24) da seguinte forma:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) = \nabla \cdot (D\nabla C) + S - f_R(C, t), \quad (3.30)$$

ou, mais comumente,

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{u}C) - \nabla \cdot (D\nabla C) + f_R(C, t) = S. \quad (3.31)$$

onde os termos  $S$  e  $f_R$  representam, respectivamente, as fontes e as reações ou processos. A Eq. (3.31) é agora denominada de equação de advecção-difusão-reação. Os termos adicionais representam (MARCHUK, 1986; LOUCKS *et al.*, 2005; TSANIS *et al.*, 2006; JI, 2008):

- Descargas ou "cargas de resíduos" ( $S$ ): Estes termos fontes são fluxos de entradas adicionais de água ou massa. Nesse caso, podem ser inseridos tantos termos fontes quantos sejam necessários na Equação (31). Estes poderiam representar, por exemplo, pequenos rios, descargas de indústrias, plantas de tratamento de esgotos, pequenos emissários de cargas de resíduos, e assim por diante.
- Termos de reação ou "processos" ( $f_R$ ): Como foi explicitado anteriormente, as reações heterogêneas produzem um novo fluxo nas condições de contornos como limitações da equação de transporte governante. A corrosão é um exemplo deste tipo de reação, uma vez que há o consumo do oxigênio no contorno de contato entre o fluido e o metal.

A forma da condição de contorno para uma reação de primeira ordem na superfície do sistema para o caso unidimensional é dado por (SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004):

$$-D \left. \frac{\partial C}{\partial n} \right|_s = \pm \delta_s k C_s \quad (3.32)$$

onde  $\delta_s$ , é a profundidade da subcamada de reação,  $C_s$  é a concentração média na superfície dentro da subcamada de reação e  $k$ , a constante de reação, é controlada pela geometria da superfície, pela presença de um catalisador e pela cinética da espécie de interesse.

As reações homogêneas são usadas para descrever os processos cinéticos dentro do volume de controle e serão apresentadas no próximo capítulo.

# CAPÍTULO 4

## MODELO DE TRANSPORTE DE POLUENTES

### 4.1 – OS TERMOS FONTES E SUMIDOUROS

Antes de apresentar os modelos matemáticos do termo reativo presente na Eq. (3.31), tornam-se necessárias algumas definições.

#### 4.1.1 - Processos ambientais não reativos

Os processos não reativos, também denominados de conservativos ou físicos, causam mudanças no conteúdo do elemento dentro do sistema sem que o elemento sofra qualquer mudança em sua estrutura molecular, entretanto, o elemento sofre mudança de fase. Representa-se esta característica matematicamente com a seguinte equação de conservação de massa

$$\frac{dC_i}{dt} = 0. \quad (4.1)$$

onde  $C_i$  é a concentração do constituinte  $i$ . Alguns exemplos de processos ambientais não reativos são:

- Deposição - Processo que consiste na agregação de matéria, de origem mineral ou orgânica, transportada por um meio fluido na base sob a qual este fluido escoar, sob ação da gravidade;
- Resuspensão - Ação de desagregar e transportar a matéria anteriormente depositada;
- Flotação - Método de separação de misturas, através da remoção de partículas minerais em suspensão de um meio líquido;
- Adsorção - É a adesão de átomos, íons ou moléculas de um gás, líquido ou sólido dissolvido a uma superfície, como consequência, são retidos nesta superfície por intermédio de ligações físicas e químicas;

- Absorção - Processo físico ou químico, no qual um material coleta e retém átomos, íons ou moléculas de outro, com a formação de uma mistura, podendo ser acompanhada de uma reação química. Este fenômeno difere da adsorção pelo fato de que os materiais são retidos dentro do volume, e não pela superfície.
- Dessorção - Fenômeno oposto ao processo de sorção (que é a adsorção e a absorção), ou seja, é o processo de separação em que uma substância é liberada de (ou através de) uma superfície para o meio a sua volta.

Além destes, outros processos podem ser classificados como não reativos.

#### 4.1.2 - Processos ambientais reativos

Os processos reativos resultam na mudança das concentrações dos elementos químicos dentro de um sistema. Como a massa total do sistema deve ser conservada, estes processos geralmente mudam a espécie de interesse em outras espécies, assim pode-se chamá-los de transformação. As reações podem ser de origem física, química ou biológica e podem ocorrer em passo simples (reações elementares) ou em múltiplos passos, consecutivamente, em paralelos ou em ciclos.

Representamos esta característica matematicamente como

$$\frac{dC_i}{dt} = f_R. \quad (4.2)$$

onde  $f_R$  é um termo fonte ou sumidouro. Desta forma, as equações de reação que descrevem a produção ou perda da espécie de interesse devem ser fornecidas, para os sistemas reativos. Como dito anteriormente, a massa total do sistema deve ser conservada, assim, estas reações são sempre representadas por um sistema de equações de transformação. Alguns dos processos reativos mais comuns na natureza são:

- Biodegradação - É a dissolução química parcial ou completa de um composto orgânico através da ação de microrganismos;
- Hidrólise - Reação de um composto químico com água;
- Oxidação - Reação de um composto químico com oxigênio, especialmente a adição do oxigênio à substância;

- Fotólise - Decomposição química da matéria induzida pela absorção de luz ou outro tipo de radiação eletromagnética; entre outros.

Os processos reativos podem, ainda, ser categorizados como *homogêneos* se ocorrem somente em uma fase ou *heterogêneos* se eles envolvem múltiplas fases (KHANDAN, 2001; RUBIN e ATIKSON, 2001).

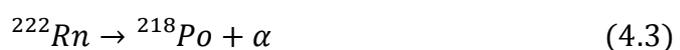
As reações homogêneas ocorrem dentro do fluido de interesse. Isto significa que elas estão distribuídas completamente no volume de controle, assim, elas são representadas como um termo fonte ou sumidouro na equação diferencial governante. Em contraste, as reações heterogêneas ocorrem somente nas bordas do modelo e se tornam condições de contorno para a equação diferencial governante (RUBIN e ATIKSON, 2001; SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004).

Algumas reações possuem tanto propriedades das reações homogêneas quanto das heterogêneas. Por exemplo, considere uma reação que ocorre na superfície das partículas de sedimentos suspensos. Como a reação ocorre na interface entre a água e o sedimento, a reação é definida como heterogênea. Mas, como o sedimento está suspenso em toda a coluna de água, a reação é de natureza homogênea (SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004).

#### 4.1.3 - Transformações físicas

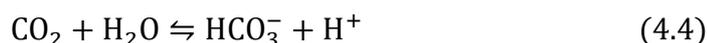
Estas reações são governadas por leis da física. Um exemplo clássico deste tipo de transformação, que vem da física nuclear, é o decaimento radioativo. Este é o processo no qual um elemento químico tornando-se um isótopo dele mesmo ou um átomo de outro elemento pela emissão de partículas ou radiação eletromagnética de seu núcleo.

Um elemento radioativo comum encontrado na engenharia é o radônio, uma espécie na cadeia de decaimento do urânio. O radônio decai para o polônio por uma ejeção de uma partícula alfa de acordo com a Eq. (4.3) (SOCOLOFSKY e JIRKA, 2004).



#### 4.1.4 - Transformação química

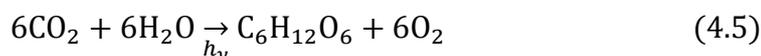
Estas transformações se referem a uma grande gama de reações físicas e químicas que não envolvem mudança em nível atômico. Um exemplo clássico deste tipo de reação vem da química da fase aquosa, que é a dissolução do dióxido de carbono (CO<sub>2</sub>) em água (H<sub>2</sub>O), dada pela seguinte equação de equilíbrio



onde HCO<sub>3</sub><sup>-</sup> é chamado bicarbonato e H<sup>+</sup> é o íon de hidrogênio. Os termos do lado esquerdo da equação são chamados de reagentes e os termos do lado direito são os produtos. O equilíbrio refere-se ao estado em que a formação dos produtos ocorre na mesma razão que o processo reverso que transforma os produtos novamente em reagentes, isto é indicado pelo símbolo  $\rightleftharpoons$  (STUMM, 1990).

#### 4.1.5 - Transformação biológica

Estes processos se referem àqueles subconjuntos de reações químicas que são realizadas por organismos vivos através dos processos de fotossíntese e respiração. Estas reações envolvem o consumo de substâncias nutritivas para a produção de biomassa e são acompanhadas por entrada e saída de energia. A equação simplificada da fotossíntese mostra a produção da glicose (C<sub>6</sub>H<sub>12</sub>O<sub>6</sub>) e oxigênio a partir da combinação de CO<sub>2</sub> com água, através da ativação pela radiação solar,  $h_\nu$ , como mostra a Eq. (4.5) (STUMM, 1990; JI, 2008):



## 4.2 - CINÉTICA DE REAÇÃO

Independente do tipo de reação (homogênea ou heterogênea), é essencial quantificar a razão, na qual, os elementos são transformados pela reação a fim de modelar a formação dos produtos químicos de interesse a partir dos reagentes e seu transporte. Logo, far-se-á uma breve revisão do estudo das cinéticas de reação.

Todas as reações ocorrem a uma taxa característica  $\Delta t_k$ . Uma medida usual desta taxa característica é a meia-vida, que é o tempo para que metade dos reagentes seja convertida em produtos. Os outros processos físicos de interesse em nossos problemas (i.e. advecção e difusão) também ocorrem em escalas de tempo característicos  $\Delta t_p$ . Comparando estas escalas de tempo características, três casos podem ser identificados:

$\Delta t_k \ll \Delta t_p$ : Quando as taxas de reações são mais rápidas que o processo de transporte é razoável assumir que o sistema esteja em equilíbrio químico, permitindo que as concentrações das espécies químicas participantes sejam estabelecidas através da estequiometria. Para estas reações, pode-se assumir que os produtos são formados logo que os reagentes tornam-se disponíveis, podendo-se negligenciar as reações cinéticas. Tais reações são chamadas instantâneas.

$\Delta t_k \gg \Delta t_p$ : Para estes processos, a reação pode ser completamente ignorada, e se tem um sistema conservativo, uma vez que os elementos são removidos do volume de controle antes que as reações tenham uma extensão significativa.

$\Delta t_k \approx \Delta t_p$ : Quando as taxas das reações são comparáveis ao processo de transporte, as concentrações das espécies químicas participantes serão determinadas através das reações cinéticas. Para estas transformações, nem a reação nem a cinética da reação podem ser ignoradas (KHANDAN, 2001; WRIGHT, 2004).

#### 4.2.1 - Reações elementares

A taxa ou cinética destas reações podem ser quantificadas usando a lei de ação de massa (STUMM, 1990, KHANDAN, 2001), que afirma que a taxa é proporcional à concentração dos reagentes. Por exemplo, considere a reação:  $A + B \rightarrow C$ . A taxa de consumo da espécie A por esta reação, é dada pela lei da ação das massas como segue:

$$\frac{dC_A}{dt} = -kf(C_A, C_B) \quad (4.6)$$

onde  $k$  é a constante da taxa da reação e é dependente da temperatura, e a função  $f(C_A, C_B)$  deve ser determinada experimentalmente. A forma geral comumente utilizada para a Eq. (4.6) é:

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC_A^{\mathfrak{a}}C_B^{\mathfrak{b}} \quad (4.7)$$

onde as potências em cada uma das concentrações são referidas como *ordem da reação*. No exemplo acima, a reação de ordem  $\mathfrak{a}$  com respeito à espécie  $A$ , e de ordem  $\mathfrak{b}$  com respeito à espécie  $B$ , e a ordem total da reação é  $\mathfrak{m} = (\mathfrak{a} + \mathfrak{b})$ . Como a maioria dos modelos são construídos sobre submodelos de elementos químicos simples, as seções seguintes tratarão com a equação:

$$\frac{dC_A}{dt} = -kC^{\mathfrak{m}} \quad (4.8)$$

onde  $\mathfrak{m} = 0, 1, 2$ , para reações de ordem zero, primeira e segunda ordem, respectivamente (MIHELICIC *et al.*, 1999; WRIGHT, 2004).

A taxa de reação  $k$  pode ser obtida como uma função da temperatura a partir da equação de Arrhenius para um gás ideal (MIHELICIC *et al.*, 1999; SOCOLOFSKY e JIRKA 2004; WRIGHT, 2004)

$$k = q \exp(-E_a/RT) \quad (4.9)$$

onde  $q$  é uma constante,  $E_a$  é a energia de ativação,  $R$  é a constante dos gases ideais e  $T$  é a temperatura absoluta. Definindo-se  $k_1 = k(T_1)$  tem-se então:

$$\frac{k}{k_1} = \frac{q \exp(-E_a/RT)}{q \exp(-E_a/RT_1)} \Rightarrow k(T) = k_1 \exp\left(\frac{E_a(T - T_1)}{RTT_1}\right) \quad (4.10)$$

Esta equação pode ser linearizada para pequenas mudanças de temperatura pela definição do coeficiente de temperatura adimensional

$$\varphi = \exp\left(\frac{E_a}{RTT_1}\right) \quad (4.11)$$

obtem-se

$$k(T) = k_1 \varphi^{(T-T_1)} \quad (4.12)$$

Esta é a forma da constante da taxa de reação aplicada em sistemas não gasosos. Geralmente a temperatura de referência  $T_1$  é de 20°C, e a Eq. (4.12) passa a ser escrita como (WU, 2007; JI, 2008)

$$k(T) = k_{20}\varphi^{(T-20)}. \quad (4.13)$$

onde  $k_{20}$  é a razão ou taxa cinética a 20°C.

#### 4.2.1.1 - Reações de Ordem Zero

A velocidade da reação para uma transformação de ordem zero não depende da concentração, sendo uma taxa constante que poderia variar com o tempo. A equação geral para uma reação de ordem zero é

$$\frac{dC}{dt} = \pm k \quad (4.14)$$

onde  $k$  tem dimensão  $[ML^{-3}T^{-1}]$ . Um exemplo deste tipo de reação é a descarga de esgoto em um rio (RUBIN e ATKINSON, 2001).

#### 4.2.1.2 - Reações de Primeira Ordem

A equação geral para uma reação de primeira ordem é

$$\frac{dC}{dt} = \pm kC \quad (4.15)$$

onde  $k$  tem dimensão  $[T^{-1}]$ . Exemplos comuns são o decaimento radioativo e o crescimento de bactéria em um rio.

#### 4.2.1.3 - Reações de Segunda Ordem

A equação geral para uma reação de segunda ordem é

$$\frac{dC}{dt} = \pm kC^2 \quad (4.16)$$

onde  $k$  tem dimensão  $[L^3M^{-1}T^{-1}]$ .

Os sinais de mais (+) ou menos (-), que aparecem em cada uma das expressões, são utilizados para indicar o crescimento ou o decaimento da concentração devido à reação.

SOCOLOFSKY e JIRKA (2004) apresentam a metodologia para a obtenção da equação de reações para ordens superiores. Entretanto, vários autores asseguram que as reações na natureza possuem no máximo segunda ordem e mais comumente reações de primeira ordem (STUMM, 1990; KHANDAN, 2001; RUBIN e ATIKSON, 2001; WRIGHT, 2004; LOUCKS *et al.*, 2005).

# CAPÍTULO 5

## SOLUÇÃO NUMÉRICA DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DIFUSÃO-REAÇÃO 2D

A Eq. (3.31) juntamente com a condição inicial, Equação (3.25), além de suas condições de contornos, Eq. (3.26) e Eq. (3.27) ou Eq. (3.29), constituem a forma forte da equação do transporte advectivo-difusivo-reativo. Para se resolver este problema numericamente, torna-se necessário a discretização em duas fases, uma devido à variável temporal e outra devido às variáveis espaciais, as quais serão descritas a seguir.

Ao longo do desenvolvimento deste capítulo adotou-se o modelo de primeira ordem para as reações homogêneas, ou seja,  $f_R(C, t) = -kC$ , para a demonstração do algoritmo adotado neste trabalho.

### 5.1 – DISCRETIZAÇÃO TEMPORAL

#### 5.1.1 – O método $\theta$

De acordo com DONEA e HUERTA (2003) este método é largamente utilizado para a solução numérica de equações diferenciais de primeira ordem. Ele é um método de passo simples, ou seja, o valor  $C^{n+1}$  da variável do problema no tempo  $t_{n+1} = t_n + \Delta t$ , onde  $\Delta t$  é o intervalo de discretização temporal, é determinado a partir do valor  $C^n$  no tempo  $t_n$ . Isto é feito por uma média ponderada entre os termos da equação nos tempos  $t_n$  e  $t_{n+1}$ . Neste caso, a Eq. (3.31) deve ser escrita na seguinte forma

$$\frac{C^{n+1} - C^n}{\Delta t} + \theta(\mathbf{u} \cdot \nabla C)^{n+1} + (1 - \theta)(\mathbf{u} \cdot \nabla C)^n - \theta[\nabla \cdot (D \nabla C)]^{n+1} - (1 - \theta)[\nabla \cdot (D \nabla C)]^n + \theta(kC)^{n+1} + (1 - \theta)(kC)^n = \theta S^{n+1} + (1 - \theta)S^n \quad (5.1)$$

onde  $C^n$  é a aproximação de  $C(t_n)$ ,  $t_n = t_0 + n\Delta t$ ,  $t_0$  é o tempo inicial e  $\theta$  é um parâmetro que assume um valor no intervalo  $[0, 1]$ .

Vários autores, como por exemplo, PATANKAR (1980); MALISKA (1995); RUBIN e ATKINSON (2001); BOCHEV *et al.* (2004) e LEWIS *et al.* (2004), indicam que este método é a generalização das aproximações de diferenças finitas, uma vez que, dependendo do valor do parâmetro  $\theta$ , pode-se obter vários esquemas de diferenças finitas, dentre eles os mais usuais são: o método de Euler ou explícito ( $\theta = 0$ ), Crank-Nicolson ( $\theta = 1/2$ ) e o método implícito ( $\theta = 1$ ). Sabe-se que para valores de  $\theta$  menores que  $1/2$ , os métodos resultantes são condicionalmente estáveis, ou seja, eles devem respeitar determinadas condições para não se tornarem numericamente instáveis. Para os valores de  $\theta$  maiores ou igual a  $1/2$ , os métodos serão incondicionalmente estáveis. Dentre os possíveis métodos, o único com segunda ordem na aproximação por diferenças finitas para a derivada temporal é o método de Crank-Nicolson ( $\theta = 1/2$ ). Maiores detalhes sobre os variados métodos de diferenças finitas podem ser encontrado em HOFFMAN (2001).

A Eq. (5.1) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta C}{\Delta t} + \theta[\mathbf{u} \cdot \nabla - \nabla \cdot (D\nabla) + k]\Delta C \\ = -[\mathbf{u} \cdot \nabla - \nabla \cdot (D\nabla) + k]C^n + \theta S^{n+1} + (1 - \theta)S^n, \end{aligned} \quad (5.2)$$

em que,  $\Delta C = C^{n+1} - C^n$ . Esta equação é denominada de forma semi-discreta, com relação às componente temporal.

### 5.1.2 – Condições de estabilidade do método $\theta$

A condição de estabilidade para a discretização temporal, pode ser derivada usando a análise de Fourier, também chamada de análise de estabilidade de von Neumann. Entretanto, este método apresenta algumas limitações, uma vez que só pode ser usado para estabelecer condições necessárias e suficientes para a análise de estabilidade de equações diferenciais lineares e homogêneas com coeficientes constantes (FLETCHER, 1991; LEWIS *et al.*, 2004).

Segundo DONEA e HUERTA (2003), a magnitude do intervalo de tempo deve ser controlada por duas velocidades de onda, uma devido à velocidade de convecção e outra devido à difusão real. Assim, pode-se escrever

$$\Delta t = s \min(\Delta t_c, \Delta t_d) = s \min\left(\frac{h}{|\mathbf{u}|}, \frac{h^2}{2D}\right) \quad (5.3)$$

em que  $h$  é o tamanho local do elemento da malha,  $\Delta t_c$  e  $\Delta t_d$  são, respectivamente, os limites dos passos de tempo para a convecção e difusão. O parâmetro  $s \in ]0,1]$  é denominado fator de segurança para o controle do passo temporal (GRIEBEL *et al.*, 1998).

Assim como em outros métodos de solução numérica da equação de advecção-difusão, para que a estabilidade do método  $\theta$ /SUPG seja obtida, torna-se necessário que o passo de tempo seja inferior a um determinado parâmetro, caso contrário a simulação produzirá resultados incorretos (ANDERSON, 1995, HIRSCH, 2007). Este parâmetro é denominado de número de Courant, o qual é obtido pelo quociente entre o intervalo de discretização do tempo e o tempo de residência em uma célula da malha de discretização espacial. O número de Courant é definido por:

$$\gamma = u \frac{\Delta t}{\Delta x}, \quad (5.4)$$

onde  $\gamma$  é o parâmetro de Courant e  $\Delta x$  é um comprimento característico da célula da malha.

## 5.2 – DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

### 5.2.1 – Formulação variacional

O processo de discretização espacial por elementos finitos recai sobre a representação discreta de uma forma integral fraca da EDP a ser resolvida. A formulação e a subsequente discretização de tal forma integral requer a definição de alguns espaços de funções e normas associadas.

Considere uma região do espaço (ou domínio)  $\Omega \in \mathbb{R}^n$  com contornos suaves por partes  $\Gamma$ . Aqui,  $n = 1, 2$  ou  $3$ , denota o número de dimensões espaciais. Usaremos a notação

$$f: \bar{\Omega} \rightarrow \mathbb{R}$$

para afirmar que para cada ponto no espaço  $x \in \bar{\Omega}$ ,  $f(x) \in \mathbb{R}$ .  $\bar{\Omega}$  denota o domínio fechado de  $\Omega$ , que é a união do domínio fechado  $\Omega$  com seu contorno  $\Gamma$ :  $\bar{\Omega} = \Omega \cup \Gamma$ .

Diz-se que a função  $f$  é de classe  $C^m(\Omega)$  se todas as suas derivadas até a ordem  $m$  existirem e forem funções contínuas.

Para definir a forma fraca, ou variacional, da equação de advecção-difusão, é necessário definir duas classes de funções: as funções pesos as soluções admissíveis. Aqui estes espaços são definidos no contexto da formulação de Galerkin padrão.

A primeira coleção de funções, denotada por  $\mathcal{V}$ , é composta pelas funções pesos e consiste de todas as funções que tem a primeira derivada quadrado integrável sobre o domínio computacional  $\Omega$ , e se anula sobre a porção do contorno do tipo Dirichlet  $\Gamma_D$ . Ela é definida como:

$$\mathcal{V} = \{w \in \mathcal{H}^1(\Omega) | w = 0 \text{ em } \Gamma_D\} \equiv \mathcal{H}_{\Gamma_D}^1(\Omega)$$

em que  $\mathcal{H}^1(\Omega)$  é o espaço de Sobolev definido por (DONEA e HUERTA, 2003; SOLÍN, 2006; GOCKENBACH, 2006; HERVOUET, 2007)

$$\mathcal{H}^1(\Omega) = \left\{ v \in \mathcal{L}_2 \mid \frac{\partial v}{\partial x_i} \in \mathcal{L}_2 \text{ } i = 1, 2, \dots, n \right\}$$

onde  $\mathcal{L}_2$  é o espaço de funções que são quadrado integráveis sobre o domínio  $\Omega$ .

O espaço  $\mathcal{H}^1(\Omega)$  é equipado com o seguinte produto interno

$$(u, v)_1 = \int_{\Omega} \left( uv + \sum_{i=1}^n \frac{\partial u}{\partial x_i} \frac{\partial v}{\partial x_i} \right) d\Omega$$

e sua norma induzida

$$\|u\|_1 = \sqrt{(u, u)_1}.$$

As funções  $w \in \mathcal{V}$  não dependem da variável temporal.

A segunda coleção de funções, que variam em função do tempo, é chamada de espaço das soluções admissíveis,

$$\mathcal{S}_t = \{u | u(\cdot, t) \in \mathcal{H}^1(\Omega), t \in [0, T] \text{ e } u(\mathbf{x}, t) = u_D \text{ para } \mathbf{x} \in \Gamma_D\}$$

as funções deste espaço verificam as condições de contorno do tipo Dirichlet.

