



UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA

SUELLEN RIBEIRO PARDO

**UMA MODELAGEM DO TRANSPORTE E REAÇÕES
DOS CICLOS DO CARBONO E DO NITROGÊNIO NO
LAGO IGAPÓ 1 - LONDRINA, PARANÁ**

SUELLEN RIBEIRO PARDO

**UMA MODELAGEM DO TRANSPORTE E REAÇÕES
DOS CICLOS DO CARBONO E DO NITROGÊNIO NO
LAGO IGAPÓ 1 - LONDRINA, PARANÁ**

Dissertação de mestrado, apresentada a Universidade Estadual de Londrina, como parte dos requisitos necessários para a conclusão do curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional (PGMAC).

Orientador: Prof. Dr. Paulo Laerte Natti,
Co-Orientador: Prof. Dr. Neyva Maria Romeiro
Lopes,

Londrina
2009

SUELLEN RIBEIRO PARDO

**UMA MODELAGEM DO TRANSPORTE E REAÇÕES
DOS CICLOS DO CARBONO E DO NITROGÊNIO NO
LAGO IGAPÓ 1 - LONDRINA, PARANÁ**

Dissertação de mestrado, apresentada a Universidade Estadual de Londrina, como parte dos requisitos necessários para a conclusão do curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada e Computacional (PGMAC).

BANCA EXAMINADORA

Prof. Paulo Laerte Natti (Orientador)
UEL – Londrina – PR

Prof. Luci Harue Fatori
UEL – Londrina – PR

Prof. Rigoberto Gregorio Sanabria Castro
UENF

Londrina, 6 de março de 2009.

Aos meus pais,
Antônia e Cláudio.

AGRADECIMENTOS

Á Deus por toda força concedida e por estar sempre ao meu lado.

Á minha mama Antônia, ao meu papito Cláudio e ao meu irmão Rafa. por serem, além de meus pais e irmão, os meus melhores amigos, os meus maiores incentivadores e aqueles que acreditam em mim sempre.

Aos familiares tia Celina, tio Manoel, Ado. , Paula e Júnior, e para aqueles que enchem minha vida de carinho e esperança, meu afilhado José Luiz e minha priminha Maria Clara, o meu muito obrigada, por todo apoio e atenção.

Ao Dr. José Roberto Nogueira, meu professor de graduação, por ter sido grande exemplo para mim.

Ao meu orientador Paulo pela paciência tendendo ao infinito, por estar sempre presente e pela sua dedicação nessa dissertação e á Neyva, minha co-orientadora, pela atenção sem limites.

Ao professor Eliandro, que foi fundamental neste trabalho, por ter fornecido a malha do lago Igapó e ajudado muito na construção do modelo hidrodinâmico.

Aos grandes amigos de infância e da FCT/UNESP, que mesmo distantes, torceram muito por este trabalho.

Aos amigos que fiz em Londrina, que muitas vezes, foram minha família.

A todos do departamento de matemática da UEL e do PGMAC, principalmente aos meus colegas de mestrado, pois, com eles dividi minhas inquietações, minhas derrotas e minhas conquistas.

Ao Alex, Stela e Thiago pelo companheirismo durante as disciplinas, e á Michelle, pelo companheirismo e convivência diária durante esses dois anos.

Ao meu querido João Roberto por estar ao meu lado.

PARDO, Suellen Ribeiro. **Uma modelagem do transporte e reações dos ciclos do carbono e do nitrogênio no lago Igapó 1 – Londrina, Paraná.** 2009. 94 f. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2009.

RESUMO

A presente dissertação é uma contribuição para um melhor entendimento do efeito que uma descarga de poluentes pode causar no corpo d' água do lago Igapó 1, localizado na região central da cidade de Londrina, Paraná. Para simular a dinâmica da concentração dos poluentes em todo o corpo d' água do lago Igapó 1, propomos um modelo bidimensional, na horizontal. Para gerar a geometria do lago Igapó 1, utilizamos uma discretização estruturada, juntamente com os métodos de diferenças finitas e Gauss-Seidel. Assim, modelamos o escoamento hidrodinâmico, na geometria discretizada do lago Igapó 1, por meio das equações de Navier-Stokes e da pressão, fornecendo o campo vetorial bidimensional de velocidades da água no lago. Estas equações foram resolvidas numericamente, também por meio do método de diferenças finitas, associado ao procedimento de Runge-Kutta de quarta ordem no caso das equações de Navier-Stokes, e ao procedimento de Gauss-Seidel no caso da equação da pressão. O escoamento das espécies reativas, sobre este uso hidrodinâmico, é descrito por um modelo de transporte e reações. Neste último, o transporte das espécies reativas é realizado pela composição dos campos vetoriais de velocidades hidrodinâmica (advectiva) e difusiva, enquanto as reações, restritas ao ciclo carbono-nitrogênio, são descritas pelo modelo de Ambrose na forma linearizada. O modelo de transporte e reações foi resolvido numericamente pelo método de elementos finitos estabilizados, através de uma formulação semi discreta. Uma análise qualitativa das simulações numéricas realizadas, em função do coeficiente de difusão, proporcionou uma melhor compreensão da dinâmica dos processos envolvidos no escoamento de espécies reativas, tais como, a dinâmica do processo de nitrificação, da demanda bioquímica de oxigênio e do nível de oxigênio dissolvido no corpo d' água. Como resultado principal das simulações numéricas realizadas, verificamos que as maiores concentrações de nitrito e de nitrato ocorrem nos vórtices do lago, caracterizando-os como regiões muito poluídas.

Palavras-chave: Poluentes. Igapó. Lago Paraná. Transporte. Modelagem matemática

PARDO, Suellen Ribeiro. **A modeling of transport and reactions of carbon and nitrogen in the lake Igapó 1 – Londrina, Paraná.** 2009. 94 f. Dissertation (Master in Applied and Computational Mathematics) - Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2009.

ABSTRACT

This dissertation is a contribution to a better understanding of the effect that a discharge of pollutants can cause in the water body of the Igapó 1 lake, located in the central region of the city of Londrina, Paraná. To simulate the dynamics of pollutants concentrations in all water body of the Igapó 1 lake, we propose a horizontal, two-dimensional model. To generate the geometry of the Igapó 1 lake, we use a structured discretization, together with methods of finite differences and Gauss-Seidel. Thus, we model the hydrodynamic flow, in the discretized geometry of the Igapó 1 lake, by the Navier-Stokes and pressure equations, providing the two-dimensional vector field of water velocities in the lake. These equations were solved numerically, also using the finite differences method, linked to the procedure of Runge-Kutta, from fourth order, in the case of the Navier-Stokes equations, and to the procedure of Gauss-Seidel in the case of the pressure equation. The flow of reactive species, on the hydrodynamic flow, it is described by a transport-reactions model. In the latter, the transport of reactive species is performed by the composition of the hydrodynamic and diffusive velocities vector fields, while the reactions, restricted to the carbon-nitrogen cycle, are described in the Ambrose model in the linearized form. The transport-reactions model was solved numerically using the stabilized finite element method, through a semi discrete formulation. A qualitative analysis of numerical simulations carried out, depending on the coefficient of diffusion, provided a better understanding of the dynamics of the processes involved in the flow of reactive species, such as the dynamics of the nitrification process, of the biochemical oxygen demand and of the level of oxygen dissolved in the water body. As a main result of numerical simulations carried out, we show that the higher concentrations of nitrite and nitrate found in the lake vortices, characterizing them as highly polluted regions.

Key-words: Pollutants. Igapó. Lake Paraná. Transportation. Mathematical modeling

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 – Alguns parâmetros indicadores de qualidade de água segundo a CETESB	23
Tabela 3.2 – Saturação do oxigênio dissolvido (OD) em mg=L.....	25
Tabela 3.3 – Valores das constantes do modelo descrito por AMBROSE, et al. (2001) a temperatura fixa de 20°C (AMBROSE, et al. (2001)).....	50
Tabela 4.1 – Valores dos parâmetros do modelo de transporte e reação á temperatura de 20°C	57
Tabela 4.2 – Valores mínimos e máximos das concentrações das espécies reativas, em mg=L, considerando todos os pontos da malha da geometria do lago Igapó 1, para $D = 10 \text{ m}^2/\text{h}$	58
Tabela 4.3 – Valores mínimos e máximos das concentrações das espécies reativas, em mg=L, considerando todos os pontos da malha da geometria do lago Igapó 1, em função da difusão D, para $t = 300$ horas	60
Tabela A.1 –Peso atribuído a cada parâmetro do IQA.....	80
Tabela A.2 –Categorias para a qualidade da água segundo a CETESB.....	83
Tabela A.3 –Concentração de oxigênio dissolvido encontrada nas amostras do lago Igapó	83
Tabela A.4 –Concentração de coliforme fecal encontrada nas amostras do lago Igapó	84
Tabela A.5 –O potencial hidrogeniônico das amostras do lago Igapó	84
Tabela A.6 –A demanda bioquímica de oxigênio encontrada nas amostras do lago Igapó	84
Tabela A.7 –Concentração de nitrogênio Kjeldahl total encontrada nas amostras do lago Igapó	85
Tabela A.8 –Concentração de fósforo total encontrada nas amostras do lago Igapó	85
Tabela A.9 –A turbidez encontrada nas amostras do lago Igapó	85
Tabela A.10 –Concentração de sólido total encontrada nas amostras do lago Igapó	85
Tabela A.11 –Temperatura da água encontrada nas amostras do lago Igapó	86
Tabela A.12 –Relatório de IQA no CAM 10 (passagem do lago Igapó sob a Av. Higienópolis)	86
Tabela A.13 –Relatório de IQA no CAM 11 (barragem do lago Igapó 1).....	86

Tabela B.1 –Nó 540	87
Tabela B.2 –Nó 1080	87
Tabela B.3 –Nó 1620	88
Tabela B.4 –Nó 2160	88
Tabela B.5 –Nó 2700	88
Tabela B.6 –Nó 3240	88
Tabela B.7 –Nó 3780	89
Tabela B.8 –Nó 4320	89
Tabela B.9 –Nó 4860	89
Tabela B.10 –Nó 5400	89
Tabela B.11 –Nó 5940	90
Tabela B.12 –Nó 6480	90
Tabela B.13 –Nó 7020	90
Tabela B.14 –Nó 7560	90
Tabela B.15 –Nó 8100	91
Tabela B.16 –Nó 8640	91
Tabela B.17 –Nó 9180	91
Tabela B.18 –Nó 9720	91
Tabela B.19 –Nó 10260	92
Tabela B.20 –Nó 10800	92
Tabela B.21 –Nó 11340	92
Tabela B.22 –Nó 11880	92

LISTA DE FIGURA

Figura 2.1 – Escoamento de um fluido entre placas paralelas	18
Figura 2.2 – Classificação do fluido como função da tensão de cisalhamento e da taxa de deformação	18
Figura 3.1 – Os lagos Igapó 1, 2, 3 e 4 (Google Earth)	33
Figura 3.2 – Domínio físico do lago Igapó 1 (Google Earth)	33
Figura 3.3 – Modelagem da geometria discreta do lago Igapó	38
Figura 3.4 – Fluxo de massa através de um volume de controle	39
Figura 3.5 – Descrição da conservação de massa de uma espécie reativa na direção x	47
Figura 3.6 – Esquemas de reações e ciclos do carbono (C) e nitrogênio (N), vermelho e azul, respectivamente, descritos pelo modelo deWoll et al. (2001) linearizado	49
Figura 4.1 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0; 001 \text{ m}^2/\text{h}$	61
Figura 4.2 – Continuação da figura 4.	62
Figura 4.3 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0; 01 \text{ m}^2/\text{h}$	63
Figura 4.4 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0; 01 \text{ m}^2/\text{h}$	64
Figura 4.5 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0; 1 \text{ m}^2/\text{h}$	65
Figura 4.6 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0; 1 \text{ m}^2/\text{h}$	66
Figura 4.7 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 1 \text{ m}^2/\text{h}$	67
Figura 4.8 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 1 \text{ m}^2/\text{h}$	68
Figura 4.9 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10 \text{ m}^2/\text{h}$	69
Figura 4.10 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10 \text{ m}^2/\text{h}$	70
Figura 4.11 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 100 \text{ m}^2/\text{h}$	71
Figura 4.12 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 100 \text{ m}^2/\text{h}$	72
Figura 4.13 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 1000 \text{ m}^2/\text{h}$	73
Figura 4.14 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 1000 \text{ m}^2/\text{h}$	74
Figura 4.15 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10000 \text{ m}^2/\text{h}$	75
Figura 4.16 – Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10000 \text{ m}^2/\text{h}$	76
Figura A.1 – Curva média de variação do coliforme fecal.	80
Figura A.2 – Curva média de variação do pH.	80
Figura A.3 – Curva média de variação da DBO	81

Figura A.4 – Curva média de variação do nitrogênio.....	81
Figura A.5 – Curva média de variação do fósforo.....	81
Figura A.6 – Curva média de variação da temperatura.	81
Figura A.7 – Curva média de variação da turbidez.	82
Figura A.8 – Curva média de variação dos sólidos totais.....	82
Figura A.9 – Curva média de variação do OD	82

SUMÁRIO

1	Introdução	12
2	Conceitos fundamentais de mecânica dos fluidos	16
2.1	Propriedades e classificação dos fluidos	16
2.2	Fluidos em movimento	19
2.2.1	Descrição do movimento dos fluidos	20
2.2.2	Classificação dos escoamentos	20
3	Modelo de qualidade de água	22
3.1	Parâmetros indicadores de qualidade de água	22
3.1.1	Parâmetros físicos	23
3.1.2	Parâmetros químicos	24
3.1.3	Parâmetros biológicos	30
3.2	Classificação da qualidade de água	30
3.2.1	Classe especial	30
3.2.2	Classe	30
3.2.3	Classe II	31
3.2.4	Classe III	31
3.2.5	Classe IV	32
3.3	Modelo hidrodinâmico	32
3.3.1	Modelagem da geometria do lago Igapó 1	32
3.3.2	Equação de Navier-Stokes	38
3.4	Modelo de transporte e reações	46
3.4.1	Equações do transporte advectivo-difusivo-reativo	46
3.4.2	Equações do modelo de reações	48
3.4.3	Solução numérica do modelo de transporte e reações	50
4	Análise dos resultados numéricos	54
5	Conclusões	77
	Apêndice A Medições do índice de qualidade de água do lago Igapó 1	79
	Apêndice B Estudo local das concentrações das espécies reativas	87
	Referência	93

Capítulo 1

Introdução

A água é componente vital no sistema de sustentação da vida na Terra. A crescente expansão demográfica e industrial, observada nas últimas décadas, trouxe como consequência a poluição hídrica, que pode ser causada, entre outras formas, pelo despejo de esgotos industriais e domésticos. Com o comprometimento das águas dos rios, lagos e reservatórios, cada vez mais se exige sofisticação no tratamento desse recurso. Um questionamento importante é até que momento os métodos de tratamento de água serão viáveis dos pontos de vista técnico e econômico. Por isso, a necessidade de sua preservação deve ser sentimento comum da sociedade.

A poluição hídrica pode ser definida como a introdução num corpo d'água de qualquer matéria ou energia que venha a alterar as propriedades físico-químicas dessa água, afetando, conseqüentemente, a saúde das espécies de animais ou vegetais que dependem dela ou com ela tenham contato. Alguns tipos de fontes poluidoras são os agrotóxicos, os esgotos domésticos (falta de saneamento básico), os resíduos industriais e os metais pesados como o mercúrio, chumbo, alumínio, zinco, etc.

Observa-se, principalmente nas proximidades de grandes cidades e metrópoles, que a capacidade de autodepuração dos corpos d'água não é suficiente para reverter o quadro de poluição devido aos inúmeros despejos. Uma forma de compreender essa problemática e buscar uma solução é analisar a relação entre as fontes poluidoras e os mecanismos de degradação dessas. Para isso utilizam-se os modelos de qualidade de água.

O modelo matemático de qualidade de água, através de simulações, proporciona previsões para a compreensão do comportamento dos processos de degradação envolvidos, obviamente dentro de uma faixa de incertezas. A base desse modelo está nas equações de conservação de massa e de quantidade de movimento e nas equações dos processos reativos envolvidos. Através destas equações é possível descrever a dinâmica do escoamento de um corpo d'água, retratar fenômenos como os ciclos do nitrogênio (N), fósforo (P) e carbono (C) e por fim analisar o impacto de uma descarga de efluentes por meio de simulação numérica (ROMEIRO, 2003).

O transporte de uma substância num corpo d'água, ao longo do tempo e do espaço, está sujeito a processos físicos, químicos e biológicos e ocorre devido aos fenômenos de advecção, difusão e dispersão no corpo d'água. A advecção de um fluido é o movimento deste, resultante do escoamento hidrodinâmico do fluido. A difusão de uma substância

num fluido é o movimento das regiões de alta concentração para as regiões de baixa concentrações. A dispersão de uma substância num fluido é o movimento turbulento desta, gerado por diferenças nas velocidades em caminhos de fluxos paralelos. Quando existem partículas que escoam com velocidade diferente da média, existe ação dispersiva no escoamento e na concentração da substância (TUCCI, 1998). Além destes fenômenos de transporte, as substâncias no corpo d'água estão sujeitas as reações, as quais ocorrem internamente ao corpo d'água e são denominadas cinéticas, sendo descrito por um modelo de reações, que juntamente com o modelo de transporte, descrevem as variações das concentrações das substâncias, chamadas espécies reativas, no corpo d'água.

A escolha de um modelo matemático depende das características do sistema a ser simulado, do nível de precisão desejado e dos dados disponíveis para representar os processos. A complexidade de um modelo de qualidade de água está relacionada com o número de equações e com o número de termos de reações cinéticas acopladas no modelo de transporte. Para modelos simples é possível encontrar soluções analíticas, já para modelos complexos utilizam-se métodos numéricos para o cálculo de soluções aproximadas. Os modelos podem ser classificados de acordo com suas dimensões espaciais. Os modelos unidimensionais simulam processos considerando apenas uma dimensão sendo utilizados, por exemplo, para estudar o fluxo em um rio. Os modelos bidimensionais se dividem em dois casos, os horizontais e os verticais. O modelo 2DH (bidimensional horizontal) considera as direções longitudinal e transversal, desprezando a direção vertical. Tais modelos são utilizados em estuários de poucos estratos, já que nestes casos há uma homogeneidade vertical do corpo d'água. O modelo 2DV (bidimensional vertical) despreza as variações dos processos na direção transversal ao fluxo, considerando relevante as variações nas direções longitudinal e vertical. Aplica-se esse tipo de modelo a corpos com grande variação de densidade na coluna d'água. Finalmente, os tridimensionais, representam variações nas três dimensões e podem ser aplicados em qualquer situação (TUCCI, 1998).

Segundo Chapra (1997), o histórico da modelagem de qualidade de água pode ser apresentado em quatro fases. Começou a evoluir no século XX e teve como marco inicial o modelo proposto por Streeter e Phelps em 1925. Este modelo descreve o processo do consumo de oxigênio e a capacidade de reaeração do corpo d'água por meio de duas equações ordinárias de primeira ordem, considerando o escoamento permanente e uniforme. Devido à falta de ferramentas computacionais, os modelos das décadas de 20 a 60 eram unidimensionais e limitavam-se ao tratamento primário de efluentes em córregos ou estuários, com cinética linear e geometrias simples, apresentavam soluções analíticas.

Na década de 60, o grande avanço tecnológico permitiu abordagens numéricas com geometrias mais complexas. O enfoque passou a ser o tratamento primário e secundário dos efluentes e o transporte de poluentes em córregos e estuários, modelados bidimensionalmente. Destaca-se a proposta de O'Connor e Dobbins, em 1967, que por meio de equações diferenciais de segunda ordem, adicionava o tratamento da demanda bentônica e da fotossíntese ao modelo de Streeter e Phelps.

Na década de 70, em vez de se concentrar sobre os efeitos locais de uma fonte de poluição, o corpo d'água passou a ser observado como um todo e o processo de eutrofização, proliferação excessiva de algas provocada por nutrientes excedentes, era o foco dos modelos, ou seja, representações dos processos biológicos começaram a ser estudadas em

córregos, lagos e estuários. A cinética não-linear e modelos tridimensionais começaram a ser estudados por meio de simulações numéricas. Nesta década, a população começou a se preocupar com o meio ambiente e movimentos ecológicos nasceram em alguns setores da sociedade. Em 1971, a Texas Water Development Board (TWDB) criou o modelo unidimensional, conhecido por QUAL-I, que permitiu a descrição do transporte advectivo e dispersivo de poluentes em corpos d'água. No ano seguinte, o QUAL-I foi melhorado pela United State Environmental Protection Agency (USEPA) e denominado QUAL-II, com aplicação em rios de maior profundidade, simulando até 13 espécies de parâmetros indicadores de qualidade de água. No final da década de 70, o foco da pesquisa passou a ser o destino de substâncias tóxicas e sua atuação na cadeia alimentar. A preocupação com os danos ambientais se intensificou e muitos países em desenvolvimento começaram a reconhecer a necessidade de estratégias para controlar a poluição, mantendo o crescimento econômico.

No início da década de 80 foi organizado pela International Association on Water Quality (IAWQ) um grupo de cientistas e técnicos, denominado Task Group on River Water Quality, que padronizou os modelos e os manuais, revisando os modelos já existentes e traçando metas para o futuro. A USEPA, em 1985, desenvolveu o Water Analysis Simulation Program (WASP), que simula processos unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais de poluentes convencionais e tóxicos. Este modelo foi modificado inúmeras vezes e sua versão atual é o WASP7 (AMBROSE; WOOL; MARTIN, 2006). Paralelamente, em 1987, devido a várias modificações no QUAL-II, este modelo unidimensional foi renomeado QUAL2E, simulando até 15 espécies, admitindo fontes pontuais e não-pontuais e fluidos tanto de regime permanente como não-permanente (BROWN *et al.*, 1987). Outros inúmeros modelos de qualidade de água são encontrados na literatura, tais como o ASM1, ASM2 e o ASM3, desenvolvidos pelo IAWQ (HENZE *et al.*, 2000); o RWQM1, também desenvolvido pelo IAWQ (SHANAHAN *et al.*, 2001), o HSPF, desenvolvido pela USEPA, (BICKNELL *et al.*, 2001), entre outros.

Neste contexto, este trabalho é uma contribuição para um melhor entendimento do efeito que uma descarga de poluentes pode causar em um corpo d'água, em particular, no lago Igapó 1, Londrina, Paraná. Para simular esta descarga de poluentes no corpo d'água do lago Igapó 1, supomos um modelo 2DH, onde o escoamento da água, na geometria discretizada do lago, é descrito pelas equações de Navier-Stokes e da continuidade, e que o transporte das espécies reativas, é dado pela velocidade do escoamento (advectiva) e pela difusão. As reações do ciclo carbono-nitrogênio, que surgem durante o transporte, são descritas pelo modelo apresentado por Ambrose, *et al.* (2001), em sua versão linearizada, modeladas acopladamente ao transporte. Assim, esta dissertação encontra-se organizada da seguinte forma. No Capítulo 2, conceitos fundamentais são discutidos como propriedades dos fluidos, sua classificação e seus tipos de escoamentos. No Capítulo 3 descrevemos o modelo de qualidade de água de nosso estudo, composto pelos modelos hidrodinâmico e de transporte e reações, bem como os parâmetros que indicam o índice de qualidade de água, classificada por padrões definidos em legislação. Ainda neste capítulo, descrevemos o método de discretização estruturada, utilizado na geração da malha computacional do lago Igapó 1, o método de diferenças finitas, utilizado na discretização do modelo hidrodinâmico, e o método de elementos finitos, utilizado na discretização do modelo de

transporte e reações. No Capítulo 4 apresentamos as simulações numéricas do modelo 2DH de transporte advectivo-difusivo-reativo dos ciclos do carbono e nitrogênio no lago Igapó 1 e fazemos uma análise qualitativa da poluição no lago. Finalmente, no Capítulo 5, apresentamos nossas conclusões sobre as simulações realizadas e as perspectivas para futuros estudos.

Capítulo 2

Conceitos fundamentais de mecânica dos fluidos

Neste capítulo apresentamos alguns conceitos fundamentais de mecânica dos fluidos necessários à descrição do transporte de poluentes em meios aquáticos.

2.1 Propriedades e classificação dos fluidos

Discutiremos alguns conceitos de mecânica necessários das modelagens presentes nesta dissertação, tais como tensão normal e de cisalhamento, viscosidade e compressibilidade (FOX; MCDONALD, 1998, POTTER; SCOTT, 2007).

Consideremos um fluido submetido a uma força $\Delta\vec{F}$ que age em uma determinada área. Essa força pode ser decomposta em uma componente normal, $\Delta\vec{F}_n$, e em uma componente tangencial, $\Delta\vec{F}_t$. Chamamos de tensão a força dividida pela área na qual ela age, ou seja, se tomarmos as componentes da força, temos a tensão normal e a tensão tangencial ou de cisalhamento. Consideramos também que os fluidos, líquidos e gases, movem-se sob ação de uma tensão tangencial. A esse movimento dá-se o nome de escoamento. Matematicamente, as tensões normal e de cisalhamento, respectivamente, podem ser descritas por

$$\sigma = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_n}{\Delta A} \quad (2.1)$$

e

$$\tau = \lim_{\Delta A \rightarrow 0} \frac{\Delta F_t}{\Delta A}. \quad (2.2)$$

Como a força é uma quantidade vetorial, podemos considerar as tensões atuando em planos cujas normais, orientadas para fora, estão nas direções dos eixos x_1 , x_2 e x_3 . Definimos as três componentes da tensão utilizando índice duplo, onde o primeiro índice indica o plano no qual a tensão atua e o segundo indica a direção na qual a força atua. Matematicamente, na direção x_1 , temos

$$\sigma_{11} = \lim_{\Delta A_{x_1} \rightarrow 0} \frac{\Delta F_{x_1}}{\Delta A_{x_1}}, \quad \tau_{12} = \lim_{\Delta A_{x_1} \rightarrow 0} \frac{\Delta F_{x_2}}{\Delta A_{x_1}} \quad \text{e} \quad \tau_{13} = \lim_{\Delta A_{x_1} \rightarrow 0} \frac{\Delta F_{x_3}}{\Delta A_{x_1}}. \quad (2.3)$$

Analogamente, tomando o eixo x_2 , definimos as componentes τ_{21} , σ_{22} e τ_{23} e, por fim, tomando o eixo x_3 , temos τ_{31} , τ_{32} e σ_{33} . Para simplificar a notação denotaremos τ_{ij} por σ_{ij} para $i \neq j$, portanto, a tensão num ponto é especificada por nove componentes,

$$\begin{bmatrix} \sigma_{11} & \sigma_{12} & \sigma_{13} \\ \sigma_{21} & \sigma_{22} & \sigma_{23} \\ \sigma_{31} & \sigma_{32} & \sigma_{33} \end{bmatrix}.$$

Quanto a viscosidade, ela representa a tensão tangencial interna entre as camadas adjacentes de um fluido, ou seja, é uma resistência ao cisalhamento. Essa propriedade é importante no estudo do escoamento, pois, quando as camadas adjacentes de um fluido estão se movendo relativamente, o movimento é amortecido pela viscosidade (forças de atrito), o que reduz as velocidades relativas. Newton (1642-1727), postulou que, no movimento retilíneo de um fluido, entre planos paralelos, a tensão entre duas camadas do fluido é proporcional à diferença de velocidades na direção perpendicular a essas camadas. Assim, a lei de Newton da viscosidade é dada, para o escoamento unidimensional, por

$$\sigma_{21} = \mu \frac{\partial u_1}{\partial x_2}, \quad (2.4)$$

onde a constante de proporcionalidade μ é a viscosidade do fluido, u_1 é a velocidade do fluido na direção x_1 e a derivada da velocidade pode ser entendida como uma taxa de deformação.

A figura 2.1 mostra o atrito sob as camadas de um líquido homogêneo compreendido entre duas placas paralelas, uma estacionária e a outra móvel. Na figura 2.1, a molécula do fluido em contato com a placa estacionária, tem a mesma velocidade da placa, ou seja, não se desloca, no entanto, a molécula em contato com a placa móvel tem a mesma velocidade desta. Isso significa que o gradiente de velocidade, para qualquer molécula entre as placas, depende da distância das moléculas às placas consideradas, no caso apresentado na figura 2.1 esta dependência é linear. Os fluidos podem ser classificados, de modo geral, de acordo com a relação entre tensão de cisalhamento e a taxa de deformação. Os fluidos nos quais a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional à taxa de deformação, como na figura 2.1, são chamados newtonianos, caso contrário, não-newtonianos. Fluidos como a água, ar e gasolina, por exemplo, são newtonianos.

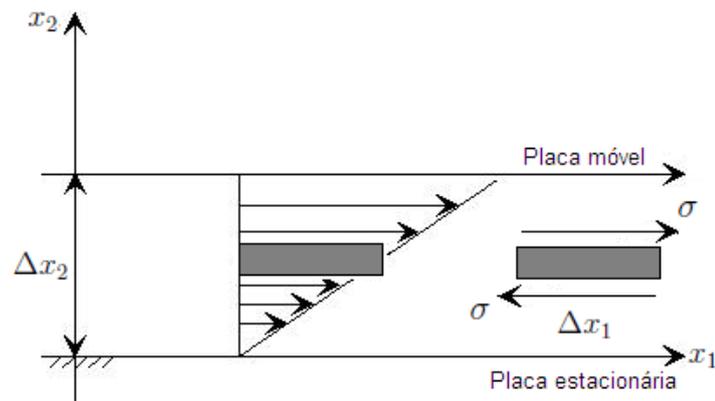


Figura 2.1: Escoamento de um fluido entre placas paralelas.

Dentre os fluidos não-newtonianos podemos citar os dilatantes que tornam-se mais resistentes ao movimento à medida que a taxa de deformação aumenta, por exemplo, a areia movediça e a lama. E os pseudoplásticos, que tornam-se menos resistentes ao movimento com o aumento da taxa de deformação. Os plásticos ideais (fluidos de Bingham) requerem tensão tangencial mínima para provocar movimento. O comportamento dos fluidos não-newtonianos podem ser visualizados na figura 2.2.

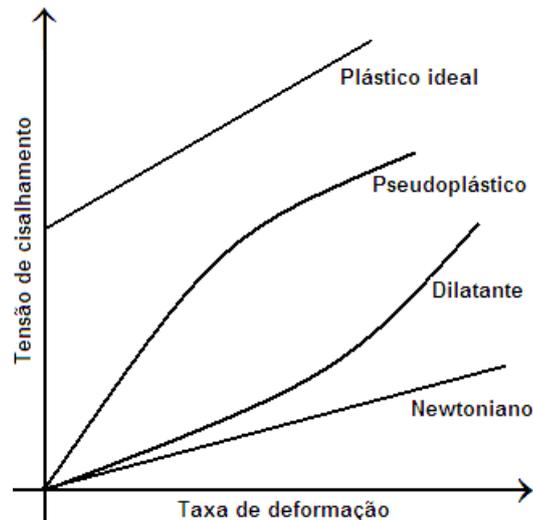


Figura 2.2: Classificação do fluido como função da tensão de cisalhamento e da taxa de deformação.

Discutiremos agora o conceito de compressibilidade em fluidos. Vimos anteriormente que um fluido é deformado angularmente devido à tensão tangencial. Por outro lado, um fluido também pode ser deformado volumetricamente. Essa deformação volumétrica resulta das variações de pressão. Seja uma porção de fluido num recipiente, de volume V , submetida a uma pressão p , a uma temperatura constante. Aplicando sobre este fluido uma pressão adicional Δp , ocorrerá uma variação de volume ΔV , de sinal contrário ao de

Δp , ou seja, para um acréscimo de pressão ocorrerá um decréscimo de volume e vice-versa. A essa relação dá-se o nome de módulo de elasticidade volumétrica ϵ , que é uma maneira de descrever a compressibilidade de um fluido. Matematicamente, temos (BASTOS, 1983)

$$\epsilon = -\frac{dp}{\frac{dV}{V}}, \quad (2.5)$$

onde dV/V é a variação relativa do volume. O coeficiente de compressibilidade é o inverso do módulo de elasticidade volumétrica, ou seja,

$$c = \frac{1}{\epsilon} = -\frac{\frac{dV}{V}}{dp}. \quad (2.6)$$

Todo fluido que for elevado a alta pressão, tende a se comprimir, aumentando sua densidade, porém, em alguns fluidos é necessário uma pressão alta para provocar uma mudança volumétrica pequena. Esses fluidos são ditos incompressíveis. A água, por exemplo, é incompressível, pois, seu módulo de elasticidade volumétrica é de $2,07 \times 10^4 \text{ Kgf/cm}^2$, logo, seu coeficiente de compressibilidade é de aproximadamente $5 \times 10^{-5} \text{ cm}^2/\text{Kgf}$ (BASTOS, 1983).

2.2 Fluidos em movimento

A base do estudo de mecânica dos fluidos é formada por três leis de conservação. A primeira é a lei de conservação de massa, ou seja, a matéria não pode ser criada, nem destruída. A segunda é a lei de conservação de quantidade de momento, linear e angular. A lei de conservação de quantidade de momento linear diz que esta quantidade permanece constante se nenhuma força externa está agindo sobre o sistema. Note que essa lei é a segunda lei de Newton, isto é, a soma de todas as forças externas agindo em um sistema é igual à taxa de variação da quantidade de momento linear do sistema em relação a um intervalo de tempo. A lei de conservação de quantidade de momento angular é análoga, envolvendo os conceitos de torque e momento angular. A terceira lei é a lei de conservação de energia, também conhecida como a primeira lei da termodinâmica, que postula que a energia total de um sistema isolado permanece constante. Caso o sistema esteja em contato com uma vizinhança, ocorre transferência de energia, de modo que, a energia de um deles aumenta na mesma quantidade que o outro perde.

As três leis acima descrevem as equações do movimento de um fluido que, em geral, são difíceis de serem resolvidas. Uma estratégia utilizada é, dependendo das propriedades do fluido, fazer algumas hipóteses que simplifiquem essas equações. Por exemplo, em alguns casos, a viscosidade do fluido não afeta consideravelmente o escoamento, ou seja, pode ser desprezada, simplificando as equações e não alterando significativamente os resultados. Para que essas hipóteses sejam feitas de maneira a não alterar significativamente os resultados, devemos conhecer as características do fluido. Na próxima seção faremos um breve estudo sobre os diferentes tipos de escoamentos dos fluidos.

2.2.1 Descrição do movimento dos fluidos

A descrição do movimento de um fluido considera as partículas em movimento. Esse movimento das partículas é uma função das coordenadas de espaço e de tempo. No estudo em que a atenção é focada para as partículas individuais, o movimento é observado como uma função do tempo. Contudo, o número de partículas no escoamento de um fluido é muito alto, o que praticamente inviabiliza este tipo de descrição.

Mais conveniente seria um outro enfoque, baseado na observação do escoamento de um conjunto de partículas passando por um local específico, ou seja, fazer com que as propriedades de escoamento sejam funções do espaço e do tempo.

A primeira abordagem é a descrição lagrangeana, onde, a posição, a velocidade, e a aceleração de cada partícula são apresentadas como $r(X, t)$, $u(X, t)$ e $a(X, t)$, sendo X um ponto fixo onde a partícula inicia o movimento. Outra abordagem, a mais conveniente, é a descrição euleriana, onde seleciona-se pontos no espaço e observa-se as velocidades das partículas passando por esses pontos, determinando a taxa de mudança da velocidade, ou seja,

$$\frac{\partial u}{\partial x_1}, \quad \frac{\partial u}{\partial x_2} \quad \text{e} \quad \frac{\partial u}{\partial x_3}. \quad (2.7)$$

A região onde se encontra os pontos selecionados é chamada de campo de escoamento. A função velocidade em cada ponto do campo de escoamento é expressa como $u(x_1, x_2, x_3, t)$ (ROSMAN, 1997).

2.2.2 Classificação dos escoamentos

Quanto às dimensões espaciais, o escoamento pode ser unidimensional, bidimensional ou tridimensional. No caso geral, quando o vetor velocidade depende de três coordenadas espaciais, o escoamento tridimensional não apresenta soluções analíticas, requerendo simulações numéricas com grande quantidade de processamento e alto desempenho computacional. No entanto, um escoamento tridimensional, pode ser aproximado por um escoamento bidimensional. Isso pode ser implementado desde que essa simplificação seja coerente com as características do fluido e do escoamento. Por exemplo, em corpos d'água onde a largura é muito maior do que a profundidade, pode-se considerar apenas as variações nas direções longitudinal e transversal. Enfim, um escoamento unidimensional é um escoamento no qual o vetor velocidade depende apenas de uma coordenada espacial. Estes ocorrem em dutos longos e retos, ou até mesmo em rios, devido a velocidade do fluxo ser predominante na direção longitudinal. Quanto à variação no tempo, o escoamento pode ser permanente ou não-permanente (transitório). O escoamento é dito permanente quando qualquer propriedade pode variar de ponto a ponto no campo de escoamento mas permanecem constantes com o tempo, em cada ponto, ou seja, o gradiente da velocidade e da densidade são nulos. São ainda subdivididos em uniformes, no qual o vetor velocidade, em módulo, direção e sentido, é idêntico em todos os pontos, em um instante qualquer, e não-uniforme, se o vetor velocidade variar de ponto a ponto, num instante qualquer. O escoamento não-permanente considera a variação no tempo e no espaço das variáveis que o retratam.

Uma outra classificação dos fluidos envolve a viscosidade. Embora não exista fluidos com viscosidade nula, há muitos problemas nos quais as forças viscosas podem ser desprezadas, simplificando o estudo e levando a resultados significativos. Assim, um escoamento pode ser dito viscoso ou não-viscoso (invíscidos). Nos líquidos, em particular na água, a viscosidade decresce com o aumento de temperatura, isso significa que se a temperatura for aproximadamente constante, a viscosidade também será. Um escoamento viscoso pode ser laminar ou turbulento. No regime laminar, o movimento das partículas é ordenado em lâminas ou camadas e o fluido escoar sem mistura significativa das partículas. No regime turbulento há irregularidade no escoamento, os movimentos são aleatórios e as partículas se misturam. Para determinar se um escoamento é laminar ou turbulento existem três parâmetros a serem combinados. O primeiro é referente a escala de comprimento, o segundo à velocidade e o terceiro à viscosidade. Estes três parâmetros definem o número de Reynolds, Re (POTTER; SCOTT, 2007). O número de Reynolds é um parâmetro adimensional dado por

$$Re = \frac{VL}{\nu}, \quad (2.8)$$

onde L e V são comprimento e velocidade características do fluido e $\nu = \mu/\rho$ é viscosidade cinemática. Em geral, escoamentos com alto número de Reynolds são turbulentos, caso contrário são laminares. O número de Reynolds, à partir do qual o escoamento passa a ser turbulento é chamado de Reynolds crítico, $Re_{\text{crít}}$. Assim, se $Re < Re_{\text{crít}}$ então o escoamento é laminar, caso $Re > Re_{\text{crít}}$, o escoamento é turbulento. Se o $Re \approx Re_{\text{crít}}$, o escoamento pode ser laminar e turbulento, o que é denominado escoamento intermitente.

A última classificação a ser considerada é quanto ao escoamento ser incompressível ou compressível. Nos escoamentos incompressíveis as variações na massa específica são desprezíveis, ou seja, a densidade dos componentes do fluido permanece relativamente constante durante o escoamento, assim,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (2.9)$$

Mas, isso não significa exigir que a massa específica seja a mesma em qualquer ponto do fluido, por exemplo, em escoamentos que envolvem camadas adjacentes de água doce e salgada, são exemplos de escoamentos incompressíveis, nos quais a massa específica varia. Quando as variações de massa específica não são desprezíveis, o escoamento é dito compressível.

Capítulo 3

Modelo de qualidade de água

A base dos modelos de qualidade de água é o modelo hidrodinâmico, o modelo de transporte advectivo-difusivo e as equações dos processos das reações. Por meio destas equações é possível representar a dinâmica do escoamento do corpo d'água e estudar o comportamento das espécies reativas (poluentes ou substâncias) durante o transporte. Em geral, as concentrações das espécies dos poluentes dependem do campo de velocidades do fluido, obtido a partir do modelo hidrodinâmico. As equações dos processos das reações retratam fenômenos como o ciclos do nitrogênio (N), carbono (C) e fósforo (P), considerando os termos de fontes e decaimentos que ocorrem internamente e externamente ao corpo d'água.

Neste capítulo, estudaremos o transporte e as reações internas no corpo d'água do lago Igapó 1, em Londrina, Paraná, considerando os ciclos do carbono (C) e nitrogênio (N). Para uma melhor compreensão das reações, inicialmente descrevemos as características das espécies reativas bem como suas interações. Em seguida, apresentamos o modelo de qualidade de água e os procedimentos numéricos utilizados na discretização deste.

3.1 Parâmetros indicadores de qualidade de água

Para realizar o controle da poluição em corpos d'água, utilizam-se os parâmetros de qualidade de água, que definem os limites físicos, químicos e biológicos que cada substância ou organismo, presente na água, deve obedecer. Dentre os inúmeros parâmetros, a Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB), selecionou 35 deles, apresentados na tabela 3.1, que tem maior representatividade nos monitoramentos.

Dos parâmetros apresentados na tabela 3.1, nove deles compõem o índice de qualidade de água (IQA). O valor do IQA é o resultado de uma fórmula definida pela CETESB, que relaciona os seguintes parâmetros: o oxigênio dissolvido (OD), a demanda bioquímica de oxigênio (DBO), os coliformes fecais, a temperatura da água, o potencial hidrogeniônico (pH), o nitrogênio Kjeldahl total, o fósforo total, os sólidos totais e a turbidez. No Apêndice A apresentamos medições do índice de qualidade da água do lago Igapó 1, realizadas pelo Instituto Ambiental do Paraná (IAP), pelo Conselho Municipal do Meio Ambiente (CONSEMMA), pela Universidade Estadual de Londrina (UEL) e pelo

Tabela 3.1: Alguns parâmetros indicadores de qualidade de água segundo a CETESB.

Alumínio	Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO 5,20)	Oxigênio Dissolvido (OD)
Bário	Ferro Total	Ortofosfato Solúvel
Cádmio	Fósforo Total	pH
Chumbo	Manganês	Resíduo Não Filtrável
Cloreto	Mercúrio	Sólido Total
Clorofila-a / Feofitina-a	Microtox	Surfactantes
Cobre	Níquel	Temperatura da Água
Coliformes Fecais	Nitrogênio Amoniacal	Temperatura do Ar
Coloração da Água	Nitrogênio Kjeldahl Total	Teste de Toxicidade Crônica
Condutividade Específica	Nitrogênio Nitrato	Turbidez
Cromo Total	Nitrogênio Nitrito	Zinco
Demanda Química de Oxigênio (DQO)	Fenóis	

Clube de Engenharia e Arquitetura de Londrina (CEAL) nos anos de 2007 e 2008 (TI SOLUTION, 2009).

Para uma melhor compreensão do modelo utilizado neste trabalho, a seguir discutiremos os parâmetros que compõem o IQA e mais alguns dos 35 parâmetros selecionados pela CETESB.

3.1.1 Parâmetros físicos

De uma maneira geral, as características físicas são analisadas em função dos sólidos que se encontram suspensos, dissolvidos ou em forma de colóides (substância que em dissolução, se difunde com extraordinária lentidão através das membranas vegetais e animais) no corpo d'água. Os parâmetros físicos da água afetam os sentidos humanos e dentro desta classificação estão parâmetros como a turbidez, temperatura, coloração e resíduo total.

Turbidez

Turbidez é a função que relaciona a quantidade de luz que penetra na água como função da profundidade. Quanto maior for a quantidade de material suspenso, maior será a dificuldade para a penetração da luz. A turbidez é devido à presença de sólidos em suspensão, tais como partículas inorgânicas (areia, argila, silte, etc.) e de detritos orgânicos (algas e bactérias, plâncton em geral, etc.).

Alta turbidez reduz a fotossíntese da vegetação enraizada submersa e de algas, suprimindo a produtividade de peixes. Logo, a turbidez tem influência nas comunidades biológicas aquáticas. A unidade de medida utilizada é a Unidade Nefelométrica de Turbidez (UNT).

Temperatura

O corpo d'água apresenta variações diurnas e sazonais de temperatura, bem como estratificação vertical. A elevação local da temperatura em um corpo d'água geralmente é provocada por despejos industriais. Fontes poluidoras despejam materiais em suspensão, aumentando a turbidez, impedindo a penetração da luz solar, influenciando diretamente na temperatura do corpo d'água. A morte de microorganismos é outro fator que altera a temperatura do corpo d'água, pois a decomposição da matéria orgânica eleva a turbidez.

As elevações de temperatura no meio aquático têm com conseqüência o aumento da taxa de reações químicas e biológicas, a diminuição da solubilidade e aumento da taxa de transferência dos gases. A unidade de medida utilizada é a escala de graus Celsius °C.

Coloração

A coloração da água pode indicar fenômenos naturais, como a lavagem do solo pelas enxurradas, ou a agressão causada pelo homem, como a eutrofização devido ao lançamento de esgotos ricos em nutrientes compostos de fósforo e nitrogênio. A eutrofização é o fenômeno causado pelo excesso de nutrientes em corpos d'água, o que leva à proliferação excessiva de algas. As algas, por sua vez, ao entrarem em decomposição, levam ao aumento do número de microorganismos e à conseqüente deterioração da qualidade da água. A medida da cor de uma água é feita pela comparação com soluções conhecidas de platina-cobalto ou com discos de vidro corados calibrados com a solução de platina-cobalto.

Sólidos totais

Os sólidos totais nas águas correspondem a toda matéria que permanece como resíduo, após evaporação, secagem ou calcinação. As medições em balanças de precisão fornecem informações sobre a quantidade total de sólidos no meio. Tais elementos sólidos, ao sedimentar no leito dos rios, podem destruir os organismos vegetais, ou prejudicar a desova de peixes. Assim, a decomposição anaeróbica de possíveis bactérias e organismos vegetais, além dos resíduos que ficam retidos pelos sólidos aumentam a poluição do corpo d'água. A quantificação de sólidos totais é, em geral, dada em miligramas por litro (mg/L).

3.1.2 Parâmetros químicos

Os parâmetros químicos descrevem as modificações químicas em função da interação dos componentes químicos. Esses parâmetros resultam de ciclos e processos que ocorrem na água. Alguns desses parâmetros indicadores são o oxigênio dissolvido (OD), a demanda bioquímica de oxigênio (DBO), a demanda química de oxigênio (DQO), o potencial hidrogeniônico (pH), o nitrogênio, o fósforo, os metais pesados, tais como o mercúrio, o chumbo, o cádmio, o cromo, entre outros.

Oxigênio dissolvido (OD)

O parâmetro oxigênio dissolvido indica a quantidade de gás oxigênio contido na água. Pode ser oriundo da dissolução, natural ou artificial, do oxigênio atmosférico e também

da produção liberada por alguns microorganismos da água como algas e bactérias. O nível de OD em um corpo d'água depende do balanço entre a quantidade consumida de oxigênio e a quantidade produzida de oxigênio. O consumo de oxigênio é realizado pelos seres aeróbicos, como peixes e algumas bactérias, enquanto a produção de oxigênio é oriunda de seres fotossintéticos, com as algas, além do processo de aeração.

A concentração saturação de OD é função da altitude e da temperatura do corpo d'água. É medida, em geral, em miligramas por litro (mg/L). Por exemplo, ao nível do mar e à temperatura de $20^{\circ}C$, a concentração de saturação de OD é de $9,2 mg/L$, como pode ser observado na tabela 3.2 abaixo.

Tabela 3.2: Saturação do oxigênio dissolvido (OD) em mg/L

Temperatura ($^{\circ}C$)	Altitude (m)				
	0	250	500	750	1000
0	14,6	14,2	13,8	13,3	12,9
4	13,1	12,7	12,3	12,0	11,6
8	11,9	11,5	11,2	10,8	10,5
10	11,3	11,0	10,7	10,3	10,0
15	10,2	9,9	9,5	9,3	9,0
20	9,2	8,9	8,6	8,4	8,1
25	8,4	8,1	7,9	7,6	7,4
30	7,6	7,4	7,2	7,0	6,7

Fonte: ROMEIRO (2003) obtido em DERÍZIO (1992).

Em águas poluídas, a decomposição dos compostos orgânicos por atividade bacteriana (microorganismos heterotróficos) leva à liberação de sais minerais no meio, especialmente os de nitrogênio e fósforo, que são utilizados como nutrientes pelas algas. Este efeito pode "mascarar" a avaliação do grau de poluição de um corpo d'água, quando se toma por base apenas a concentração de oxigênio dissolvido. Sob este aspecto, águas poluídas são aquelas que apresentam baixa concentração de oxigênio dissolvido, devido ao seu consumo na decomposição de compostos orgânicos, enquanto que as águas limpas apresentam concentrações de oxigênio dissolvido elevadas, um pouco abaixo da concentração de saturação. No entanto, uma água eutrofizada (superpopulação de algas) pode apresentar concentrações de oxigênio bem superiores a $10 mg/L$, mesmo em temperaturas superiores a $20^{\circ}C$, caracterizando uma situação de supersaturação. Isto ocorre principalmente em lagos de baixa velocidade, onde crostas verdes de algas se formam na superfície. Nesse processo, a matéria orgânica é decomposta pelos microorganismos heterotróficos que, por sua vez, produzem gás carbônico que é matéria prima para o processo fotossintético, produzindo oxigênio.

Outra fonte de oxigênio é o processo de aeração, que pode ser definido como reoxigenação da água com ajuda do ar. Para restituir a uma água poluída o oxigênio dissolvido, ou para alimentar o processo de biodegradação das matérias orgânicas consumidoras de oxigênio, é preciso favorecer o contato da água e do ar. A taxa de aeração superficial depende das características hidráulicas e é proporcional à velocidade do corpo d'água, ou

seja, quanto maior a velocidade, maior a capacidade de reaeração. Isso significa que em uma cascata, a taxa de aeração é maior do que a de um rio, que por sua vez, apresenta taxa de aeração superior à de uma represa. A aeração também pode ser feita artificialmente, onde aeradores superficiais eletro-mecânicos, ou máquinas sopradoras de ar em tubulações, contendo difusores para a redução dos tamanhos das bolhas são empregados no corpo d'água. Novos sistemas de aeração vêm sendo continuamente desenvolvidos.

Portanto, o OD é um dos principais parâmetros de caracterização dos efeitos da poluição das águas, pois pode indicar presença de matéria orgânica (valores de OD inferiores ao valor de saturação) ou crescimento anormal de algas (valores de OD superiores ao valor de saturação).

Demanda bioquímica de oxigênio (DBO)

A demanda bioquímica de oxigênio determina indiretamente a concentração de matéria orgânica biodegradável, por meio da demanda de oxigênio exercida por microrganismos através da respiração, por ser a quantidade de oxigênio necessária para estabilizar biologicamente o sistema. É medida, em geral, em miligramas por litro (mg/L).