A discretização espacial pode ser aplicada diretamente na equação diferencial (31), ou na equação semi-discreta Eq.(5.2). Neste trabalho, utilizou-se a segunda opção. Desta forma, seguindo a metodologia da formulação variacional (BECKER *et al.*, 1981; DONEA e HUERTA, 2003; LEWIS *et al.*, 2004), obteve-se a seguinte equação integral,

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w \frac{\Delta C}{\Delta t} d\Omega + \int_{\Omega} w\theta[\mathbf{u} \cdot \nabla - \nabla \cdot (D\nabla) + k]\Delta C d\Omega \\
& = - \int_{\Omega} w[\mathbf{u} \cdot \nabla - \nabla \cdot (D\nabla) + k]C^n d\Omega + \int_{\Omega} w\theta S^{n+1} d\Omega \\
& + \int_{\Omega} w(1 - \theta)S^n d\Omega. \tag{5.5}
\end{aligned}$$

O termo difusivo pode ser reescrito como:

$$\nabla \cdot (wD\nabla(\Delta C)) = D \cdot \nabla w \cdot \nabla(\Delta C) + w\nabla \cdot (D\nabla(\Delta C)), \tag{5.6}$$

ou ainda

$$w\nabla \cdot (D\nabla(\Delta C)) = \nabla \cdot (wD\nabla(\Delta C)) - D \cdot \nabla w \cdot \nabla(\Delta C). \tag{5.7}$$

Substituindo-se a Eq.(5.7) na Eq.(5.5), tem-se

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w \frac{\Delta C}{\Delta t} d\Omega + \theta \left\{ \int_{\Omega} w[\mathbf{u} \cdot \nabla(\Delta C)] d\Omega - \int_{\Omega} \nabla \cdot [wD\nabla(\Delta C)] d\Omega + \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla(\Delta C) d\Omega \right. \\
& \quad \left. + \int_{\Omega} wk\Delta C d\Omega \right\} \\
& = - \int_{\Omega} w\mathbf{u} \cdot \nabla C^n d\Omega + \int_{\Omega} \nabla \cdot [wD\nabla C^n] d\Omega - \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla C^n d\Omega \\
& - \int_{\Omega} wkC^n d\Omega + \int_{\Omega} w\theta S^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} w(1 - \theta)S^n d\Omega. \tag{5.8}
\end{aligned}$$

Aplicando o teorema da divergência,

$$\begin{cases} \int_{\Omega} \nabla \cdot [wD\nabla(\Delta C)] d\Omega = \int_{\Gamma_N} wD \frac{\partial(\Delta C)}{\partial n} d\Gamma_N, \\ \int_{\Omega} \nabla \cdot [wD\nabla C^n] d\Omega = \int_{\Gamma_N} wD \frac{\partial C^n}{\partial n} d\Gamma_N. \end{cases} \tag{5.9}$$

Levando a Eq. (5.9) na Eq. (5.8) obtém-se,

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w \frac{\Delta C}{\Delta t} d\Omega + \theta \left\{ \int_{\Omega} w[\mathbf{u} \cdot \nabla(\Delta C)] d\Omega - \int_{\Gamma_N} wD \frac{\partial(\Delta C)}{\partial n} d\Gamma_N + \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla(\Delta C) d\Omega \right. \\
& \quad \left. + \int_{\Omega} wk\Delta C d\Omega \right\} \\
& = - \int_{\Omega} w\mathbf{u} \cdot \nabla C^n d\Omega + \int_{\Gamma_N} wD \frac{\partial C^n}{\partial n} d\Gamma_N - \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla C^n d\Omega \\
& \quad - \int_{\Omega} wkC^n d\Omega + \int_{\Omega} w\theta S^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} w(1-\theta)S^n d\Omega. \tag{5.10}
\end{aligned}$$

Substituindo a condição de contorno Eq. (3.27) na Eq. (5.10) resulta

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w \frac{\Delta C}{\Delta t} d\Omega + \theta \left\{ \int_{\Omega} w[\mathbf{u} \cdot \nabla(\Delta C)] d\Omega - \int_{\Gamma_N} w\Delta b d\Gamma_N + \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla(\Delta C) d\Omega \right. \\
& \quad \left. + \int_{\Omega} wk\Delta C d\Omega \right\} \\
& = - \int_{\Omega} w\mathbf{u} \cdot \nabla C^n d\Omega + \int_{\Gamma_N} wb^n d\Gamma_N - \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla C^n d\Omega \\
& \quad - \int_{\Omega} wkC^n d\Omega + \int_{\Omega} w\theta S^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} w(1-\theta)S^n d\Omega. \tag{5.11}
\end{aligned}$$

ou ainda

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} w \frac{\Delta C}{\Delta t} d\Omega + \theta \left\{ \int_{\Omega} w[\mathbf{u} \cdot \nabla(\Delta C)] d\Omega + \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla(\Delta C) d\Omega + \int_{\Omega} wk\Delta C d\Omega \right\} \\
& = - \int_{\Omega} w\mathbf{u} \cdot \nabla C^n d\Omega - \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla C^n d\Omega - \int_{\Omega} wkC^n d\Omega \\
& \quad + \int_{\Omega} w\theta S^{n+1} d\Omega + \int_{\Omega} w(1-\theta)S^n d\Omega \\
& \quad + \int_{\Gamma_N} w[\theta b^{n+1} + (1-\theta)b^n] d\Gamma_N. \tag{5.12}
\end{aligned}$$

### 5.3.2 – Discretização por elementos finitos

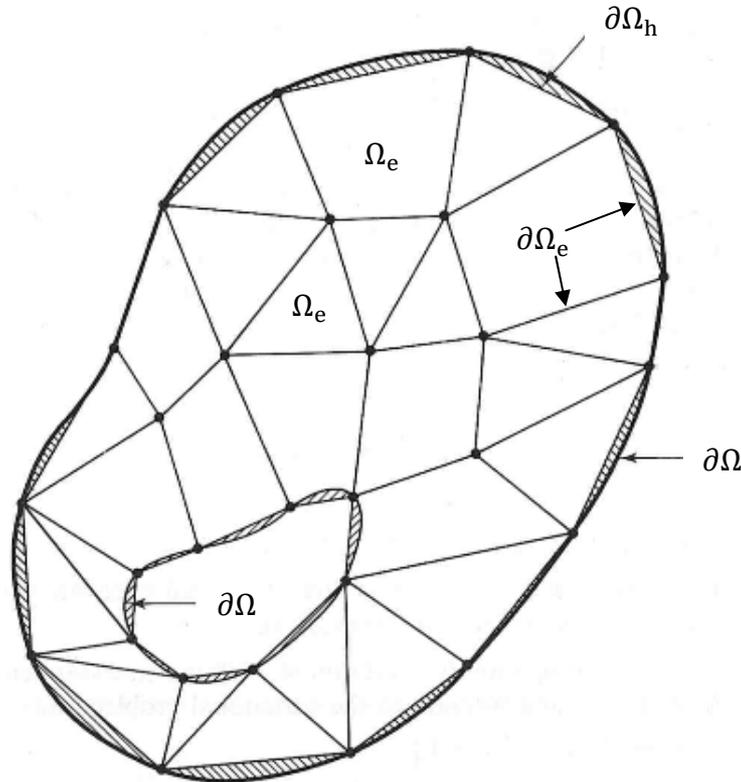
No método de elementos finitos, no sentido da formulação de Galerkin, deve-se aproximar os espaços dimensionalmente infinitos,  $\mathcal{V}$  e  $\mathcal{S}_t$ , por convenientes

subconjuntos finitos destas coleções, os quais serão denotados por  $\mathcal{V}^h$  e  $\mathcal{S}^h$  (DONEA e HUERTA, 2003; SOLÍN, 2006; GOCKENBACH, 2006; HERVOUET, 2007).

Neste ponto, deve-se construir uma malha de elementos finitos  $\Omega_h$  constituída pela união dos elementos finitos  $\Omega_e$ , para representar uma aproximação do domínio  $\Omega$ , de tal forma que

$$\Omega \approx \Omega_h = \bigcup_{e=1}^{n_{el}} \Omega_e \quad \text{e} \quad \Omega_e \cap \Omega_f = \emptyset \quad \text{para} \quad \forall e \neq f.$$

em que  $n_{el}$  represente o número de elementos na malha. Cada subdomínio  $\Omega_e$  tem um contorno suave por parte  $\Gamma_e = \partial\Omega_e$ . Estes elementos devem ser geometricamente simples e devem compartilhar um de seus lados com os elementos adjacentes, conforme mostrado na Figura 5.1. Nesta figura está indicado também o contorno do domínio  $\partial\Omega$ , da malha de elementos finitos  $\partial\Omega_h$  e de uma das células desta malha  $\partial\Omega_e$ .



**Figura 5.1** - Malha de elementos finitos  $\Omega_h$ , composta por elementos  $\Omega_e$  triangulares e quadrilaterais, discretizando um domínio  $\Omega$ . Fonte: Adaptado de BECKER *et al.* (1981).

A ideia básica é representar soluções aproximadas  $w_h \in \mathcal{V}^h$  e funções testes  $C_h \in \mathcal{S}^h$  em cada  $\Omega_e$  tal que

$$\mathcal{V}^h = \{w \in \mathcal{H}^1(\Omega) \mid w|_{\Omega_e} \in \mathcal{P}_p(\Omega_e) \forall e \text{ e } w = 0 \text{ em } \Gamma_D\},$$

$$\mathcal{S}_t^h = \{C | C(\cdot, t) \in \mathcal{H}^1(\Omega), C(\cdot, t)|_{\Omega_e} \in \mathcal{P}_p(\Omega_e) \ t \in [0, T] \forall e \text{ e } C = C_D \text{ em } \Gamma_D\}$$

onde  $\mathcal{P}_p$  é o espaço de interpolação de elementos finitos que consiste de polinômios de grau  $p$ .

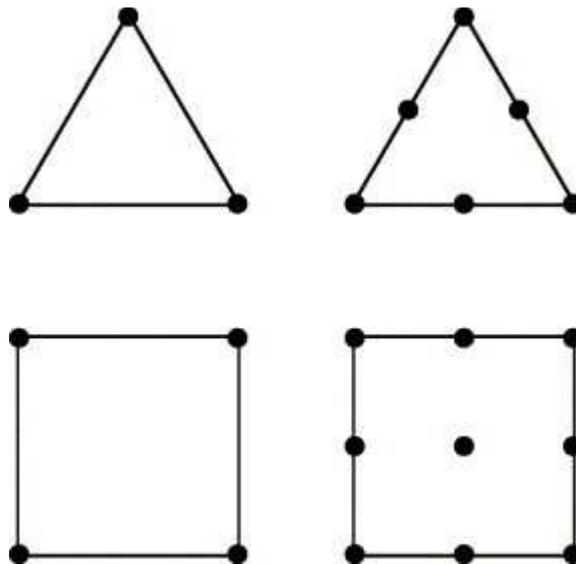
A formulação de Galerkin consiste em restringir a forma fraca da equação semi-discreta, Eq. (5.12), aos espaços dimensionalmente finitos.

A função de aproximação  $C_h$  em cada elemento pode ser escrita como:

$$C_h = \sum_{i=1}^r N_i C_i = \mathbf{N} \mathbf{C}, \quad (5.13)$$

onde,  $r$  é o número de nós em cada elemento na malha de elementos finitos,  $\mathbf{N}$  é o vetor contendo as funções bases para a interpolação pertencentes  $\mathcal{P}_p$  a e  $\mathbf{C}$  é o vetor contendo os valores nodais da variável  $C$ .

O grau dos polinômios interpoladores é dependente do número de pontos que constituem cada uma das células da malha de elementos finitos. A Figura 5.2 mostra exemplos de células triangulares com 3 e 6 nós e quadrilateras com 4 e 9 nós, onde são gerados polinômios de grau 1 e 2, respectivamente, para cada tipo de malha (triangular ou quadrilateral).



**Figura 5.2** - Exemplo de células de elementos finitos triangulares e quadrilateras, geradores de polinômios lineares e quadráticos. Fonte: Adaptado de BECKER *et al.* (1981).

Assim, pode-se escrever a Eq. (5.12), após a substituição da Eq. (5.13), como:

$$\begin{aligned}
& \int_{\Omega} wN d\Omega \frac{\Delta C}{\Delta t} + \theta \left\{ \int_{\Omega} w\mathbf{u} \cdot \nabla N d\Omega + \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla N d\Omega + \int_{\Omega} wkN d\Omega \right\} \Delta C \\
& = - \left[ \int_{\Omega} w\mathbf{u} \cdot \nabla N d\Omega + \int_{\Omega} D\nabla w \cdot \nabla N d\Omega + \int_{\Omega} wkN d\Omega \right] C^n \\
& + \int_{\Omega} w[\theta S^{n+1} + (1 - \theta)S^n] d\Omega + \int_{\Gamma_N} w[\theta b^{n+1} + (1 - \theta)b^n] d\Gamma_N.
\end{aligned} \tag{5.14}$$

Esta equação é a representação da equação de transporte, com termo reativo, completamente discretizada pelos métodos  $\theta$  e de elementos finitos, no tempo e no espaço, respectivamente.

### 5.3.3 – O método SUPG

Devido à presença do termo que representa o transporte devido à advecção na equação diferencial (3.31), os métodos clássicos de discretização espacial sofrem com oscilações espúrias, ou instabilidades numéricas, desde que o número de Peclet do elemento da malha, exceda um valor crítico (TEZDUYAR, 1992; LEWIS *et al.*, 2004). No método de elementos finitos, a formulação de Galerkin apresenta esta característica. Para estabilizar o termo advectivo, no método de elementos finitos, de forma consistente, assegurando que a solução da Eq. (5.14) seja também solução da Eq. (3.31), existem várias técnicas (TEZDUYAR, 1992; DONEA e HUERTA, 2003; LEWIS *et al.*, 2004), denominadas métodos de Petrov-Galerkin, que consistem na modificação da função peso para o acréscimo de uma difusão artificial ao longo das linhas de fluxo, a partir da adição de um termo de perturbação  $p(\mathbf{N})$ , ou seja,

$$w = \mathbf{N} + \tau p(\mathbf{N}), \tag{5.15}$$

sendo  $\tau$  denominado de parâmetro de estabilização, que, seguindo DONEA e HUERTA (2003) e JOHN e SCHMEYER (2008), para a equação de advecção-difusão-reação transiente, semi-discretizada pelo método  $\theta$ , pode ser dado por:

$$\tau = \left( \frac{1}{\theta \Delta t} + \frac{2|\mathbf{u}|}{h} + \frac{4D}{h^2} + k \right)^{-1} \quad (5.16)$$

Entre os diversos métodos resultantes da Eq. (5.15), encontra-se o SUPG (Streamline Upwind Petrov-Galerkin), através da definição de  $\mathcal{p}(\mathbf{N})$  como (BROOKS, 1981; ZIENKIEWICZ e TAYLOR, 2000; HERVOUET, 2007):

$$\mathcal{p}(\mathbf{N}) = \frac{h}{2} \frac{\mathbf{u}}{|\mathbf{u}|} \nabla \mathbf{N} = \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u} \nabla \mathbf{N} \quad (5.17)$$

Substituindo a Eq. (5.15) na Eq. (5.14), obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_{\Omega} (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \mathbf{N} d\Omega \frac{\Delta \mathbf{C}}{\Delta t} \\ & + \theta \left\{ \int_{\Omega} (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega \right. \\ & + \left. \int_{\Omega} D \nabla (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} k (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \mathbf{N} d\Omega \right\} \Delta \mathbf{C} \\ & = - \left[ \int_{\Omega} (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} D \nabla (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega \right. \\ & + \left. \int_{\Omega} k (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) \mathbf{N} d\Omega \right] \mathbf{C}^n \\ & + \int_{\Gamma_N} (\mathbf{N} + \tau \mathcal{P}) [\theta b^{n+1} + (1 - \theta) b^n] d\Gamma_N \end{aligned} \quad (5.18)$$

ou

$$\begin{aligned}
& \left[ \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} \tau \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega \right] \frac{\Delta \mathcal{C}}{\Delta t} \\
& + \theta \left\{ \left[ \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} \tau \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N})(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) d\Omega \right] \right. \\
& + \left[ \int_{\Omega} D \nabla \mathbf{N} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} D \tau \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega \right] \\
& \left. + \left[ \int_{\Omega} k \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} k \tau \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N} d\Omega \right] \right\} \Delta \mathcal{C} \\
& = - \left\{ \left[ \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} \tau \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N})(\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) d\Omega \right] \right. \\
& + \left[ \int_{\Omega} D \nabla \mathbf{N} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} D \tau \frac{\Delta t}{2} \nabla \cdot (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega \right] \\
& \left. + \left[ \int_{\Omega} k \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} k \tau \frac{\Delta t}{2} (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N} d\Omega \right] \right\} \mathcal{C}^n \\
& + \int_{\Gamma_N} (\mathbf{N} + \tau \frac{\Delta t}{2} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) [\theta b^{n+1} + (1 - \theta) b^n] d\Gamma_N \tag{5.19}
\end{aligned}$$

Por hipótese,  $\nabla \cdot \mathbf{u} = 0$ , logo a equação acima pode ser reescrita como,

$$\begin{aligned}
& \left[ \int_{\Omega} \mathbf{N}\mathbf{N}d\Omega + \int_{\Omega} \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega \right] \frac{\Delta \mathbf{C}}{\Delta t} \\
& + \theta \left\{ \left[ \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} \alpha (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) d\Omega \right] \right. \\
& + \left[ \int_{\Omega} D \nabla \mathbf{N} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} D \alpha (\mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{N}) \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega \right] \\
& + \left. \left[ \int_{\Omega} k \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} k \alpha (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N} d\Omega \right] \right\} \Delta \mathbf{C} \\
& = - \left\{ \left[ \int_{\Omega} \mathbf{N} \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} \alpha (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) d\Omega \right] \right. \\
& + \left[ \int_{\Omega} D \nabla \mathbf{N} \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} D \alpha (\mathbf{u} \cdot \nabla^2 \mathbf{N}) \cdot \nabla \mathbf{N} d\Omega \right] \\
& + \left. \left[ \int_{\Omega} k \mathbf{N} \mathbf{N} d\Omega + \int_{\Omega} k \alpha (\mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) \cdot \mathbf{N} d\Omega \right] \right\} \mathbf{C}^n \\
& + \int_{\Gamma_N} (\mathbf{N} + \alpha \mathbf{u} \cdot \nabla \mathbf{N}) [\theta b^{n+1} + (1 - \theta) b^n] d\Gamma_N, \tag{5.20}
\end{aligned}$$

em que  $\alpha = \tau \Delta t / 2$ .

A Eq. (5.20) pode ser reescrita na forma matricial como:

$$\begin{aligned}
& [\mathbf{M} + \alpha \mathbf{A}] \frac{\Delta \mathbf{C}}{\Delta t} + \theta \{ \mathbf{A} + \alpha \mathbf{K}_1 + \mathbf{K} + \alpha \mathbf{K}_2 + k [\mathbf{M} + \alpha \mathbf{A}] \} \Delta \mathbf{C} \\
& = - \{ \mathbf{A} + \alpha \mathbf{K}_1 + \mathbf{K} + \alpha \mathbf{K}_2 + k [\mathbf{M} + \alpha \mathbf{A}] \} \mathbf{C}^n + \mathbf{F}, \tag{5.21}
\end{aligned}$$

ou ainda,

$$\begin{aligned}
& [\mathbf{M} + \alpha \mathbf{A}] \frac{\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n}{\Delta t} + \theta \{ \mathbf{A} + \mathbf{K} + \alpha (\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2) + k [\mathbf{M} + \alpha \mathbf{A}] \} (\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n) \\
& = - \{ \mathbf{A} + \mathbf{K} + \alpha (\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2) + k [\mathbf{M} + \alpha \mathbf{A}] \} \mathbf{C}^n + \mathbf{F}, \tag{5.22}
\end{aligned}$$

onde cada uma das integrais da Eq. (5.20) passou a ser escrita como uma matriz na Eq. (5.21). Caso as funções bases para a interpolação sejam lineares, o termo com derivadas de segunda ordem, e portanto a matriz  $\mathbf{K}_2$ , será anulado.

Fazendo

$$\mathbf{C} = \mathbf{A} + \mathbf{K} + \alpha(\mathbf{K}_1 + \mathbf{K}_2) + k[\mathbf{M} + \alpha\mathbf{A}] \quad (5.23)$$

por motivo de brevidade, pode-se reescrever a Eq. (5.22) de forma mais compacta,

$$[\mathbf{M} + \alpha\mathbf{A}](\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n) + \theta\Delta t\mathbf{C}(\mathbf{C}^{n+1} - \mathbf{C}^n) = -\Delta t\mathbf{C}\mathbf{C}^n + \Delta t\mathbf{F}, \quad (5.24)$$

ou ainda,

$$[\mathbf{M} + \alpha\mathbf{A} + \theta\Delta t\mathbf{C}]\mathbf{C}^{n+1} = [\mathbf{M} + \alpha\mathbf{A} + (\theta - 1)\Delta t\mathbf{C}]\mathbf{C}^n + \Delta t\mathbf{F}. \quad (5.25)$$

Este é o sistema linear final obtido pelo método  $\theta$ /SUPG para a equação de transporte por advecção-difusão-reação.

Uma vez que as matrizes globais não mudam durante a evolução temporal, elas devem ser calculadas uma única vez.

## CAPÍTULO 6

### MODELAGEM COMPUTACIONAL

A resolução computacional da metodologia apresentada previamente (Capítulo 5) é feita em três etapas. A primeira delas é a geração da simulação hidrodinâmica, a qual fornecerá a malha de elementos finitos e o campo de velocidade para a etapa seguinte, que é a solução do algoritmo da equação de advecção-difusão pelo método  $\theta$ /SUPG propriamente dito, finalmente os resultados obtidos são exportados para a visualização e análise.

#### 6.1 - SIMULAÇÃO HIDRODINÂMICA

Como evidenciado anteriormente, as simulações hidrodinâmicas utilizadas neste trabalho foi feita com o auxílio do pacote computacional MODELEUR/HYDROSIM.

O primeiro passo para uma simulação hidrodinâmica, utilizando este pacote, consiste na geração de uma malha de elementos finitos. Para isso, o *Modeleur* possui várias ferramentas denominadas de *modos* (SECRETAN *et al.*, 2000). O modo *partição de malha* permite a especificação da geometria bem como o refinamento da malha, fornecendo assim os dados essenciais para a criação da malha triangular.

Em seguida, deve-se transferir os dados topográficos para a malha, isto é conseguido pelo modo *partição de topografia*, onde é possível especificar a origem dos dados por zonas. O objetivo deste passo, é obter um campo escalar global de topografia que cobrirá inteiramente o domínio especificado pela malha.

A terceira etapa da modelagem é determinar as condições de contorno do domínio gerado a priori. Para isso o modo *partição das condições de contornos* permite a especificação dos fluxos de entrada e saída do domínio modelado. Pode-se criar e especificar várias condições de contornos permitindo simular alagamento, seca e outras descargas características.

Segundo SECRETAN *et al.* (2000) existem outros passos que são opcionais inserindo informações adicionais ao modelo, são eles: substratos, ventos, gelo e o coeficiente de Manning.

Após a preparação da malha deve-se seguir para a simulação hidrodinâmica propriamente dita que é conduzida pelo *Hydrosim*, para isso devem ser inseridas as seguintes informações adicionais: as propriedades globais, a condição inicial, o esquema de resolução e os resultados a serem exportados no final da simulação.

Maiores detalhes sobre a utilização e aplicação do pacote *Modeleur/Hydrosim* podem ser encontrados em SECRETAN e LECLERC (1998) e SECRETAN *et al.* (2000).

## 6.2 - SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE MASSA

A solução numérica da equação de advecção-difusão-reação, usando o método  $\theta$ /SUPG, foi feita pela implementação computacional, em linguagem FORTRAN 90/95 do algoritmo apresentado. Os dados necessários para a utilização deste código, devem estar escritos em arquivos que possuem as seguintes estruturas:

- Malha triangular - esta pode ou não ser estruturada, o arquivo deve conter a seguinte sequência de dados: o número total de nós da malha (nnos), estes nós representam os vértices dos triângulos constituintes da malha; uma matriz, de dimensão (nnos, 2), contendo as coordenadas espaciais dos nós; o número de triângulos que formam a malha (ntriag); a indicação de quais pontos formam os vértices de cada triângulo, isto é feito com o auxílio de uma matriz de dimensão (ntriag, 3), cada linha desta matriz contém a sequência de números dos nós que formam uma célula triangular;
- Modelo hidrodinâmico - contém uma matriz de dimensão (nnos, 2) com as componentes dos vetores velocidades em cada nó da malha;
- Condição inicial - este arquivo deve conter um vetor de dimensão (nnos, 1), com os valores da concentração em cada ponto da malha, ele representa a distribuição espacial da concentração no instante inicial da simulação;
- Contorno de entrada - os valores da concentração nos pontos localizados sobre o contorno de entrada do fluxo. Esta concentração pode ser variável no espaço e/ou no tempo.

Afora estes dados, torna-se também necessária a informação do valor do coeficiente de difusão, o qual é assumido ser constante ao longo do programa. Isto

implica na hipótese de que o transporte devido à dispersão ser igual em todas as direções.

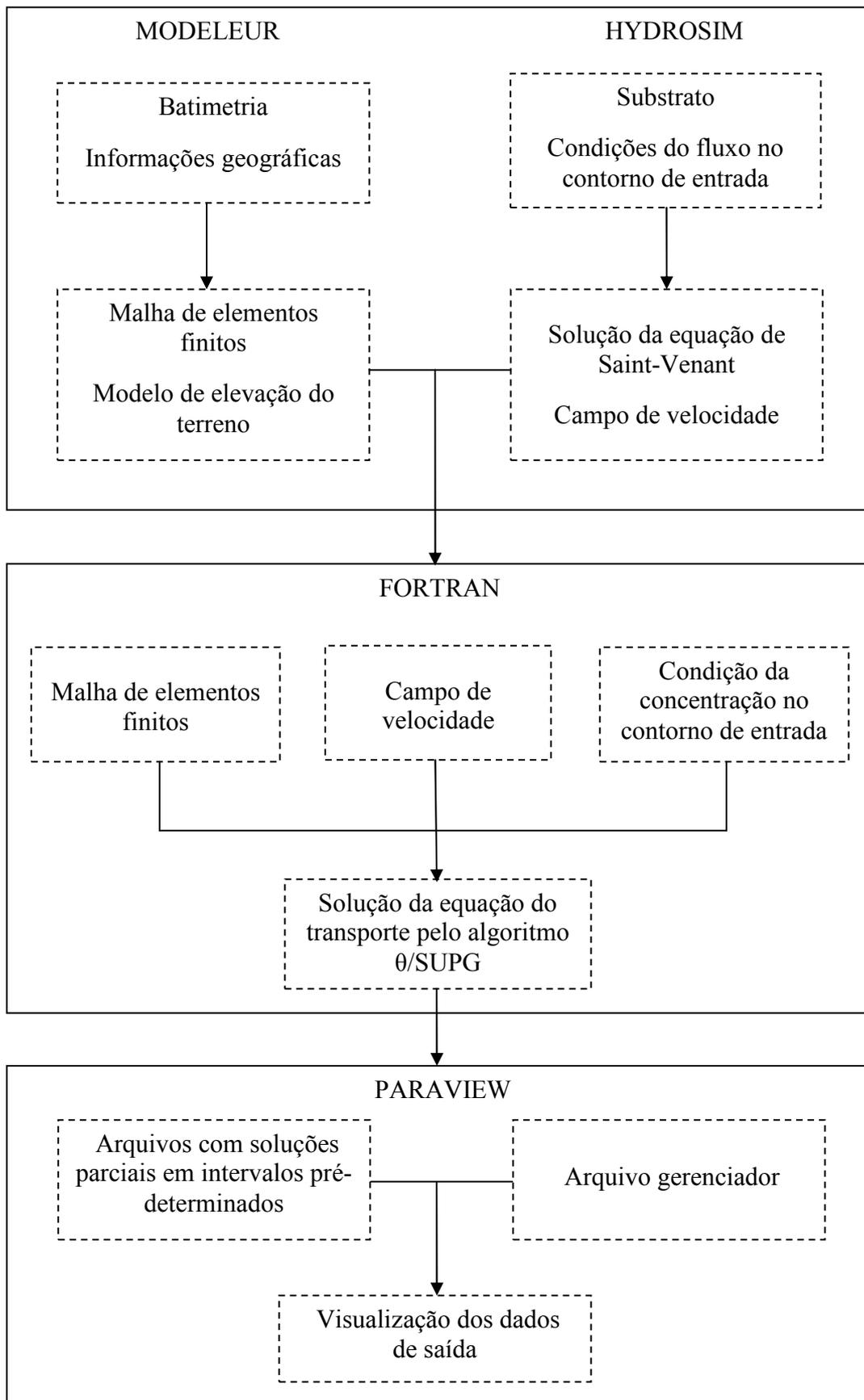
Além disso, como a matriz dos coeficientes do sistema linear resultante do processo de discretização espacial é esparso, utilizou-se uma estrutura apropriada para este tipo de dados, mais especificamente o formato de coordenadas, que constrói três vetores a partir da matriz esparsa. O primeiro destes vetores contém os valores reais não nulos desta matriz, os outros dois vetores, que devem possuir a mesma dimensão do primeiro, contém os índices de linhas e colunas para cada valor não nulo armazenado (VISUAL NUMERICS, 1997). Desta forma, diminui-se o esforço computacional pela preservação de memória e consegue-se melhorar a eficiência do código implementado.