A matéria orgânica é formada por compostos como proteínas, carboidratos, uréia, surfactantes (detergentes), gorduras, óleos, fenóis, pesticidas, etc. Esta matéria, carbonácea, pode ser biodegradável, ou não, e se encontrar dissolvida ou em suspensão. Medindo a quantidade de oxigênio consumida pelas bactérias oxidantes, determinamos indiretamente a quantidade da matéria orgânica biodegradável presente no corpo d'água. Em suma, uma DBO elevada significa presença de poluição através de matéria orgânica biodegradável de origem doméstica ou industrial.

A DBO_5 é um teste padrão, realizado a uma temperatura constante de $20^{\circ}C$ e durante um período de incubação também fixo, de 5 dias. Neste teste uma amostra é coletada em duplicata. Em uma das amostras é medido o oxigênio dissolvido após a coleta; o oxigênio da outra amostra é medido após 5 dias, período em que a amostra fica em uma incubadora a uma temperatura de $20^{\circ}C$. A diferença de concentração de oxigênio nas amostras representa a demanda bioquímica de oxigênio (oxigênio consumido para oxidar a matéria orgânica via respiração dos microrganismos no período de 5 dias). Esta medida é um indicador estimativo, já que no corpo d'água, ocorrem fenômenos de turbulência, aeração, insolação e etc., que alteram dinamicamente o valor da medida estática.

A DBO em esgotos domésticos é em torno de $300 mg/L$, ou seja, 300 miligramas de oxigênio são consumidos em 5 dias, pelas bactérias oxidantes, a uma temperatura de $20^{\circ}C$, em 1 litro de esgoto.

Demanda química de oxigênio

A demanda química de oxigênio é a quantidade de oxigênio necessária para oxidação da matéria orgânica através de um agente químico. Um valor de DQO alto indica uma grande concentração de matéria orgânica oxidável e baixo teor de oxigênio. O aumento da concentração de DQO num corpo d'água se deve principalmente a despejos de origem industrial. Este parâmetro também fornece uma estimativa da concentração de matéria

orgânica em termos de oxigênio consumido. A principal vantagem da DQO é a rapidez da medição, que pode ser realizada em pouco mais de duas horas, enquanto que a DBO leva 5 dias. Como os parâmetro OD e DBO, a DQO é também quantificada, em geral, em miligramas por litro (*mg/L*).

Potencial hidrogeniônico (pH)

O potencial hidrogeniônico é a concentração relativa dos íons de hidrogênio numa solução sendo calculado como o logaritmo negativo de base 10 da concentração de íons de hidrogênio, em moles por litro. Se o pH assume valor 7, dizemos que a solução está neutra. Valores inferiores a 7 indicam acidez e superiores a alcalinidade. Quando as condições de pH não são favoráveis às espécies de peixes, eles correm o risco de sofrerem irritações dérmicas, hemorragias, hipersecreção de muco, patologias branquiais e até mesmo a morte. Essas modificações também levam os peixes ao estresse, deixando-os suscetíveis a outras doenças.

Nitrogênio

O nitrogênio manifesta-se no meio ambiente sob diversas formas, como o nitrogênio molecular (N_2), que se encontra livre na atmosfera; o nitrogênio orgânico, que se encontra dissolvido e em suspensão no corpo d'água; a amônia, que pode ser livre (NH_3) ou ionizada (NH_4^+); o nitrito (NH_2) e o nitrato (NO_3).

No corpo d'água, o nitrogênio oriundo de esgotos, está quase todo na forma de proteínas (substância formada por nitrogênio, carbono, oxigênio, fósforo, enxofre e ferro) e uréia (composto orgânico cristalino, incolor, produto final da excreção do nitrogênio nos mamíferos). Nos esgotos domésticos frescos, predomina o nitrogênio em forma de amônia e o orgânico, e nos esgotos antigos predomina o nitrogênio em forma de nitrato. O nitrogênio em forma de amônia livre é altamente tóxico aos peixes, enquanto na forma ionizada é não tóxico. Em meios aquáticos, para valores de pH menores que 8, a amônia se apresenta na forma ionizada.

A quantificação do nitrogênio, que é dada em miligramas por litro (*mg/L*), no corpo d'água é importante, porque está intimamente ligada ao consumo de OD. Essa ligação ocorre, pois, as bactérias consomem oxigênio ao realizar o processo de nitrificação, que consiste em transformar amônia em nitrito e este em nitrato. No fim desse processo de nitrificação, o nitrato gerado é utilizado por algas ou outras plantas para formar proteínas. O nitrato, em altas concentrações, pode trazer vários problemas de intoxicação, tanto no ser humano como nos animais.

As algas têm no nitrogênio um elemento vital para o seu crescimento. O crescimento descontrolado das algas (floração das águas) pode acarretar a eutrofização. A eutrofização consiste no seguinte processo: com a floração, as algas submersas deixam de fazer a fotossíntese em taxa adequada e morrem; a taxa de geração de oxigênio se reduz; as algas mortas são decompostas por microorganismos; e a DBO aumenta. Portanto, a eutrofização acarreta a morte de seres aeróbicos.

O nitrogênio pode ser quantificado pela forma Kjeldahl (NTK), que mede predominante o nitrogênio dos esgotos domésticos brutos e daí sua importância como parâmetro

químico de qualidade das águas. Consiste na soma dos nitrogênios orgânico e amoniacal. Esse parâmetro é importante não só porque constata a presença de esgotos lançados recentemente no corpo d'água, mas também como um futuro indicador do consumo de oxigênio e um possível crescimento de algas.

Fósforo

O fósforo é um nutriente fundamental para o crescimento e multiplicação das bactérias que são responsáveis pelos mecanismos bioquímicos de estabilização da matéria orgânica, por isso, sua presença nos corpos d'água é indispensável. Esse parâmetro não traz problemas de ordem sanitária para a água, porém, em alta quantidade contribui para a proliferação de algas, que podem acelerar o processo de eutrofização.

A quantidade de fósforo na água pode ter origem no solo, nos despejos domésticos e/ou industriais, nos detergentes, nos excrementos de animais e nos fertilizantes. A quantificação do fósforo é, em geral, dada em miligramas por litro (*mg/L*).

Mercúrio

O mercúrio em corpos d'água provém de mineração e de uso de derivados na indústria e agricultura. Acumula-se nos organismos dos seres aquáticos durante toda a vida, representando um perigo para os homens que se alimentam de peixes ou aves desse ecossistema.

O mercúrio é altamente tóxico ao homem, sendo que doses superiores a 3 gramas são fatais. A intoxicação por mercúrio é caracterizada por náuseas, vômitos, dores abdominais, diarreia, danos nos ossos e morte. A intoxicação crônica afeta glândulas salivares, rins e altera as funções psicológicas e psicomotoras. O padrão de potabilidade é de 0,001 *mg/L*.

Chumbo

Presente nos corpos d'água devido às descargas de efluentes industriais, como aquelas de indústrias de baterias automotivas, de metalúrgicas e no despejo de materiais de construção a base de chumbo. Dissolvido em águas superficiais naturais, a sua concentração geralmente encontra-se em quantidade baixa. Seu padrão de potabilidade é de 0,03 *mg/L*. Nos peixes, as doses fatais, em geral, variam de 0,1 a 0,4 *mg/L*. A toxicidade do chumbo, quando aguda, é caracterizada pela sede intensa, sabor metálico, inflamação gastrointestinal, vômitos e diarreias.

Cádmio

O cádmio é obtido como subproduto nos processos de fundição e refinação de metais como zinco, chumbo e cobre. Derivados de cádmio são utilizados em pigmentos e pinturas, baterias, solda, acumuladores, estabilizadores de PVC, reatores nucleares e nos processos de galvanoplastia. Ele é também utilizado como inseticida.

Caracterizado com metal de elevado potencial tóxico, que se acumula em organismos aquáticos, a ação do cádmio sobre a fisiologia dos peixes é semelhante à do chumbo. O padrão de potabilidade está fixado por volta de $0,005 \text{ mg/L}$.

Cromo

O cromo III (forma trivalente) é elemento fundamental para o funcionamento de organismos vivos, por ser essencial ao metabolismo de carboidratos, lipídeos e proteínas. Entretanto, o cromo IV (forma tetravalente) é tóxico e carcinogênico. As concentrações de cromo em água doce são muito baixas, sendo o padrão de potabilidade $0,05 \text{ mg/L}$.

O excesso deste metal nos corpos d'água pode ter origem doméstica ou industrial, sendo resíduos na produção de alumínio anodizado, aço inoxidável, tintas, pigmentos, explosivos, papel, entre outros produtos.

3.1.3 Parâmetros biológicos

Os parâmetros biológicos descrevem as características biológicas sob o ponto de vista patológico da vida animal, vegetal e de organismos unicelulares (algas) presentes no corpo d'água. Os organismos patogênicos se dividem em coliformes e comunidade planctônica. A bactéria coliforme total é utilizada como primeira referência para constatar contaminação do meio aquático, enquanto a clorofila é utilizada para indicar a presença de algas.

Coliformes

As bactérias do grupo coliforme são consideradas os principais indicadores de contaminação fecal. O grupo coliforme é formado por bactérias que inclui os gêneros *Klebsiella*, *Escherichia*, *Serratia*, *Erwenia* e *Enterobactéria*. As bactérias coliformes fecais (restritas ao trato intestinal de animais de sangue quente) mostra-se como um indicador mais significativo para evidenciar o nível de contaminação por esgotos domésticos em um corpo d'água do que o uso da bactéria coliforme "total".

O parâmetro coliforme indica possibilidade da existência de microorganismos patogênicos, responsáveis por doenças tais como febre tifóide, febre paratifóide, disenteria bacilar e cólera. A contaminação fecal é geralmente medida em número mais provável (NMP) de coliformes por cem mililitros de água amostrada (NMP/100 ml). Por meio desse indicador os órgãos públicos avaliam as condições do corpo d'água para banho, classificando-a como excelente, muito boa, satisfatória ou imprópria. A essa classificação dá-se o nome de balneabilidade.

Clorofila-a

A clorofila é um dos pigmentos responsáveis pelo processo fotossintético. A clorofila-a é a mais comum das clorofilas (a, b, c, e d) e representa, aproximadamente, de 1 a 2% do peso seco do material orgânico em todas as algas planctônicas e é, por isso, um indicador da biomassa algal. A quantidade de clorofila, medida em microgramas por litro ($\mu\text{g/L}$) da

amostra d'água, permite estimar a capacidade de reoxigenação das águas no seu próprio meio e avaliar a massa de nutrientes presentes.

O crescimento anormal de algas no meio aquático é devido ao excesso de nutrientes (nitrogênio e fósforo) oriundos de esgotos domésticos e industriais. Um desses vegetais aquáticos são os fitoplânctons. Algumas espécies de fitoplânctons produzem toxinas que podem levar a morte dos seres aquáticos. Quando os fitoplânctons morrem, eles são consumidos pelas bactérias, as quais, no processo de oxidação biológica, utilizam o oxigênio contido na água. Dependendo da quantidade de matéria orgânica presente, este processo de oxidação biológica pode esgotar a quantidade de oxigênio dissolvida no corpo d'água, interferindo na respiração dos peixes e de outros seres aeróbicos, levando-os à morte. Enfim, como as algas se localizam na superfície dos corpos d'água, elas dificultam a penetração da luz, o que prejudica o desenvolvimento das plantas que se encontram em profundidade, reduzindo a diversidade biológica.

3.2 Classificação da qualidade de água

Os padrões dos parâmetros de qualidade de água, citados anteriormente, foram definidos por legislação variando de acordo com a classificação da água. Segundo a Resolução nº 357 de 17 de março de 2005 do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA, 2005), a água pode ser classificada como doce (salinidade igual ou superior a 0,5‰), salobra (salinidade de 0,5‰ a 30‰) e salina (salinidade igual ou superior a 30‰). Quanto às águas doces, apresentam-se em cinco classes: especial, classes I, II, III e IV.

Especificamente, neste trabalho, vamos estudar a qualidade de águas doces. Das águas doces, segundo (CONAMA, 2005), são observados os seguintes usos e as seguintes condições de qualidade descritos nas subseções abaixo.

3.2.1 Classe especial

Essa classe de água é utilizada para abastecimento da população sem prévio tratamento, ou desinfecção. Nas águas de classe especial deverão ser mantidas as condições naturais do corpo d'água.

3.2.2 Classe I

As águas da classe I são destinadas ao abastecimento para consumo humano, após tratamento simplificado; à proteção das comunidades aquáticas; à recreação de contato primário, tais como natação, esqui aquático e mergulho e à irrigação de hortaliças e de frutas.

Sobre as condições de qualidade da água de classe I, não devemos verificar efeitos tóxicos crônicos nos organismos aquáticos, comprovado pela realização de ensaio ecotoxicológico padronizado. Materiais flutuantes, inclusive espumas não-naturais, óleos e graxas, substâncias que comuniquem gosto ou dor, corantes e resíduos sólidos, estão ausentes. Quanto aos coliformes termotolerantes (fecais), estes não deverão exceder o limite

de 200 coliformes por 100 mililitros, em 80% ou mais de pelo menos 6 amostras coletadas durante o período de um ano, com frequência bimestral. A DBO_5 a $20^\circ C$ deverá ser limitada a 3 mg/L , ou seja, a demanda bioquímica de oxigênio em 5 dias, a $20^\circ C$, deve ser no máximo de 3 miligramas para a estabilização da matéria orgânica carbonácea biodegradável presente em um litro de esgoto. Quanto à quantidade de OD, em qualquer amostra, não poderá ser inferior a 6 mg/L . A turbidez é limitada a 40 unidades nefelométrica de turbidez (UNT) e o pH limitado entre 6,0 a 9,0.

3.2.3 Classe II

Assim como as águas de classe I, estas também são destinadas ao abastecimento para consumo humano após tratamento convencional. Elas são destinada à proteção das comunidades aquáticas; à recreação de contato primário, tais como natação, esqui aquático e mergulho; à irrigação de hortaliças, plantas frutíferas e de parques, jardins, campos de esporte e lazer com os quais o público possa vir a ter contato direto, à aquicultura e à atividade de pesca.

Aplicam-se as mesmas condições de qualidade da classe I, com exceção que será permitida a presença de corantes, exceto aqueles provenientes de fontes antrópicas que não sejam removíveis por processo de coagulação, sedimentação e filtração convencionais. Quanto aos coliformes termotolerantes (fecais), não deverão exceder um limite de 1.000 coliformes por 100 mililitros, em 80% ou mais de pelo menos 6 (seis) amostras coletadas durante o período de um ano, com frequência bimestral. A cor do corpo d'água é limitada até 75 mg Pt/L , a turbidez até 100 UNT, a DBO_5 a $20^\circ C$, até 5 mg/L , o OD, em qualquer amostra, não inferior a 5 mg/L , a clorofila-a até $30\ \mu\text{ g/L}$, a densidade de cianobactérias (classificadas como algas) até 50000 cel/mL (células por mililitro) e o fósforo total até $0,030\text{ mg/L}$, em ambientes lênticos, onde as águas têm movimento lento ou estagnado, com tempo de permanência superior a 40 dias e, até $0,050\text{ mg/L}$, em ambientes intermediários, onde as águas têm tempo de permanência entre 2 e 40 dias.

3.2.4 Classe III

Para o abastecimento do consumo humano, se faz necessário tratamento convencional ou avançado. As águas desta classe são destinadas à irrigação de culturas arbóreas, cerealíferas e forrageiras; à pesca amadora; à recreação de contato secundário e à dessedentação (saciar da sede) de animais.

Quanto as condições de qualidade da água de classe III, não devemos verificar efeitos tóxicos agudos nos organismos aquáticos, comprovado pela realização de ensaio ecotoxicológico padronizado. Materiais flutuantes, inclusive espumas não-naturais; óleos e graxas; substâncias que comuniquem gosto ou odor e resíduos sólidos objetáveis; estão ausentes. E assim como nas águas da classe II, não será permitida a presença de corantes provenientes de fontes antrópicas que não sejam removíveis por processo de coagulação, sedimentação e filtração convencionais.

Os coliformes termotolerantes, para o uso de recreação de contato secundário, não deverão exceder o limite de 2500 coliformes por 100 mililitros, em 80% ou mais de pelo

menos 6 amostras, coletadas durante o período de um ano, com frequência bimestral. Para dessedentação de animais confinados não deverá ser excedido o limite de 1000 coliformes por 100 mililitros, em 80% ou mais de pelo menos 6 amostras coletadas durante o período de um ano, com frequência bimestral. Para os demais usos, não deverá ser excedido um limite de 4000 coliformes por 100 mililitros em 80% ou mais de pelo menos 6 amostras coletadas durante o período de um ano, com periodicidade bimestral.

Os valores de densidade de cianobactérias para dessedentação de animais não deverão exceder 50.000 cel/ml. A DBO_5 , a $20^\circ C$, até 10 mg/L , o OD, em qualquer amostra, não inferior a 4 mg/L , a turbidez até 100 UNT , a cor até 75 PT/L e o pH entre 6,0 a 9,0.

3.2.5 Classe IV

As águas pertencentes a esta classe são destinadas à navegação e à harmonia paisagística. Nesta classe materiais flutuantes, inclusive espumas não-naturais, encontram-se ausentes, assim como substâncias facilmente sedimentáveis que contribuam para o assoreamento de canais de navegação. São tolerados óleos e graxas e o OD deve ser superior a 2 mg/L em qualquer amostra. O pH deve ser entre 6 e 9.

3.3 Modelo hidrodinâmico

Nas seções precedentes deste capítulo estudamos a importância de alguns parâmetros no controle do nível de poluição em corpos d'água. Em nossa modelagem vamos supor que, as substâncias que consideramos, descritas na seção (3.1.2), fluem com a mesma velocidade do escoamento do corpo d'água, de modo que o campo de velocidades das espécies reativas será tomado como idêntico àquele do corpo d'água. Esta hipótese permite desacoplar o cálculo do escoamento do corpo d'água do escoamento de cada espécie reativa, pois basta calcular o escoamento do corpo d'água que teremos o campo de velocidades de todas espécies reativas consideradas. O objetivo desta seção é construir o modelo hidrodinâmico e os procedimentos numéricos que permitirão a descrição do escoamento (campo de velocidades e pressão) do corpo d'água do lago Igapó 1, em Londrina, Paraná.

3.3.1 Modelagem da geometria do lago Igapó 1

O lago Igapó foi criado em 10 de dezembro de 1959, por meio do represamento do Ribeirão Cambé, como uma solução para o problema de drenagem, dificultada por uma barragem natural de pedra. O lago artificial tem aproximadamente 3,5 mil metros de extensão e 200 metros de largura média e se subdivide em Igapó 1, Igapó 2, Igapó 3 e Igapó 4. A figura 3.1 mostra essa subdivisão por meio de uma imagem híbrida de satélite. Na região onde se encontram os lagos Igapó (1, 2, 3 e 4) a altitude varia de 580 a 550 metros, resultando numa diferença altimétrica de 30 metros. Quanto à profundidade média do lago Igapó 1, ela é de 2 metros. Tais características permitem simplificar o escoamento da água no lago Igapó 1 por meio de um modelo 2DH, ou seja, podemos interpretar o fluxo dinâmico no domínio geométrico do lago Igapó 1 por meio de um modelo bidimensional horizontal devido à característica laminar deste corpo d'água.

Para gerar o interior da geometria do lago Igapó I optamos pela discretização estruturada, pois esse método permite a implementação otimizada de muitos métodos de solução e porque este sistema permite que a malha computacional seja coincidente com a geometria física (CIRILO; DE BORTOLI, 2006). A transformação numérica entre o sistema de coordenadas cartesianas (x_1, y_1) do domínio físico e o sistema de coordenadas generalizado (ξ, η) do domínio computacional foi dada por

$$\alpha(x_1)_{\xi\xi} + \gamma(x_1)_{\eta\eta} - 2\beta(x_1)_{\xi\eta} + \frac{1}{J^2} (P(x_1)_\xi + Q(x_1)_\eta) = 0 \quad (3.1)$$

$$\alpha(y_1)_{\xi\xi} + \gamma(y_1)_{\eta\eta} - 2\beta(y_1)_{\xi\eta} + \frac{1}{J^2} (P(y_1)_\xi + Q(y_1)_\eta) = 0, \quad (3.2)$$

onde x_1 e y_1 são as coordenadas cartesianas do domínio físico, ξ e η são as coordenadas generalizadas do domínio computacional, $P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$ são os termos fonte, que são responsáveis ou permitirão a concentração de linhas onde forem requeridas, dados por

$$P(\xi, \eta) = - \sum_{j=1}^{nj} a_j \text{sign}(\xi - \xi_j) e^{-c_j |\xi - \xi_j|} - \sum_{i=1}^{ni} b_i \text{sign}(\xi - \xi_i) e^{-d_i \sqrt{(\xi - \xi_i)^2 + (\eta - \eta_i)^2}} \quad (3.3)$$

$$Q(\xi, \eta) = - \sum_{j=1}^{nj} a_j \text{sign}(\eta - \eta_j) e^{-c_j |\eta - \eta_j|} - \sum_{i=1}^{ni} b_i \text{sign}(\eta - \eta_i) e^{-d_i \sqrt{(\xi - \xi_i)^2 + (\eta - \eta_i)^2}}. \quad (3.4)$$

Os índices dos somatórios ni e nj representam todas as linhas nas direções ξ e η , respectivamente, e a_j , b_i , c_j e d_i são constantes ajustadas numericamente com o objetivo de atrair as linhas ξ e η para as linhas ξ_i e η_i (MALISKA, 1995; DE BORTOLI, 2000). Enfim, J é o jacobiano definido por

$$J = [(x_1)_\xi (y_1)_\eta - (x_1)_\eta (y_1)_\xi]^{-1} \quad (3.5)$$

e

$$\alpha = (x_1)_\eta^2 + (y_1)_\eta^2, \quad \beta = (x_1)_\eta (x_1)_\xi + (y_1)_\eta (y_1)_\xi, \quad \gamma = (x_1)_\xi^2 + (y_1)_\xi^2, \quad (3.6)$$

com $(x_1)_\xi$, $(x_1)_\eta$, $(y_1)_\xi$ e $(y_1)_\eta$ denotando derivadas parciais. O sistema de equações diferenciais parciais elíptico (3.1)-(3.2), sujeito a condições iniciais e de contorno, fornece as linhas ξ e η que superpostas, formam a malha computacional (CIRILO, 2001).

Reescrevendo o sistema (3.1)-(3.2) segundo uma variável ϕ genérica temos (DE BORTOLI, 2000; MALISKA, 1995)

$$\alpha\phi_{\xi\xi} + \gamma\phi_{\eta\eta} - 2\beta\phi_{\xi\eta} + \frac{1}{J^2} (P\phi_\xi + Q\phi_\eta) = 0 \quad (3.7)$$

As derivadas parciais que aparecem em (3.7) foram discretizadas utilizando a fórmula de Taylor infinitesimal, que afirma: para uma dada função $f : I \rightarrow \mathfrak{R}$ n vezes diferenciável no ponto $x \in I$, então para qualquer h tal que $(x + h) \in I$ tem -se

$$f(x + h) = f(x) + hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) + \frac{1}{6}h^3 f'''(x) + \dots \quad (3.8)$$

$$f(x - h) = f(x) - hf'(x) + \frac{1}{2}h^2 f''(x) - \frac{1}{6}h^3 f'''(x) + \dots \quad (3.9)$$

onde $h \in \mathfrak{R}$ (LIMA, 1992). Somando as equações (3.8) e (3.9) e negligenciando termos $O(h^4)$ obtemos

$$f(x + h) + f(x - h) \cong 2f(x) + h^2 f''(x) , \quad (3.10)$$

ou seja, a derivada de segunda ordem podem ser aproximada por

$$\frac{d^2 f(x)}{dx^2} \cong \frac{f(x + h) - 2f(x) + f(x - h)}{h^2} . \quad (3.11)$$

Subtraindo as equações (3.8) e (3.9) e negligenciando termos $O(h^3)$ obtemos a seguinte aproximação para a derivada de primeira ordem

$$\frac{df(x)}{dx} \cong \frac{f(x + h) - f(x - h)}{2h} . \quad (3.12)$$

Estas aproximações são denominadas diferenças centrais. Analogamente, utilizando as equações (3.8) e (3.9), podemos encontrar as aproximações

$$\frac{df(x)}{dx} \cong \frac{f(x + h) - f(x)}{h} \quad (3.13)$$

e

$$\frac{df(x)}{dx} \cong \frac{f(x) - f(x - h)}{h} , \quad (3.14)$$

denominadas para frente e para trás, respectivamente. Para a variável $\phi = (\xi, \eta)$, considerando $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$, (i, j) os pontos do domínio computacional e aproximações por diferenças centrais, temos

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \xi^2} \right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{(\Delta\xi)^2} = \phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j} , \quad (3.15)$$

$$\left(\frac{\partial^2 \phi}{\partial \eta^2} \right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j}}{(\Delta\eta)^2} = \phi_{i+1,j} - 2\phi_{i,j} + \phi_{i-1,j} , \quad (3.16)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta\xi} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2} \text{ e} \quad (3.17)$$

$$\left(\frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right)_{i,j} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2\Delta\eta} = \frac{\phi_{i+1,j} - \phi_{i-1,j}}{2} . \quad (3.18)$$

Para a derivada temporal de ϕ , utilizamos a aproximação para frente, ou seja,

$$\left(\frac{\partial\phi}{\partial t}\right)_{i,j} = \frac{\phi_{i,j}^{k+1} - \phi_{i,j}^k}{\Delta t}, \quad (3.19)$$

onde $k + 1$ é o tempo atual, k o tempo anterior e Δt é o incremento no tempo.

Para as derivadas cruzadas de segunda ordem, utilizamos aproximação por diferenças centrais, assim

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial\xi\partial\eta}\right)_{i,j} = \frac{\frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i-1,j+1}}{2\Delta\eta} - \frac{\phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j-1}}{2\Delta\eta}}{2\Delta\xi} = \frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i-1,j-1}}{4\Delta\xi\Delta\eta} \quad (3.20)$$

$$\left(\frac{\partial^2\phi}{\partial\eta\partial\xi}\right)_{i,j} = \frac{\frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j-1}}{2\Delta\xi} - \frac{\phi_{i-1,j+1} - \phi_{i-1,j-1}}{2\Delta\xi}}{2\Delta\eta} = \frac{\phi_{i+1,j+1} - \phi_{i+1,j-1} - \phi_{i-1,j+1} + \phi_{i-1,j-1}}{4\Delta\eta\Delta\xi}. \quad (3.21)$$

A equação (3.7) resulta em um sistema linear da forma $A\phi = b$, dado por

$$\begin{aligned} \phi_{i,j} &= \frac{1}{a_{i,j}} (a_{i+1,j}\phi_{i+1,j} + a_{i-1,j}\phi_{i-1,j} + a_{i,j+1}\phi_{i,j+1} + a_{i,j-1}\phi_{i,j-1}) \\ &+ a_{i+1,j+1}\phi_{i+1,j+1} + a_{i-1,j+1}\phi_{i-1,j+1} + a_{i+1,j-1}\phi_{i+1,j-1} + a_{i-1,j-1}\phi_{i-1,j-1}, \end{aligned} \quad (3.22)$$

onde

$$\begin{aligned} a_{ij} &= 2\alpha + 2\gamma & a_{i+1,j} &= \alpha + \frac{P}{2J^2} \\ a_{i-1,j} &= \alpha - \frac{P}{2J^2} & a_{i,j+1} &= \gamma + \frac{Q}{2J^2} \\ a_{i-1,j-1} &= a_{i+1,j+1} & a_{i+1,j+1} &= -\frac{\beta}{2} \\ a_{i+1,j-1} &= a_{i-1,j+1} & a_{i,j-1} &= \gamma - \frac{Q}{2J^2} \\ a_{i-1,j+1} &= -a_{i+1,j+1}. \end{aligned} \quad (3.23)$$

Este sistema linear foi resolvido pelo método de Gauss-Seidel. As margens foram obtidas com interpolação polinomial via spline cúbico parametrizado, pois sua implementação computacional não é complicada e as imposições feitas sobre o polinômio interpolador minimizam as oscilações, de modo que o contorno modelado seja representativo em relação ao contorno real (CIRILO; DE BORTOLI, 2006). Considerando $((x_1)_n, (y_1)_n)$, os pontos do contorno, em $n + 1$ pontos, os mesmos podem ser ajustados via polinômios cúbicos parametrizados em t , conforme as expressões

$$(x_1)(h) = \sum_{k=0}^3 a_{k_t} (h - t)^k \quad (3.24)$$

$$(y_1)(h) = \sum_{k=0}^3 b_{kt} (h-t)^k, \quad (3.25)$$

onde a variável h é ajustada na medida que se deseja efetuar, ou não, a concentração de pontos à esquerda ou à direita de um ponto base parametrizado em t . Considerando o método spline cúbico natural, os coeficientes a_{kt} e b_{kt} são determinados via resolução dos seguintes sistemas lineares (RUGGIERO; LOPES, 1996)

$$g_{k-1}^{(x_1)} + 4g_k^{(x_1)} + g_{k+1}^{(x_1)} = m_k^{(x_1)} \quad (3.26)$$

$$g_{k-1}^{(y_1)} + 4g_k^{(y_1)} + g_{k+1}^{(y_1)} = m_k^{(y_1)} \quad (3.27)$$

para $k = 2, \dots, n$, onde

$$m_k^{(x_1)} = 6((x_1)_{k+1} - 2(x_1)_k + (x_1)_{k-1}) \quad (3.28)$$

$$m_k^{(y_1)} = 6((y_1)_{k+1} - 2(y_1)_k + (y_1)_{k-1}).$$

Logo, os coeficientes a_{kt} e b_{kt} em (3.10) e (3.11) são dados por

$$\begin{aligned} a_{3k} &= \frac{1}{6} (g_k^{(x_1)} - g_{k-1}^{(x_1)}) \\ b_{3k} &= \frac{1}{6} (g_k^{(y_1)} - g_{k-1}^{(y_1)}) \\ a_{2k} &= \frac{1}{2} g_k^{(x_1)} \\ b_{2k} &= \frac{1}{2} g_k^{(y_1)} \\ a_{1k} &= (x_1)_k - (x_1)_{k-1} + \frac{1}{3} g_k^{(x_1)} + \frac{1}{6} g_{k-1}^{(x_1)} \\ b_{1k} &= (y_1)_k - (y_1)_{k-1} + \frac{1}{3} g_k^{(y_1)} + \frac{1}{6} g_{k-1}^{(y_1)} \\ a_{0k} &= (x_1)_k \\ b_{0k} &= (y_1)_k. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Pelo fato de que os sistemas lineares (3.10)-(3.11) são tridiagonais, num primeiro momento, eliminamos os termos abaixo da diagonal principal e, num segundo momento, substituímos ordenadamente os termos encontrados, calculando o valor dos termos presentes no vetor incógnita. Este método é denominado TriDiagonal Matrix Algorithm (TDMA) e reduz consideravelmente o tempo de memória (DE BORTOLI, 2000). Outro fato relevante é a utilização da técnica multiblocos (DE BORTOLI, 2000), que consiste em, primeiramente, fazer uma análise de quais e quantas sub-malhas (blocos) a malha inteira seria composta. Após a definição dos sub-blocos, para cada um deles, defini-se o contorno e seu interior. Ao final, os blocos são lidos e gravados em um arquivo referente a malha inteira. A junção

dos sub-blocos que formam a malha é feita a partir da leitura dos pontos extremos comuns entre os blocos (CIRILO; DE BORTOLI, 2006).

Tais procedimentos foram adotados devido ao seu desempenho computacional e ainda pela rápida similaridade obtida com a geometria física, a partir de poucos pontos conhecidos do domínio. Deste modo, a modelagem da geometria discretizada do lago Igapó 1 é apresentada na figura 3.3, onde foram considerados 839 pontos espaçados ao longo das margens esquerda e direita e 35 pontos espaçados nos contornos de entrada e saída.



Figura 3.3: Modelagem da geometria discreta do lago Igapó 1

3.3.2 Equações de Navier-Stokes

A partir das considerações sobre a geometria e as características do lago Igapó 1, apresentadas na seção precedente, iniciamos a modelagem do escoamento do corpo d'água. Sendo as equações que governam o modelo hidrodinâmico as equações de conservação de quantidade de movimento e continuidade. Supomos que o fluido seja incompressível e que esteja em equilíbrio hidrostático. Neste caso, a equação da continuidade, na forma integral, para qualquer fluido (viscoso ou ideal, compressível ou incompressível, com ou sem transferência de calor) é dada por (FOX; MCDONALD, 1998)

$$\int_S \rho \vec{U} \cdot dS = -\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV, \quad (3.30)$$

onde ρ é a densidade $\vec{U} = (u_1, u_2, u_3)$ é o campo de velocidades do fluido; ambos no interior do elemento de volume V , limitado por uma superfície de controle S .

Fisicamente, a equação (3.30) diz que, a vazão, em massa, para fora da superfície de controle S é igual ao decréscimo de massa no interior do volume de controle V na unidade de tempo. Supondo que o volume de controle V , tenha dimensões físicas Δx_1 , Δx_2 e Δx_3 , e que neste volume, ρ seja espacialmente constante, então o segundo membro da equação (3.30) pode ser reescrito como

$$-\frac{\partial \rho}{\partial t} \int_V dV = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \int_{x_3}^{x_3+\Delta x_3} \int_{x_2}^{x_2+\Delta x_2} \int_{x_1}^{x_1+\Delta x_1} dx_1 dx_2 dx_3 = -\frac{\partial \rho}{\partial t} \Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3. \quad (3.31)$$

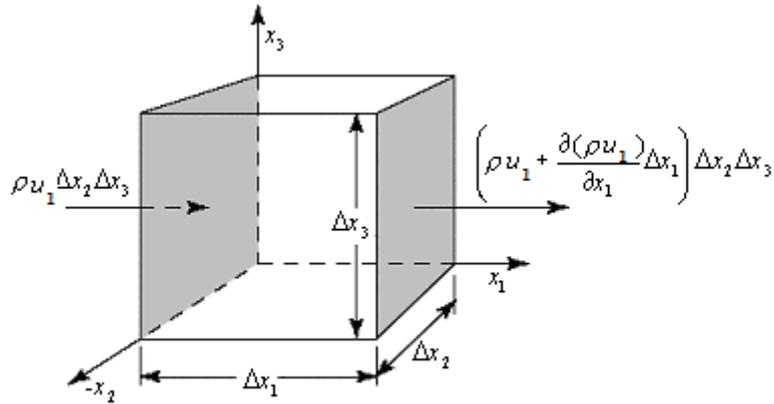


Figura 3.4: Fluxo de massa através de um volume de controle.

De modo análogo, observando a figura 3.4, o primeiro membro da equação (3.30) pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} \int_S \vec{U} d\vec{A} &= \rho (-u_1|_{x_1} + u_1|_{x_1+\Delta x_1}) \Delta x_2 \Delta x_3 + \rho (-u_2|_{x_2} + u_2|_{x_2+\Delta x_2}) \Delta x_1 \Delta x_3 \\ &+ \rho (-u_3|_{x_3} + u_3|_{x_3+\Delta x_3}) \Delta x_1 \Delta x_2. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Substituindo as equações (3.31) e (3.32) em (3.30) e dividindo a igualdade pelo volume de controle arbitrário $\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$ obtém-se

$$\rho \left[\frac{u_1|_{x_1+\Delta x_1} - u_1|_{x_1}}{\Delta x_1} + \frac{u_2|_{x_2+\Delta x_2} - u_2|_{x_2}}{\Delta x_2} + \frac{u_3|_{x_3+\Delta x_3} - u_3|_{x_3}}{\Delta x_3} \right] = -\frac{\partial \rho}{\partial t}. \quad (3.33)$$

Tomando o limite $\Delta x_1 \rightarrow 0$, $\Delta x_2 \rightarrow 0$ e $\Delta x_3 \rightarrow 0$ e reordenando os termos em (3.33) segue

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} \right) = 0, \quad (3.34)$$

ou ainda, em notação vetorial,

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho \vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0. \quad (3.35)$$

A equação (3.35) é a forma diferencial da equação da continuidade, admitindo ρ espacialmente constante. Como o escoamento do lago é incompressível, ρ também é temporalmente constante, logo, a equação da conservação de massa (3.35) reescreve-se como

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} + \frac{\partial u_3}{\partial x_3} = 0, \quad (3.36)$$

ou seja, $\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0$. A equação da conservação da quantidade de movimento, em sua forma integral, é deduzida a partir da segunda lei de Newton, ou seja, a soma de todas as forças externas \vec{F} atuando sobre o sistema é igual a taxa de variação, no tempo, da sua quantidade de movimento linear \vec{P} (FOX; MCDONALD, 1998)

$$\vec{F} = \left. \frac{d\vec{P}}{dt} \right|_{\text{sistema}}. \quad (3.37)$$

Na sua forma mais geral, uma lei de conservação estabelece que a razão de mudança de uma propriedade contínua L , definida em todo volume de controle, deve ser igual aquilo que é perdido através das fronteiras do volume, carregado para fora pelo movimento do fluido, mais o que é criado/consumido pelas fontes e sorvedouros Q dentro do volume de controle, ou seja,

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V L dV = - \int_S L \vec{U} \cdot d\vec{A} + \int_V Q dV. \quad (3.38)$$

Se $L = \vec{U} \rho$ e $\vec{F} =$ forças externas, temos

$$\int_V Q dV = \vec{F} = \left. \frac{d\vec{P}}{dt} \right|_{\text{sistema}} = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{U} dV + \int_S \vec{U} \rho (\vec{U} \cdot d\vec{A}). \quad (3.39)$$

Portanto, a equação (3.39) fornece a formulação da segunda lei de Newton, para um volume de controle,

$$\vec{F} = \vec{F}_S + \vec{F}_B = \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho \vec{U} dV + \int_S \vec{U} \rho (\vec{U} \cdot d\vec{A}), \quad (3.40)$$

onde \vec{F}_S descreve as forças de superfície e \vec{F}_B as forças de campo no elemento de volume.

Consideramos um fluido escoando sem atrito. A partir das tensões normal e de cisalhamento, definidas em (2.1-2.4), temos que $\sigma_{ij} = 0$ para $i \neq j$ (não existem tensões de cisalhamento) e que $\sigma_{ij} = -p$ para $i = j$, ou seja, as tensões normais têm o mesmo módulo, mas sentido contrário das pressões externas. Da equação integral (3.40), considerando as tensões que compõem a força externa \vec{F}_S , ou seja, quando

$$\vec{F}_S = -\vec{\nabla} p \quad \text{e} \quad \vec{F}_B = \rho \vec{f},$$

o balanço da quantidade de movimento, para fluidos sem viscosidade, escreve-se nas direções x_1 , x_2 e x_3 como

$$\begin{aligned} \frac{\partial(\rho u_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_1 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_1 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_1 u_3)}{\partial x_3} &= -\frac{\partial p}{\partial x_1} + \rho f_1 \\ \frac{\partial(\rho u_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_2 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_2 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_2 u_3)}{\partial x_3} &= -\frac{\partial p}{\partial x_2} + \rho f_2 \\ \frac{\partial(\rho u_3)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_3 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_3 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_3 u_3)}{\partial x_3} &= -\frac{\partial p}{\partial x_3} + \rho f_3 \end{aligned} \quad (3.41)$$

ou ainda, na forma compacta

$$\frac{\partial(\rho u_i)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_i u_j)}{\partial x_j} = -\frac{\partial p}{\partial x_i} + \rho f_i. \quad (3.42)$$

A equação (3.42) é a clássica equação de Euler do movimento. Salientamos que estas equações modelam escoamentos cujas tensões de cisalhamento são consideradas desprezíveis, ou seja, escoamentos não-viscosos.

No caso de fluidos viscosos gerais, de acordo com o teorema de Stokes, as relações mais gerais entre tensões normais σ_{ii} e taxas de deformação são (FOX; MCDONALD, 1998)

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= -p + \lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{U} + 2\mu D_{11} \\ \sigma_{22} &= -p + \lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{U} + 2\mu D_{22} \\ \sigma_{33} &= -p + \lambda \vec{\nabla} \cdot \vec{U} + 2\mu D_{33}, \end{aligned} \quad (3.43)$$

onde p é o campo de pressão no fluido, μ é a viscosidade do fluido, λ é o parâmetro de Stokes e as taxas de deformação normais D_{ii} são dadas por

$$D_{11} = \frac{\partial u_1}{\partial x_1}, \quad D_{22} = \frac{\partial u_2}{\partial x_2} \quad \text{e} \quad D_{33} = \frac{\partial u_3}{\partial x_3}. \quad (3.44)$$

As relações entre as tensões de cisalhamento σ_{ij} e as taxas de deformação de cisalhamento γ_{ij} são

$$\sigma_{12} = \mu \gamma_{12} = \sigma_{21}, \quad \sigma_{23} = \mu \gamma_{23} = \sigma_{32} \quad \text{e} \quad \sigma_{13} = \mu \gamma_{13} = \sigma_{31}, \quad (3.45)$$

onde as taxas de deformação de cisalhamento γ_{ij} podem ser escritas como

$$\gamma_{12} = \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right), \quad \gamma_{23} = \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \quad \text{e} \quad \gamma_{13} = \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right). \quad (3.46)$$

Enfim, nas equações dadas pelo sistema (3.43), o parâmetro λ , denominado segundo coeficiente de viscosidade, devido a hipótese feita por Stokes em 1845, deve satisfazer a relação (SCHLICHTING, 1968)

$$3\lambda + 2\mu = 0 \quad \Rightarrow \quad \lambda = -\frac{2}{3}\mu. \quad (3.47)$$

Substituindo (3.44) e (3.47) no sistema (3.43) temos

$$\begin{aligned} \sigma_{11} &= -p - \frac{2}{3}\mu\nabla\cdot\vec{V} + 2\mu\frac{\partial u_1}{\partial x_1} \\ \sigma_{22} &= -p - \frac{2}{3}\mu\nabla\cdot\vec{V} + 2\mu\frac{\partial u_2}{\partial x_2} \\ \sigma_{33} &= -p - \frac{2}{3}\mu\nabla\cdot\vec{V} + 2\mu\frac{\partial u_3}{\partial x_3}, \end{aligned} \quad (3.48)$$

enquanto que a substituição de (3.46) na equação (3.45) fornece

$$\begin{aligned} \sigma_{12} &= \mu\left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1}\right) = \sigma_{21} \\ \sigma_{23} &= \mu\left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2}\right) = \sigma_{32} \\ \sigma_{13} &= \mu\left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3}\right) = \sigma_{31}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

As expressões (3.48) e (3.49) para as tensões normais e de cisalhamento, respectivamente descrevem os chamados fluidos newtonianos. Nestes fluidos, na situação de equilíbrio, temos $\sigma_{ij} = -p\delta_{ij}$. Os fluidos newtonianos são invariantes rotacionalmente, de modo que, cristais líquidos, por exemplo, não pode ser descrito pelas leis constitutivas (3.48) e (3.49). Enfim, se substituirmos as equações (3.48) e (3.49) no sistema (3.41), obtemos as equações fundamentais para o escoamento de um fluido viscoso e compressível, do tipo newtoniano, denominadas equações de Navier-Stokes, ou seja,

$$\begin{aligned} &\frac{\partial(\rho u_1)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_1 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_1 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_1 u_3)}{\partial x_3} = -\frac{\partial p}{\partial x_1} + \rho f_1 \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\mu \left(2\frac{\partial u_1}{\partial x_1} - \frac{2}{3}\vec{\nabla}\cdot\vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\mu \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) \right] \\ &\frac{\partial(\rho u_2)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_2 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_2 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_2 u_3)}{\partial x_3} = -\frac{\partial p}{\partial x_2} + \rho f_2 \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\mu \left(\frac{\partial u_1}{\partial x_2} + \frac{\partial u_2}{\partial x_1} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\mu \left(2\frac{\partial u_2}{\partial x_2} - \frac{2}{3}\vec{\nabla}\cdot\vec{V} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\mu \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \right] \\ &\frac{\partial(\rho u_3)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u_3 u_1)}{\partial x_1} + \frac{\partial(\rho u_3 u_2)}{\partial x_2} + \frac{\partial(\rho u_3 u_3)}{\partial x_3} = -\frac{\partial p}{\partial x_3} + \rho f_3 \\ &+ \frac{\partial}{\partial x_1} \left[\mu \left(\frac{\partial u_3}{\partial x_1} + \frac{\partial u_1}{\partial x_3} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_2} \left[\mu \left(\frac{\partial u_2}{\partial x_3} + \frac{\partial u_3}{\partial x_2} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial x_3} \left[\mu \left(2\frac{\partial u_3}{\partial x_3} - \frac{2}{3}\vec{\nabla}\cdot\vec{V} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.50)$$

Para modelar o escoamento no Lago Igapó I, devido a sua característica tipo laminar, considera-se um modelo hidrodinâmico do tipo 2DH (bidimensional horizontal), onde as equações de Navier-Stokes estão presentes para u_1 e u_2 . Ainda, devido às características do escoamento do corpo d'água, considera-se o fluido incompressível, $\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0$, logo ρ é constante, em regime não-permanente. Consideramos que a ação do vento e as trocas de calor do lago com o meio externo não são expressivas, de modo que forças de campo estão ausentes, ou seja, $f_1 = f_2 = 0$. Não considerando variações no contorno do lago, na massa do fluido e na área do espelho d'água ao longo do tempo, as equações de Navier-Stokes e da continuidade para o nosso modelo hidrodinâmico bidimensional tornam-se

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_1} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} \right) \quad (3.51)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial x_2} + \frac{\mu}{\rho} \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \quad (3.52)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0. \quad (3.53)$$

As equações (3.51) - (3.53) descrevem o movimento bidimensional, horizontal, de fluidos newtonianos incompressíveis, estabelecendo as mudanças nos momentos e nas acelerações do fluido como resultado de mudanças na pressão e nas forças viscosas dissipativas (cisalhamento), atuantes no interior do fluido. Note que no caso simples de um fluido ideal (viscosidade nula), a aceleração a que o fluido é submetido é proporcional à derivada da pressão interna no fluido. Por conveniência, manipularemos as equações (3.51) - (3.53) para obter a equação para o campo de pressões na forma de uma equação de Poisson. Para isto, consideremos as equações de Navier-Stokes (3.51) - (3.52) e da continuidade (3.53) em suas formas adimensionais.

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_1}{\partial x_2} = -\frac{\partial p}{\partial x_1} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u_1}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_1}{\partial x_2^2} \right) \quad (3.54)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} + u_1 \frac{\partial u_2}{\partial x_1} + u_2 \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = -\frac{\partial p}{\partial x_2} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 u_2}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 u_2}{\partial x_2^2} \right) \quad (3.55)$$

$$\frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2} = 0, \quad (3.56)$$

onde Re é o número de Reynolds. Para tornar as equações adimensionais, as coordenadas x_i foram divididas por um comprimento de referência l e as velocidades u_1 e u_2 por uma velocidade de referência U_∞ , que usualmente é tomada como a velocidade da corrente livre. A pressão adimensional é obtida dividindo-a por ρU_∞^2 . Com o objetivo de simplificar a notação, mantivemos as notações u_1 , u_2 e ρ para as variáveis nas equações (3.54) - (3.56).

As equações (3.54)-(3.56) não estão em um formato conveniente para a implementação de um procedimento numérico. Assim, diferenciando a equação (3.54) em

relação à variável x_1 e a equação (3.55) em relação à variável x_2 , somando-as e utilizando a equação da continuidade, obtém-se uma equação do tipo Poisson para o campo de pressões (GRESHO, 1987),

$$\nabla^2 p = -\frac{\partial^2 u_1^2}{\partial x_1^2} - \frac{\partial^2 u_1 u_2}{\partial x_1 \partial x_2} - \frac{\partial^2 u_2^2}{\partial x_2^2} - \frac{\partial d}{\partial t} + \frac{1}{Re} \left(\frac{\partial^2 d}{\partial x_1^2} + \frac{\partial^2 d}{\partial x_2^2} \right), \quad (3.57)$$

onde d é o divergente da velocidade definido por

$$d = \frac{\partial u_1}{\partial x_1} + \frac{\partial u_2}{\partial x_2}. \quad (3.58)$$

Enfim, as equações (3.54) - (3.55) e (3.57) constituem o nosso modelo hidrodinâmico bidimensional na horizontal para o escoamento da água no lago Igapó 1. Este sistema de EDP's acoplado fornece o campo de velocidades e de pressões do fluxo de água na geometria do lago modelado.