O melhor meio para a solução de sistemas deste tipo é via um método iterativo. Entre os vários métodos existentes, o mais comumente usado é o método do resíduo mínimo generalizado (GMRES, na sigla em inglês), que aproxima a solução pela minimização do vetor dos resíduos no espaço de Krylov. Para mais detalhes a respeito deste método, recomenda-se SAAD e SCHULTZ (1986).

### **6.3 - VISUALIZAÇÃO DOS RESULTADOS**

A etapa seguinte, de pós-processamento, é feita com o auxílio do software livre de visualização 2D e 3D, PARAVIEW (KITWARE, 2010), o qual é utilizado para a geração gráfica dos resultados exportados na etapa anterior, em intervalos de tempo de simulação pré-estabelecido. Para isso, a cada intervalo, são produzidos arquivos que contém as informações sobre a geometria do problema (malha), o campo de velocidade e a distribuição espacial da concentração. Ao final da simulação é construído um arquivo gerenciador, o qual será aberto no software de visualização, que será responsável pela organização de todos os resultados que poderão ser vistos e analisados.

O procedimento apresentado neste capítulo pode ser resumido no fluxograma mostrado na Figura 6.1 abaixo:



**Figura 6.1** - Fluxograma do procedimento computacional adotado na solução numérica da equação de advecção-difusão.

## CAPÍTULO 7

### RESULTADOS NUMÉRICOS

Para a análise do algoritmo  $\theta$ /SUPG foram feitos testes em malhas triangulares estruturadas, para simulações mais simples, e não-estruturadas, para simulações mais complexas. Em todos os exemplos, utilizou-se funções base lineares para a interpolação da concentração.

#### 7.1 – ADVECCÃO PURA EM UM CAMPO ROTACIONAL

Este problema é uma adaptação do experimento numérico apresentado em DONEA e HUERTA (2003). Considere uma concentração no instante inicial ( $t = 0$ ) dada pela função:

$$C_0 = \begin{cases} \frac{1}{4}(1 + \cos \pi X_1)(1 + \cos \pi X_2) & \text{se } X_1^2 + X_2^2 \leq 1, \\ 0 & \text{caso contrário,} \end{cases}$$

Esta função representa uma distribuição de concentração em forma de “sino”, isto significa, que o centro desta disposição possui o máximo valor para a concentração, neste caso  $C_0 = 1$  unidade de concentração (u.c.), este valor diminui à medida que se afasta do centro, nas direções radiais, para a "borda" desta distribuição até atingir a distância do seu raio, onde atinge seu valor mínimo ( $C_0 = 0$  u.c.). As variáveis que aparecem nesta função são: o vetor com as componentes espaciais

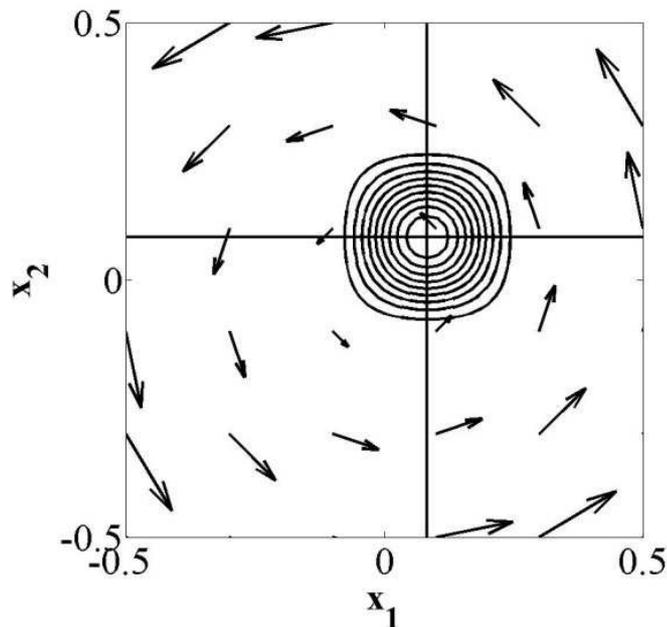
$$\mathbf{X} = (X_1, X_2) = \left( \frac{x_1 - x_{01}}{\sigma}, \frac{x_2 - x_{02}}{\sigma} \right)$$

onde  $x_1$  e  $x_2$  variam no intervalo  $\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]$ ,  $\mathbf{x}_0 = (x_{01}, x_{02})$  é a posição inicial do centro da distribuição e está localizada em  $\left(\frac{1}{6}, \frac{1}{6}\right)$  e  $\sigma = 0,2$  é o raio desta.

Esta concentração é transportada por um campo de velocidade rotacional com velocidade angular unitária dada por  $\mathbf{u}(\mathbf{x}) = (-x_2, x_1)$  ao redor do centro de um quadrado de lados unitários  $\left(\left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right] \times \left[-\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right]\right)$  até completar uma volta. No entanto, esta concentração não sofre transporte por difusão, ou seja, não há alteração no raio da distribuição inicial ao longo de todo o percurso.

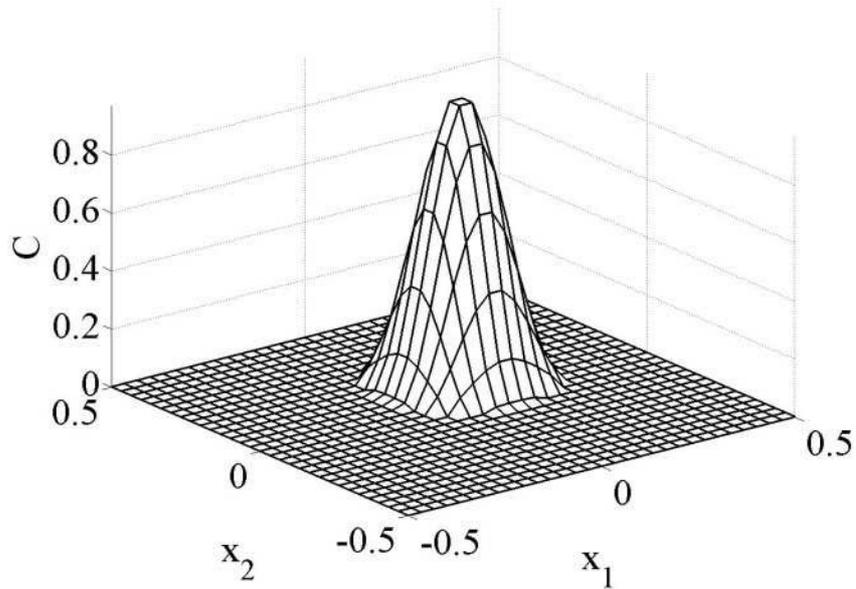
A Figura 7.1 mostra o campo de velocidade, bem como as isolinhas da concentração no instante inicial (esta por sua vez também representa a solução exata após o percurso de uma volta). Além disso, nesta figura são mostradas duas linhas que se cruzam no centro das isolinhas da concentração, elas representam cortes nas direções  $x_1$  e  $x_2$ , que serão utilizados para análise dos resultados obtidos nos testes.

Nesse caso, assumiu-se a condição de contorno do tipo Dirichlet homogêneo, ou seja, a concentração é considerada nula ( $C = 0$ ), sobre todas as bordas do modelo. Além disso, para a integração temporal utilizou-se o parâmetro  $\theta = 1/2$ , o que indica a utilização do método de Crank-Nicolson para as diferenças finitas.



**Figura 7.1** - Campo de velocidade, isolinhas da condição inicial e cortes nas direções  $x_1$  (horizontal) e  $x_2$  (vertical).

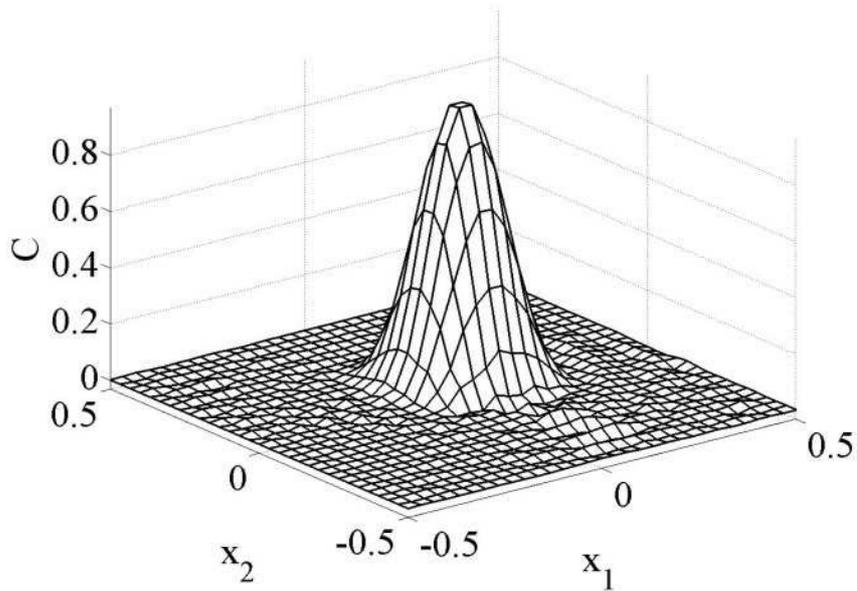
A Figura 7.2 apresenta a distribuição inicial da concentração, na forma de superfície, ela indica que os maiores valores estão próximos ao centro desta distribuição até se tornarem nulos nas regiões além de seu raio. O modelo foi discretizado em uma malha regular de 31X31 nós.



**Figura 7.2** - Representação da condição inicial (e também solução exata) na forma de superfície.

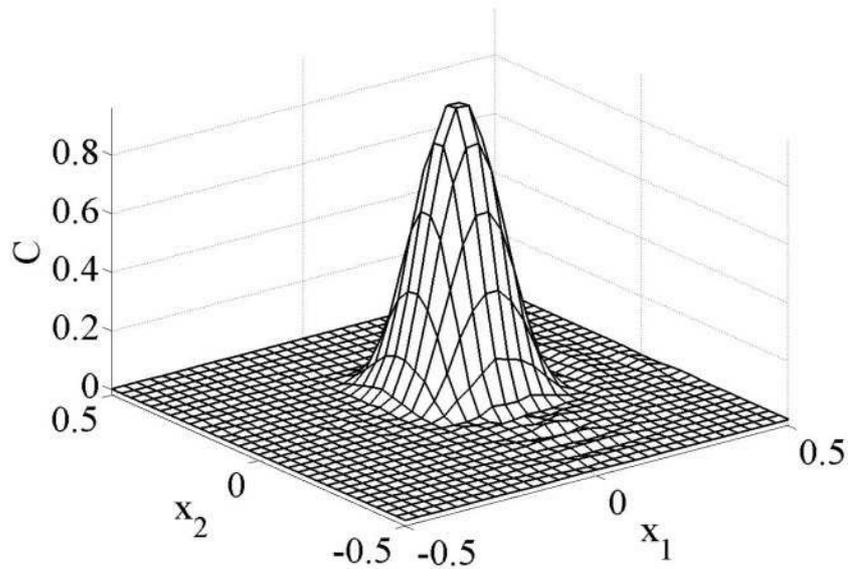
As Figuras 7.3 e 7.4 mostram os resultados numéricos após a simulação de uma rotação de  $360^\circ$  em uma malha regular de  $31 \times 31$  nós, para dois valores distintos do parâmetro  $\tau$ .

O primeiro destes valores foi calculado pela Eq. (5.16), o qual obteve  $\tau = 0,1964 \times 10^{-3}$ . Devido a este valor para o parâmetro  $\tau$  ser próximo de zero, pode-se afirmar que a Figura 7.3 apresenta, de fato, o resultado obtido pela formulação de Galerkin para os elementos finitos. Nota-se que para distâncias maiores que o raio da distribuição inicial, aparecem oscilações, as quais representam valores não nulos, e até negativos, para a concentração. Este efeito não possui significado físico sendo apenas um efeito numérico devido a instabilidades do método utilizado.



**Figura 7.3** - Solução do problema obtida pelo método de Galerkin após uma rotação completa em volta do centro do modelo.

O segundo valor adotado para o parâmetro de estabilização foi  $\tau = 1,0$ , consequentemente introduzindo a formulação SUPG, a qual insere a difusão numérica no modelo inteiro ao longo da simulação, desta forma as flutuações são reduzidas, como pode ser visto na Figura 10, a qual mostra que as oscilações de menores amplitudes presentes no resultado obtido pelo método de Galerkin foram bastante atenuadas. Entretanto, é possível observar que existem oscilações remanescentes no resultado ao final do teste. Este fato é conhecido e deve-se pela não monotonicidade do método SUPG.

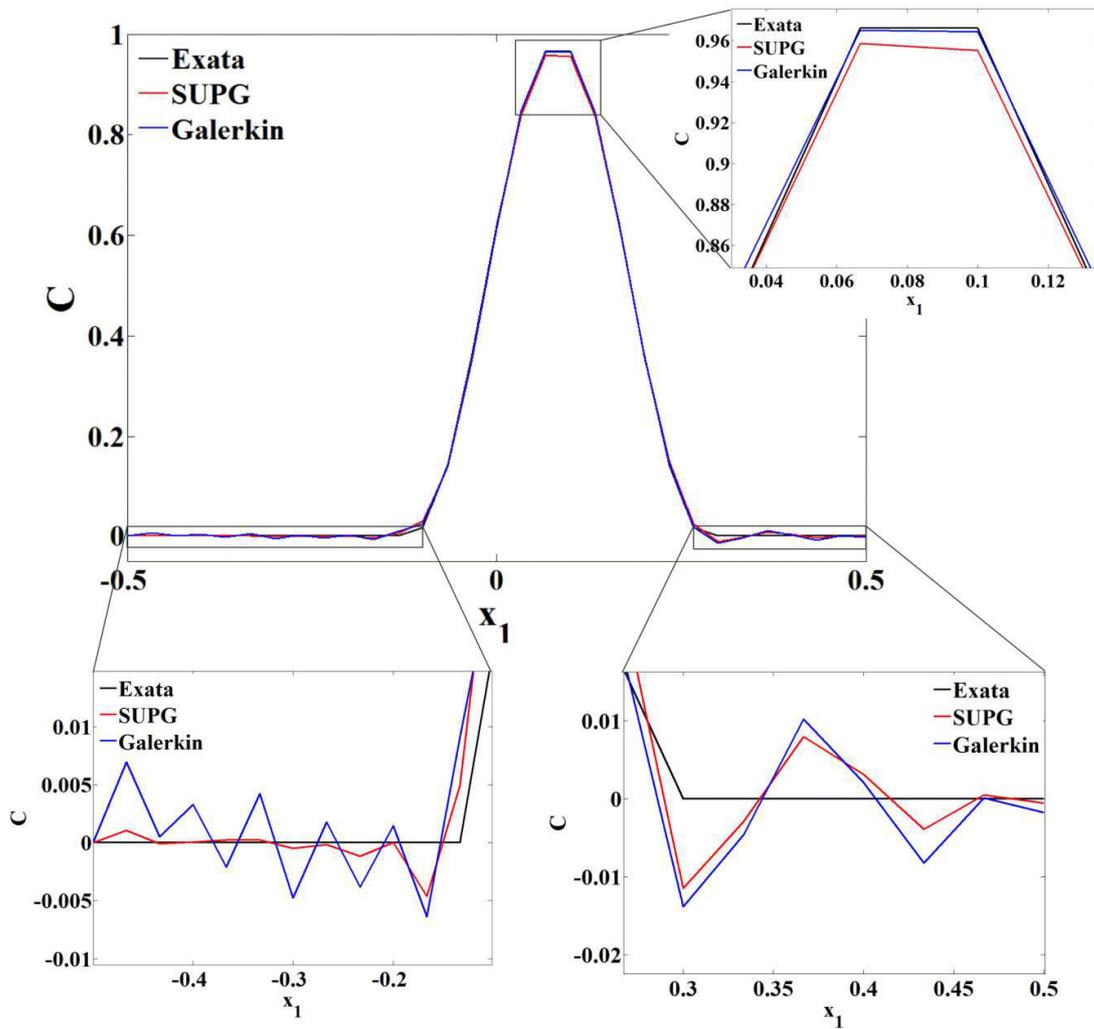


**Figura 7.4** - Resultado numérico obtido pelo método de  $\theta$ /SUPG após uma rotação completa em volta do centro do modelo.

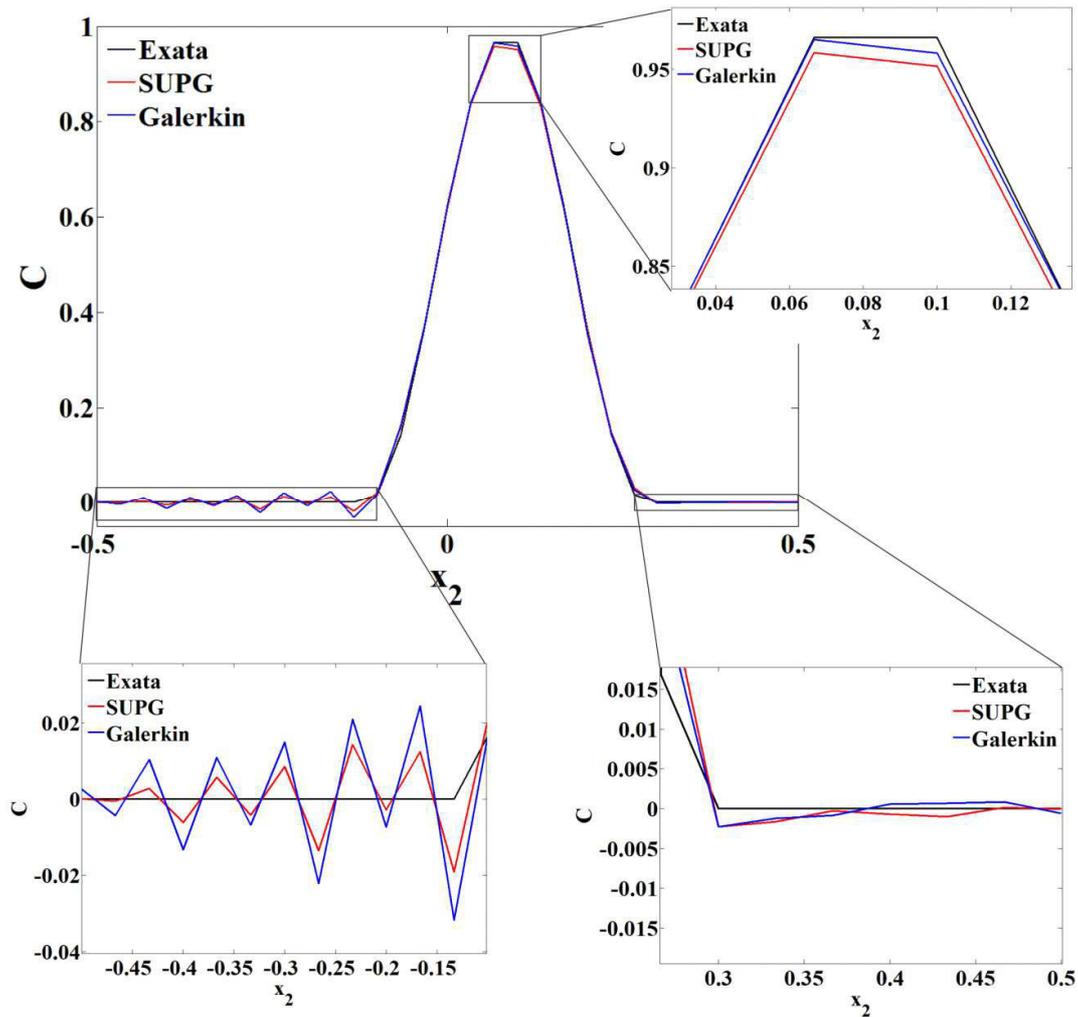
As Figuras 7.5 e 7.6, mostram a comparação dos resultados obtidos pelos dois métodos (Galerkin e SUPG) com a solução exata do problema. Esta comparação é feita pelo os cortes nas direções  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente, conforme mostrado na Figura 7.

Como pode ser visto nas Figuras 7.5 e 7.6, além dos três gráficos ao longo de toda a extensão do modelo nas direções  $x_1$  e  $x_2$  (em segundo plano), aparecem também, as ampliações de algumas partes destas respostas para efeito de análise mais detalhada (em primeiro plano). Observa-se que na base das curvas, tanto à esquerda quanto à direita da origem, as oscilações obtidas pela solução de Galerkin são mais acentuadas, sendo que suas maiores amplitudes são de 0,025 u.c. e 0,055 u.c., sobre as retas tomadas para análise nas direções  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente. Por outro lado, as flutuações do gráfico obtido pelo método SUPG possuem amplitudes de aproximadamente 0,02 u.c. e 0,035 u.c., nas direções  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente, conseqüentemente este último método apresenta o resultado mais próximo ao exato na base das curvas. Entretanto, na porção em que as concentrações atingem seus valores máximos, a formulação SUPG apresenta resultado menor que a solução exata, 0,9586 u.c. e 0,9662 u.c., respectivamente. Diferentemente, o método de Galerkin obtém 0,9652 u.c., o que está mais próximo à exata. Estes efeitos são conseqüência da inserção da difusão numérica artificial introduzida pelo método SUPG na formulação de Galerkin, o qual causa atenuação da

resposta desta ao longo de todo o modelo. É possível diminuir ainda mais a amplitude das oscilações atribuindo-se valores maiores para o parâmetro  $\tau$ , entretanto, isto causaria o aumento da difusão artificial levando a valores máximos do método SUPG cada vez menores, tornando-os mais distantes da solução exata.



**Figura 7.5** - Comparação entre as soluções exata, SUPG e Galerkin, na direção  $x_1$ .



**Figura 7.6** - Comparação entre as soluções exata, SUPG e Galerkin, na direção  $x_2$ .

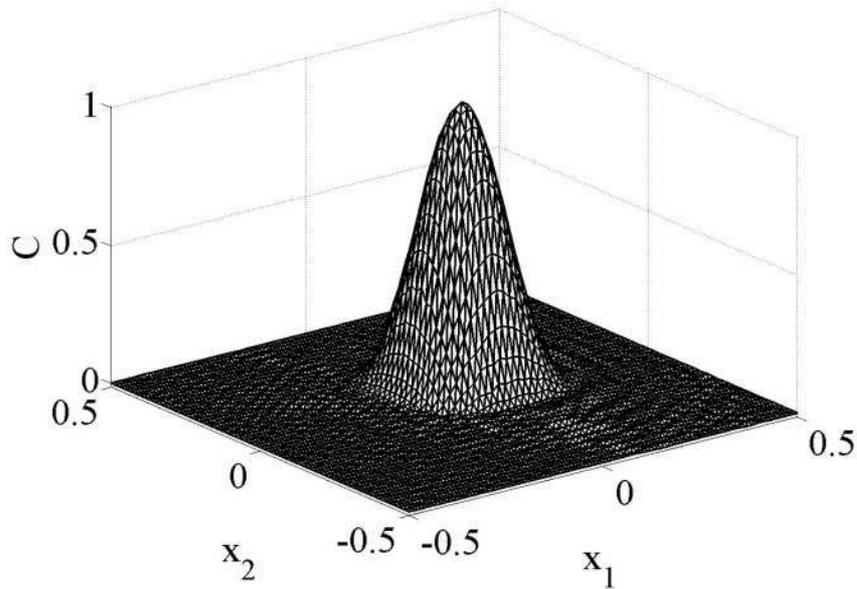
Em DONEA e HUERTA (2003), os autores utilizaram as seguintes metodologias: o método Lax-Wendroff combinado com a formulação de Galerkin com elementos bilineares e uma representação diagonal da matriz de massa, o método Lax-Wendroff combinado com a formulação com elementos bilineares e uma representação consistente da matriz de massa (denominado pelos autores como TG2) e o método de Taylor-Galerkin (denominado de TG3). A Tabela 7.1 apresenta os valores de maiores e menores concentrações globais (em u.c.) apresentados pela resposta exata, formulação  $\theta$ /SUPG e de Galerkin, não apenas sobre as curvas das Figuras 7.5 e 7.6, e os valores obtidos pelos métodos descritos em DONEA e HUERTA (2003). O máximo da solução exata, não atinge o valor unitário para a concentração, como informado na descrição do problema, devido à utilização de uma malha grosseira. Os dados tabelados mostram que

a concentração máxima do método de Galerkin apresenta valor numérico mais próximo da solução exata, enquanto que nos valores mínimos o método TG3 apresenta resposta mais aproximada da exata, apesar do sinal negativo, o que representa as oscilações remanescentes. A resposta da concentração mínima obtida no método  $\theta$ /SUPG é comparável aos resultados das metodologias (TG2) e (TG3), os quais apresentam amplitudes menores para as oscilações na base do sino. Dentre todos os resultados tabelados, aqueles devido ao método Lax-Wendroff/Galerkin exibiu os valores menos precisos quando comparado à solução exata.

**Tabela 7.1** - Valores máximos e mínimos das concentrações para as soluções exata,  $\theta$ /SUPG, Galerkin, Lax-Wendroff/Galerkin, TG2 e TG3.