O sistema (3.54) - (3.55) e (3.57) foi resolvido numericamente, utilizando coordenadas generalizadas, por meio do método de diferenças finitas, descrito na seção anterior. A discretização destas equações foi feita da seguinte maneira: considerando as equações (3.54) e (3.55) escritas na forma de coordenadas generalizadas, ou seja,

$$\frac{\partial u_1}{\partial t} = E_1(u_1, u_2) - F_1(p) \quad (3.59)$$

$$\frac{\partial u_2}{\partial t} = E_2(u_1, u_2) - F_2(p) \quad (3.60)$$

e aproximando os termos de derivadas espaciais E_1 e E_2 por diferenças centrais obtemos

$$E_1(u_1, u_2) = -(u_1)_{i,j} \frac{(u_1)_{i+1,j} - (u_1)_{i-1,j}}{2\Delta x_1} - (u_2)_{i,j} \frac{(u_1)_{i,j+1} - (u_1)_{i,j-1}}{2\Delta x_2} + \frac{1}{Re} \left(\frac{(u_1)_{i+1,j} - 2(u_1)_{i,j} + (u_1)_{i-1,j}}{\Delta(x_1)^2} + \frac{(u_1)_{i,j+1} - 2(u_1)_{i,j} + (u_1)_{i,j-1}}{\Delta(x_2)^2} \right) \quad (3.61)$$

$$E_2(u_1, u_2) = -(u_1)_{i,j} \frac{(u_2)_{i+1,j} - (u_2)_{i-1,j}}{2\Delta x_1} - (u_2)_{i,j} \frac{(u_2)_{i,j+1} - (u_2)_{i,j-1}}{2\Delta x_2} + \frac{1}{Re} \left(\frac{(u_2)_{i+1,j} - 2(u_2)_{i,j} + (u_2)_{i-1,j}}{\Delta(x_1)^2} + \frac{(u_2)_{i,j+1} - 2(u_2)_{i,j} + (u_2)_{i,j-1}}{\Delta(x_2)^2} \right), \quad (3.62)$$

onde

$$F_1(p) = \frac{p_{i+1,j} - p_{i-1,j}}{2\Delta x_1} \quad (3.63)$$

$$F_2(p) = \frac{p_{i,j+1} - p_{i,j-1}}{2\Delta x_2}. \quad (3.64)$$

Sobre o domínio transformado e aplicando as condições de fronteira, por meio da discretização acima obtemos um sistema linear do tipo $A\phi = b$ que pode ser resolvido por

métodos diretos ou métodos iterativos. Preferimos adotar o método iterativo em virtude do sistema ser grande e esparso (CIRILO, 2001). Para o campo de velocidades utilizamos o método de Runge-Kutta (explícito) de quarta ordem e para o campo de pressões utilizamos o método de Gauss Seidel com relaxações sucessivas. O método de Runge-Kutta é dado por (RUGGIERO; LOPES, 1996)

$$\begin{aligned}
\vec{W}_{i,j}^{(0)} &= \vec{W}_{i,j}^{(n)} \\
\vec{W}_{i,j}^{(1)} &= \vec{W}_{i,j}^{(0)} - \frac{\Delta t}{2V_{i,j}} \vec{R}_{i,j}^{(0)} \\
\vec{W}_{i,j}^{(2)} &= \vec{W}_{i,j}^{(0)} - \frac{\Delta t}{2V_{i,j}} \vec{R}_{i,j}^{(1)} \\
\vec{W}_{i,j}^{(3)} &= \vec{W}_{i,j}^{(0)} - \frac{\Delta t}{2V_{i,j}} \vec{R}_{i,j}^{(2)} \\
\vec{W}_{i,j}^{(4)} &= \vec{W}_{i,j}^{(0)} - \frac{\Delta t}{6V_{i,j}} \left[\vec{R}_{i,j}^{(0)} + 2\vec{R}_{i,j}^{(1)} + 2\vec{R}_{i,j}^{(2)} + \vec{R}_{i,j}^{(3)} \right] \\
\vec{W}_{i,j}^{(n+1)} &= \vec{W}_{i,j}^{(4)} ,
\end{aligned}$$

onde $\vec{R}_{i,j}^{(k)} = \vec{Q}_{i,j}^{(k)} - \vec{D}_{i,j}^{(k)}$, com $K = 0, 1, 2, 3, 4$. Utilizando uma simplificação deste método (CIRILO, 2001), temos

$$\begin{aligned}
\vec{W}_{i,j}^{(0)} &= \vec{W}_{i,j}^{(n)} \\
\vec{W}_{i,j}^{(r)} &= \vec{W}_{i,j}^{(0)} - \alpha_K \frac{\Delta t}{2V_{i,j}} \vec{R}_{i,j}^{(K-1)} \\
\vec{W}_{i,j}^{(n+1)} &= \vec{W}_{i,j}^{(K)} , \quad K = 0, 1, 2, 3, 4
\end{aligned}$$

onde os coeficientes α_K são

$$\begin{aligned}
\alpha_1 &= 1 , \quad \alpha_2 = \frac{1}{2} , \quad \alpha_3 = 1 \\
\alpha_1 &= \frac{1}{4} , \quad \alpha_2 = \frac{1}{2} , \quad \alpha_3 = \frac{1}{2} , \quad \alpha_4 = 1 \\
\alpha_1 &= \frac{1}{4} , \quad \alpha_2 = \frac{1}{6} , \quad \alpha_3 = \frac{3}{8} , \quad \alpha_4 = \frac{1}{2} , \quad \alpha_5 = 1 .
\end{aligned}$$

Segundo Cirilo (2001), o método de relaxações sucessivas é utilizado para obter o campo de pressões, pois acelera a convergência, já que a pressão varia lentamente. Este método consiste na aproximação da iteração $K+1$ como uma média entre o valor $\vec{W}_{i,j}^{(K+1)}$, obtido na iteração K , e o valor $\vec{W}_{i,j}^{K+1}$ obtido pelo método de Gauss-Seidel. Para a equação da quantidade de movimento em x , $\vec{W} = \rho u$, o método das relaxações sucessivas é dado por

$$\vec{W}_{i,j}^{(K+1)} = (1-w) \vec{W}_{i,j}^{(K)} + w \vec{W}_{GSi,j}^{(K+1)} , \quad (3.65)$$

onde w é denominado fator de relaxação, variando de 0 a 2, e $\vec{W}_{GSi,j}^{(K+1)}$ é a aproximação obtida pelo método de Gauss-Seidel. Se $w = 1$, então temos o método de Gauss-Seidel,

se $1 < w < 2$ o método denomina-se Gauss-Seidel sobre-relaxado e por fim, se $0 < w < 1$ têm-se o método de Gauss-Seidel sub-relaxado. Nesta dissertação optou-se pelo método de Gauss-Seidel, $w = 1$, que acelerou a convergência (CIRILO, 2001).

Na próxima seção descreveremos o transporte e as reações de substâncias neste escoamento.

3.4 Modelo de transporte e reações

No caso de lagos, onde não há concentração elevada de sedimentos em suspensão, as concentrações de substâncias, que denominaremos a partir de agora como espécies reativas, se encontram dissolvidas no corpo d'água, ou seja, escoam com o mesmo campo de velocidades deste. Nestas condições, as concentrações das espécies reativas não alteram substancialmente a massa específica do corpo d'água e a velocidade hidrodinâmica u_i ($i = 1, 2, 3$) é independente das concentrações das espécies reativas. A essas espécies reativas são dados os nomes de contaminantes passivos, caso contrário, dizemos que são contaminantes ativos. Como as espécies reativas, que serão consideradas neste trabalho, são contaminantes passivos, estudaremos o transporte e as reações a que tais espécies reativas estão submetidas, desacopladamente da modelagem hidrodinâmica, e utilizaremos o campo de velocidades, obtido no modelo hidrodinâmico, para descrever esse transporte.

3.4.1 Equação do transporte advectivo-difusivo-reativo

Analogamente a seção precedente, supomos que no transporte de espécies reativas, o princípio de conservação de massa (concentrações das espécies reativas) é verificado. Assim, a variação por unidade de tempo da massa de um espécie reativa, dentro de um volume, é igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída, mais a massa resultante das reações entre as espécies, no interior do volume na unidade de tempo. Essas reações entre as espécies que ocorrem dentro do volume são denominadas reações cinéticas e envolvem fenômenos químicos, físicos e biológicos.

Supondo um volume V , com dimensões físicas, Δx_1 , Δx_2 e Δx_3 , então a massa de uma espécie no interior do volume será o produto da concentração C da espécie pelo volume $\Delta x_1 \Delta x_2 \Delta x_3$. O fluxo de entrada da massa da espécie em V , na direção x_1 é igual a concentração C da espécie multiplicada pela velocidade de transporte da espécie u_{c1} e pela área de entrada do fluxo $\Delta x_2 \Delta x_3$. O fluxo de saída da massa da espécie é obtido por expansão de Taylor ao longo de Δx_1 e como o volume é suficientemente pequeno, supomos que a variação do fluxo seja quase linear (ROSMAN, 1997). Analogamente, é possível fazer o balanço de massa de um contaminante na direção x_2 e x_3 , com fluxos de entrada $u_{c2} C \Delta x_1 \Delta x_3$ e $u_{c3} C \Delta x_1 \Delta x_2$ e expansões em série de Taylor ao longo de Δx_2 e Δx_3 . A figura 3.5 mostra o balanço de massa de uma espécie reativa na direção x_1 .

Assim, a variação da massa de uma espécie reativa no volume V , por unidade de tempo,

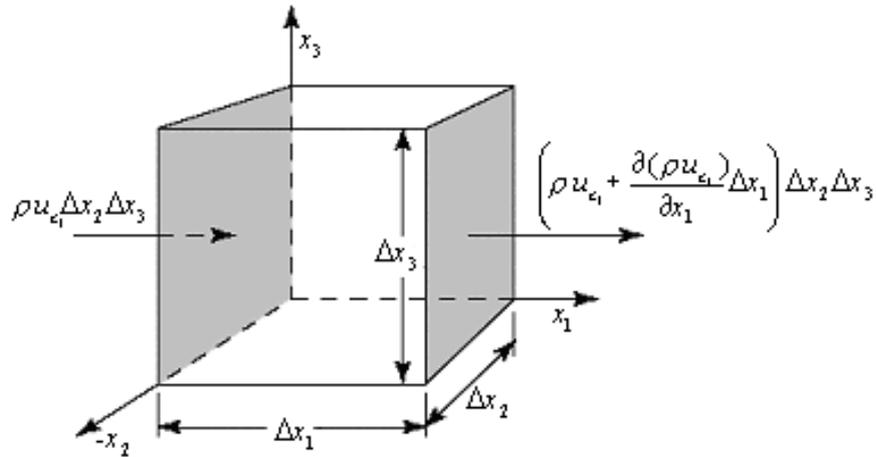


Figura 3.5: Descrição da conservação de massa de uma espécie reativa na direção x_1 .

é dada por

$$\underbrace{\frac{\partial (C\Delta x_1\Delta x_2\Delta x_3)}{\partial t}}_{\text{variação da massa por unidade do tempo}} = \underbrace{-\left(\frac{\partial u_{c1}C}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{c2}C}{\partial x_2} + \frac{\partial u_{c3}C}{\partial x_3}\right)\Delta x_1\Delta x_2\Delta x_3}_{\text{fluxo de entrada menos fluxo de saída nas direções } x_1, x_2, x_3} + \underbrace{\sum R_c\Delta x_1\Delta x_2\Delta x_3}_{\text{somatório das reações das espécies}}. \quad (3.66)$$

Como o volume V é arbitrário e não é função do tempo, a expressão pode ser simplificada, resultando em

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial u_{c1}C}{\partial x_1} + \frac{\partial u_{c2}C}{\partial x_2} + \frac{\partial u_{c3}C}{\partial x_3}\right) + \sum R_c. \quad (3.67)$$

De um modo mais sucinto, a equação (3.67) pode ser reescrita em notação indicial,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\left(\frac{\partial u_{c_i}C}{\partial x_i}\right) + \sum R_c. \quad (3.68)$$

Note que, as espécies reativas, além da velocidade de escoamento hidrodinâmica, aquela do corpo d'água, denotada por u_i ($i = 1, 2, 3$) e chamada de advectiva, apresenta uma velocidade de escoamento associada ao processo de difusão molecular, devido à não homogeneidade das concentrações das espécies reativas, de modo que, as componentes da velocidade total u_{c_i} de uma espécie reativa no meio fluido serão decompostas na parte advectiva, dada a partir do modelo hidrodinâmico, e na parte difusiva, como mostra a equação (3.69) (ROSMAN, 1997),

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{(u_i C)}_{\text{fluxo advectivo}} - \frac{\partial}{\partial x_i} \underbrace{[(u_{c_i} - u_i) C]}_{\text{fluxo difusivo}} + \sum R_c. \quad (3.69)$$

O fluxo difusivo em fluidos newtonianos incompressíveis pode ser modelado através da conhecida Lei de Fick da difusão molecular. A Lei de Fick diz que o fluxo difusivo de uma espécie reativa é proporcional ao gradiente das concentrações, e ocorre no sentido contrário ao do gradiente (CHAPRA, 1997). Traduzindo matematicamente, o fluxo difusivo da massa na direção x_i , é dado por

$$J_{x_i} = -D_c \frac{\partial C}{\partial x_i}, \quad (3.70)$$

onde D_C é o coeficiente da difusão molecular. Inserindo o delta de Kroenecker δ_{ij} para possibilitar a notação indicial, a equação (3.69) pode ser reescrita na forma,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\frac{\partial(u_i C)}{\partial x_i} + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_c \delta_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) + \sum R_c. \quad (3.71)$$

Expandindo a derivada do termo advectivo e usando a condição do escoamento incompressível, $\vec{\nabla} \cdot \vec{U} = 0$, obtemos

$$\underbrace{\frac{\partial C}{\partial t}}_{\text{variação local no tempo}} + \underbrace{u_i \frac{\partial C}{\partial x_i}}_{\text{balanço do fluxo advectivo}} = \underbrace{\frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_c \delta_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right)}_{\text{balanço do fluxo difusivo}} + \underbrace{\sum R_c}_{\text{reações de consumo ou de produção}}. \quad (3.72)$$

A equação (3.72) é também conhecida como equação do transporte advectivo-difusivo-reativo. Como nosso campo de velocidades u_i é independente de C , temos uma equação linear, desde que o somatório das reações de consumo ou de produção das espécies reativas sejam lineares. Por outro lado, quando o contaminante é ativo, onde u_i depende de C e a modelagem hidrodinâmica deve ser acoplada à modelagem de transporte, temos que a equação (3.72) é não-linear.

3.4.2 Equações do modelo de reações

O termo de reações de consumo ou de produção em (3.72) pode ser modelado de diversas formas por meio dos inúmeros modelos de qualidade de água, alguns deles citados na introdução. Neste trabalho utilizamos o modelo apresentado por AMBROSE, *et al.* (2001) em sua versão linearizada (ROMEIRO; CASTRO; LANDAU, 2003), limitado aos ciclos do carbono (C) e do nitrogênio (N). Neste modelo o esquema de reações dos ciclos do carbono (C) e do nitrogênio (N) são descritos pela figura 3.6, nas cores vermelha e azul, respectivamente.

O sistema acoplado de equações das reações cinéticas do modelo descrito por AMBROSE, *et al.* (2001), descreve o comportamento das concentrações de quatro espécies reativas presentes nos ciclos descritos na figura 3.6, ou seja, da concentração da amônia

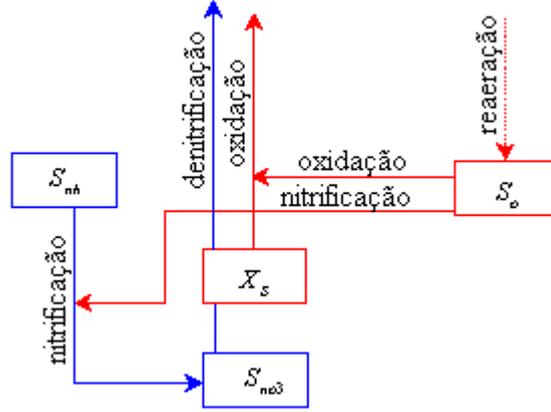


Figura 3.6: Esquemas de reações e ciclos do carbono (C) e nitrogênio (N), vermelho e azul, respectivamente, descritos pelo modelo de Woll *et al.* (2001) linearizado.

(S_{nh}), da concentração do nitrito + nitrato (S_{n03}), da concentração da demanda bioquímica de oxigênio (X_s) e da concentração do oxigênio dissolvido (S_0), após um período de tempo. Utilizando a notação do modelo descrito por AMBROSE, *et al.* (2001) para as concentrações das espécies reativas, utilizamos o seguinte modelo linear para os ciclos do carbono e nitrogênio (ROMEIRO; CASTRO; LANDAU, 2003)

$$\begin{aligned}
 \frac{dS_{nh}}{dt} &= -K_1 S_{nh} - K_7 S_0 + \tau_{S_{nh}} \\
 \frac{dS_{n03}}{dt} &= K_1 S_{nh} - K_2 S_{n03} + K_8 S_0 - \tau_{S_{n03}} \\
 \frac{dX_S}{dt} &= -\frac{20}{7} K_2 S_{n03} - K_5 X_S - K_4 S_0 + \tau_{X_S} \\
 \frac{dS_0}{dt} &= -\frac{32}{7} K_1 S_{nh} - K_5 X_S - K_6 S_0 + \tau_{S_0},
 \end{aligned} \tag{3.73}$$

onde definimos as constantes

$$\begin{aligned}
 K_1 &= k_{12} \Theta_{12} \left(\frac{\bar{S}_0}{k_{nit} + \bar{S}_0} \right) & K_2 &= k_{2D} \Theta_{2D} \left(\frac{k_{n03}}{k_{n03} + \bar{S}_0} \right) \\
 K_4 &= k_D \Theta_D \left(\frac{\bar{X}_S k_{DBO}}{(k_{DBO} + \bar{S}_0)^2} \right) - \frac{32}{7} k_{2D} \Theta_{2D} \left(\frac{k_{n03} \bar{S}_{n03}}{(k_{n03} + \bar{S}_0)^2} \right) \\
 K_5 &= k_D \Theta_D \left(\frac{\bar{S}_0}{k_{DBO} + \bar{S}_0} \right) \\
 K_6 &= k_2 \Theta_D + K_D \Theta_D \left(\frac{\bar{X}_S k_{DBO}}{(k_{DBO} + \bar{S}_0)^2} \right) \frac{32}{7} k_{12} \Theta_{12} \left(\frac{\bar{S}_{nh} k_{nit}}{(k_{nit} + \bar{S}_0)^2} \right)
 \end{aligned}$$

(3.74)

$$\begin{aligned}
K_7 &= k_{12}\Theta_{12} \left(\frac{\bar{S}_{nh}k_{nit}}{(k_{nit} + \bar{S}_0)^2} \right) \\
K_8 &= k_{12}\Theta_{12} \left(\frac{\bar{S}_{nh}k_{nit}}{(k_{nit} + \bar{S}_0)^2} \right) + k_{2D}\Theta_{2D} \left(\frac{k_{n03}\bar{S}_{n03}}{(k_{n03} + \bar{S}_0)^2} \right) \\
\tau_{S_{nh}} &= k_7\bar{S}_0 & \tau_{S_{n03}} &= k_8\bar{S}_0 \\
\tau_{X_S} &= k_4\bar{S}_0 & \tau_{S_0} &= k_2\Theta_D C_{sat} + K_3\bar{S}_0.
\end{aligned}$$

Os símbolos, valores e unidades dos parâmetros do modelo descrito por AMBROSE, *et al.* (2001), utilizados em (3.74) são dados na tabela 3.3.

Tabela 3.3: Valores das constantes do modelo descrito por AMBROSE, *et al.* (2001) a temperatura fixa de 20°C (AMBROSE, *et al.* (2001)).

Símbolo	Valor	Unidade	Descrição do parâmetro
T	—	°C	Temperatura
Θ_{2D}	1,045		Coefficiente da temperatura para denitrificação
Θ_{12}	1,08		Coefficiente da temperatura para nitrificação
Θ_D	1,047		Coefficiente da temperatura para oxidação do carbono
Θ_2	1,028		Coefficiente da temperatura para reaeração
k_{2D}	0,004	h^{-1}	Taxa de denitrificação
k_{12}	0,009	h^{-1}	Taxa de nitrificação
k_D	0,016	h^{-1}	Taxa de oxidação do OD
k_2	0,052	h^{-1}	Taxa de reaeração
k_{DBO}	0,001	mg/L	Constante de meia saturação da DBO carbonada
k_{nit}	0,2	mg/L	Constante de meia saturação para OD na nitrificação
k_{n03}	0,1	mg/L	Constante de meia saturação para OD na denitrificação
S_{sat}	8,3	mg/L	Concentração de saturação do OD

3.4.3 Solução numérica do modelo de transporte e reações

Substituindo as constantes dadas em (3.74) em (3.72) e considerando a difusão molecular D de todas as espécies reativas iguais e constantes, temos que o modelo 2DH de transporte de poluentes, com reações linearizadas é dado por

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S_{nh}}{\partial t} + u_i \frac{\partial S_{nh}}{\partial x_i} - D \frac{\partial^2 S_{nh}}{\partial x_i^2} &= -K_1 S_{nh} - K_7 S_0 + \tau_{S_{nh}} \\
\frac{\partial S_{n03}}{\partial t} + u_i \frac{\partial S_{n03}}{\partial x_i} - D \frac{\partial^2 S_{n03}}{\partial x_i^2} &= K_1 S_{nh} - K_2 S_{n03} + K_8 S_0 - \tau_{S_{n03}} \\
\frac{\partial X_S}{\partial t} + u_i \frac{\partial X_S}{\partial x_i} - D \frac{\partial^2 X_S}{\partial x_i^2} &= -\frac{20}{7} K_2 S_{n03} - K_5 X_S - K_4 S_0 + \tau_{X_S} \\
\frac{\partial S_0}{\partial t} + u_i \frac{\partial S_0}{\partial x_i} - D \frac{\partial^2 S_0}{\partial x_i^2} &= -\frac{32}{7} K_1 S_{nh} - K_5 X_S - K_6 S_0 + \tau_{S_0},
\end{aligned} \tag{3.75}$$

onde os índices $i = 1, 2$, representam as direções longitudinal e transversal, respectivamente, D o coeficiente de difusão e u_i são as componentes do vetor velocidade fornecidas pelo modelo hidrodinâmico. Reescrevendo matricialmente o sistema (3.75), temos

$$\mathbf{C}_{,t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{C} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \mathbf{C}) = \mathbf{F} \tag{3.76}$$

com $\mathbf{U} = [\mathbf{U}_1 \ \mathbf{U}_2]$, $\nabla \mathbf{C} = [\mathbf{C}_{,1} \ \mathbf{C}_{,2}]^T$, $i = 1, 2$, onde

$$\mathbf{C}_{,i} \begin{bmatrix} \frac{\partial S_{nh}}{\partial x_i} \\ \frac{\partial S_{n03}}{\partial x_i} \\ \frac{\partial X_S}{\partial x_i} \\ \frac{\partial S_0}{\partial x_i} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{C} = \begin{bmatrix} S_{nh} \\ S_{n03} \\ X_S \\ S_0 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_1 = \begin{bmatrix} u_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_1 \end{bmatrix}, \quad \mathbf{U}_2 = \begin{bmatrix} u_2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & u_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & u_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & u_2 \end{bmatrix},$$

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_{11} & D_{12} \\ D_{21} & D_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{D}_{ij} = \delta_{ij} D_i \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad \text{e } \mathbf{F} = \mathbf{G}(\mathbf{C}) + \tau \quad \text{onde}$$

$$\mathbf{G}(\mathbf{C}) = \begin{bmatrix} -K_1 & 0 & 0 & -K_7 \\ K_1 & -K_2 & 0 & K_8 \\ 0 & -\frac{20}{7} K_2 & -K_5 & -K_4 \\ -\frac{32}{7} K_1 & 0 & -K_5 & -K_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} S_{nh} \\ S_{n03} \\ X_S \\ S_0 \end{bmatrix} \quad \text{e } \tau = \begin{bmatrix} \tau_{S_{nh}} \\ -\tau_{S_{n03}} \\ \tau_{X_S} \\ \tau_{S_0} \end{bmatrix},$$

sendo u_1 e u_2 as velocidades nas direções x_1 e x_2 , D_{ij} os coeficientes de difusões nas direções x_1 e x_2 , δ_{ij} é o delta de Kronecker, $i, j = 1, 2$, $\mathbf{G}(\mathbf{C})$ a matriz referente ao termo de reações lineares, $K_1, K_2, K_4, K_5, K_6, K_7$ e K_8 são os coeficientes de primeira ordem e por fim, τ é matriz dos termos de ordem zero, gerada pela linearização do modelo de reações. Este modelo de transporte-advectivo-difusivo-reactivo foi resolvido numericamente pelo método de elementos finitos estabilizados na sua formulação semi-discreta, onde as derivadas espaciais são aproximadas por elementos finitos e as derivadas temporais aproximadas por diferenças finitas (ROMEIRO; CASTRO, 2007). Seja Ω um domínio espacial com fronteira Γ , subdividindo este domínio em n elementos triangulares, denominados de nel , obtemos Ω^e domínios, onde

$$\Omega = \cup_{nel}^{e=1} \Omega^e \quad \Omega^i \cap \Omega^j \quad \text{para } i \neq j. \tag{3.77}$$

Os subespaços de elementos finitos, no tempo $t = t_n$, são dados por

$$\hat{\mathbf{C}}_n^h \equiv \left\{ \hat{\mathbf{C}}^h; \hat{\mathbf{C}}^h \in (C^0(\Omega))^4; \hat{\mathbf{C}}^h|_{\Omega^e} \in (P^k(\Omega^e))^4; \hat{\mathbf{C}}^h|_{\Gamma} = 0 \right\} \tag{3.78}$$

$$\mathcal{C}_n^h \equiv \left\{ C^h; C^h \in (C^0(\Omega))^4; C^h|_{\Omega^e} \in (P^k(\Omega^e))^4; C^h|_{\Gamma} = g \right\}, \quad (3.79)$$

onde $\hat{\mathcal{C}}_n^h$ é o subespaço das funções de ponderação, \mathcal{C}_n^h é o subespaço das funções admissíveis, h é o tamanho característico de cada elemento finito, P^k é o conjunto de funções polinomiais de grau menor ou igual a k , C^0 é o conjunto das funções contínuas e g são as condições de fronteira prescritas. Assim, dado $C(t_0)$, para tempo t_n $n = 1, 2, \dots$ queremos encontrar $C^h \in \mathcal{C}_n^h$ tal que $\forall \hat{C}^h \in \hat{\mathcal{C}}_n^h$ o seguinte problema variacional seja satisfeito

$$\int_{\Omega} \mathbf{R} \cdot \hat{\mathcal{C}}_n^h d\Omega + \sum_{nel}^{e=1} \int_{\Omega} \mathbf{R} \cdot (\tau \mathbf{U} \cdot \hat{\mathcal{C}}_n^h) d\Omega, \quad (3.80)$$

onde $R(C^h) = \mathbf{C}_{,t} + \mathbf{U} \cdot \nabla \mathbf{C} - \nabla \cdot (\mathbf{D} \nabla \mathbf{C}) - \mathbf{F}$ é o resíduo associado com a solução aproximada C^h . Denotando por ξ_{x_i} ($i = 1, 2$) as coordenadas locais, temos que τ é dado por

$$\tau = \left[\frac{\partial \xi_i}{\partial x_j} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} \mathbf{U}_j \mathbf{U}_k + \frac{\partial \xi_i}{\partial x_k} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_l} \frac{\partial \xi_i}{\partial x_m} \frac{\partial \xi_j}{\partial x_n} \mathbf{D}_{kl} \mathbf{D}_{mn} \right]^{-1/2}. \quad (3.81)$$

Na equação (3.80), a primeira integral corresponde a formulação de *Galerkin* e a segunda integral refere-se ao termo de estabilização *Streamline Upwind Petrov-Galerkin* (SUPG) proposto por BROOKS e HUGHES (1982).

A discretização das funções C^h e $\hat{\mathcal{C}}^h$ é feita por meio de elementos finitos, onde

$$C^h = \sum_{j=1}^{nnode} \phi_j(x_1, x_2) C_n^j \quad (3.82)$$

$$\hat{\mathcal{C}}^h = \sum_{i=1}^{nnode} \phi_i(x_1, x_2) \hat{\mathcal{C}}_n^i \quad (3.83)$$

sendo C_n^j o valor nodal da função C^h para o nó j no tempo t_n , $\hat{\mathcal{C}}_n^i$ o valor nodal correspondente de $\hat{\mathcal{C}}^h$ e ϕ_j a função de interpolação para o nó j .

Substituindo as funções aproximadas (3.82) e (3.83) na formulação variacional (3.80), o seguinte sistema de equações diferenciais ordinárias é obtido

$$\mathbf{M} \dot{\mathbf{C}}_n + \mathbf{K} \mathbf{C}_n = \mathbf{F}, \quad (3.84)$$

onde \mathbf{C}_n é o vetor de valores nodais de \mathbf{C}_h e $\dot{\mathbf{C}}_n = \left(\frac{\partial \mathbf{C}_h}{\partial t} \right) |_{t=t_n}$ é a derivada temporal. As matrizes \mathbf{M} , \mathbf{K} , \mathbf{F} são

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}^G + \mathbf{M}^{PG} \quad (3.85)$$

$$\mathbf{K} = \mathbf{K}^G + \mathbf{K}^{PG} \quad (3.86)$$

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^G + \mathbf{F}^{PG}, \quad (3.87)$$

onde os sobrescritos G e PG se referem às contribuições de *Galerkin* e *Petrov-Galerkin*, respectivamente. As derivadas temporais foram aproximadas por diferenças finitas utilizando a regra trapezoidal generalizada, assim

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{n+1} &= \mathbf{C}_n + \Delta t \dot{\mathbf{C}}_{n+\alpha} \\ \dot{\mathbf{C}}_{n+\alpha} &= (1 - \alpha) \dot{\mathbf{C}}_n + \alpha \dot{\mathbf{C}}_{n+1} . \end{aligned} \quad (3.88)$$

O sistema de equações diferenciais ordinárias (3.84) foi resolvido utilizando o algoritmo preditor multi-corretor, ou seja,

$$\begin{aligned} \mathbf{C}_{n+1}^0 &= \mathbf{C}_n + \Delta t(1 - \alpha) \dot{\mathbf{C}}_n \\ \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^0 &= 0 \end{aligned} \quad (3.89)$$

na fase preditora e para $i = 0, 1, 2, \dots$

$$\begin{aligned} \mathbf{R}^i &= \mathbf{F}_{n+1} - \mathbf{M} \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i - \mathbf{K} \mathbf{C}_{n+1}^i \\ \mathbf{M}^* \Delta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i &= \mathbf{R}^i \\ \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^{i+1} &= \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i + \Delta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i \\ \mathbf{C}_{n+1}^{i+1} &= \mathbf{C}_{n+1}^i + \alpha \Delta t \Delta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i \end{aligned} \quad (3.90)$$

onde

$$\mathbf{M}^* = \mathbf{M} + \alpha \Delta t \mathbf{K} . \quad (3.91)$$

Esquemmatizando as iterações, temos três passos a considerar:

- (i) avaliar o resíduo $\mathbf{R}^i(\mathbf{C}^i)$,
- (ii) resolver o sistema $\mathbf{M}^* \Delta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i = \mathbf{R}^i$,
- (iii) atualizar solução $\mathbf{C}_{n+1}^{i+1} = \mathbf{C}_{n+1}^i + \alpha \Delta t \Delta \dot{\mathbf{C}}_{n+1}^i$.

Dado uma tolerância ϵ para o erro, o processo termina quando $\|\mathbf{R}^i\| < \epsilon \|\mathbf{R}^0\|$. No próximo capítulo apresentamos as simulações numéricas do modelo discretizado de transporte advectivo-difusivo-reativo dos ciclos do carbono e nitrogênio no lago Igapó 1.

Capítulo 4

Análise dos resultados numéricos

Neste capítulo apresentamos as simulações numéricas do transporte dos ciclos do carbono e do nitrogênio no corpo d'água do Lago Igapó 1, Londrina, Paraná. Inicialmente ordenamos as características e as hipóteses utilizadas em nosso modelo a ser simulado numericamente.

Sobre o Lago Igapó 1, o mesmo caracteriza-se por ser uma lâmina d'água, de modo que supomos que o escoamento do corpo d'água seja do tipo laminar. A partir dessa hipótese, utilizamos um modelo do tipo 2DH (bidimensional na horizontal) para realizar nossas simulações. Quanto à discretização da geometria do lago, supomos que o lago Igapó 1 não apresenta fontes e sorvedouros, exceto as barragens de entrada e saída do mesmo. Já o procedimento técnico da elaboração da malha do lago Igapó, este é descrito no início da seção (3.3).

Sobre o escoamento do corpo d'água, em nossa modelagem supomos que o transporte das espécies reativas (ciclos do carbono e do nitrogênio) ocorre de modo passivo. A hipótese do fluido passivo permite desacoplar a simulação numérica em duas partes, ou seja, primeiramente o cálculo do campo de velocidades advectivo do escoamento da água, na geometria modelada do lago, através de um modelo hidrodinâmico do tipo 2DH e, posteriormente, o cálculo das concentrações das espécies reativas dos ciclos do carbono e nitrogênio, nesta geometria, através de um modelo de transporte advectivo-difusivo-reativo.

Sobre o modelo hidrodinâmico, supomos que o escoamento da água, na geometria discretizada do lago, é descrito pelas equações de Navier-Stokes e da pressão dadas em (3.54 - 3.57). Na modelagem destas equações, devido ao regime de escoamento, fazemos a hipótese de que a água é um fluido incompressível do tipo newtoniano.

Sobre o modelo de transporte das espécies reativas, o campo de velocidades de escoamento destas espécies é suposto ser a soma vetorial dos campos advectivo, fornecido pelo modelo hidrodinâmico, e do campo difusivo, fornecido pela lei de Fick (3.70). Já as reações dos ciclos carbono-nitrogênio, estas são descritas pelo modelo descrito em AMBROSE, *et al.* (2001) linearizado, mostradas de forma esquemática na figura 3.6. Enfim, o sistema dado em (3.75) é o modelo bidimensional na horizontal de transporte advectivo-difusivo-reativo, dos ciclos do carbono e nitrogênio, onde supomos que os coeficientes de difusão molecular das espécies reativas são constantes e iguais em toda a geometria do lago Igapó 1.

Sobre o coeficiente de difusão molecular D , note que na realidade este deveria assumir em (3.75) diferentes valores dependendo da espécie reativa considerada e da temperatura do corpo d'água. De modo análogo, as "constantes" em (3.74) também são dependentes da temperatura. Para facilitar nosso estudo, fixamos a temperatura do corpo d'água em 20°C, de modo que as quantidades em (3.74) assumem valores constantes em nossa modelagem, aqueles apresentados na tabela 3.3. Especificamente sobre o coeficiente D em (3.75), note que a difusão molecular transporta (mistura) localmente as espécies reativas por movimento randômico, mas, em larga escala, são os redemoinhos (vórtices) e turbilhões que misturam as espécies reativas através da chamada difusão turbulenta. Como a escala dos redemoinhos são muito maiores que as escalas da difusão molecular, a difusão turbulenta é várias ordens de grandeza maior que aquela da difusão molecular. Conforme (CHAPRA, 1997), as várias espécies reativas têm valores de difusão molecular no intervalo de valores entre $D = 10^{-3} \text{ m}^2/\text{h}$ e $D = 10^{-1} \text{ m}^2/\text{h}$. Já o coeficiente de difusão turbulenta, em lagos, que depende da escala do fenômeno turbulento, assume valores entre $D = 10^1 \text{ m}^2/\text{h}$ e $D = 10^{10} \text{ m}^2/\text{h}$. Com o objetivo de simular e de estudar em nosso modelo os fenômenos de difusão molecular e turbulenta, envolvidos no transporte das espécies reativas na lâmina d'água do Lago Igapó 1, permitiremos que o coeficiente de difusão D varie entre $D = 10^{-3} \text{ m}^2/\text{h}$ e $D = 10^4 \text{ m}^2/\text{h}$.

Portanto, através de simulações numéricas dos sistema de equações (3.54 - 3.57) e (3.75), em função do coeficiente de difusão D , estudaremos aspectos qualitativos do transporte dos ciclos do carbono e do nitrogênio no corpo d'água do Lago Igapó 1, Londrina, Paraná. Salientamos que nossa simulação numérica não tem a pretensão de fornecer previsões quantitativas sobre o índice de poluição em um dado local do domínio físico do lago, num dado instante. Sabemos que as condições de entrada (iniciais e fronteira) das espécies reativas variam diariamente. De fato, verificamos que as medições realizadas por uma cooperação envolvendo o IAP, o CONSEMMA, a UEL e o CEAL (TI SOLUTION, 2009), nos anos de 2007 e 2008, forneceram medidas de IQA e medidas individuais dos parâmetros de qualidade de água, conforme a data da coleta, muito discrepantes. Nestas condições, o nosso objetivo é fornecer informações qualitativas, por exemplo, os locais no domínio do lago que se tornam mais poluídos, independentemente das concentrações, iniciais e de fronteira, de despejo das espécies reativas.

Neste contexto, utilizando o nosso modelo matemático, vamos descrever qualitativamente o impacto que uma descarga contínua de amônia, na entrada do lago Igapó I, produz em toda sua extensão, caracterizada pela região compreendida entre a Avenida Higienópolis até a barragem (veja figura 3.2). Para isso simulou-se em (3.54 - 3.57) as componentes do campo vetorial de velocidades $\vec{V} = (u_1, u_2)$ e do campo escalar de pressões P , em todo domínio do lago Igapó I, fornecidas pelo modelo hidrodinâmico. Neste procedimento utilizamos o número de Reynolds $Re = 10$ e as condições iniciais e de fronteira abaixo:

- **condições iniciais para o modelo hidrodinâmico.**

Consideramos que no instante inicial os campos de velocidades e de pressões, nos pontos interiores da geometria do lago Igapó 1, são dados por

$$\vec{V}(X, 0) = (1, 0) \quad \text{e} \quad P(X, 0) = 1, 0 \quad (4.1)$$

onde $t = 0$ e $X = (x_1, x_2)$ é um ponto interior do domínio da malha do lago Igapó 1. Para $X = \bar{X}$, pontos da entrada do lago Igapó 1, e para $X = \tilde{X}$, pontos da saída do lago Igapó 1 (ver figura 3.2), tomamos os seguintes valores para as velocidades e pressões, iniciais,

$$\begin{aligned}\vec{V}(\bar{X}, 0) &= (1, 0) \\ \vec{V}(\tilde{X}, 0) &= (1, 0) \\ P(\bar{X}, 0) &= 1, 0 \\ P(\tilde{X}, 0) &= 0, 0 .\end{aligned}\tag{4.2}$$

Enfim, para os demais pontos da fronteira do lago Igapó 1, consideramos

$$\begin{aligned}\vec{V}(X_p, 0) &= (0, 0) \\ P(X_p, 0) &= 0, 0\end{aligned}\tag{4.3}$$

onde X_p são pontos da margem do lago, exceto aqueles da entrada e saída;

- **condições de fronteira para o modelo hidrodinâmico.**

Consideramos que o campo de velocidades, para $t > 0$, nos pontos de fronteira da geometria do lago Igapó 1, são extrapolados na entrada e saída deste e nulo nos demais pontos da margem, ou seja,

$$\begin{aligned}\vec{V}(\bar{X}, t) &\text{ condição livre} \\ \vec{V}(\tilde{X}, t) &\text{ condição livre} \\ \vec{V}(X_p, t) &= (0, 0) .\end{aligned}\tag{4.4}$$

No campo de pressões, para $t > 0$, consideramos um pequeno gradiente de 10 % entre a entrada e a saída do lago Igapó 1, enquanto nos demais pontos da margem as pressões são extrapoladas pelo procedimento numérico. Assim,

$$\begin{aligned}P(\bar{X}, t) &= 1, 0 \\ P(\tilde{X}, t) &= 0, 9 \\ P(X_p, t) &\text{ condição livre .}\end{aligned}\tag{4.5}$$

Obtido o campo de velocidades advectivas, simulamos o escoamento das espécies reativas, presentes nos ciclos do carbono-nitrogênio, na geometria modelada do lago Igapó 1. Para isto calculamos os valores dos parâmetros $K_1, K_2, K_4, K_5, K_6, K_7, K_8, \tau_{X_S}, \tau_{S_0}$ e τ_{S_0} , dados em (3.74), utilizando os valores da tabela 3.3. Estes valores são apresentados na tabela 4.1.

Tabela 4.1: Valores dos parâmetros do modelo de transporte e reações à temperatura de 20°C.

$K_1 = 9,67 \times 10^{-3} \text{ h}^{-1}$	$K_2 = 4,67 \times 10^{-5} \text{ h}^{-1}$	$K_4 = 1,22 \times 10^{-6} \text{ h}^{-1}$
$K_5 = 1,66 \times 10^{-2} \text{ h}^{-1}$	$K_6 = 5,38 \times 10^{-2} \text{ h}^{-1}$	$K_7 = 4,77 \times 10^{-5} \text{ h}^{-1}$
$K_8 = 4,77 \times 10^{-5} \text{ h}^{-1}$	$\tau_{S_{nh}} = 3,96 \times 10^{-4} \text{ mgL}^{-1} \text{ h}^{-1}$	$\tau_{S_{n03}} = 3,96 \times 10^{-4} \text{ mgL}^{-1} \text{ h}^{-1}$
$\tau_{X_s} = 1,01 \times 10^{-5} \text{ mgL}^{-1} \text{ h}^{-1}$	$\tau_{S_0} = 4,47 \times 10^{-1} \text{ mgL}^{-1} \text{ h}^{-1}$	

Quanto às condições para o escoamento das espécies reativas tomamos:

- **condições iniciais para o modelo de transporte e reações.**

Consideramos que no instante inicial o campo escalar de concentrações de uma espécie reativa é nulo, ou seja,

$$C(X_m, 0) = 0,0 \text{ mg/L}, \quad (4.6)$$

onde $t = 0$ e $X_m = (x_1, x_2)$ são todos os pontos da malha (interiores e de fronteira) do lago Igapó 1. Portanto, as condições iniciais para as concentrações de amônia (S_{nh}), de nitrito + nitrato (S_{n03}), da demanda bioquímica de oxigênio (X_s) e do oxigênio dissolvido (S_0) são dadas por

$$\begin{aligned} S_{nh}(X_m, 0) &= 0,0 \text{ mg/L} \\ S_{n03}(X_m, 0) &= 0,0 \text{ mg/L} \\ X_s(X_m, 0) &= 0,0 \text{ mg/L} \\ S_0(X_m, 0) &= 0,0 \text{ mg/L}; \end{aligned} \quad (4.7)$$

- **condições de fronteira para o modelo de transporte e reações.**

Consideramos para $t > 0$ e $X = \bar{X}$ as seguintes concentrações constantes

$$\begin{aligned} S_{nh}(\bar{X}, t) &= 1,74 \text{ mg/L} \\ S_{n03}(\bar{X}, t) &= 0,00 \text{ mg/L} \\ X_s(\bar{X}, t) &= 5,05 \text{ mg/L} \\ S_0(\bar{X}, t) &= 8,30 \text{ mg/L}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

e para $X = \tilde{X}$ condições extrapoladas, ou seja,

$$\begin{aligned} S_{nh}(\tilde{X}, t) &\text{ condição livre} \\ S_{n03}(\tilde{X}, t) &\text{ condição livre} \\ X_s(\tilde{X}, t) &\text{ condição livre} \\ S_0(\tilde{X}, t) &\text{ condição livre.} \end{aligned} \quad (4.9)$$

Nos demais pontos da fronteira, para $t > 0$, tomamos concentrações nulas, devido à hipótese de ausência de outras fontes e sorvedouros, ou seja,

$$\begin{aligned}
S_{nh}(X_p, t) &= 0,0 \text{ mg/L} \\
S_{n03}(X_p, t) &= 0,0 \text{ mg/L} \\
X_S(X_p, t) &= 0,0 \text{ mg/L} \\
S_0(X_p, t) &= 0,0 \text{ mg/L} .
\end{aligned}
\tag{4.10}$$

Note que as condições de fronteira na entrada do lago representam uma descarga contínua de 1,74 miligramas de amônia por litro, uma ausência de concentração de nitrito + nitrato (que será gerada por meio do processo de nitrificação), uma demanda bioquímica de 5,05 miligramas de oxigênio por litro e uma concentração de saturação de oxigênio dissolvido de 8,3 miligramas por litro.

A partir deste modelo, simulamos o transporte das concentrações de amônia, de nitrito+nitrato, da demanda bioquímica de oxigênio e do oxigênio dissolvido, em todo domínio do lago, em todo instante, para $D = 0,001 \text{ m}^2/h$, $D = 0,01 \text{ m}^2/h$, $D = 0,1 \text{ m}^2/h$, $D = 1 \text{ m}^2/h$, $D = 10 \text{ m}^2/h$, $D = 100 \text{ m}^2/h$, $D = 1000 \text{ m}^2/h$, $D = 10000 \text{ m}^2/h$. As figuras 4.1 a 4.16 apresentam os resultados das simulações destas quatro espécies reativas, num intervalo de tempo de 300 horas de lançamento contínuo, com condições iniciais e de fronteira dadas nas equações (4.1 - 4.10).

A seguir, através de uma análise descritiva da simulação numérica realizada para $D = 10 \text{ m}^2/h$, dada nas figuras 4.9 e 4.10, fornecemos indícios de que o escoamento após 300 horas atinge uma situação quase-estacionária. Para isto, apresentamos na tabela 4.2 os valores mínimos e máximos das concentrações das espécies reativas, em todo o domínio do lago Igapó 1, no tempo indicado, para uma difusão de $D = 10 \text{ m}^2/h$.

Tabela 4.2: Valores mínimos e máximos das concentrações das espécies reativas, em mg/L , considerando todos os pontos da malha da geometria do lago Igapó 1, para $D = 10 \text{ m}^2/h$.

Horas	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
25 h	0,00 – 1,74	0,00 – 0,21	0,00 – 5,05	5,90 – 8,30
50 h	0,03 – 1,74	0,00 – 0,37	0,06 – 5,05	6,62 – 8,30
75 h	0,12 – 1,74	0,00 – 0,51	0,22 – 5,05	6,58 – 8,30
100 h	0,21 – 1,74	0,00 – 0,65	0,37 – 5,05	6,51 – 8,30
150 h	0,34 – 1,74	0,00 – 0,78	0,52 – 5,05	6,52 – 8,30
200 h	0,40 – 1,74	0,00 – 0,96	0,58 – 5,05	6,51 – 8,30
250 h	0,42 – 1,74	0,00 – 1,07	0,59 – 5,05	6,51 – 8,30
300 h	0,43 – 1,74	0,00 – 1,16	0,60 – 5,05	6,51 – 8,30

Notamos que após 300 horas de lançamento contínuo, os intervalos de variações das concentrações de amônia, da demanda bioquímica de oxigênio e de oxigênio dissolvido atingem uma situação quase-estacionária, ou seja, uma concentração mínima de 0,43 mg/L de amônia, uma concentração mínima de 0,6 mg/L para a demanda bioquímica de oxigênio e uma concentração mínima de 6,51 mg/L para o oxigênio dissolvido, enquanto o intervalo de concentração de nitrito+nitrato ainda apresenta pequenas variações. Salientamos

que as taxas mínimas para a amônia, para a demanda bioquímica de oxigênio e para o oxigênio dissolvido ocorrem em algum nó da malha do lago, enquanto nos demais nós as taxas estão nos intervalos apresentados. A mesma observação aplica-se à taxa máxima observada de nitrito+nitrato.

Outra evidencia do fato do escoamento das espécies reativas ter atingido uma situação quase-estacionária, para $D = 10 \text{ m}^2/h$, é apresentada nas tabelas do apêndice B. Tomamos aleatoriamente 22 dos 11886 nós que formam a malha do lago Igapó 1 e notamos nestes que as variações nas concentrações das espécies reativas entre os tempos $t = 250$ horas e $t = 300$ horas foram da ordem 10^{-3} para a amônia, da ordem 10^{-1} para nitrito+nitrato, da ordem 10^{-1} para a demanda bioquímica de oxigênio e da ordem 10^{-2} para o oxigênio dissolvido. Estas pequenas alterações nas concentrações entre os tempos 250 e 300 horas também mostram que o escoamento atingiu um regime quase-permanente.

Em seguida, analisamos e interpretaremos as simulações apresentadas nas figuras 4.1 a 4.16. Enumeramos abaixo alguns resultados:

- Em nosso procedimento numérico, quando D assume valores compatíveis com a difusão molecular, D variando entre $10^{-3} \text{ m}^2/h$ a $10^{-1} \text{ m}^2/h$, capturamos quatro grandes vórtices, dois deles localizados próximos a entrada do lago Igapó 1, um na margem esquerda e outro na margem direita do lago e os outros dois na margem esquerda, após a região central do lago. Já para valores de difusão superiores a $10^2 \text{ m}^2/h$, região de difusão turbulenta, observamos a desestruturação desta topologia de vórtices, caracterizando o fato do campo de velocidades difusivas ser maior que o campo de velocidades advectivas.
- Observamos que a concentração de amônia, lançada continuamente na entrada do lago, diminui ao longo do escoamento, gerando valores maiores de concentrações de nitrito+nitrato, conforme aproximamo-nos da saída do lago. Consistentemente, observamos uma alta taxa de demanda bioquímica de oxigênio nas regiões com altas concentrações de amônia.
- Um resultado importante é a verificação que para $D < 10^2 \text{ m}^2/h$ as maiores concentrações de nitrito+nitrato ocorrem nos vórtices do lago, caracterizando-os como as regiões mais poluídas por nitrito e nitrato.
- Enfim, a tabela 4.3 mostra que para o coeficiente de difusão variando de $D = 10^{-3} \text{ m}^2/h$ a $D = 10^4 \text{ m}^2/h$, os intervalos de variação das concentrações das espécies reativas diminuem, consistentemente com o fato do campo de velocidades efetivo (advecção+difusão) ter aumentado. Portanto, quanto maior o coeficiente de difusão menor a capacidade de autodepuração do lago.

Tabela 4.3: Valores mínimos e máximos das concentrações das espécies reativas, em mg/L , considerando todos os pontos da malha da geometria do lago Igapó 1, em função da difusão D , para $t = 300$ horas.

D (m^2/h)	S_{nh} (mg/L)	S_{n03} (mg/L)	X_S (mg/L)	S_0 (mg/L)
10^{-3}	0,19 – 1,74	0,00 – 1,31	0,23 – 5,05	6,60 – 8,30
10^{-2}	0,19 – 1,74	0,00 – 1,31	0,23 – 5,05	6,58 – 8,30
10^{-1}	0,20 – 1,74	0,00 – 1,36	0,23 – 5,05	6,50 – 8,30
10^0	0,23 – 1,74	0,00 – 1,21	0,27 – 5,05	6,50 – 8,30
10^1	0,43 – 1,74	0,00 – 1,16	0,60 – 5,05	6,51 – 8,30
10^2	0,93 – 1,74	0,00 – 0,84	1,80 – 5,05	6,50 – 8,30
10^3	1,09 – 1,74	0,00 – 0,67	2,30 – 5,05	6,47 – 8,30
10^4	1,16 – 1,74	0,00 – 0,60	2,60 – 5,05	6,57 – 8,30

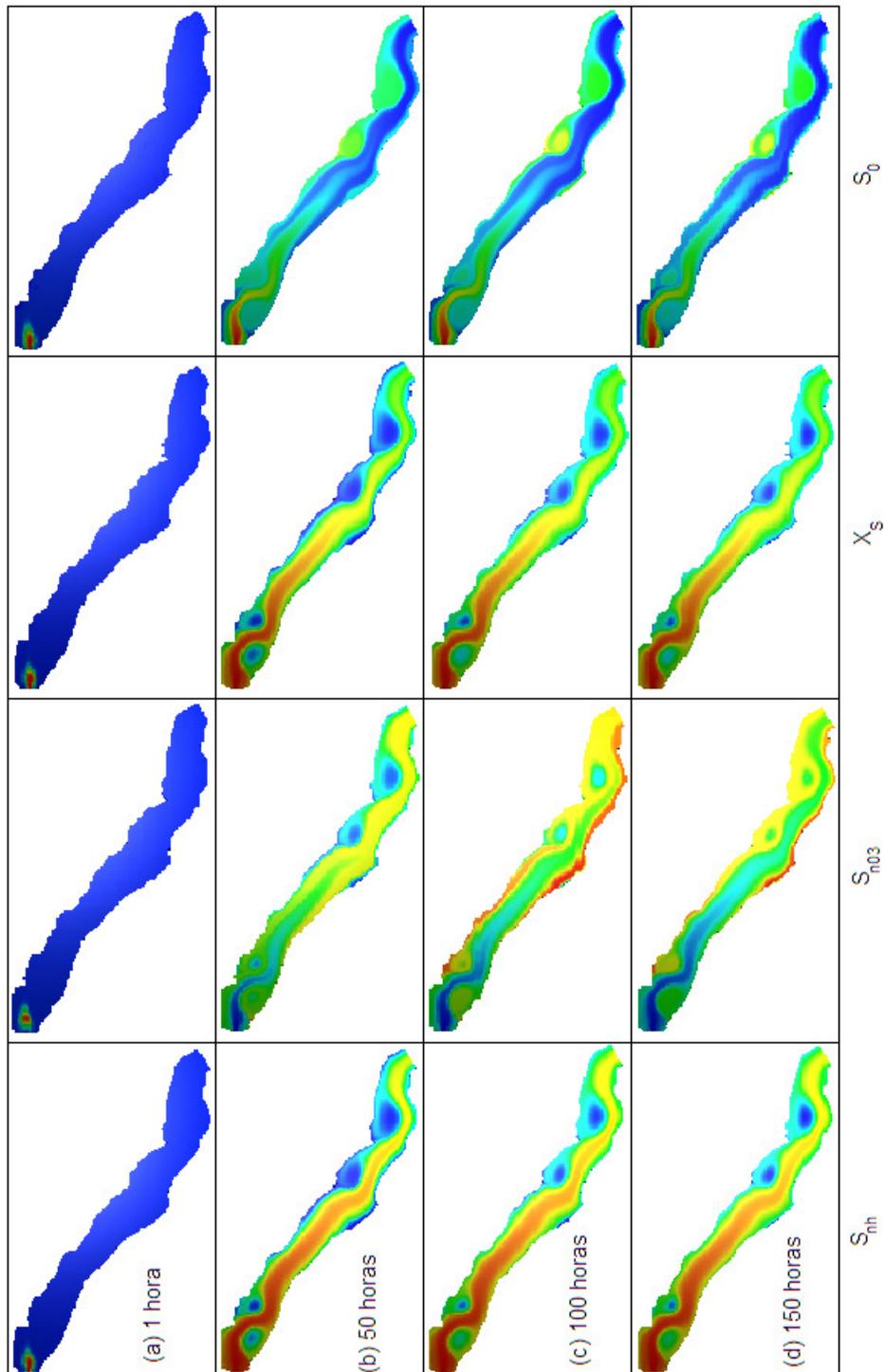


Figura 4.1: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0,001 \text{ m}^2/h$.