<b>Concentração(u.c.) Solução</b>	$C_{máx}$	$C_{mín}$
<b>Exata</b>	0,9662	0,0000
<b><math>\theta</math>/SUPG</b>	0,9586	- 0,0193
<b>Galerkin</b>	0,9652	- 0,0317
<b>Lax-Wendroff/Galerkin</b>	0,8186	- 0,1774
<b>TG2</b>	0,9830	-0,0186
<b>TG3</b>	0,9835	-0,0148

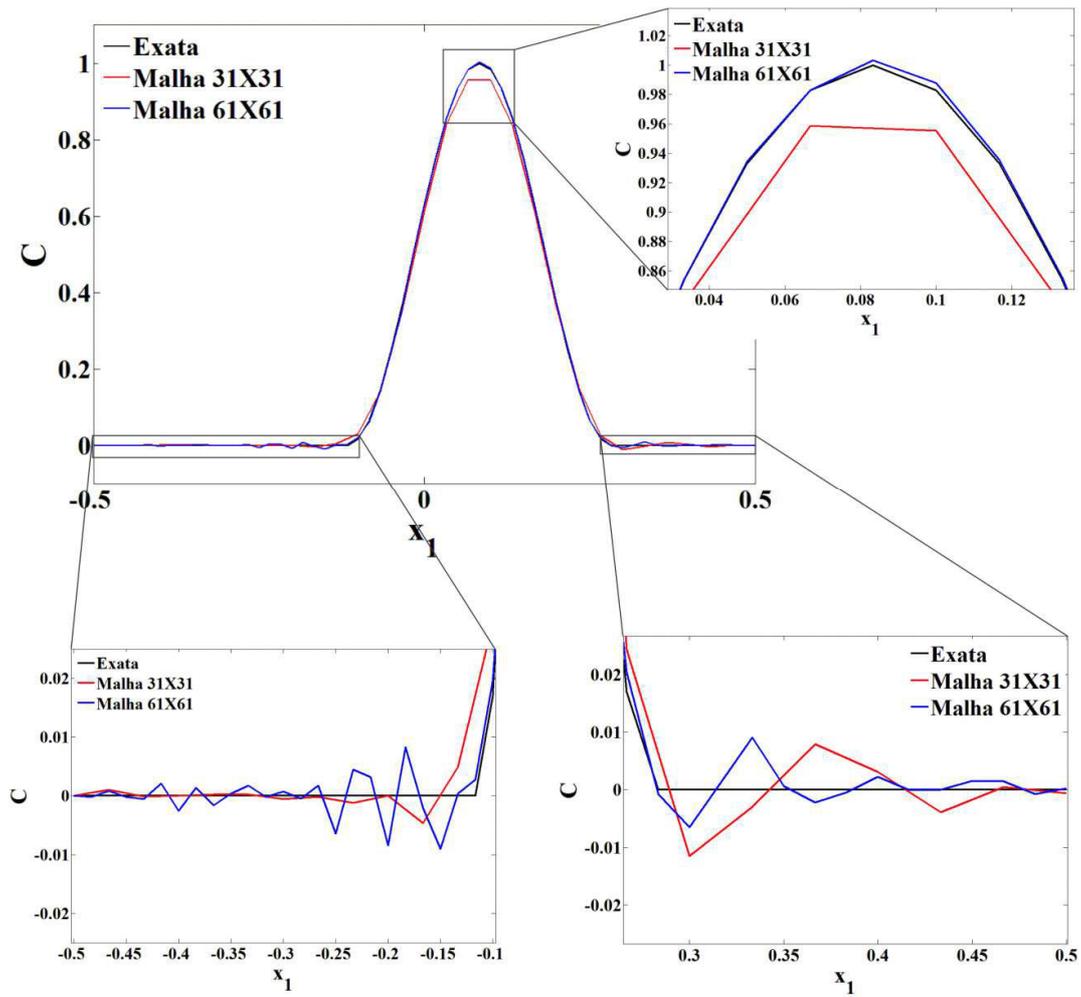
A Figura 7.7 mostra a resposta ao final de uma volta completa em torno do centro do modelo obtida pelo método  $\theta$ /SUPG em uma malha de 61X61 pontos sobre as bordas. Observa-se que, mesmo com o refinamento da malha, o método apresenta oscilações remanescentes. As amplitudes das oscilações na base do modelo são, em geral, menores que as apresentadas na Figura 7.4.



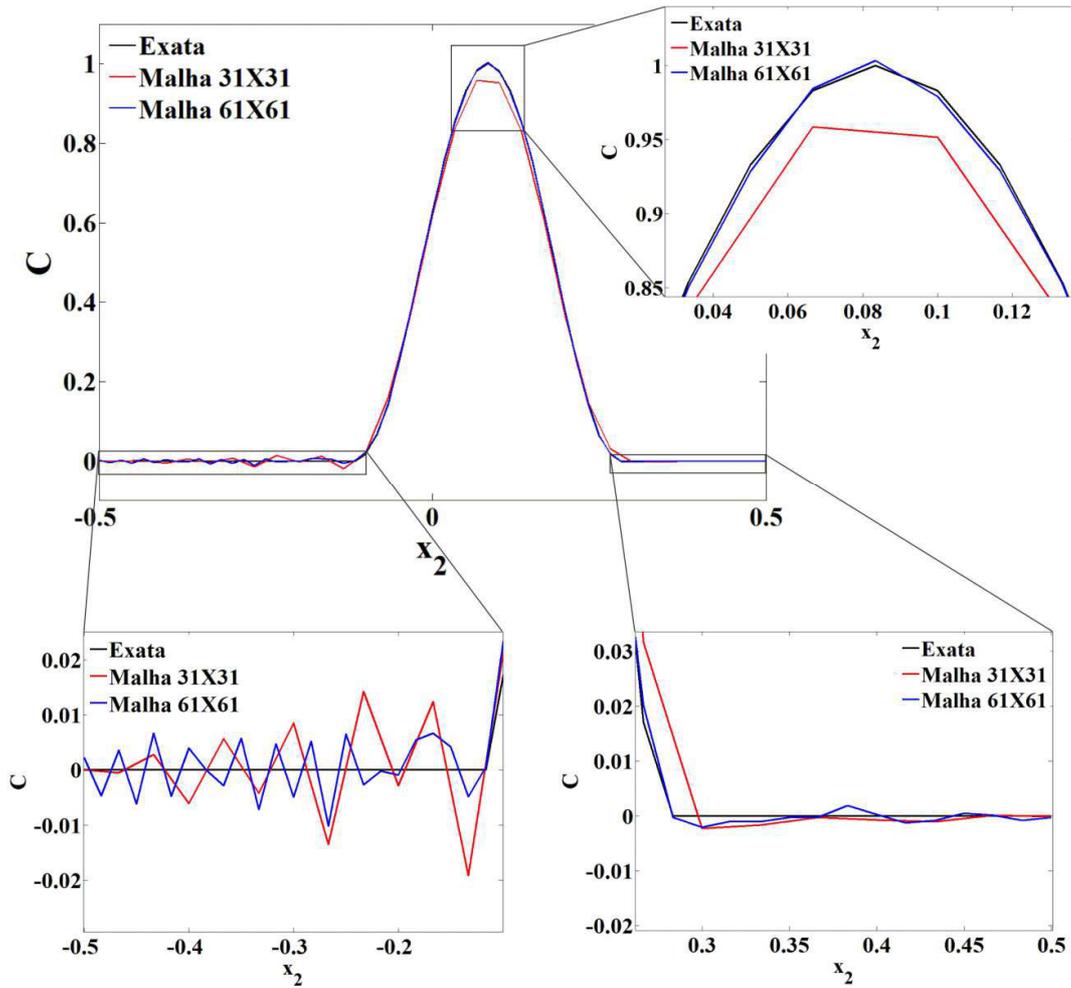
**Figura 7.7** - Solução final obtida pelo método  $\theta$ /SUPG para uma rotação completa em uma malha 61X61.

As Figuras 7.8 e 7.9 apresentam a comparação dos resultados alcançados pelo algoritmo  $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61 nós, sobre os cortes nas direções  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente. Em segundo plano, aparecem estas duas curvas juntamente com a curva da solução exata, enquanto que no primeiro plano aparecem ampliados os detalhes da base e do topo destas curvas. Nota-se a influência do refinamento da malha pelos valores máximo e mínimo encontrados. Enquanto que a máxima concentração é praticamente igual ao valor exato, as flutuações nas bases possuem as maiores amplitudes aproximadamente iguais a 0,02 u.c. e 0,018 u.c., nas direções  $x_1$  e  $x_2$ , respectivamente. Entretanto, deve-se ressaltar que em algumas regiões na base das curvas as oscilações da malha mais refinada possuem amplitudes maiores, como pode ser visto no detalhe à esquerda da origem na Figura 7.8 e à direita da origem na Figura 7.9.

Todavia, a formulação  $\theta$ /SUPG na malha mais refinada possui um comportamento global mais próximo do exato. Isto é confirmado pelos dados apresentados na Tabela 7.2, a qual apresenta os valores máximo e mínimo global das soluções exatas e  $\theta$ /SUPG para malhas 31X31 e 61X61. Observa-se que os valores numéricos para estes extremos, na malha refinada, estão mais próximos da solução exata, e o valor máximo não sofreu tanto a influência dispersão numérica inserida pelo método.



**Figura 7.8** - Comparação entre as soluções exatas e  $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61 na direção  $x_1$ .



**Figura 7.9** - Comparação entre as soluções exatas e  $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61 na direção  $x_2$ .

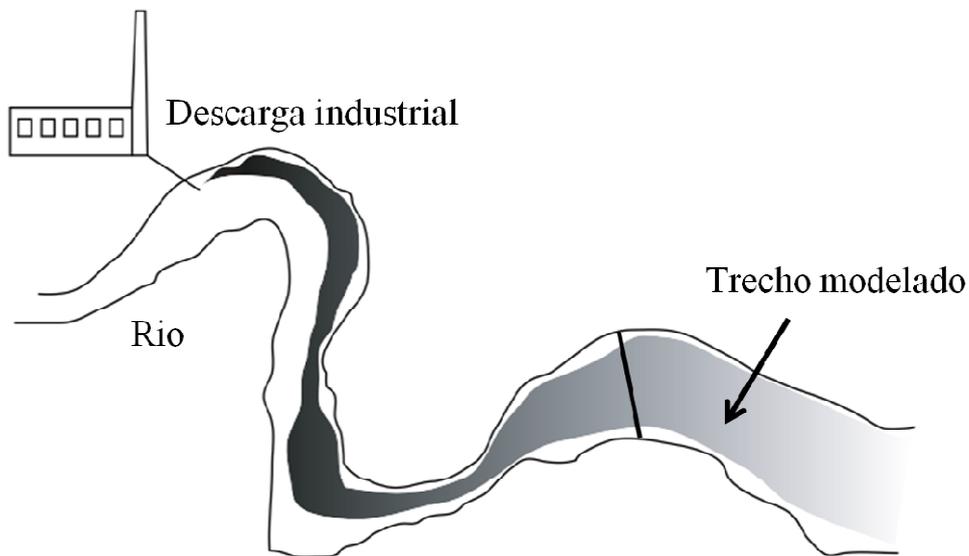
**Tabela 7.2** - Valores máximos e mínimos das concentrações para as soluções exatas e  $\theta$ /SUPG nas malhas 31X31 e 61X61.

Concentração(u.c.) Solução	$C_{m\acute{a}x}$	$C_{m\grave{i}n}$
Exata - 61X61	1,0000	0,0000
$\theta$ /SUPG - 31X31	0,9586	- 0,0193
$\theta$ /SUPG - 61X61	1,0033	-0.0137

## 7.2 – ADVECÇÃO E DIFUSÃO EM MALHAS NÃO ESTRUTURADAS

No exemplo anterior, o método  $\theta$ /SUPG mostrou-se apropriado, na resolução de problemas simples, envolvendo transporte de uma concentração por advecção pura em malhas estruturadas, com algumas restrições, por exemplo, o valor do parâmetro  $\tau$  que pode ter seu valor elevado acarretando no aumento da difusão numérica artificial e, conseqüentemente, diminuindo as amplitudes do modelo, isto acarreta diminuição das oscilações, mas também atinge os valores da concentração de interesse. Neste exemplo, mostra-se o comportamento deste algoritmo quando aplicado em problemas envolvendo o transporte de massa pelos processos advectivo e difusivo, com modelos hidrodinâmicos mais sofisticados e em malhas não estruturadas.

Para isso se considerou um rio livre de uma determinada substância. Em certo ponto, ao longo deste rio, há o despejo desta por uma fonte pontual, a partir daí este elemento passa a ser transportado por advecção e sofre espalhamento lateral devido a difusão, como mostrado na Figura 7.10. Admitiu-se que não há outras fontes, nem sumidores, e que a concentração no contorno de entrada do trecho modelado apresenta um valor constante na região mais central do modelo, sem atingir suas margens.

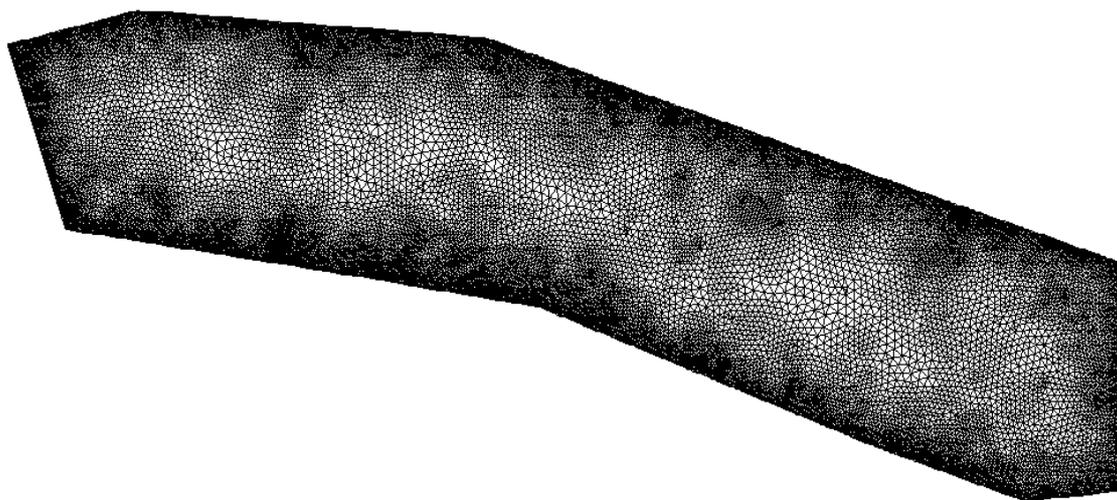


**Figura 7.10** - Descarga por uma fonte pontual na margem de um rio distante do trecho modelado. Fonte: Adaptado de SOCOLOFSKY e JIRKA (2004).

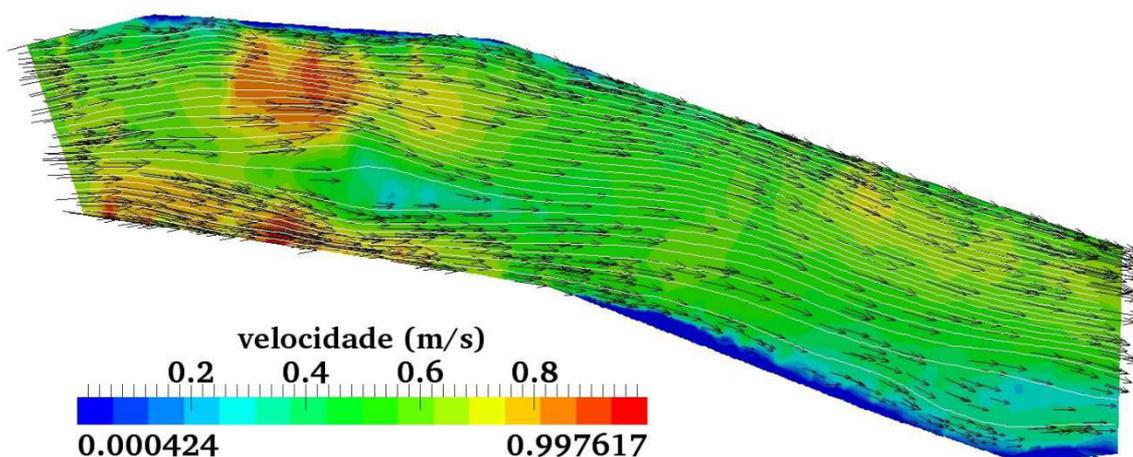
Para a representação do trecho modelado foram usados a malha e o campo de velocidade do modelo teste *Trout River*, fornecido no pacote de simulação hidrodinâmica Modeleur/Hydrosim (versão 1.0a07b - 2000).

A Figura 7.11 mostra a malha hidrodinâmica utilizada, a qual contém 23.096 nós, o que produz 44.679 triângulos lineares, o valor para o número de Courant obtido para esta simulação foi de 0,3. Esta malha foi obtida após a convergência, pelo Modeleur, para a geração do campo de velocidade.

Os elementos do campo de velocidade são apresentados na Figura 7.12, a qual mostra o campo escalar do módulo da velocidade, juntamente com as linhas de corrente, representadas pelas linhas claras dentro do modelo, e o campo vetorial da velocidade. Vê-se que a velocidade apresenta gradientes ao longo de todo o modelo, alcançando a magnitude máxima de aproximadamente 1 m/s, nas regiões que exibem a cor vermelha, principalmente em áreas próximas à montante. Por outro lado, em outras regiões seu módulo é praticamente nulo (em azul), destacadamente nas áreas da margem sul próximas à jusante, e em pequenas áreas da margem norte próximas à montante. Entretanto, a maior parte da área do modelo apresenta velocidade média de 0,5 m/s (em verde). As linhas de correntes ajudam a visualizar as distorções sofridas pelo campo de velocidade devido a estes gradientes, isto é indicado pelas aproximações das linhas nas zonas onde a velocidade possui maior módulo e os afastamentos delas nas zonas de velocidade menor que sua vizinhança, como por exemplo, na área próxima à montante, a qual possui em suas imediações áreas de grande velocidade, e também na área adjacente à jusante do modelo. Deve-se destacar que não existem zonas de recirculação, de tal forma que toda concentração que entra no domínio é arrastada para fora deste pelo processo advectivo.



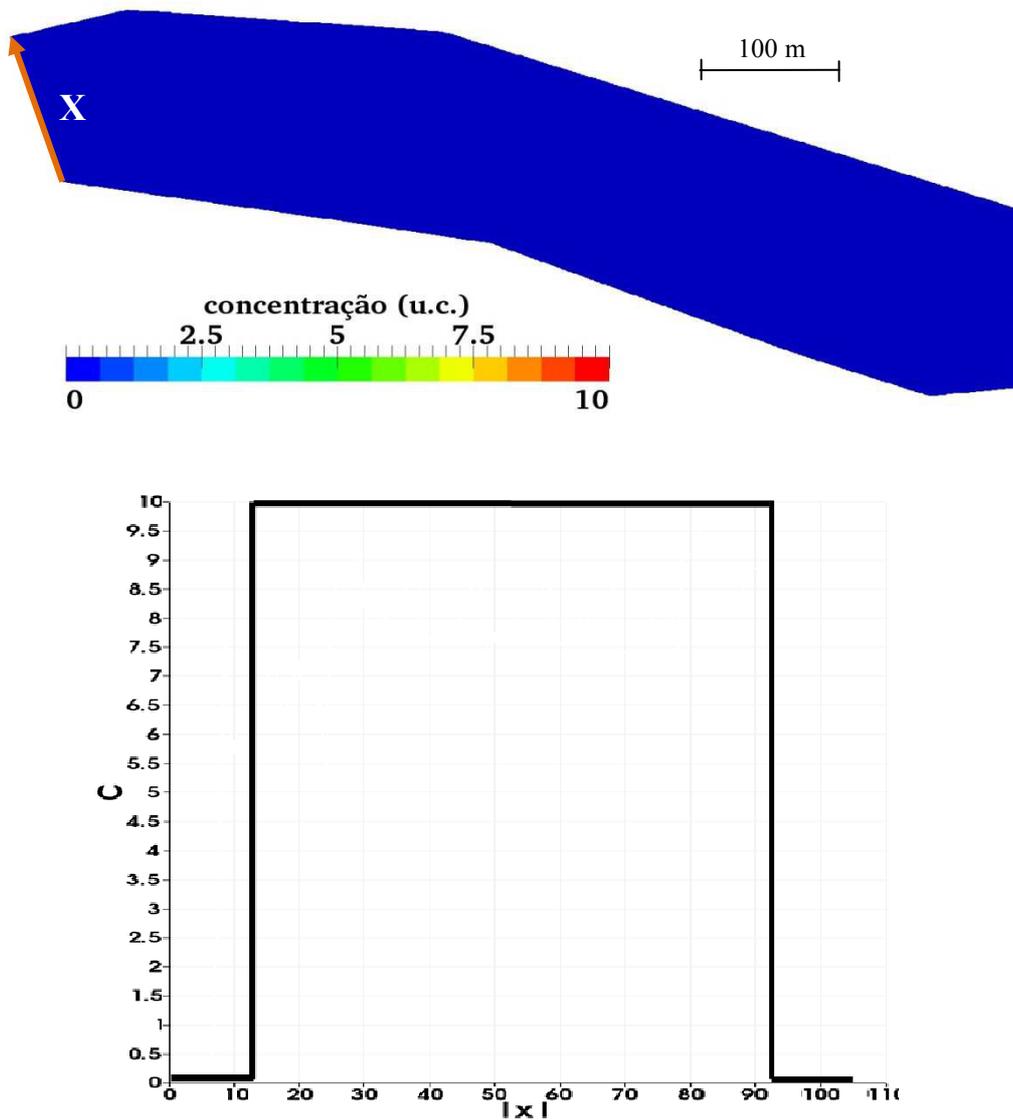
**Figura 7.11** - Malha não estruturada de elementos finitos do modelo teste Trout River, fornecido pelo pacote Modeleur /Hydrosim.



**Figura 7.12** - Campo de velocidade do modelo teste Trout River fornecido no pacote de simulação hidrodinâmica Modeleur/Hydrosim.

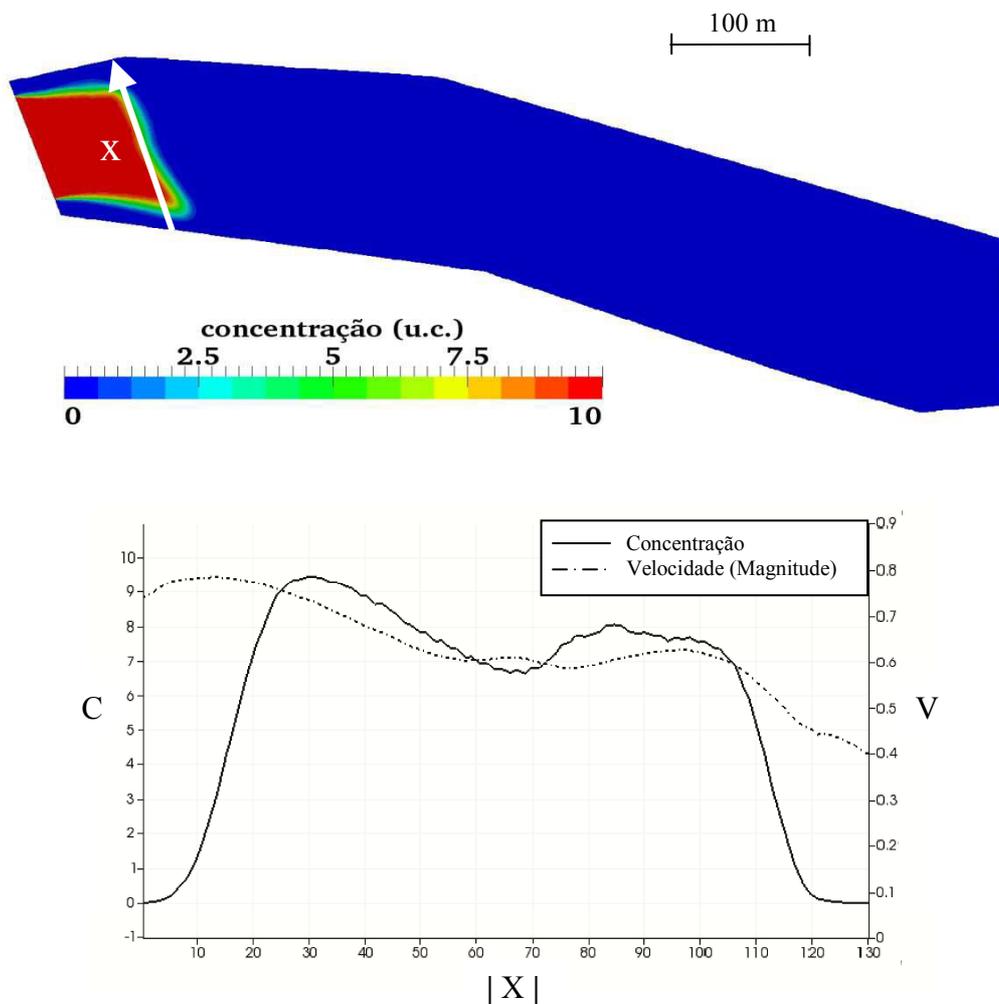
Da Figura 7.13 até a Figura 7.17 é apresentada a evolução temporal da simulação do transporte. Cada figura é composta por duas ilustrações, a imagem superior apresenta distribuição da concentração no referido instante do transporte e a imagem inferior mostra o comportamento da concentração (eixo vertical à esquerda) e a magnitude do campo de velocidade (eixo vertical à direita) ao longo do módulo do vetor de referência  $X$ , o qual indica a direção destes dados (eixo horizontal). Este vetor sempre terá sua origem sobre a margem sul do modelo e sua extremidade na margem norte.

A Figura 7.13 exibe a condição inicial do problema, isto é, a concentração ao longo do intervalo de comprimento entre 12 e 92 m sobre o contorno de entrada é constante e igual a 10 u.c. e nulo próximo às bordas durante toda a evolução temporal. Dentro do domínio, a concentração é nula no instante inicial. A simulação representa o transporte de massa em um período de 2,5 h (9000 s), com o intervalo de discretização dado pela Eq. (5.3), utilizando o valor do fator de segurança igual a 0,3. Além disso, o valor adotado para o coeficiente de difusão foi de  $0,1 \text{ m}^2/\text{s}$ .



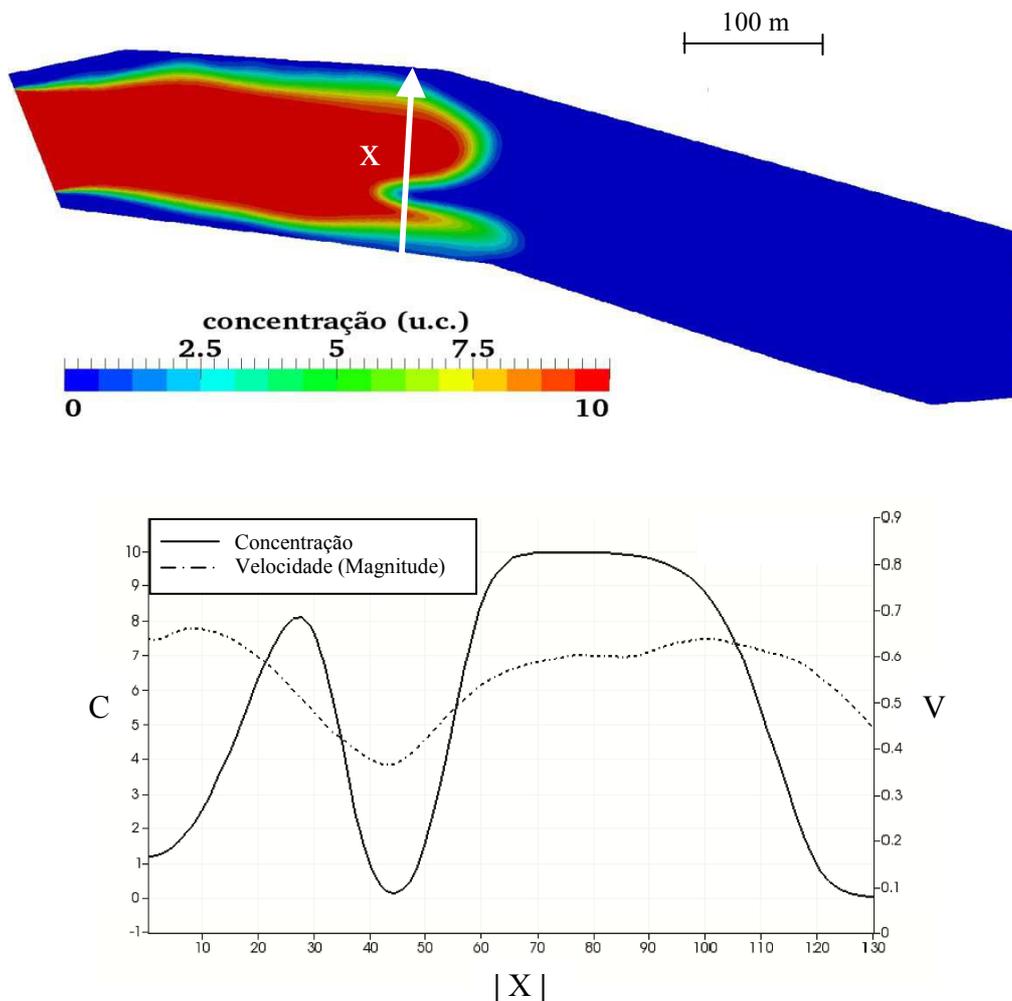
**Figura 7.13** - Condição inicial do problema. A concentração é constante em 10 u.c. entre 20 e 110 m sobre o contorno de entrada do modelo.

Após a simulação de 13 minutos, nota-se a presença da matéria dentro do modelo nas proximidades do contorno de entrada, como mostrado na Figura 7.14. A distribuição das cores representa a presença de massa devido aos processos advectivo e difusivo, sendo este último observado pelo gradiente de cores que parte do valor máximo (10 u.c., denotado pela cor vermelha) até a concentração nula (em azul). O efeito do campo de velocidade sobre esta distribuição da substância é percebido, neste instante, devido à aceleração da concentração próxima à margem sul do modelo. Estas observações podem ser acompanhadas na comparação entre as curvas de velocidade e de concentração que mostra que nas áreas de maior velocidade, a concentração também é mais elevada, principalmente, na região próxima à margem sul do rio, devido ao efeito do transporte advectivo. A difusão é percebida pela transição suave entre os valores de maior e menor concentração, da região mais central do gráfico para as bordas, respectivamente. caso o efeito difusivo não fosse considerado, esta transição seria abrupta aparecendo, assim, como linhas verticais entre esses dois valores. Deve-se chamar a atenção com relação à curva de representação da velocidade, pois nela seus valores nas bordas deveriam ser nulos, devido à hipótese de não deslizamento do fluido nos contornos sólidos, entretanto, no processo de geração da malha hidrodinâmica pode ocorrer que esta seja definida dentro das fronteiras dos dados batimétricos do modelo, assim seu contorno terá cota não nula durante a geração da simulação hidrodinâmica.



**Figura 7.14** - Distribuição da concentração após 13 minutos de simulação.

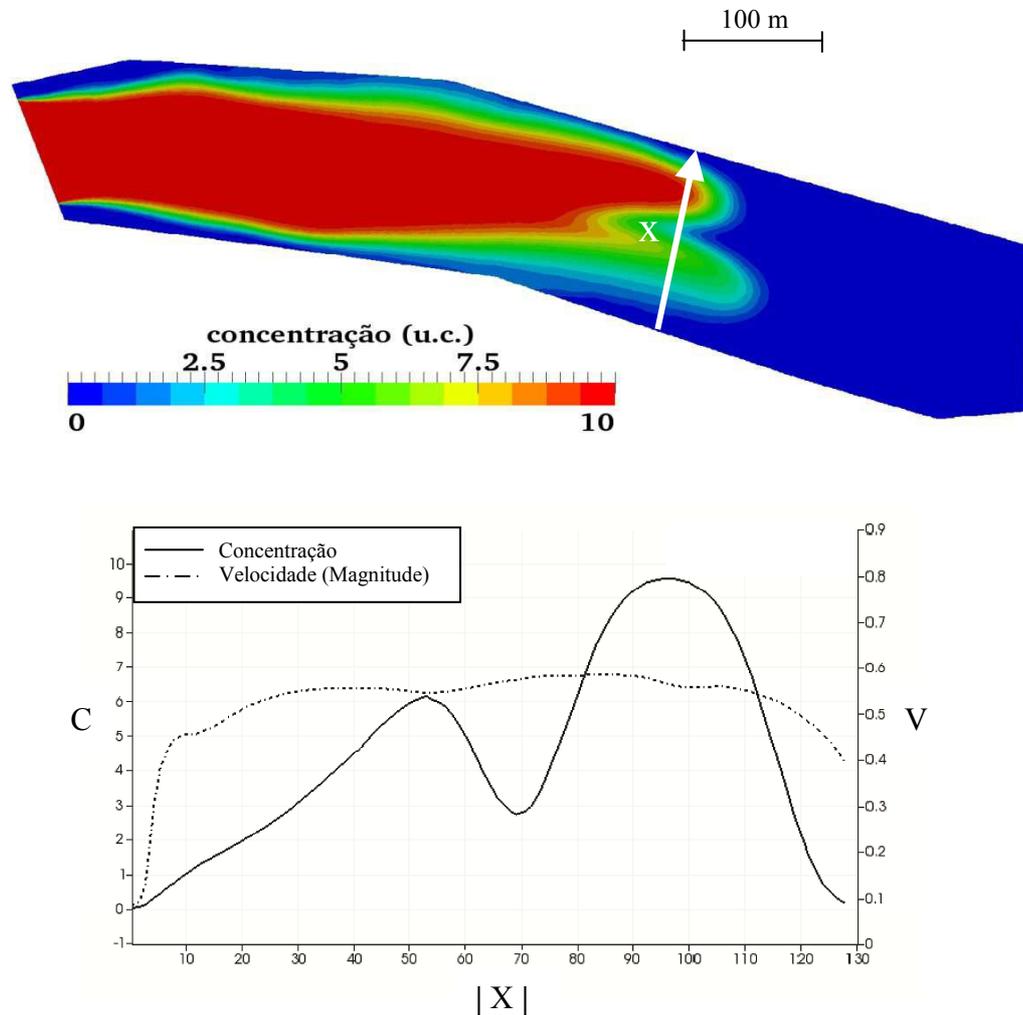
Na Figura 7.15 a resposta após a simulação de 50 min, através da qual fica evidente a influência do campo de velocidade na distribuição da concentração devido à distorção acentuada pela passagem da substância em áreas de maior velocidade, o que produz um atraso na região entre elas. Além disso, o transporte difusivo é notado pela presença da concentração com valores distribuídos entre o máximo e o mínimo em locais onde não havia sua presença anteriormente. Estas descrições podem ser ratificadas nas curvas tomadas sobre o vetor  $\mathbf{X}$ , as quais mostram que as regiões com módulo da velocidade elevado possuem maiores valores para a concentração para o referido instante e a transição suave entre seu máximo e seu mínimo.



**Figura 7.15** - Configuração da concentração após a simulação de 50 minutos.

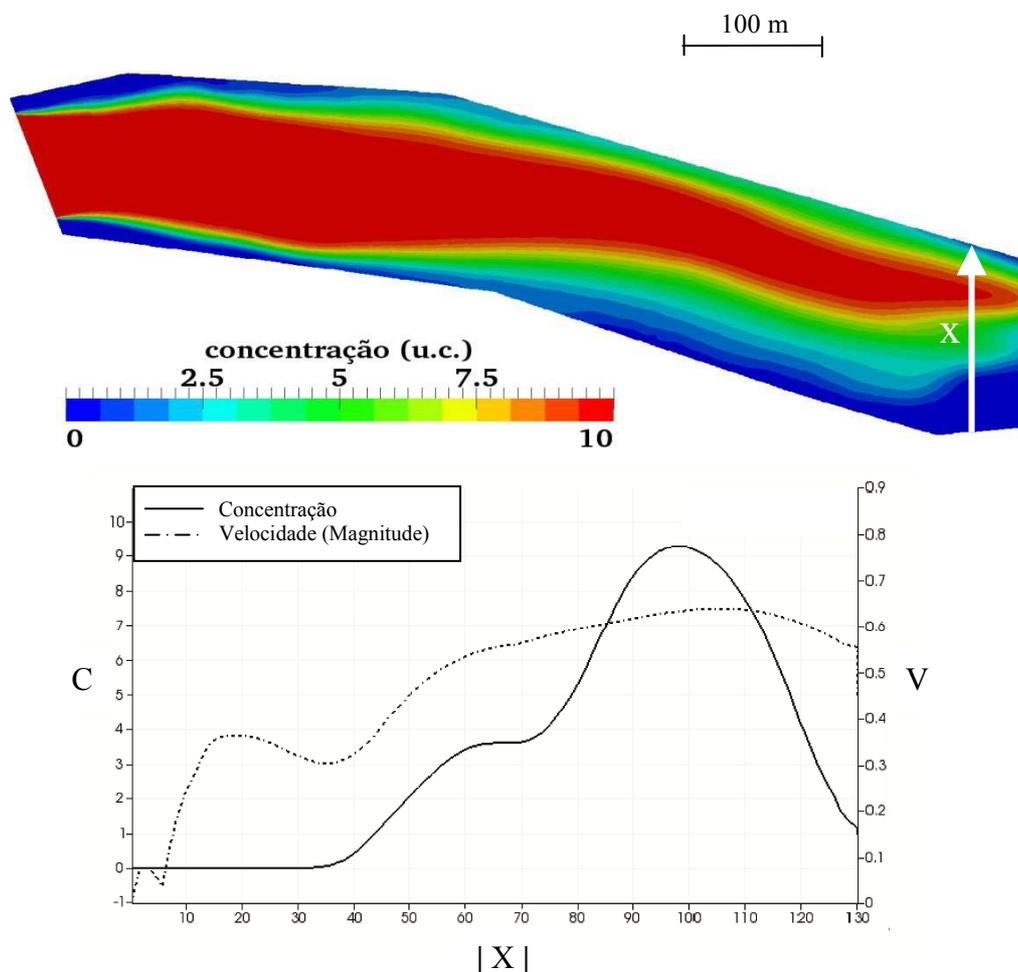
A concentração da substância apresenta evidente efeito do transporte advectivo-difusivo após 1 hora e 23 minutos da simulação da chegada da concentração no contorno de entrada do modelo, como pode ser visto na Figura 7.16. Nota-se que a concentração apresenta valor mais elevado na área localizada mais próxima da margem norte do modelo. Isto é devido ao fato do fluxo próximo à margem sul sofrer um deslocamento na direção da linha central do canal graças à curvatura do modelo. As velocidades próximas a esta borda sofrem uma queda, passando a exibir valores baixos, praticamente nulo, para seu módulo, como mostrado na Figura 7.12. Entretanto, devido ao efeito difusivo, percebe-se a presença da concentração correspondente a 0,1 u.c. nesta região de baixa velocidade. A comparação da concentração com a velocidade sobre o vetor  $X$  mostra que a zona próxima à margem sul do modelo apresenta menor magnitude para a velocidade e a concentração além de sofrer um deslocamento para a região mais ao centro do modelo, também sofre a diminuição na sua amplitude nesta

região, quando comparada à Figura 7.15, passando de valores acima de 8 u.c. para aproximadamente 6 u.c. Na região mais central da curva de velocidade nota-se que ela apresenta um valor médio de aproximadamente 0,5 m/s.



**Figura 7.16** - Comportamento da distribuição da substância após 83 minutos.

A Figura 1.17 apresenta a distribuição da concentração após a simulação do transporte da substância em um intervalo de tempo pouco maior que 2 horas.



**Figura 7.17** - Distribuição da concentração após a simulação de 127 minutos de transporte da substância.

Nota-se que o campo de velocidade apresenta valores mais elevados, aproximadamente iguais a 0,65 m/s, próximo à margem norte à jusante do modelo, diminuindo até anular-se a aproximadamente 8 m da borda sul. Este efeito pode ser entendido devido à curvatura do rio. Porém, a presença de valores negativos para a velocidade, deve-se ao fato da simulação hidrodinâmica ter produzido uma área muito pequena de recirculação entre a margem sul e o contorno do modelo. Com isso, o campo escalar tem a tendência de apresentar valores maiores próximo da margem norte à jusante do modelo, diminuindo progressivamente em direção da margem sul até anular-se completamente a 35 m desta, no instante indicado. Além disso, pode-se notar que parte da substância foi conduzida para fora do modelo, uma vez que as concentrações menores que 6 u.c. já não estão presentes na área entre a margem norte e o contorno de saída.

É importante enfatizar que não foram observadas oscilações numéricas, diferentemente do transporte por advecção pura, apesar do fenômeno ser claramente dominado pelo transporte advectivo. Isto é devido à presença do processo difusivo, o qual produz a suavização dos gradientes entre as concentrações máxima e mínima.

Com relação ao processamento da simulação, teve-se que o tempo de total de processamento, para este teste, foi de aproximadamente 1,5 h em um PC com processador Core 2 Quad e 4Gb de memória RAM.

As análises destes resultados mostram que o método  $\theta$ /SUPG, em especial com o método de Crank-Nicolson ( $\theta = 1/2$ ), pode ser aplicado em problemas de transporte advectivo-difusivo transiente em modelos mais sofisticados, tanto com relação à malha quanto ao campo de velocidade. Assim, pode-se advogar a favor da aplicação deste método numérico na simulação de fenômenos de transporte em meios hídricos.

No teste a seguir será utilizado um modelo mais realista, o qual possui domínio geometricamente complexo, dados de concentração com variação temporal nos locais de injeção, bem como a inclusão do processo de reação para o fósforo.

## **7.3 – DISPERSÃO DE FÓSFORO NO LAGO ÁGUA PRETA**

### **7.3.1 - Apresentação do problema**

Belém, capital do Estado do Pará, está localizada a 1°30' de latitude sul e 48°30' de longitude oeste de GWR, na área de encontro entre a Baía de Guajará e o Rio Guamá no vértice do estuário guajarinense, o qual é formado pela confluência dos rios Pará, Acará e Guamá.

A região metropolitana de Belém (RMB) é constituída pelos municípios de Belém, Ananindeua, Marituba, Santa Bárbara e Benevides com uma área total de 1.819 km<sup>2</sup>. Segundo o censo 2010 divulgado pelo Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), nesta região residem cerca de 2.197.807 pessoas, o que corresponde à cerca de 30% da população do estado do Pará.

O complexo hidrológico de abastecimento da RMB é composto pelo rio Guamá, juntamente com os lagos Água Preta e Bolonha. A Figura 7.18 mostra que este sistema de abastecimento começa com a captação de água do rio Guamá para a manutenção dos níveis dos lagos. Através de adutoras, estas águas são então despejadas no lago Água Preta, que por sua vez são levadas para o lago Bolonha por meio de um canal artificial e depois conduzidas para a Estação de Tratamento de Água (ETA) Bolonha, a qual posteriormente é distribuída para a RMB.



**Figura 7.18** - Complexo hídrico de abastecimento da região metropolitana de Belém.  
Fonte: Adaptado do Google Earth (2012).

O lago Água Preta é considerado o principal lago que serve como fonte de abastecimento da RMB (SILVA, 2010). Ele é formado pelas bacias dos igarapés Catu e Água Preta e possui três nascentes, tem uma área de superfície livre de aproximadamente  $3.116.868 \text{ m}^2$  e um volume estimado em  $10.550.000 \text{ m}^3$  com uma profundidade máxima de aproximadamente 8,5 m. O controle de saída de suas águas para o lago Bolonha através do canal de ligação, é feito por gravidade com um sistema de comportas.

O lago Bolonha apresenta um volume avaliado em aproximadamente  $2.100.000 \text{ m}^3$  em  $512.540 \text{ m}^2$  de lâmina de água com profundidade máxima estimada em 7,64 m. Segundo SILVA (2010) além da água importada do lago Água Preta, este lago possui duas nascentes, uma das quais se encontra em área totalmente ocupada por residências, o que gera, direta ou indiretamente, a degradação de suas águas devido ao lançamento de esgotos domésticos no próprio manancial.

VASCONCELOS e SOUZA (2011) apontam que os resíduos produzidos na região metropolitana de Belém são despejados, sem tratamento, diretamente na baía do

Guajar e no rio Guam, que por sua vez, tem suas guas transportadas para o manancial do Utinga. Alm disso, a populao residente nos arredores deste manancial tambm contribui diretamente para o aumento da poluio de suas guas, uma vez que ela, no possuindo saneamento bsico, passa a despejar seus esgotos diretamente nas guas represadas nestes lagos (HOLANDA *et al.*, 2011). Entretanto, como observado anteriormente, devido ao Bolonha possuir uma de suas nascentes em uma regio j densamente habitada alm de receber, indiretamente, as guas do rio Guam,  o que mais apresenta o problema de eutrofizao, como pode ser visto na Figura 7.19, que mostra como a regio dentro do contorno do lago apresenta-se quase completamente tomada pela vegetao aqutica. A regio escura representa a rea do lago livre desta vegetao.

O lago gua Preta no est isento do problema de eutrofizao, apesar de apresentar uma grande rea livre de vegetao aqutica,  possvel visualizar algumas extenses em suas margens em que elas esto presentes, principalmente, no brao esquerdo do lago, provavelmente devido  proximidade de regies habitadas, como mostrado na Figura 7.20. Nesta figura tambm pode-se ver as localizaes da entrada e da sada de gua neste lago, vindo do rio Guam e indo para o lago Bolonha, respectivamente.



**Figura 7.19** - Detalhe do lago Bolonha. Fonte: Adaptado de Google Earth (2012)



**Figura 7.20** - Detalhe do lago Água Preta. Fonte: Adaptado de Google Earth (2012)

Devido a grande importância do manancial do Utinga para o abastecimento de água para a RMB, vários trabalhos foram publicados com objetivos de avaliar características variadas destes lagos, entre os mais recentes, podemos citar:

SODRÉ (2007) que coletou amostragens das águas superficiais e de fundo nos lagos Bolonha e Água Preta para o estudo de parâmetros abióticos e compará-los com a sazonalidade e hidrologia dos lagos. Dentre as variáveis hidrológicas estudadas, estão as vazões nas entradas e saídas dos lagos, a precipitação pluviométrica e a variação nos níveis e volumes de água. O estudo concluiu que os lagos apresentaram certa capacidade de assimilação das cargas orgânicas presentes e que, caso a captação das águas do rio Guamá fosse interrompida e mantido o consumo, o tempo de sobrevivência dos lagos seria de 2,7 dias.

SILVA (2010) fez o monitoramento da qualidade das águas com base em dados abióticos e bióticos, através de coletas pontuais ao longo do sistema de captação da COSANPA, no período de um ano, para diagnosticar a situação das características desse ecossistema. A pesquisa apontou que, apesar dos fortes impactos ambientais a que estes meios estão submetidos, foi observado que eles mantêm sua capacidade de autodepuração e renovação.

HOLANDA (2010) realizou a modelagem hidrodinâmica e o estudo morfológico do lago Água Preta, com base na comparação de dados batimétricos históricos do lago. A análise dos resultados obtidos, mostrou que a área próxima a entrada da água transportada do rio Guamá sofreu assoreamento a uma taxa de 6 cm/ano. Por outro lado, a média de assoreamento para todo o lago, no período analisado, foi de 8 mm/ano. Com base nestes dados o estudo concluiu que a vida útil do Água Preta é de aproximadamente 318 anos, a partir do ano 2009, mantendo-se a mesma taxa de sedimentação, consumo de água e bombeamento.

O presente exemplo pretende simular a dispersão do fósforo, dentro do lago Água Preta, trazido pelas águas do rio Guamá, assim como por uma fonte hipotética localizada em uma posição fictícia, utilizando a simulação hidrodinâmica produzida por HOLANDA (2010) como base e com referência nos dados pontuais divulgados em SILVA (2010).

### 7.3.2 - Dados experimentais disponíveis

Para a simulação computacional deste problema foram utilizados grupos de dados coletados no local ou na região onde o lago Água Preta está localizado. O primeiro destes grupos de dados é referente à variação pluviométrica da região, a qual é a principal responsável pela dinâmica do lago, uma vez que ela determina a necessidade do aumento ou diminuição do volume de águas bombeadas do rio Guamá, assim como a variação da concentração dos poluentes provenientes de fontes externas.

A Tabela 7.3 mostra a média pluviométrica, bem como o acumulado, para os meses de novembro de 2008 a outubro de 2009. Estas informações também podem ser visualizados na Figura 7.21, as quais mostram que o mês de novembro de 2008 teve um acumulado pouco acima da média. Entretanto, no período de dezembro de 2008 a fevereiro de 2009 os valores acumulados ficaram abaixo das médias registradas, voltando a se tornarem maiores entre março e julho de 2009. No trimestre final do período analisado (agosto a outubro de 2009) os dados mostram que o acumulado ficou abaixo da média mensal para estes meses.

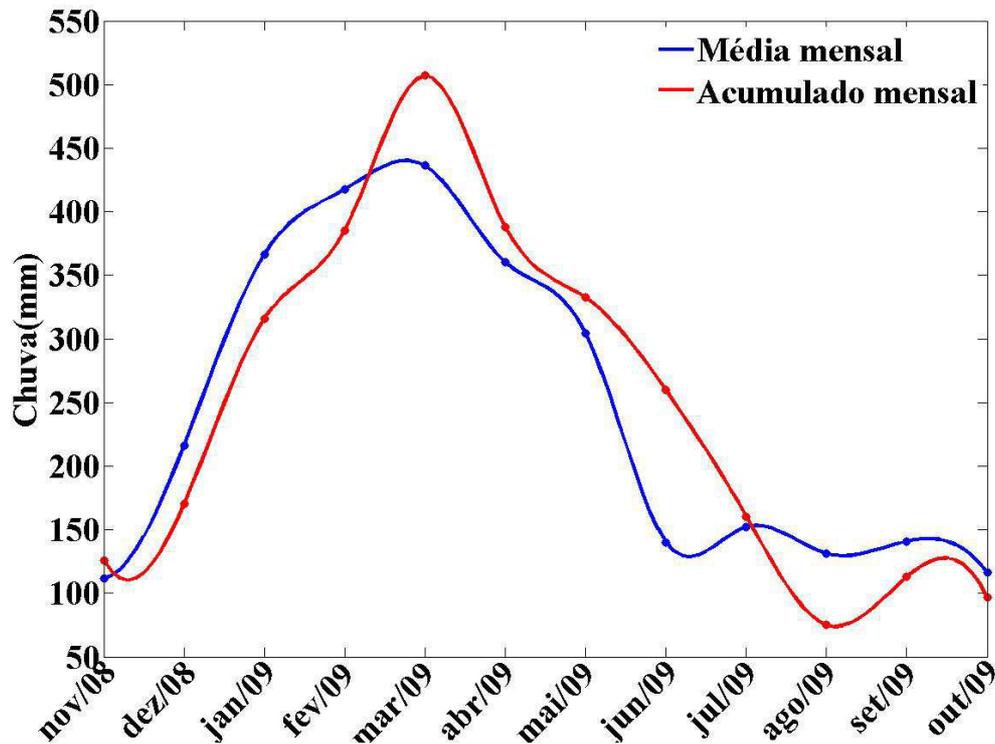
**Tabela 7.3** - Médias mensais e acumuladas, em milímetros, da pluviometria da região do lago Água Preta para o período de novembro de 2008 a outubro de 2009. Fonte:

SECTAM - EMBRAPA

	<b>MÉDIA (mm)</b>	<b>ACUMULADO (mm)</b>
NOV - 2008	111,8	125,5
DEZ - 2008	216,4	170,1
JAN - 2009	366,5	316,1
FEV - 2009	417,5	385,2
MAR - 2009	436,2	506,9
ABR - 2009	360	387,9
MAI - 2009	304,1	332,5
JUN - 2009	140,2	259,6
JUL - 2009	152,1	160,4
AGO - 2009	131,1	75

**Tabela 7.4 - Continuação**

	<b>MÉDIA (mm)</b>	<b>ACUMULADO (mm)</b>
SET - 2009	140,8	112,8
OUT - 2009	116,1	96,8



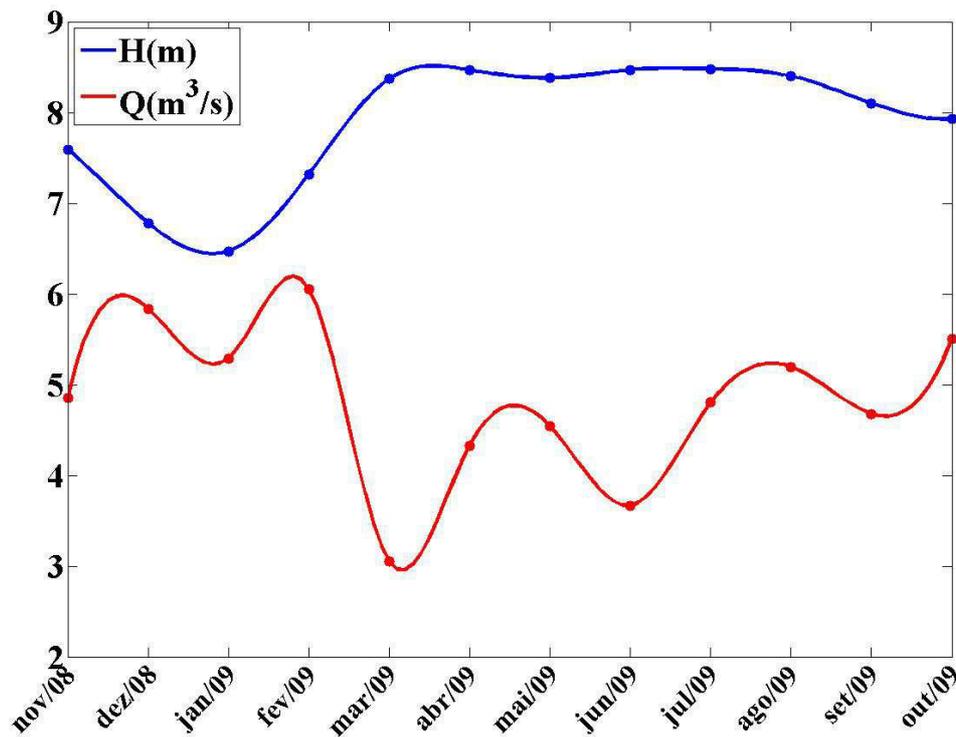
**Figura 7.21** - Curvas da média mensal e do acumulado para a precipitação pluviométrica para os dados apresentados na Tabela 7.3.