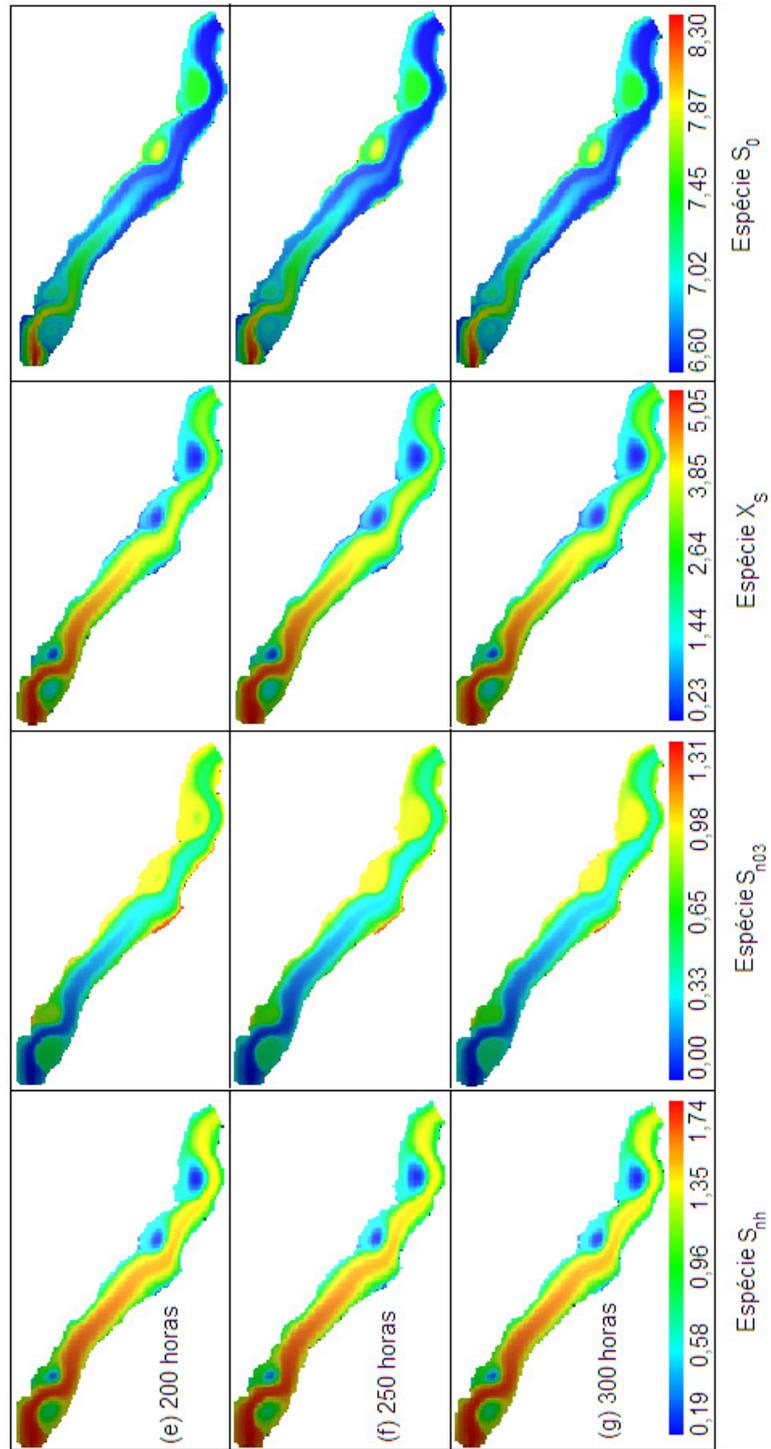


Figura 4.2: Continuação da figura 4.1.

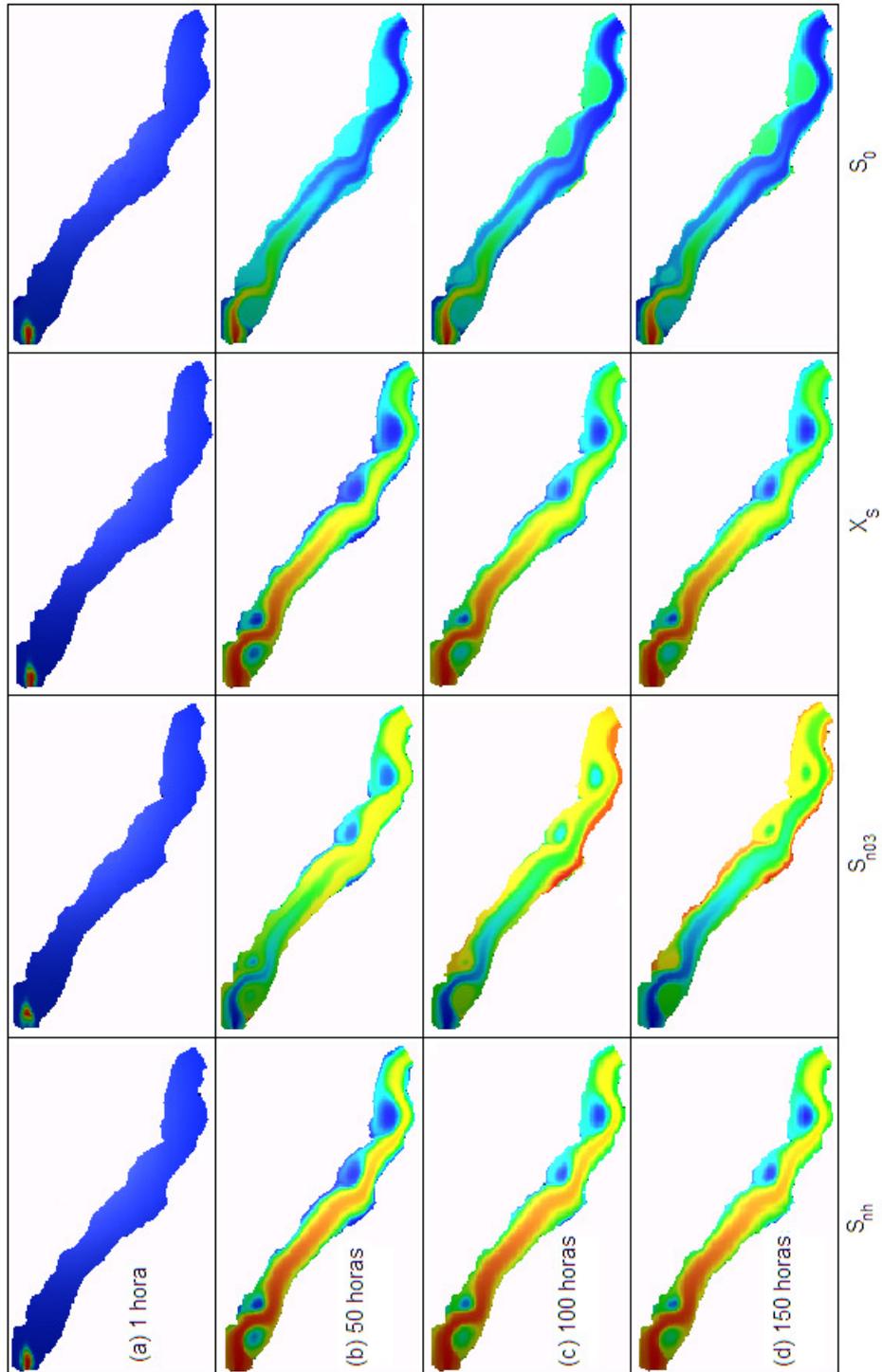


Figura 4.3: Evolução das quatro espécies relativas com $D = 0,01 \text{ m}^2/h$.

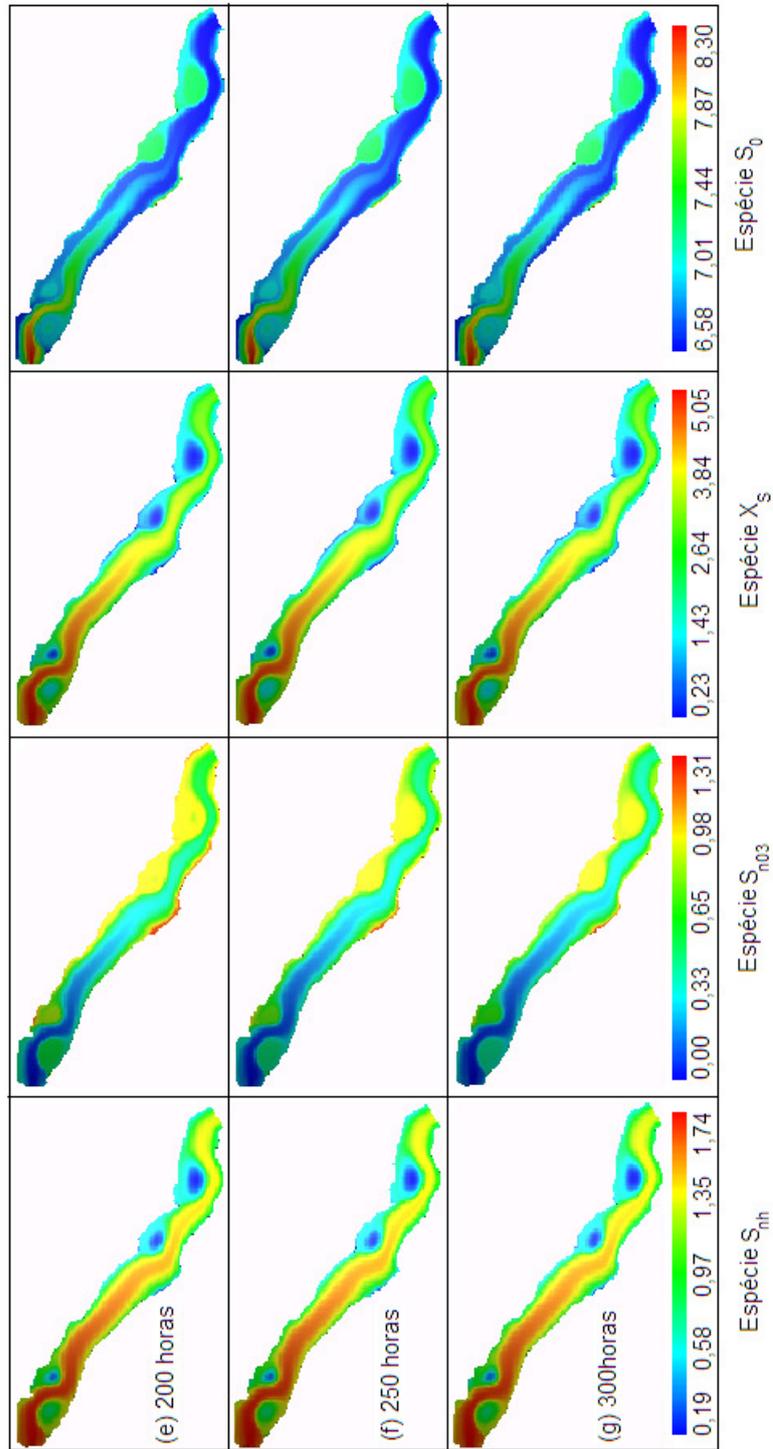


Figura 4.4: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 0,01 \text{ m}^2/h$.

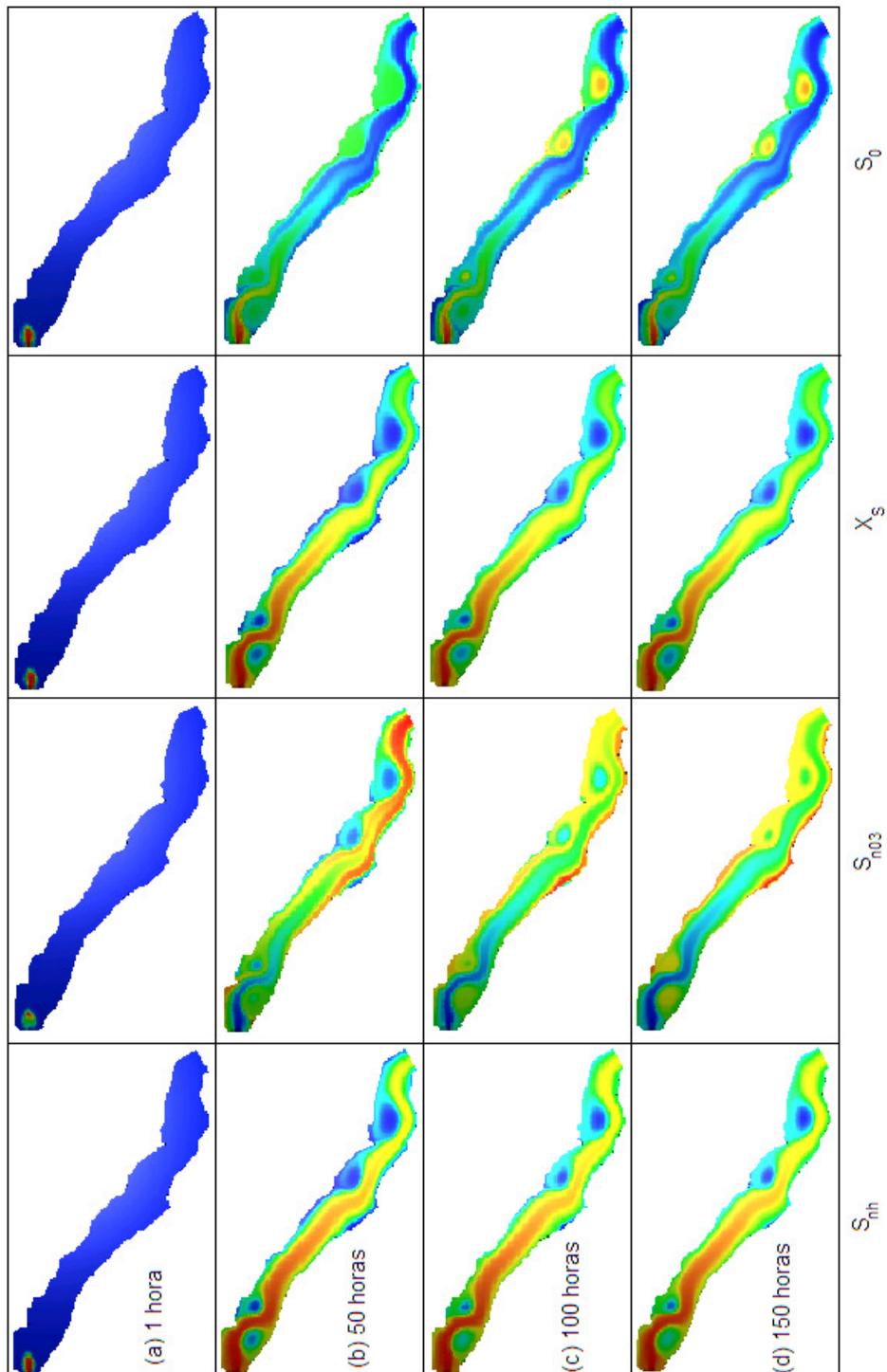


Figura 4.5: Evolução das quatro espécies relativas com $D = 0,1 \text{ m}^2/h$.

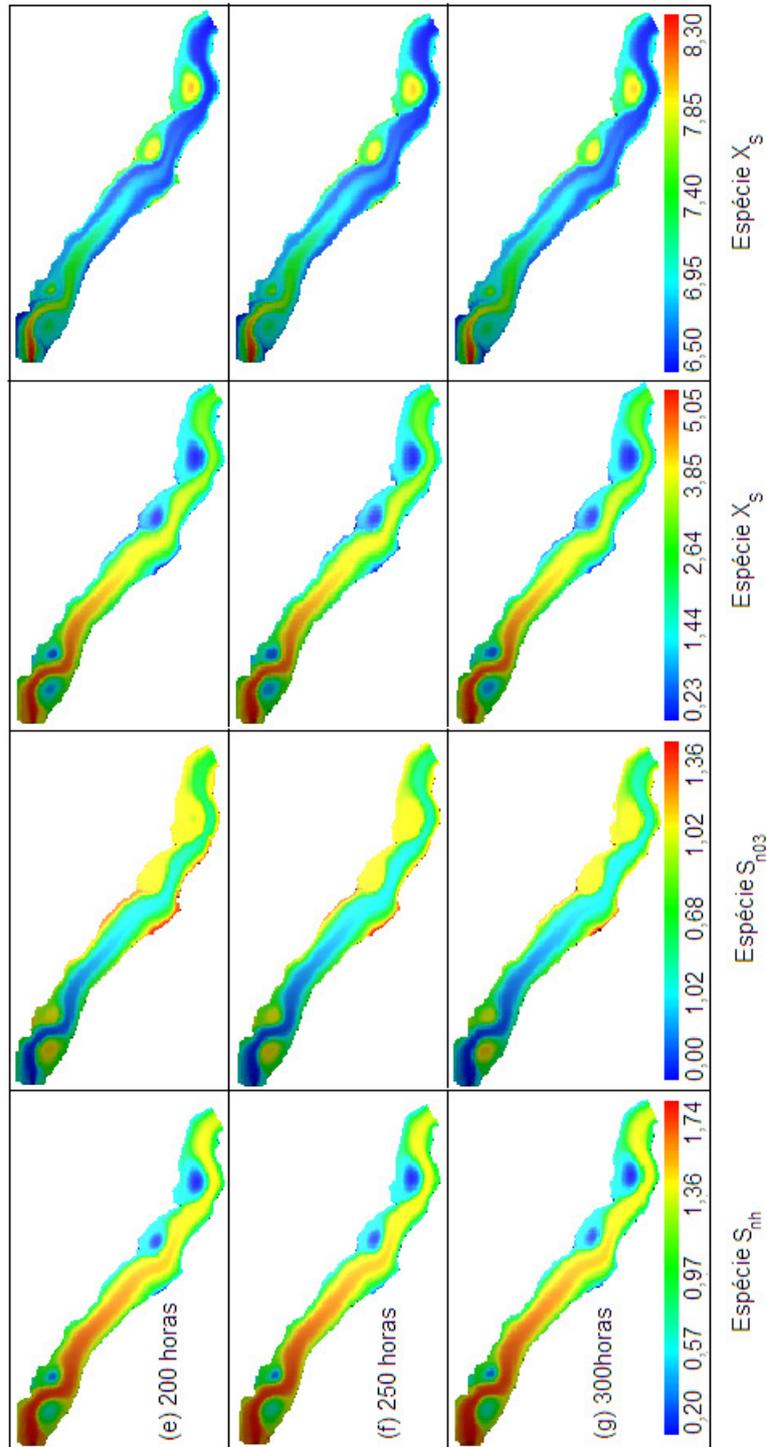


Figura 4.6: Evolução das quatro espécies relativas com $D = 0,1 \text{ m}^2/h$.

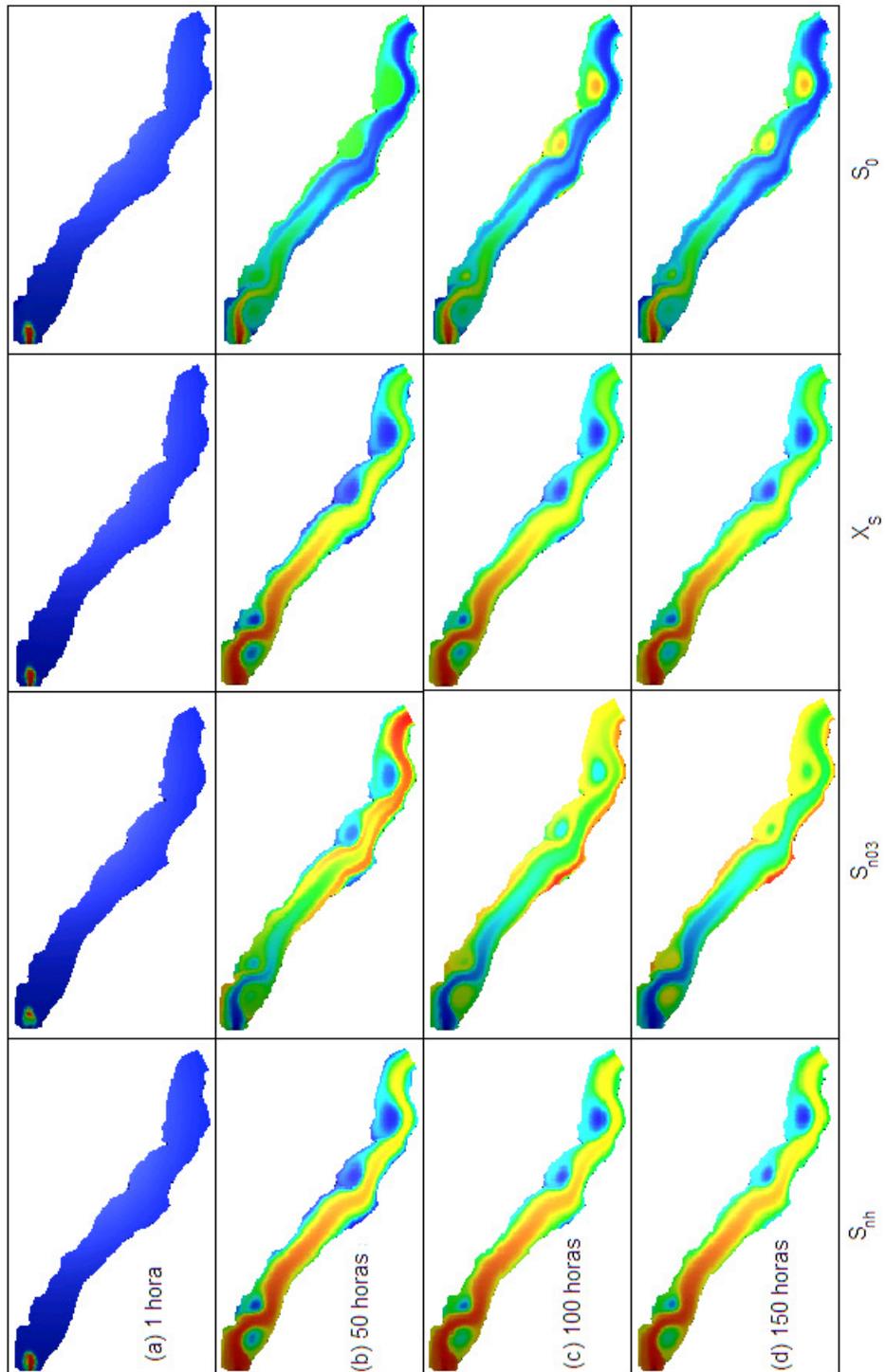


Figura 4.7: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 1 \text{ m}^2/h$.