O segundo conjunto de dados utilizados reporta-se às variáveis hidrológicas do lago Água Preta, altura da lâmina de água e a vazão de bombeamento da água do rio Guamá para o lago, como mostrado na Tabela 7.4. A Figura 7.22 expõe estes dados na forma gráfica. Nota-se a importância da precipitação pluviométrica nestas variáveis, uma vez que para os meses com pluviosidade mais baixas tornou-se necessário o aumento da vazão de bombeamento das águas do Guamá para a manutenção do nível da coluna de água. Isto é percebido, principalmente, nos quatro primeiros e nos três últimos meses da coleta, os quais indicaram precipitação abaixo da média para estes períodos, com isso, registraram-se os maiores valores para vazão. Por outro lado, o período compreendido entre março e julho de 2009 mostra pluviosidade acima da

média, destacadamente nos meses de março e junho, os quais mostram redução acentuada da vazão. Entretanto, este período marca a passagem da estação chuvosa para a estação seca, sendo assim, há um crescimento paulatino da vazão bombeada, desde o valor mínimo de 3,052 m<sup>3</sup>/s até atingir novamente valores mais elevados.

**Tabela 7.5** - Médias mensais da altura da lâmina de água e vazão bombeada para o lago Água Preta. Fonte: COSANPA

	<b>ALTURA (m)</b>	<b>VAZÃO (m<sup>3</sup>/s)</b>
NOV - 2008	7,59	4,854
DEZ - 2008	6,78	5,836
JAN - 2009	6,47	5,291
FEV - 2009	7,32	6,054
MAR - 2009	8,37	3,052
ABR - 2009	8,47	4,330
MAI - 2009	8,38	4,543
JUN - 2009	8,47	3,669
JUL - 2009	8,48	4,803
AGO - 2009	8,40	5,196
SET - 2009	8,10	4,679
OUT - 2009	7,93	5,506

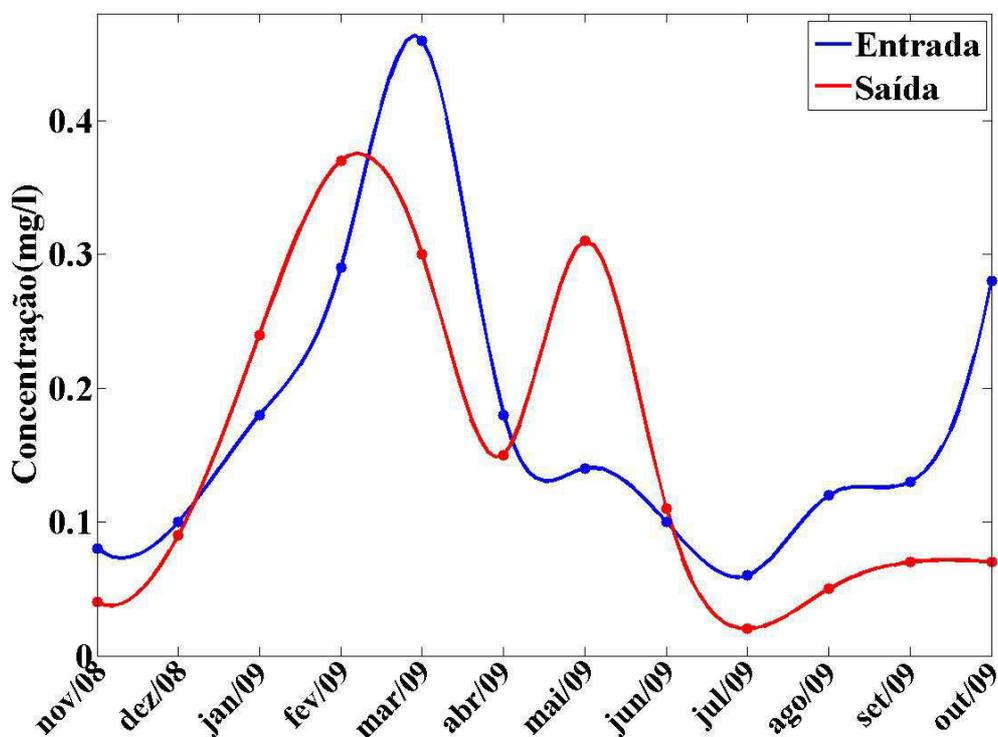


**Figura 7.22** - Altura da lâmina de água do lago (H) e vazão de bombeamento da água do Rio Guamá (Q).

A terceira família de dados relata a concentração de fósforo total em dois pontos do lago, um localizado na saída da canalização da água bombeada do rio Guamá (entrada do modelo) e outro situado na entrada do canal que transporta a água para o lago Bolonha (saída do modelo), como indicado na Figura 7.20. As amostras foram coletadas em um único dia a cada mês, no período de novembro de 2008 a outubro de 2009. As informações coletadas nestes pontos estão apresentadas na Tabela 7.5 e também podem ser visualizadas graficamente na Figura 7.23.

**Tabela 7.6** - Dados de concentração de fósforo total (em mg/L) coletados na adutora de entrada e no canal de saída das águas do lago Água preta. Fonte: SILVA (2010)

	<b>ENTRADA</b>	<b>SAÍDA</b>
NOV - 2008	0,08	0,04
DEZ - 2008	0,10	0,09
JAN - 2009	0,18	0,24
FEV - 2009	0,29	0,37
MAR - 2009	0,46	0,3
ABR - 2009	0,18	0,15
MAI - 2009	0,14	0,31
JUN - 2009	0,10	0,11
JUL - 2009	0,06	0,02
AGO - 2009	0,12	0,05
SET - 2009	0,13	0,07
OUT - 2009	0,28	0,07



**Figura 7.23** - Representação gráfica dos valores de concentração do fósforo total (mg/L) mostrados na Tabela 7.5.

É possível constatar a influência da vazão de água bombeada do rio Guamá nos dados de concentração de fósforo total registrados na entrada do lago Água Preta, pois a comparação destes dois conjuntos de informações indicam os mesmos comportamentos, por exemplo, entre os meses de novembro de 2008 a fevereiro de 2009, houve o aumento na admissão de água do rio, passando de aproximadamente 5 m<sup>3</sup>/s para 6 m<sup>3</sup>/s, com a concentração seguindo a mesma tendência, subindo de 0,08 mg/L para 0,29 mg/L. Posteriormente, devido ao período mais chuvoso, houve uma diminuição na injeção de água no lago, que nos quatro primeiros meses tabelados passou de uma média de 5,5 m<sup>3</sup>/s para pouco mais de 4,0 m<sup>3</sup>/s, entre os meses de março e julho de 2009, a concentração média apresentou declínio de 0,65 mg/L para 0,188 mg/L, e atingiu seu valor mais baixo (0,06 mg/L). Em seguida, no trimestre final da coleta dos dados, a vazão tornou a se elevar, subindo para uma média de 5,127 m<sup>3</sup>/s, e a concentração apresentou a mesma tendência de crescimento neste período, entretanto sua média foi de 0,177 mg/L, devido aos baixos valores anotados neste período quando comparado ao quadrimestre anterior.

Com relação aos dados obtidos na saída do modelo, nota-se a presença de valores de concentrações maiores que na entrada nos meses de janeiro, fevereiro, maio e junho de 2009, com a maior diferença entre as concentrações à montante e à jusante, que ocorreu no mês de maio, sendo igual a 0,17 mg/L. Este comportamento indica a existência de fontes variáveis no tempo e, possivelmente, também no espaço, que podem ser do tipo não reativas, como emissários de esgotos, ou reativas, como por exemplo reações bioquímicas dentro do lago, ou mesmo ambas.

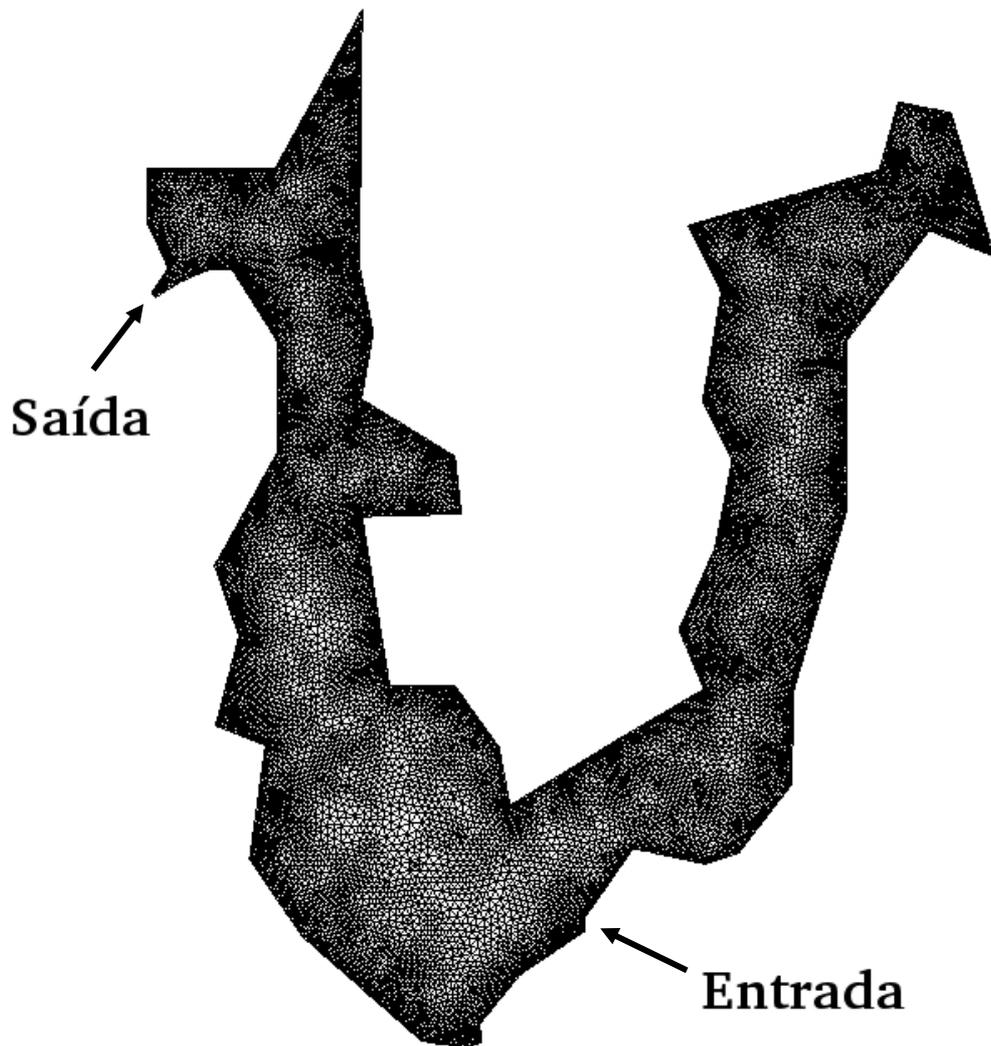
### **7.3.3 - Modelagem do problema**

#### ***Modelos Hidrodinâmicos***

Como indicado anteriormente, a dinâmica das águas dentro do lago sofre grande influência da precipitação pluviométrica da região em que ele se encontra, modificando assim, tanto a altura da sua superfície livre quanto o volume de água que deve ser bombeado do rio Guamá. Para se construir a simulação desta dinâmica, utilizou-se o pacote *Modeleur/Hydrosim*, empregando-se as médias mensais da altura e da vazão na adutora que traz a água do rio, compreendendo o período de novembro de 2008 a outubro de 2009, como mostrado na Tabela 7.4, e assim geraram-se os campos de

velocidade os quais foram utilizados como dados de entrada no programa de simulação de transporte de massa, bem como para a malha de elementos finitos produzida com o uso do modelador de terreno *Modeleur*. Para a determinação da malha a ser utilizada foi feita a análise de convergência com malhas que apresentavam o maior valor para aresta entre os elementos triangulares igual a 15m, 10m, 8m e 5m, obtendo-se a melhor opção entre custo computacional (com tempo de processamento de aproximadamente 13 horas e 47 minutos em um PC AMD Duron 1.26 GHz) e o erro no balanço de massa entre a entrada e a saída do domínio (na ordem de 0,009%) para a malha de 8m (HOLANDA, 2010), a qual está apresentada na Figura 7.24.

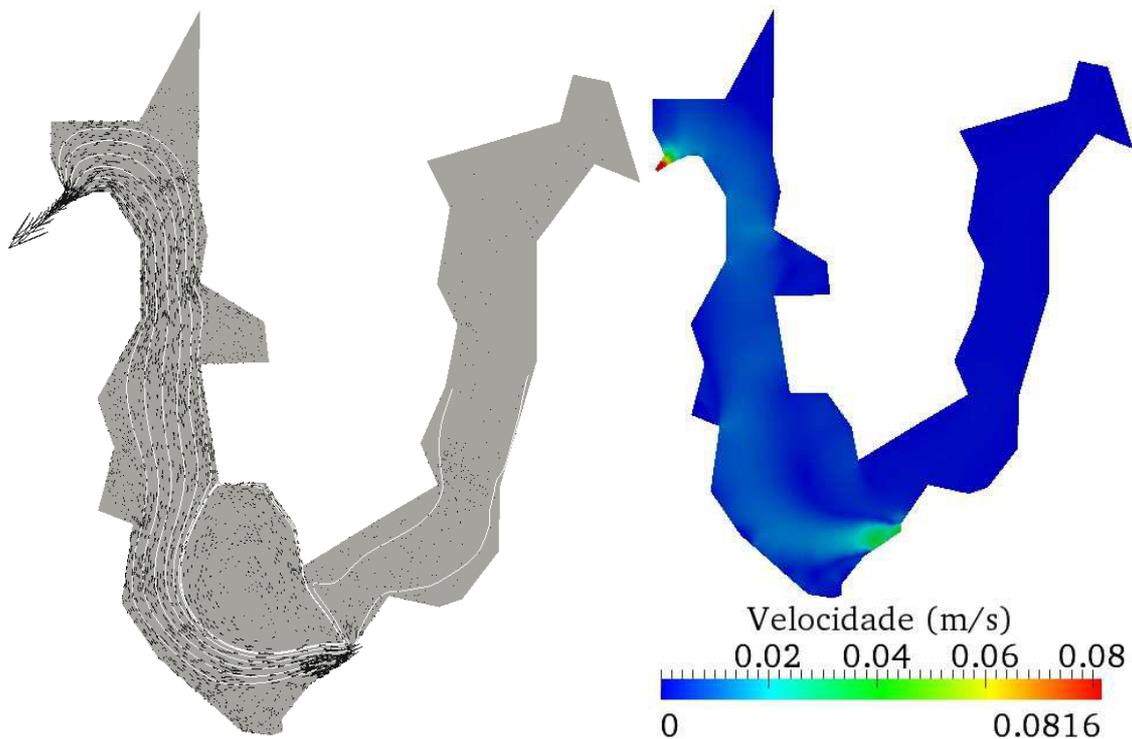
Utilizando esta malha foram gerados 12 campos de velocidades, um para cada par de dados referentes a um determinado mês da Tabela 7.4, cada um destes campos foi considerado invariável para o período de simulação de 30 dias, desta forma, a simulação do transporte pode ser considerada "semi-instacionária", quando considerado todo o período da modelagem.



**Figura 7.24** - Malha hidrodinâmica do Lago Água Preta gerada no *Modeleur*.

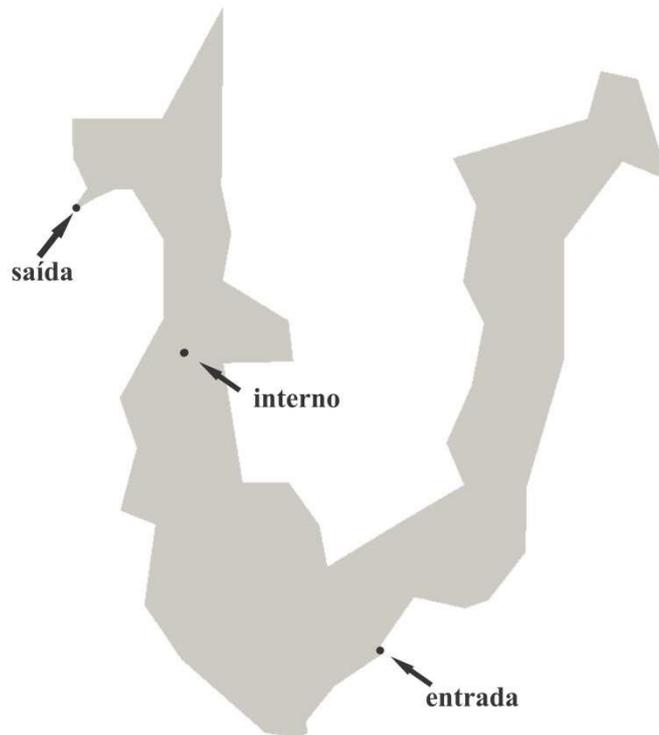
Os campos de velocidade simulados apresentam um pequeno intervalo entre seus valores máximos e mínimos, com o módulo da velocidade apresentando seus maiores valores na entrada e na saída do modelo, como mostrado na Figura 7.25, a qual mostra o modelo utilizado no início da simulação, obtido com os dados de vazão e altura da lâmina de água para o mês de novembro de 2008. Nesse caso, a velocidade na entrada do modelo é aproximadamente igual a 0,031 m/s, enquanto que na saída este valor é pouco inferior a 0,24 m/s. Além disso, o modelo apresenta um fluxo com velocidade média de aproximadamente 0,01 m/s, na porção ocidental do modelo, além de uma grande área onde há recirculação, localizada próxima ao contorno de admissão das águas do rio Guamá. Na imagem à esquerda da referida figura, as curvas claras dentro do campo de velocidade, correspondem a linhas de corrente para o escoamento. Por

outro lado, a porção oriental do modelo possui velocidades muito baixas, aproximadamente nulas.



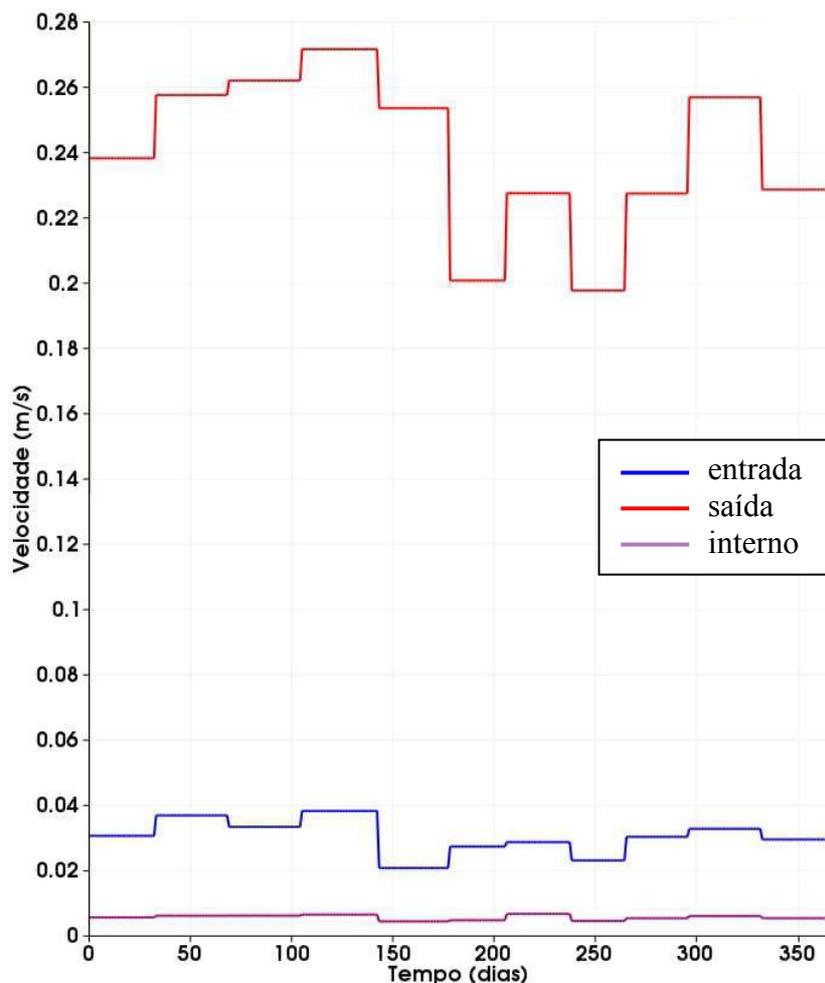
**Figura 7.15** - Campo de velocidade gerado pelo simulador hidrodinâmico Hydrosim, à esquerda, e seu módulo.

Devido à dinâmica do lago ser muito pequena, não há sensíveis mudanças entre os campos de velocidades. A Figura 7.26 mostra a localização de três pontos selecionados para a análise do comportamento da velocidade dentro do domínio, o primeiro deles está sobre o contorno de entrada, o segundo ponto está localizado internamente ao lago na região do fluxo entre a montante e a jusante e o último ponto está situado sobre o contorno de saída.



**Figura 7.26** - Localização dos pontos de amostragem para análise do campo de velocidade.

As curvas mostradas na Figura 7.27 representam os módulos da velocidade tomados nos pontos indicados pela Figura 7.26. Cada patamar nestas curvas representa um campo de velocidade, iniciando a partir do mês de novembro de 2008 (dia zero no eixo dos tempos). Como explicitado anteriormente, cada campo de velocidade permaneceu inalterado no período de 30 dias. É possível notar que a velocidade na saída da adutora possui pequenas variações ao longo da simulação hidrodinâmica entre meses consecutivos, tendo a maior diferença entre os valores máximo e mínimo igual a 0,02 m/s entre os meses de fevereiro e março de 2009 (140 dias). A saída do modelo é o local que apresenta as maiores variações de velocidade entre meses adjacentes, sendo a diferença mais acentuada entre os meses de março e abril de 2009, quando a velocidade passou de aproximadamente 0,26 m/s para 0,2 m/s. Porém a velocidade máxima obtida foi de 0,27 m/s para o mês de fevereiro de 2009, e a mínima, pouco abaixo de 0,2 m/s, para o mês de junho de 2009. Com relação à velocidade no ponto interno ao modelo, tem-se uma média de 0,006 m/s, com a maior variação no seu módulo de 0,0032 m/s, entre os meses de março e maio de 2009.



**Figura 7.27** - Módulo da velocidade nos três pontos de amostragem ao longo do tempo de simulação.

### *Simulação do Transporte de Fósforo Total*

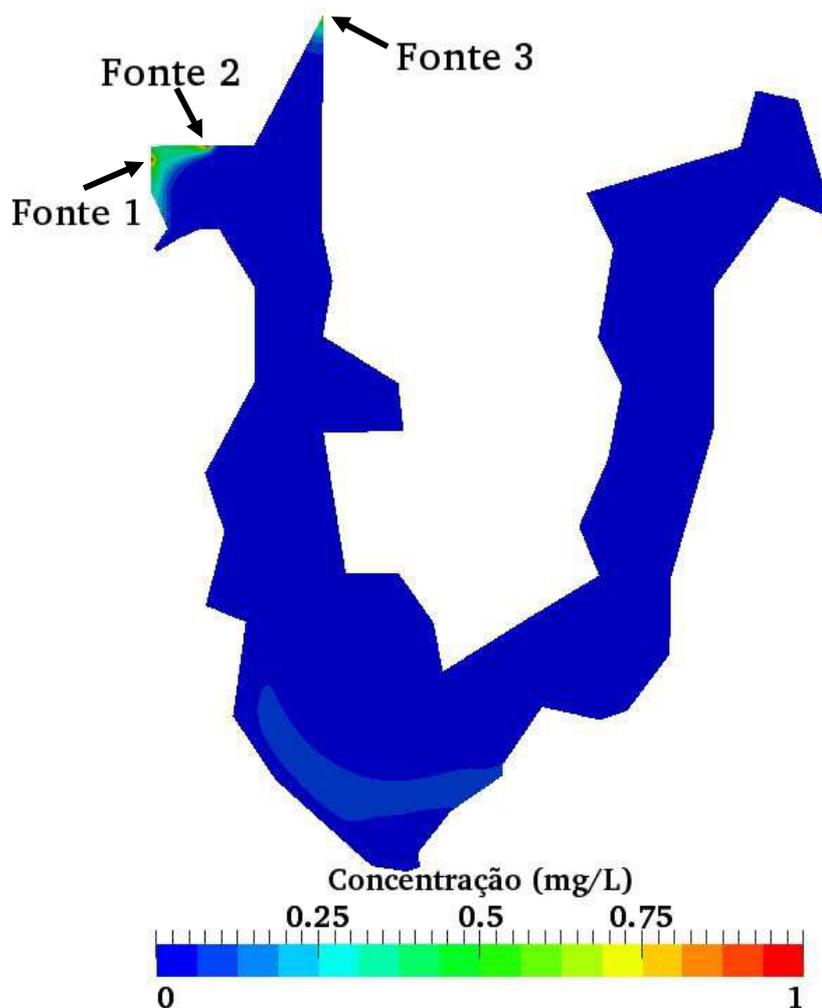
Antes de se inicializar a descrição e a análise dos resultados obtidos na simulação a seguir, torna-se necessário salientar que devido a falta de dados fundamentais para a simulação dos modelos matemáticos de representação do ciclo do fósforo propriamente dito, utilizou-se um modelo simples, conforme descrito no Capítulo 5, e os dados de fósforo total conforme apresentado anteriormente. A escolha deste elemento deve-se à sua grande importância no processo de eutrofização, tornando-se assim alvo de análise para a compreensão deste processo no lago Água Preta.

Para a simulação do transporte do fósforo total, oriundo das águas do rio Guamá, os dados na entrada do modelo foram utilizados como condição de contorno durante a evolução temporal. Além desta, foram inseridas três fontes pontuais, as quais

representam descarga de resíduos, provenientes de esgotos domésticos, conforme indicado na Figura 7.28. As localizações aproximadas destas fontes foram obtidas por excursões ao local e suas variações de concentração tiveram como base a distribuição pluviométrica, uma vez que estas variáveis estão correlacionadas, e estão apresentadas na Tabela 7.6. Para que estas informações fossem utilizadas a cada passo de tempo, de forma consistente, tanto a condição de contorno quanto as fontes foram interpoladas utilizando-se o método *cubic spline* durante o processamento.

**Tabela 7.7** – Variação temporal das concentrações nas fontes pontuais ao longo do período analisado.

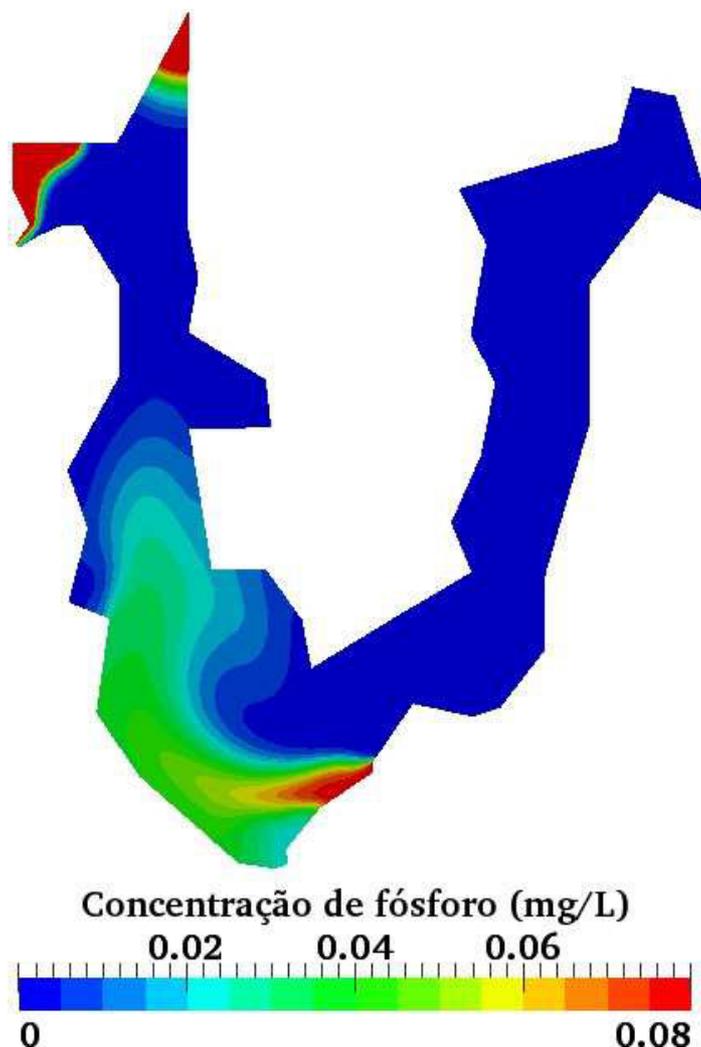
<b>C(mg/L)</b> <b>Período</b>	<b>Fonte 1</b>	<b>Fonte 2</b>	<b>Fonte 3</b>
NOV – 2008	2,164	1,701	1,712
DEZ – 2008	3,665	3,161	3,545
JAN – 2009	4,175	3,852	4,22
FEV – 2009	4,362	5,069	5,823
MAR – 2009	3,60	3,879	4,699
ABR – 2009	3,041	3,325	4,566
MAI – 2009	1,402	2,596	3,173
JUN – 2009	1,521	1,604	1,931
JUL – 2009	1,311	0,75	0,927
AGO – 2009	1,408	1,128	1,341
SET – 2009	1,161	0,968	1,423
OUT – 2009	1,118	1,255	1,352



**Figura 7.28** - Indicação das localizações das fontes pontuais, as quais representam emissários de esgotos não tratados.

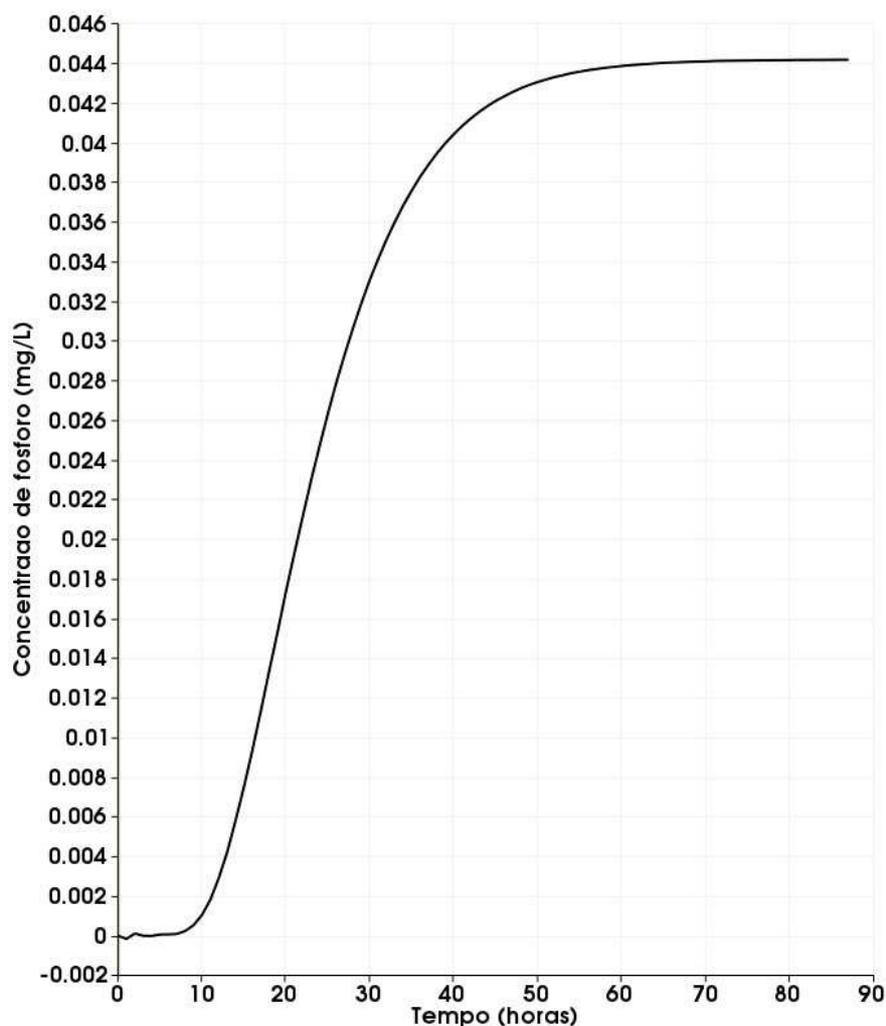
Como não havia dados referentes à distribuição do fósforo na área do lago no instante inicial das simulações, a condição inicial utilizada foi produzida pela simulação do transporte de fósforo para o campo de velocidade estacionário referente ao mês de novembro de 2008, com coeficiente de difusão igual a  $0,09 \text{ m}^2/\text{s}$ , concentração constante na entrada do modelo ( $0,08 \text{ mg/L}$ ) e também nas fontes ( $2,164 \text{ mg/L}$ ,  $1,701 \text{ mg/L}$  e  $1,712 \text{ mg/L}$ , respectivamente), em um intervalo de 87 horas, o que equivale a aproximadamente 3,5 dias. Além disso, adotou-se o valor de  $3 \cdot 10^{-6} \text{ dia}^{-1}$  para o coeficiente de reação e considerou-se o domínio inicialmente livre deste elemento, de tal forma que a concentração atingisse o estado estacionário na saída do modelo e os dados calculados na entrada e na saída fossem aproximados aos dados coletados, mostrados na primeira linha da Tabela 7.5, o qual resultou na distribuição apresentada

na Figura 7.29. É possível observar que neste cenário a concentração advinda do rio Guamá não possui influência na concentração de fósforo que abandona o lago, devido principalmente, ao efeito da componente reativa que impõe o seu consumo.



**Figura 7.29** - Condição da distribuição inicial do fósforo total.

A Figura 7.30 apresenta a curva de comportamento da concentração obtida em um ponto sobre o contorno de saída do modelo, em função do tempo, para a obtenção da condição inicial. Vê-se que nas primeiras 10 horas, aproximadamente, não há a presença de fósforo, uma vez que assumiu-se inicialmente que a concentração no modelo seria nula. Após o início da chegada do elemento no contorno à jusante, continuou-se a simulação até atingir o estado estacionário, obtendo-se, no final da simulação, o valor aproximado de 0,044 mg/L, sobre o ponto à jusante, gerando o modelo inicial mostrado na Figura 7.29.



**Figura 7.30** – Evolução temporal da concentração no contorno de saída do modelo, obtida na simulação para a obtenção da condição inicial.

### 7.3.4 - Resultados e discussões

A sequência de imagens apresentada na Figura 7.31 representa o resultado da simulação da distribuição do fósforo total dentro do lago Água Preta no período de novembro de 2008 a outubro de 2009. Os valores para os coeficientes de difusão e de reação são os mesmos adotados para a obtenção da condição inicial, ou seja,  $0,09 \text{ m}^2/\text{s}$  e  $3 \cdot 10^{-6} \text{ dia}^{-1}$ , respectivamente. Além disso, a escala adotada para a concentração varia de zero ao valor máximo coletado na saída do modelo, ou seja,  $0,38 \text{ mg/L}$ . Também, assumiu-se o intervalo de 30 dias entre as imagens consecutivas.

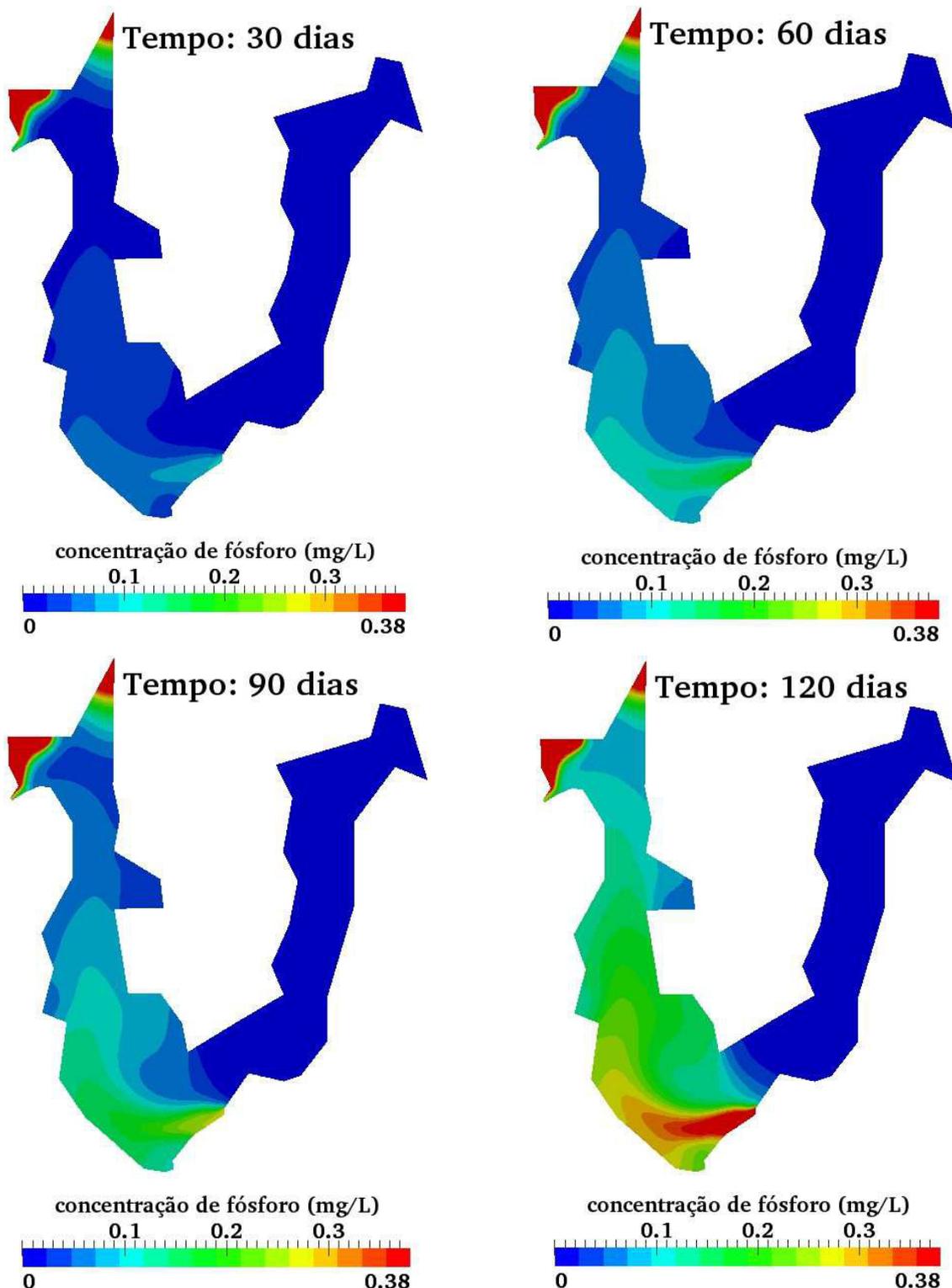
Nota-se nas imagens, que a principal origem do fósforo que sai do lago Água Preta em direção ao lago Bolonha são as fontes pontuais localizadas nas proximidades

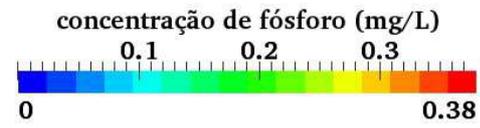
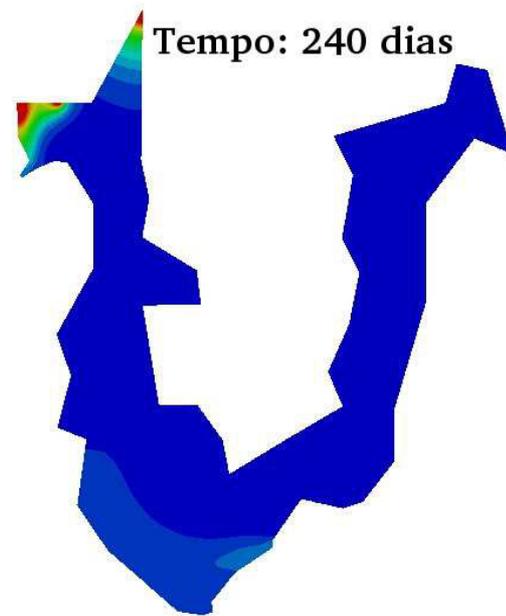
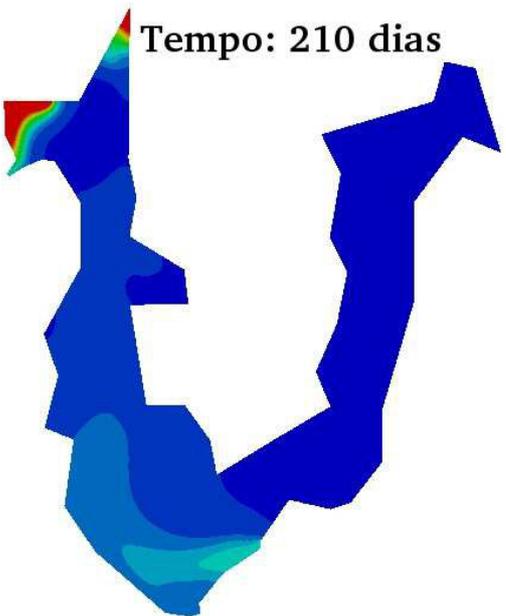
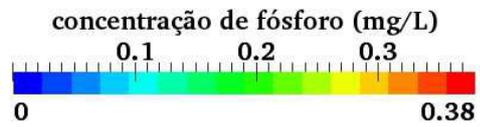
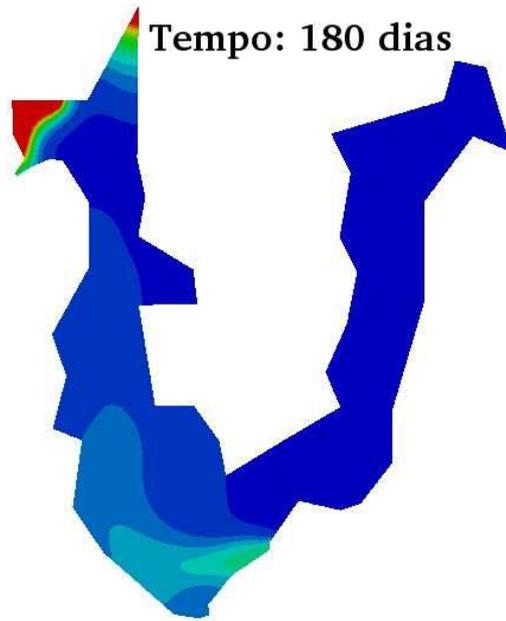
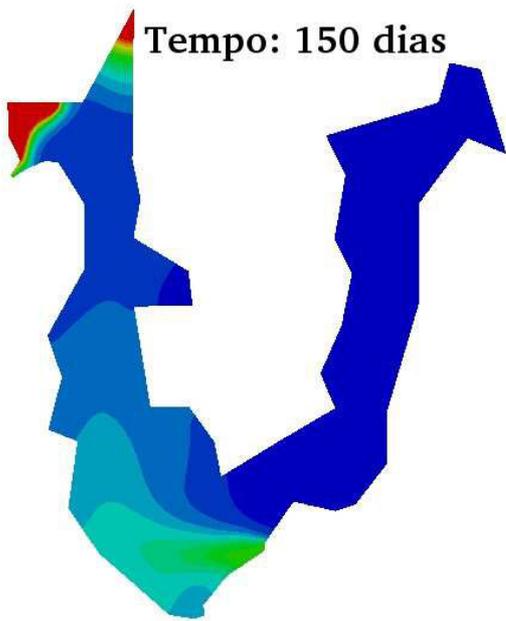
do canal de ligação entre os dois lagos, uma vez que, a maior parte da concentração decorrente do rio Guamá é consumida antes de atingir este canal. A maior contribuição do rio ocorre no mês de março de 2009 (120 dias), uma vez que, devido à maior incidência pluviométrica, ocorrem também os máximos valores para a concentração de fósforo transportada pelo rio, bem como para as velocidades dentro deste, ocasionando assim uma concentração maior que a capacidade de consumo pelas reações. Mesmo assim, esta contribuição é de 0,1 mg/L, o que corresponde, aproximadamente, a um terço do valor obtido na simulação para este mês.

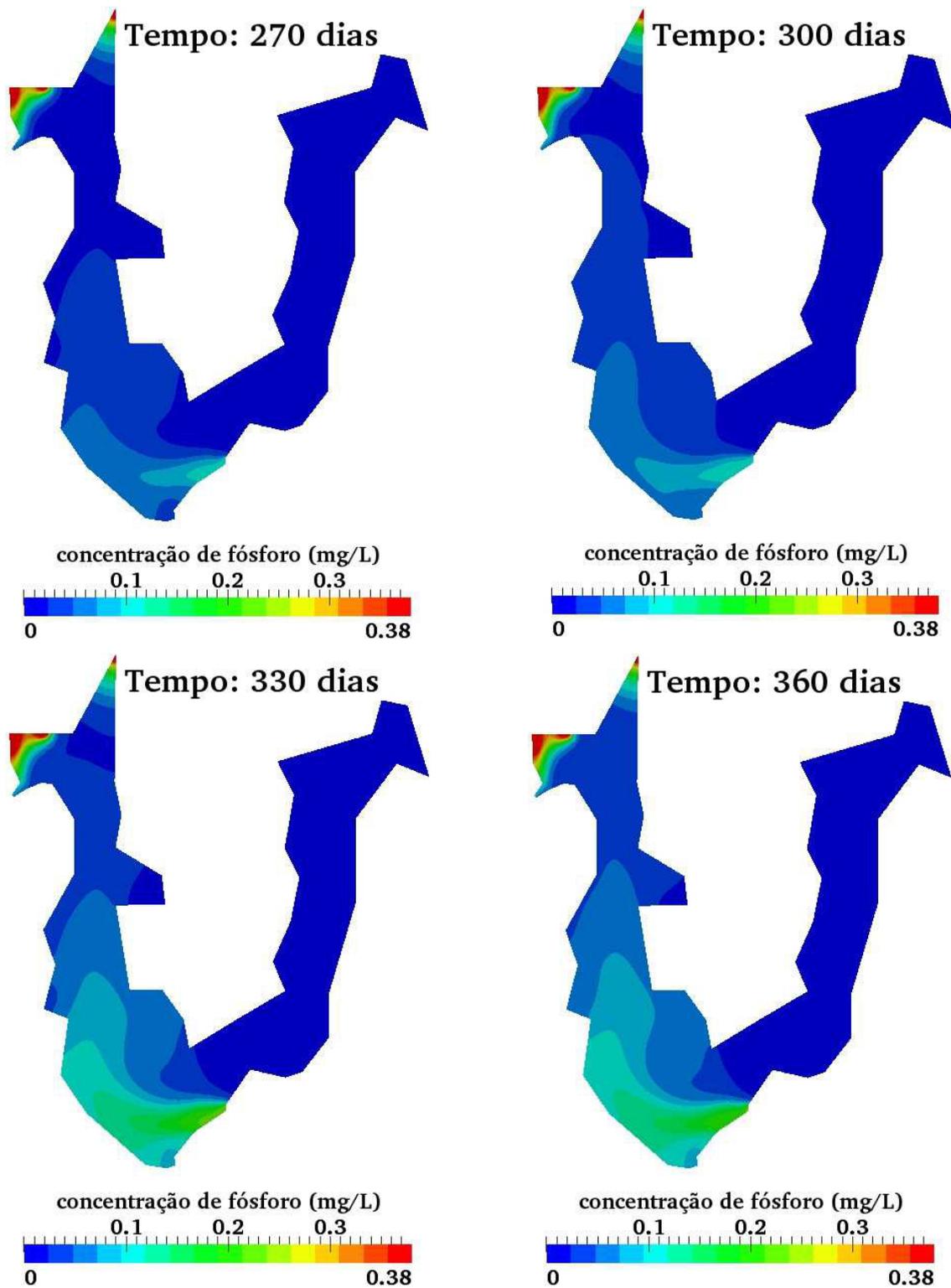
O efeito advectivo pode ser notado nesta sequência devido à presença de fósforo na porção oeste do modelo e na grande área de recirculação próximo à montante, onde as velocidades são maiores, o que causa o arraste deste elemento antes do seu consumo. Outra área onde a advecção pode ser observada é na proximidade da saída do modelo aonde há uma aceleração das águas desta região, ocasionando a condução da concentração proveniente das fontes 1 e 2 para o canal de ligação dos lagos. Por outro lado, o efeito difusivo é indicado pela propagação do fósforo em regiões onde as velocidades são mais baixas, como por exemplo, nas áreas vizinhas à correnteza que liga a entrada e a saída do modelo e, principalmente, na parte da porção leste próxima à entrada do lago. Também, deve-se ao efeito difusivo, a condução do fósforo proveniente da fonte 3, uma vez que o campo de velocidade na região onde ela está localizada é aproximadamente nulo, conforme pode-se ver na Figura 7.25.

A componente reativa, no modelo adotado, corresponde a todas as formas de consumo do fósforo total, desde sua interação com sedimentos e sua deposição devido à diminuição do módulo da velocidade, até seu aproveitamento pelos produtores primários. A taxa de reação, considerada constante, não reflete a realidade uma vez que este coeficiente varia em função da temperatura do ambiente, entretanto, é possível utilizá-lo como um valor médio para a análise do comportamento dos resultados da simulação. Sendo assim, como observado anteriormente, nota-se que grande parte do fósforo proveniente do rio Guamá é consumida antes de alcançar a jusante do modelo ao longo do período analisado, e sua menor contribuição ocorre no mês de junho de 2009 (240 dias), quando é observada a menor injeção de fósforo pelo rio. Além disso, é quando também ocorre o menor valor da concentração registrado na saída do modelo, uma vez que as fontes pontuais apresentam também os valores mínimos de injeção de fósforo, além deste também ser consumido antes de atingir o canal de ligação dos lagos.

A observação dos resultados da simulação indica que as áreas que apresentam os maiores índices de concentração deste elemento ao longo de todo o período e domínio modelado são devidas aos despejos de fósforo pelas fontes pontuais. A Figura 7.20 dá a indicação de que este resultado está correto, em termos qualitativos, uma vez que estas áreas apresentam-se cobertas por plantas aquáticas superficiais.





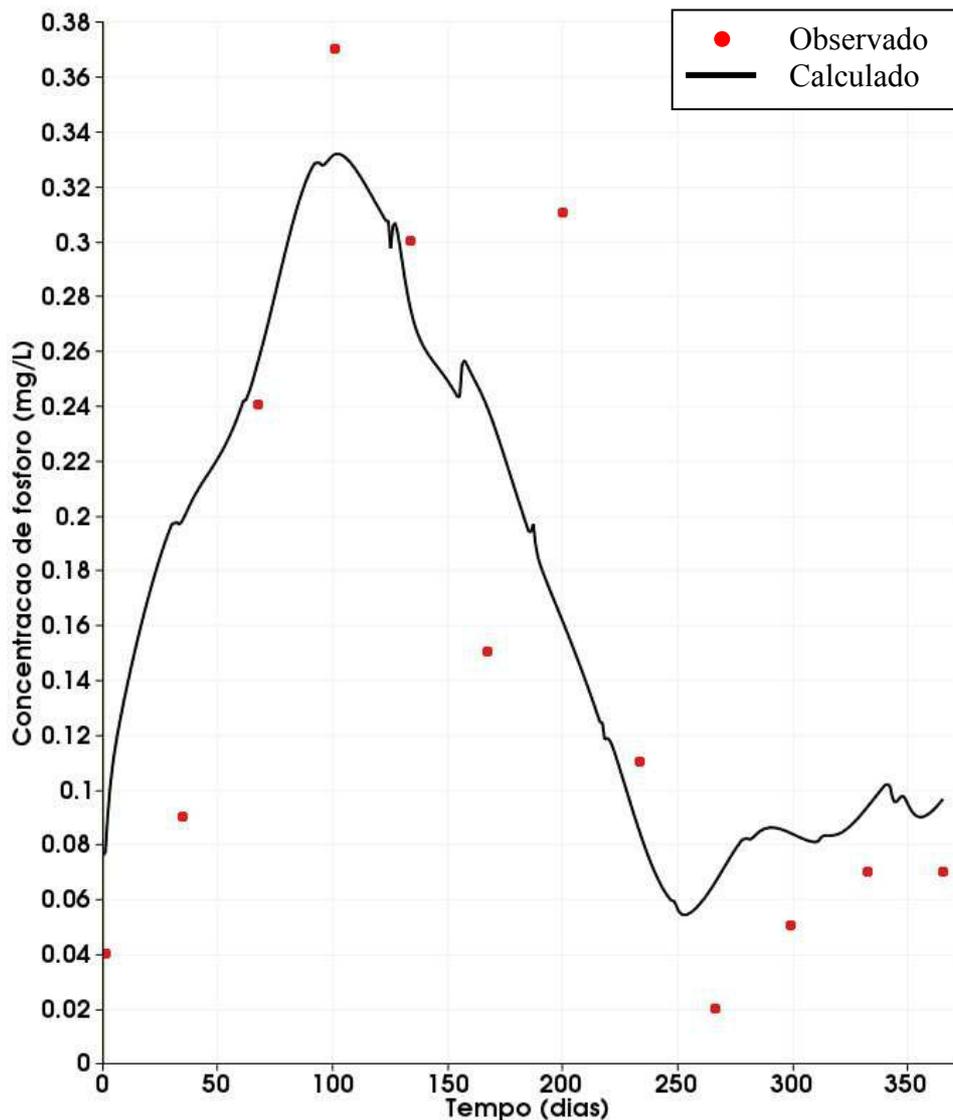


**Figura 7.31** - Evolução temporal da simulação do transporte de fósforo introduzido pelas águas do rio Guamá e por fontes pontuais.

A Figura 7.32 representa a comparação de dois conjuntos de dados de concentração do fósforo na saída do modelo, o primeiro deles, representado pelos

pontos, configuram as informações coletadas no local, enquanto que a curva relata o resultado da simulação computacional. Percebe-se que esta última apresenta descontinuidades que causam quebras da suavidade da curva, isto é causado pela passagem abrupta de um campo de velocidade para o posterior, assim sendo, os meses consecutivos que apresentam as menores diferenças entre seus módulos de velocidades no contorno de saída apresentam também transições menos acentuadas, como por exemplo, a passagem entre os meses de dezembro de 2008 e janeiro de 2009 (representado no eixo dos tempo por 60 dias). Apesar deste fato, nota-se que a curva acompanha a tendência dos dados, indicando que o modelo recupera as informações da concentração no local de avaliação. Contudo, esta mesma curva assinala a necessidade de mais elementos para a calibragem mais refinada deste resultado, como por exemplo, modelos mais aprimorados de produção e consumo das componentes do fósforo total dentro da área do lago, dados mais precisos sobre descargas pontuais, etc.

Com relação aos resultados obtidos, pode-se afirmar que as maiores diferenças obtidas entre estes conjuntos de dados estão nos meses de dezembro de 2008 (30 dias) e maio de 2009 (210 dias), este último deve-se ao valor fora da tendência nos dados coletados, que como assinalado anteriormente, pode corresponder uma variação anômala das fontes existentes no lago. Uma possível explicação para esse comportamento é o surgimento de uma fonte difusa dentro da área do lago, como por exemplo, a resuspensão do fósforo depositado no fundo ou a decomposição de matéria orgânica.



**Figura 7.32** - Comparação dos dados observados e calculados da concentração de fósforo ao longo do tempo em um ponto sobre o contorno de saída do modelo.

Apesar da exigência de maiores estudos com relação aos modelos matemáticos que descrevem o ciclo do fósforo, bem como a necessidade da coleta de dados específicos, pode-se argumentar que o modelo simplificado, aplicado neste teste, pode ser utilizado para uma análise qualitativa da dispersão deste elemento, bem como de outros poluentes, em condições reais, uma vez que nestes casos seus comportamentos diferem por seus coeficientes de difusão e de reação.

Uma simulação realística para o transporte de fósforo, bem como de outros elementos, exige a descrição de várias relações complexas entre os componentes do meio em que este elemento está sendo conduzido. Por outro lado, deve-se levar em

consideração o equilíbrio entre o custo computacional, o objetivo do estudo e os dados disponíveis. Assim sendo, os testes apresentados neste trabalho indicam que o método  $\theta$ /SUPG pode ser apropriado na solução numérica da equação de advecção-difusão-reação, a qual serve de base para o transporte de poluentes em meios aquáticos, com um custo computacional razoável. Entretanto, deve-se observar que a componente difusiva desta equação não seja aproximadamente nula, o que ocorre no transporte de poluentes considerados não newtonianos, como por exemplo o petróleo, nestes casos as soluções podem apresentar oscilações remanescentes.

## CAPÍTULO 8

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES

#### 8.1 - CONCLUSÕES

Este trabalho utilizou uma metodologia para a solução numérica e a simulação computacional da equação de advecção-difusão-reação, que é a base do modelo do transporte de poluentes, bem como de outros fenômenos de transporte em meios hidrodinâmicos. A solução consiste na aplicação do método SUPG de elementos finitos para a discretização espacial e um método generalizado de diferenças finitas, denominado de família  $\theta$ , para a integração da componente temporal da equação.

O procedimento apresentado teve seu desempenho avaliado através de testes com dados sintéticos. O primeiro destes testes foi o caso clássico de um transporte puramente advectivo em um campo rotacional com velocidade angular constante. Além disso, avaliou-se também sua aplicabilidade em casos mais próximos da realidade como o transporte de um poluente hipotético em um trecho de um rio que possui seu campo de velocidade invariável no tempo. O último experimento simulou a condução do fósforo total no lago Água Preta a partir de dados reais coletados entre os meses de novembro de 2008 a outubro de 2009. Nesta simulação os campos de velocidade foram gerados com informações sobre altura da lâmina de água e vazão na entrada do lago para cada mês do intervalo de tempo supracitado e todos os campos de velocidade foram considerados invariáveis no intervalo de tempo de 30 dias. A concentração de fósforo, por sua vez, teve medições feitas na entrada e na saída do lago. A partir daí, utilizando os dados à montante do modelo, juntamente com informações hipotéticas para fontes pontuais, simulou-se o transporte do fósforo até a jusante, aplicando-se uma taxa constante de consumo deste elemento dentro do modelo. O resultado obtido neste teste assinalou a necessidade de informações a priori mais precisas para uma análise quantitativa mais acurada do processo em questão. Porém, ele indicou que é possível obter uma avaliação qualitativa, mesmo nestas condições, uma vez que o método utilizado gerou resultados que recuperaram o comportamento dos dados reais e não introduziu anomalias espúrias, gerando, desta forma, soluções fisicamente coerentes.

Isto posto, pode-se argumentar que a metodologia adotada é suficientemente genérica, podendo ser aplicada em situações que possuem a equação de advecção-difusão como base, tendo-se em mente suas especificidades, como por exemplo, o transporte de sedimentos.

## **8.2 - SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS**

Ao longo do desenvolvimento deste trabalho, constatou-se o aparecimento de alguns aspectos importantes que não foram cobertos por este estudo, em função de algumas limitações. Estes aspectos não comprometeram os objetivos da pesquisa, porém eles indicam que ela pode ser continuada no desenvolvimento de outros trabalhos. Desta forma, como sugestões para trabalhos futuros, pode-se indicar:

- Estudo mais aprofundado sobre o coeficiente de difusão, através de modelos matemáticos e de análise de dados experimentais;
- A obtenção de dados mais minuciosos para a análise da dispersão de poluentes em ambientes reais;
- Análise pormenorizada da cinética das reações para outros elementos químicos importantes no estudo da qualidade da água;
- Exploração dos modelos de interação entre poluentes e entre estes e partículas de sedimentos.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ANDERSON, J. D., 1995, *Computational Fluid Dynamics: The Basics with Applications*. New York, McGraw-Hill, Inc.

ANI, E.-C., HUTCHINS, M., KRASLAWSKI, A., AGACHI, P. S., "Mathematical model to identify nitrogen variability in large rivers", *River Research Applications*. v.27, p.1216–1236, 2011.

BECK, M.B., 1981, "Hard or soft environmental systems?", *Ecological Modelling*, v.11, p.233-251.

BECKER, E. B., CAREY G. F., ODEN, J. T., 1981, *Finite Elements an Introduction*. Volume I. New Jersey. Prentice-Hall.

BOCHEV, P. B., GUNZBURGER, M. D., SHADID, J. N., 2004, "Stability of the SUPG Finite Element Method for Transient Advection-Diffusion Problems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.193, p.2301-2323.

BRAGA, B., HESPANHOL, I., CONEJO, J. G. L. *et al.*, 2005, *Introdução à Engenharia Ambiental*, 2ª Ed., São Paulo, Pearson Prentice Hall.

BROOKS, A. N., 1981, *A Petrov-Galerkin Finite Element Formulation for Convection Dominated Flows*. PhD Thesis, California Institute of Technology, Pasadena, California. USA.

BROOKS, A. N., HUGHES, T. J. R., 1982, "Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible navies-stokes equations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.32, p.199-259.

CHAPRA, S. C., 1997, *Surface water-quality modeling*, Boston, WCB – McGraw-Hill.

CHAPRA, S. C., 2011, "Rubbish, stink, and death: the historical evolution, present state, and future direction of water-quality management and modeling", *Environmental Engineering Research*, v.16, n.3, p.113-119.

CODINA, R. , 1998, "Comparison of some finite element methods for solving the diffusion-convection-reaction equation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.156, p.185-210.

DI TORO, D.M., O'CONNOR, D.J., THOMANN, R.V. , 1971, "A Dynamic Model of the Phytoplankton Population in the Sacramento - San Joaquin Delta", *Advances in Chemistry Series*, v.106, p.131-180.

DI TORO, D.M., MATYSTIK, W. F., 1980, *Mathematical Models of Water Quality in Large Lakes. Part 1 : Lake Huron and Saginaw Bay*, USA, EPA Ecological Research Series.

DI TORO, D.M., CONNOLLY, J.P., 1980, *Mathematical Models of Water Quality in Large Lakes. Part 2 : Lake Erie*, USA, EPA Ecological Research Series.

DONEA, J., 1984, "A Taylor-Galerkin method for convection transport problems", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v.20, p.101-119.

DONEA, J., HUERTA, A., 2003, *Finite Element Methods for Flow Problems*. England, John Wiley & Sons Ltd.

DOUGLAS, J., RUSSELL, T.F., 1982, "Numerical methods for convection dominated diffusion problems based on combining the method of characteristics with finite element or finite difference procedures", *SIAM Journal on Numerical Analysis*, v.19, p.871-885.

EMBRAPA. 2011. *Boletim Agrometeorológico de 2009 para Belém, PA*. Belém, Embrapa Amazônia Oriental.

FILOSO, S., VALLINO, J., HOPKINSON, C. *et al.*, 2004, "Modeling nitrogen in the Ipswich river basin, Massachusetts, using a hydrological simulation program in fortran

(hspf)", *Journal of the American Water Resources Association*, v.40, n.5, p.1365-1384.

FLETCHER, C. A. J., 1991, *Computational Techniques for Fluid Dynamics 1*, Second Edition, Berlin, Springer-Verlag.

FRANCA, L. P., HAUKE, G., MASUD, A., 2006, "Revisiting stabilized finite element methods for the advective–diffusive equation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.195, p.1560–1572.

FRANCA, L. P., VALENTIN, F., L.P. , 2000, "On an improved unusual stabilized finite element method for the advective-reactive-diffusive equation", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.190, p.1785–1800.

GOCKENBACH, M. S., 2006, *Understanding and implementing the finite element method*, Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics.

GRIEBEL, M., DORNSEIFER, T., NEUNHOEFFER, T., 1998, *Numerical Simulation in Fluid Dynamics: A Practical Introduction*, Philadelphia, Society for Industrial and Applied Mathematics.

GRIFFITHS, D. F., 1997, "The ‘No Boundary Condition’ Outflow Boundary Condition", *Int. J. for Num. Methods in Fluids*, v.24, p.393-411.

GRIEVE, I. C., 1991, "Dissolved organic carbon trends in small streams, land use effects and models of temporal variation", *Sediment and Stream "Water Quality in a Changing Environment: Trends and Explanation (Proceedings of the Vienna Symposium, August 1991) IAHS Publ.*, n.203.

HALFON, E., LAM, D. C. L., 1978, "The effects of advection-diffusion processes on the eutrophication of large lakes, a hypothetical example: lake superior", *Ecological Modelling*, v. 4, p.119-131.

HALPERN, L., 1986, "Artificial Boundary Condition for the Linear Advection Diffusion Equation", *Mathematics of Computation*, v.46, p.425-438.

HAMILTON, D. P., SCHLADOW, S. G., 1997, "Prediction of water quality in lakes and reservoirs. Part I – Model description". *Ecological Modelling*, v.96, p.91-110.

HENICHE, M., SECRETAN, Y., BOUDREAU, P., LECLERC, M., 2000, "A two-dimensional finite element drying-wetting shallow water model for rivers and estuaries", *Advances in Water Resources*, v.23, p.359-372.

HENICHE, M., SECRETAN, Y., BOUDREAU, P., LECLERC, M., 2002, "Dynamic tracking of flow boundaries in rivers with respect to discharge", *Journal of Hydraulic Research*, v. 40, n.5, p.589-602.

HERVOUET, J.-M., 2007, *Hydrodynamics of Free Surface Flows: Modelling with the Finite Element Method*, Chichester, John Wiley & Sons, Inc.

HIRSCH, C., 2007, *Numerical Computation of Internal and External Flows: Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*, v.1, Second Edition, Elsevier's Science and Technology.

HOFFMAN, J. D., 2001, *Numerical Methods for Engineers and Scientists*, Second Edition, Marcel Dekker, Inc.

HOLANDA, P. S., 2010, *Modelagem hidrodinâmica e estudo morfológico do lago Água Preta: um dos mananciais da grande Belém*, Dissertação de Mestrado em Engenharia Mecânica, Instituto de Tecnologia, Universidade Federal do Pará, Belém, Pará, Brasil.

HOLANDA, P. S., BLANCO, C. J. C., CRUZ, D. O. A *et al.*, 2011, "Hydrodynamic Modeling and Morphological Analysis of Lake Água Preta: One of the water Sources of Belém-PA-Brazil", *Journal of the Brazilian Society of Mechanic Science and Engineering*, v. XXXIII, n.2, p.117-124.

HONGPING, P., JIANYI, M., 2002, "Study on the algal dynamic model for West Lake, Hangzhou", *Ecological Modelling*, v.148, p.67–77.

HUGHES, T. J. R., 1978, "A simple scheme for developing 'upwind' finite elements", *International Journal for Numerical Methods in Engineering*, v.12, p.1359-1365.

HUGHES, T. J. R., 1995, "Multiscale phenomena: Green's functions, the Dirichlet-to-Neumann formulation, subgrid scale models, bubbles and the origins of stabilized methods", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.127, p.387-401.

HUGHES, T. J. R., MALLET, M., MIZUKAMI, A., 1986, "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: II. Beyond SUPG", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 54., p.341-355.

HUGHES, T. J. R., FRANCA, L. P, MALLET, M., 1987, "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VI. Convergence analysis of the generalized SUPG formulation for linear time-dependent multidimensional advective-diffusive systems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 63, p.97-112.

HUGHES, T. J. R., FRANCA, L. P, HULBERT, G. M. , 1989, "A new finite element formulation for computational fluid dynamics: VII. The Galerkin least squares method for advective-diffusive equations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 73, p.173-189.

IBGE - INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA, 2010, *Censo demográfico*.

JAIN, S.K., SINGH, V.P., 2003, *Water Resources System Planning and Management*, Developments in Water Science, v.51, Developments in Water Science Series, Elsevier.

JI, Z.-G., 2008, *Hydrodynamics and Water Quality: Modeling Rivers, Lakes, and Estuaries*. USA, John Wiley & Sons, Inc.

JOHN, V., KNOBLOCH, P., 2007, " On spurious oscillations at layers diminish (SOLD) methods for convection-diffusion equations: Part I - A review", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.196, p.2197-2215.

JOHN, V., SCHMEYER, E., 2008, "Finite element methods for time-dependent convection–diffusion–reaction equations with small diffusion", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v.198, p.475-494.

JØRGENSEN, S.E., 1976, "A eutrophication model for a lake", *Ecological Modelling*, v.2, p.147-165.

JØRGENSEN, S. E., KAMP-NIELSEN, L. AND JØRGENSEN, L.A., 1986, "Examination of the generality of eutrophication models". *Ecological Modelling*, v.32, p.251-266.

JØRGENSEN, S. E., LÖFFLER, H., RAST, W. *et al.*, 2005, *Lake and Reservoir Management*, v.54, Developments in Water Science Series, Elsevier.

KELLER, D. P., HOOD, R. R., 2011, "Modeling the seasonal autochthonous sources of dissolved organic carbon and nitrogen in the upper Chesapeake Bay", *Ecological Modelling*, v.222, p.1139–1162.

KHANDAN, N. N., 2001, *Modeling tools for environmental engineers and scientists*. Florida, CRC Press.

KIM, S., 1994, "Analytical solution schemes for phosphorus transport equations of a steady state in a stream", *Ecological Modelling*, v.71, p.221–243.

KITWARE, INC., 2010, *Paraview 3.8.1, 3D Visualization Software*.

LEWIS, W. L., NITHIARASU, P., SEETHARAMU, K. N., 2004, *Fundamentals of the Finite Element Method for Heat and Fluid Flow*. England, John Wiley & Sons Ltd.

LORENZEN, K., STRUVE, J., COWAN, V. J., 1997, "Impact of farming intensity and water management on nitrogen dynamics in intensive pond culture: a mathematical model applied to Thai commercial shrimp farms", *Agriculture Research*, v.28, p.493-507.

LOUCKS, D. P., BEEK, E. V., STEDINGER, J. R. *et al.*, 2005, *Water resources systems planning and management: an introduction to methods, models and applications*, Studies and Reports in Hydrology Series, UNESCO.

LUNG, W. S., CANALE, R. P., FREEDMAN, P. L., 1976, "Phosphorus models for eutrophic lakes", *Water Research*, v.10, p.1101-1114.

MALISKA, C. R., 1995, *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacionais*, Rio de Janeiro, LTC - Livros Técnicos e Científicos Editora.

MARCHUK, G. I., 1986, *Mathematical Models in Environmental Problems*, New York, v.16, Studies in Mathematics and its applications, Elsevier Science Publishers.

MASSABÓ, M., CIANCI, R., PALADINO, O., 2011, "An Analytical Solution of the Advection Dispersion Equation in a Bounded Domain and Its Application to Laboratory Experiments", *Journal of Applied Mathematics*, v.2011, p. 1-14.

MIHELICIC, J. R., AUER, M. T., HAND, D. W. *et al.*, 1999, *Fundamentals of Environmental Engineering*, New Jersey, John Wiley & Sons, Inc.

MILLER, D. R., 1978, "Model for total transport". In: Butler, G. C. (ed), *Principles of Ecotoxicology*, SCOPE 12, Great Britain, John Wiley & Sons.

NATAF, F., ROGIER, F., 1994, "Outflow boundary conditions and domain decomposition method", *Contemporary Mathematics*, v. 180, p.289-293.

NYHOLM, N., 1978, "A simulation model for phytoplankton growth and nutrient cycling in eutrophic, shallow lakes", *Ecological Modelling*, v.4, p.279-310.

ORLOB, G. T., 1983, *Mathematical Modeling of Water Quality: Streams, Lakes, and Reservoirs*, International Series on Applied Systems Analysis, v. 12, John Wiley and Sons, p. 176-226.

PADILLA, F., SECRETAN, Y., LECLERC, M., 1997, "On Open Boundaries in the Finite Element Approximation of Two-Dimensional Advection-Diffusion Flows", *Int. J. for Num. Methods in Engeneering*, v.40, p.2493-2516.

PAPANASTASIOU, T. C., MALAMATARIS, N., ELLWOOD, K., 1992, "A New Outflow Boundary Condition", *Int. J. for Num. Methods in Fluids*, v.14, p.587-608.

PATANKAR, S. V., 1980, *Numerical Heat Transfer and Fluid Flow*, McGraw-Hill.

PEÑA, M. A., KATSEV, S., OGUZ, T. *et al.*, 2010, "Modeling dissolved oxygen dynamics and hypoxia", *Biogeosciences*, v.7, p.933–957.

PENHA-LOPES, G., FLINDT, M. R., OMMEN, B. *et al.*, 2012, " Organic carbon dynamics in a constructed mangrove wastewater wetland populated with benthic fauna: A modelling approach", *Ecological Modelling*, v.232, p.97–108.

RENARDY, M., 1997, "Imposing ‘No’ Boundary Condition at Outflow: Why does it work?", *Int. J. for Num. Methods in Fluids*. v.24. p.413-417.

RUBIN, H., ATKINSON, J., 2001, *Environmental Fluid Mechanics*, New York, Marcel Dekker, Inc..

SAAD, Y., SCHULTZ, M. H., 1986, "GMRES: a generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems", *Siam J. Sci. Stat. Comput.*, v. 7, no. 3, p. 856-869.

SARAVANAN, K., RAMACHANDRAN, S., BASKAR, R., 2005, *Principles of Environmental Science and Tecnology*, Daryaganj, New Delhi, New Age International (P) Ltd.

SECRETAN, Y., LECLERC, M., 1998, "Modeleur: a 2D hydrodynamic GIS and simulation software". In: *hydroinformatics-98*, pp. 1-18, Copenhagen, Denmark.

SECRETAN, Y., ROY, Y. *et al.*, 2000, *Modeleur: User's Guide 1.0a07*. Québec, INRS-Eau.

SECRETAN - SECRETARIA EXECUTIVA DE CIÊNCIA, TECNOLOGIA E MEIO AMBIENTE. **Pluviosidade média mensal em Belém**. Disponível em: [para30graus.pa.gov.br/precipitacoes\\_mensal.htm](http://para30graus.pa.gov.br/precipitacoes_mensal.htm). Acesso em: 26 agosto 2012.

SILVA, J. P., 2010, *Avaliação da qualidade da Água Superficial utilizada no sistema de abastecimento público do município de Belém (PA)*, Dissertação (Mestrado), ITEC/UFPA, Belém, PA, Brasil.

SOCOLOFSKY, S. A., JIRKA, G. H., 2004, **Special Topics in Mixing and Transport Process in the Environment**, Disponível em: <https://ceprofs.civil.tamu.edu/ssocolofsky/cven489/Book/Book.htm>. Acesso em: 15 jan. 2008.

SODRÉ, S. S. V., 2007, *Hidroquímica dos lagos Bolonha e Água Preta, Mananciais de Belém - Pará*, Dissertação (Mestrado), Instituto de Geociências, Universidade Federal do Pará / Museu Paraense Emilio Goeldi / Embrapa Amazônia Oriental, Belém, PA, Brasil.

SOLÍN, P., 2006, *Partial differential equations and the finite element method*, New Jersey, John Wiley & Sons, Inc.

STEFAN, H. G., FANG, X., 1994, "Dissolved oxygen model for regional lake analysis", *Ecological Modelling*, v.71, p.37-68.

STREETER, H. W., PHELPS, E. B., 1925, *A study of the pollution and natural purification of the Ohio river*, Public Health Bulletin, n.146, U.S. Public Health Service.

STUMM, W., 1990, *Aquatic chemical kinetics: reaction rates of processes in natural waters*, New York, John Wiley & Sons, Inc.

TEZDUYAR, T. E., 1992, "Stabilized Finite Element Formulations for Incompressible Flow Computations". *Advances in Applied Mechanics*, v.28, p.1-44.

TSANIS, I.K., PRESCOTT, K.L., SHEN, H., 1998, "Modelling of phosphorus and suspended solids in Cootes Paradise marsh", *Ecological Modelling*, v.114, p.1-17.

TSANIS, I. K., WU, J., SHEN, H., VALEO, C., 2006, *Environmental Hydraulics: Hydrodynamic and Pollutant Transport Modeling of Lakes and Coastal Waters*, v.56, Developments in Water Science Series, Elsevier.

VASCONCELOS, V. de M. M.; SOUZA, C. F., 2011, "Caracterização dos parâmetros de qualidade da água do manancial Utinga, Belém, PA, Brasil", *Revista Ambiente e Água*, v.6, n. 2, p.305-324.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W., 1995, *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method*. England, Longman Scientific and Technical.

VISUAL NUMERICS, INC., 1997, *IMSL Fortran Subroutines for Mathematical Applications Math/Library Volumes 1 and 2*. Houton , Texas.

WHITEHEAD, P.G., JIN, L., BAULCH, H.M. *et al.*, 2011, "Modelling phosphorus dynamics in multi-branch river systems: A study of the Black River, Lake Simcoe, Ontario, Canada", *Science of the Total Environment*, v.412-413, p.315–323.

WRIGHT, M. R., 2004, *An introduction to chemical kinetics*, England, John Wiley & Sons Ltd.

WU, W., 2007, *Computational River Dynamics*. London, Taylor & Francis.

ZIENKIEWICZ, O.C., CODINA, R., 1995, "A general algorithm for compressible and incompressible flow. Part I: The split, characteristic based scheme", *International journal for numerical methods in fluids*, v.20, p.869-885.

ZIENKIEWICZ, O. C., TAYLOR, R. L. 2000. *The Finite Element Method, Volume 3: Fluid Dynamics*. Fifth Edition, Oxford, Butterworth-Heinemann.