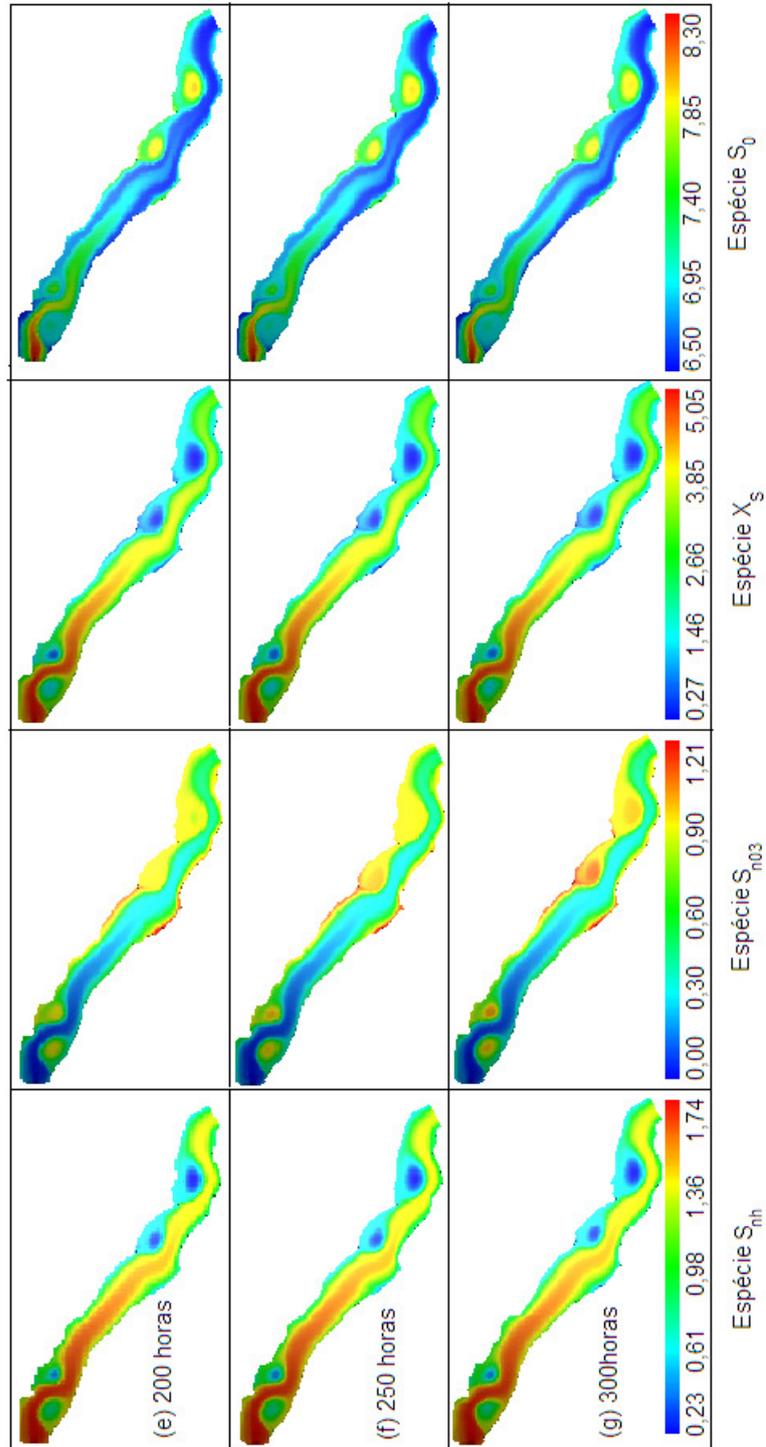


Figura 4.8: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 1 \text{ m}^2/h$.

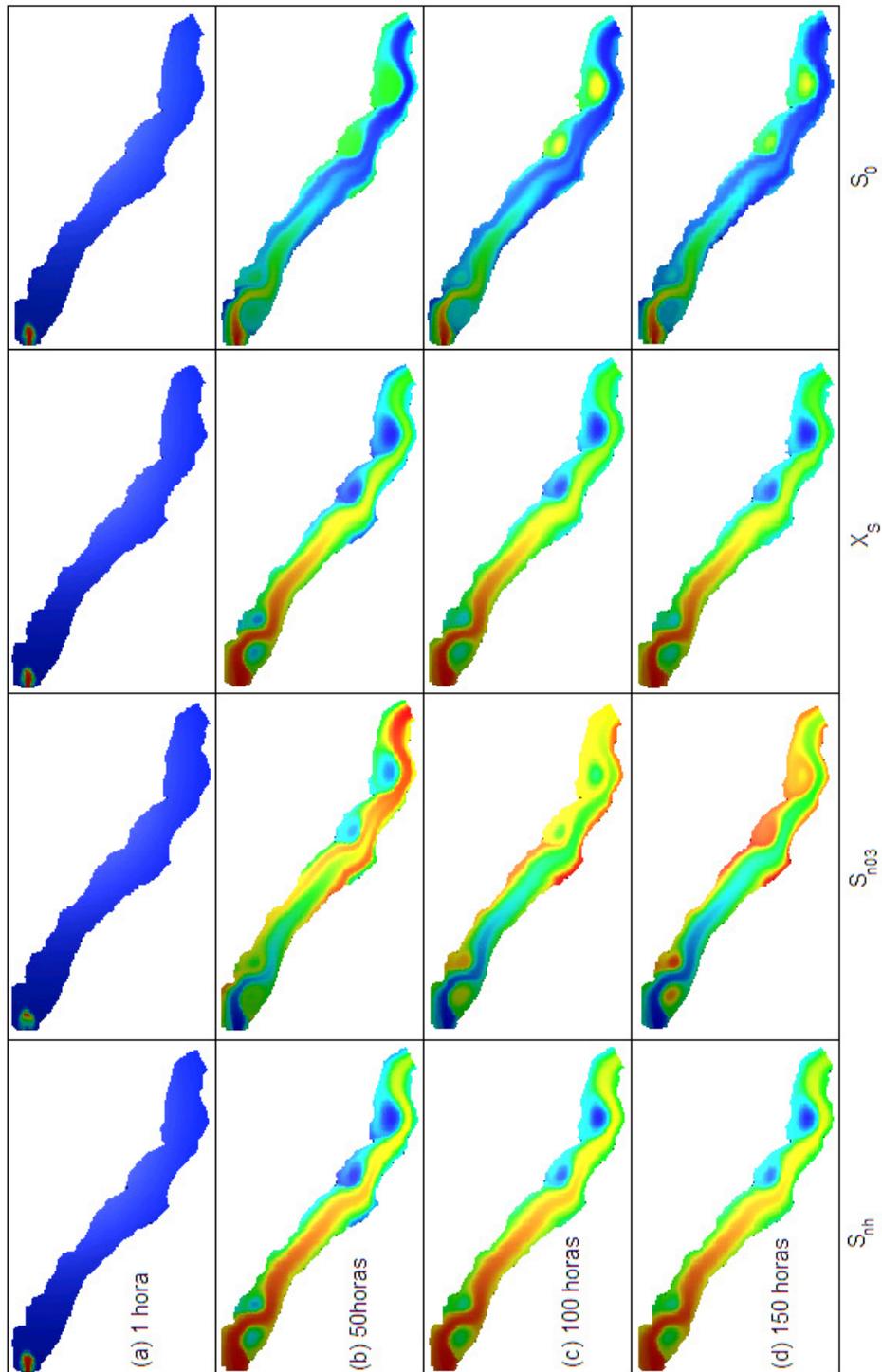


Figura 4.9: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10 \text{ m}^2/h$.

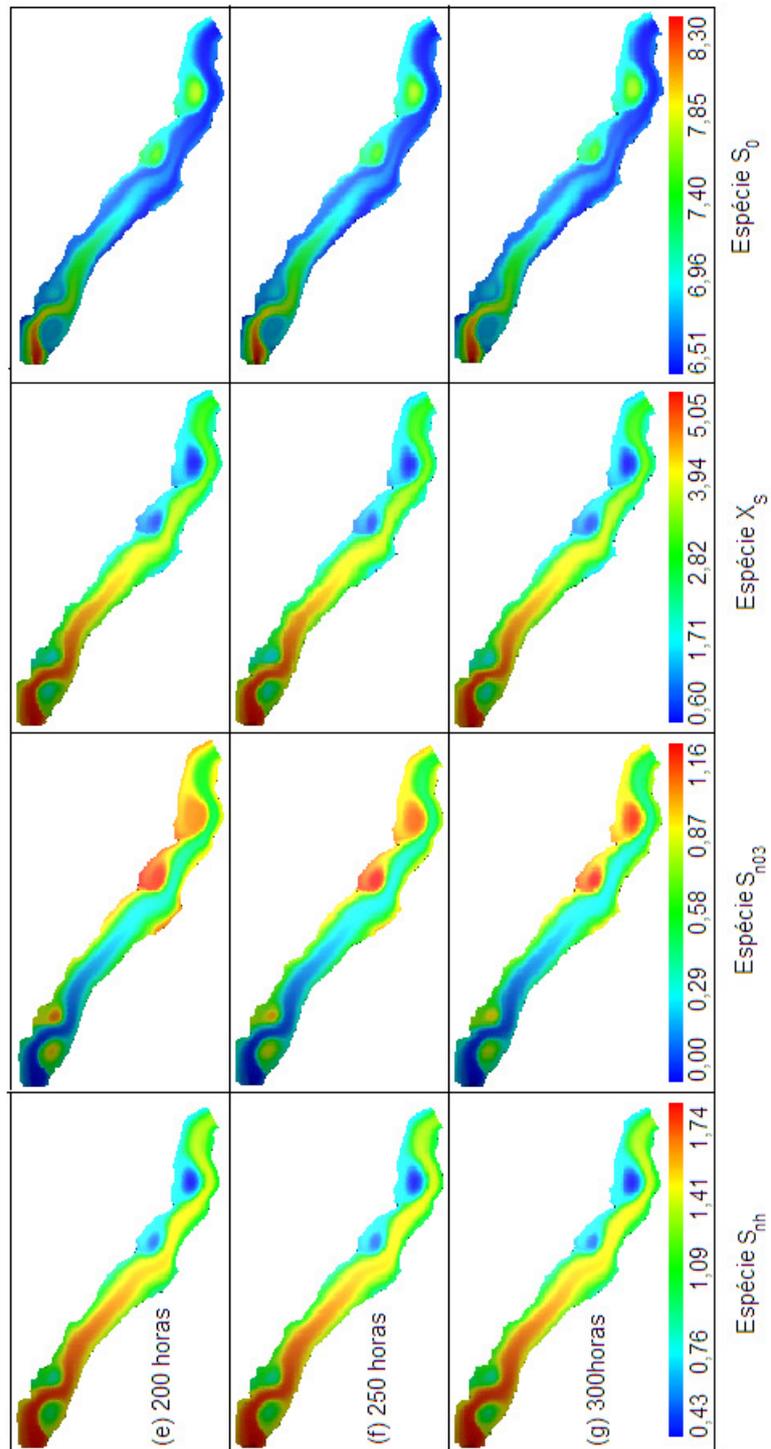


Figura 4.10: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10 \text{ m}^2/h$.

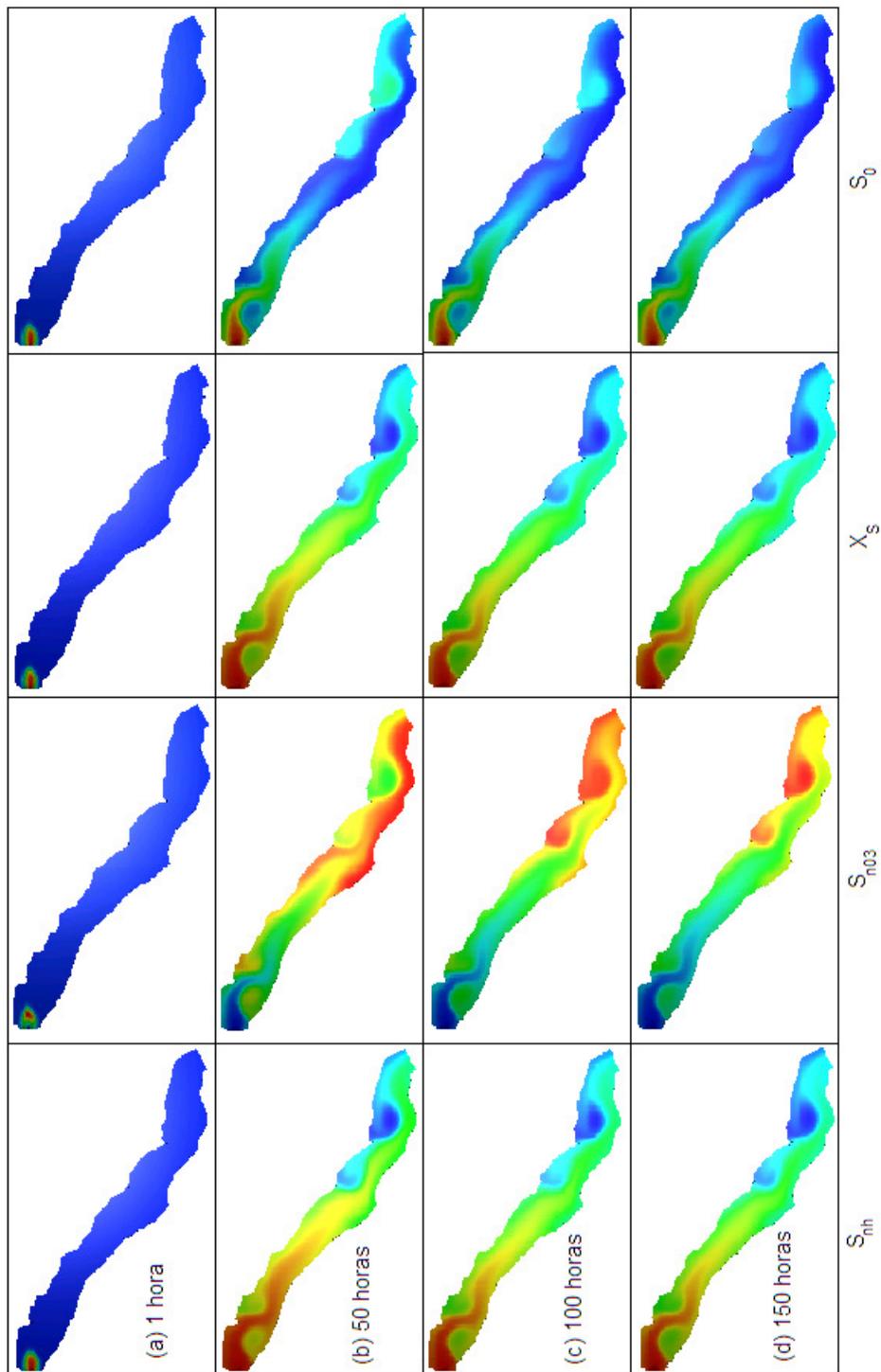


Figura 4.11: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 100 \text{ m}^2/h$.

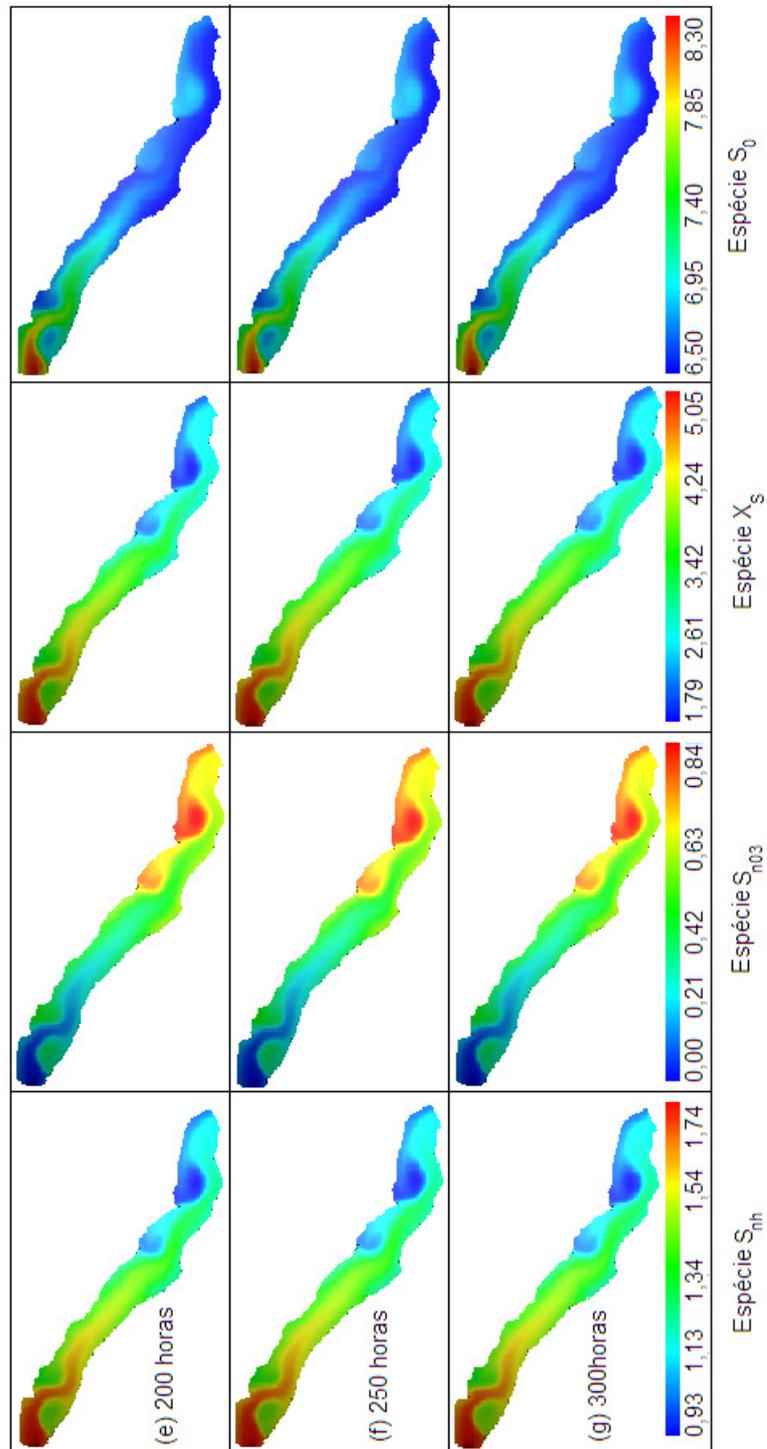


Figura 4.12: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 100 \text{ m}^2/h$.

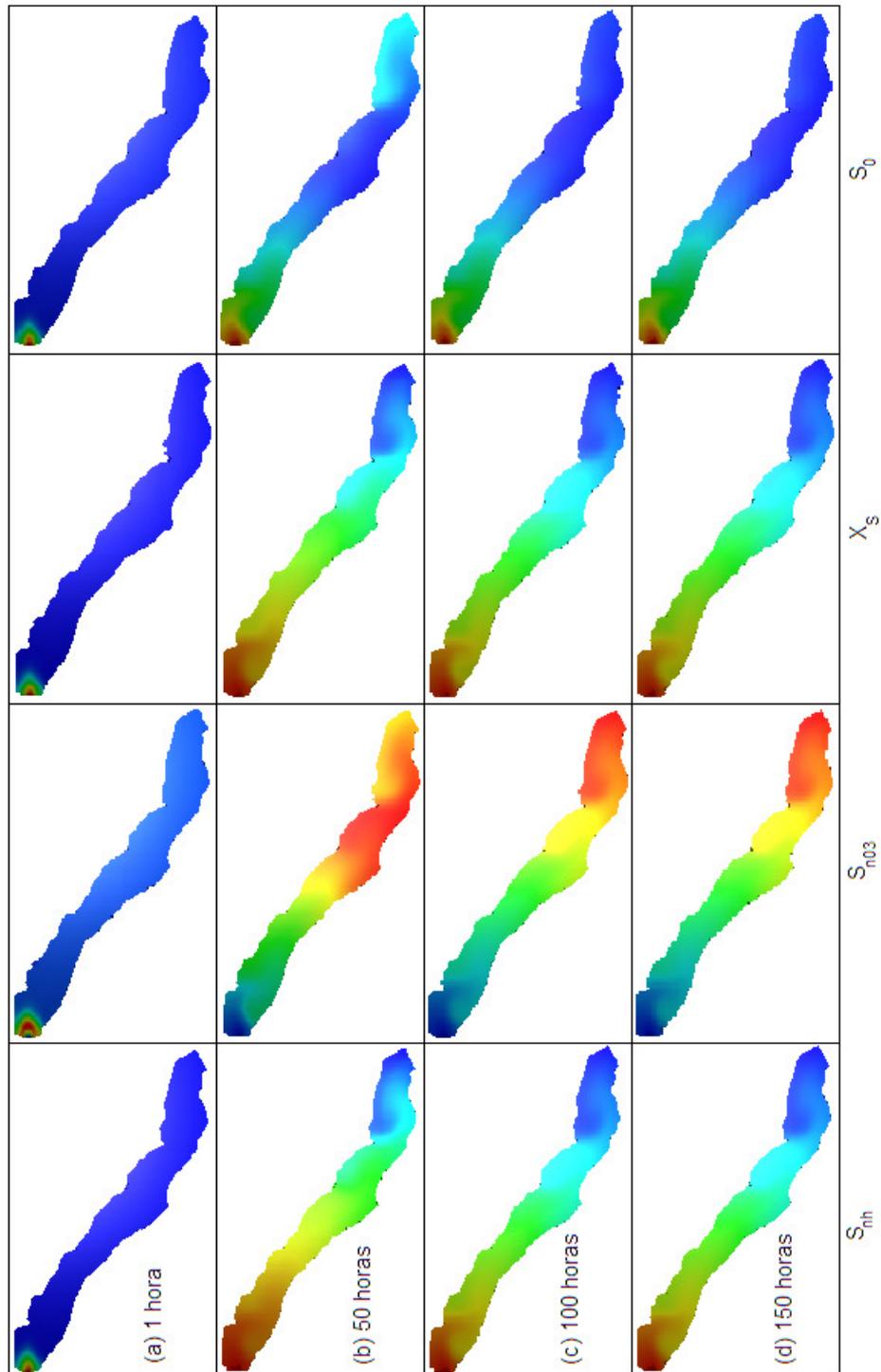


Figura 4.13: Evolução das quatro espécies relativas com $D = 1000 \text{ m}^2/h$.

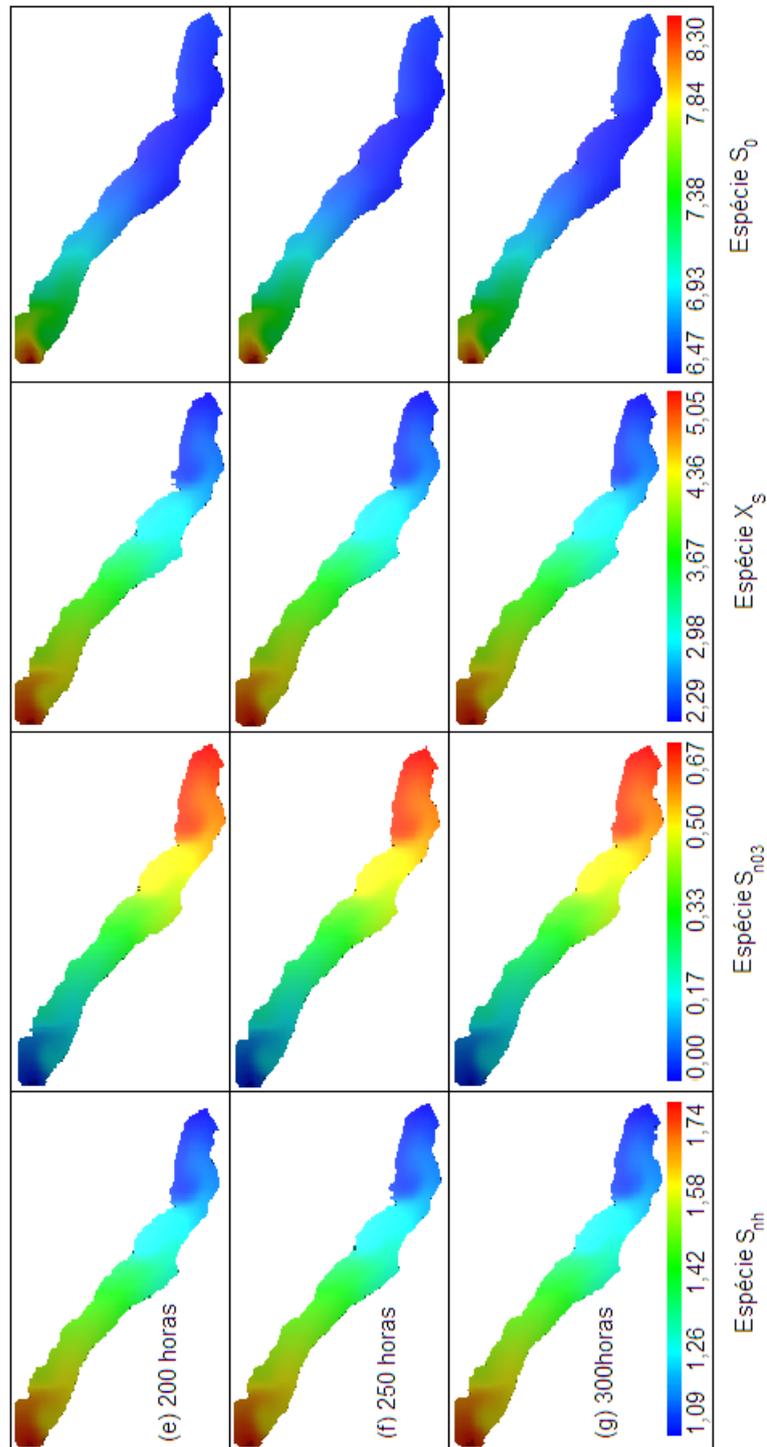


Figura 4.14: Evolução das quatro espécies relativas com $D = 1000 \text{ m}^2/h$.

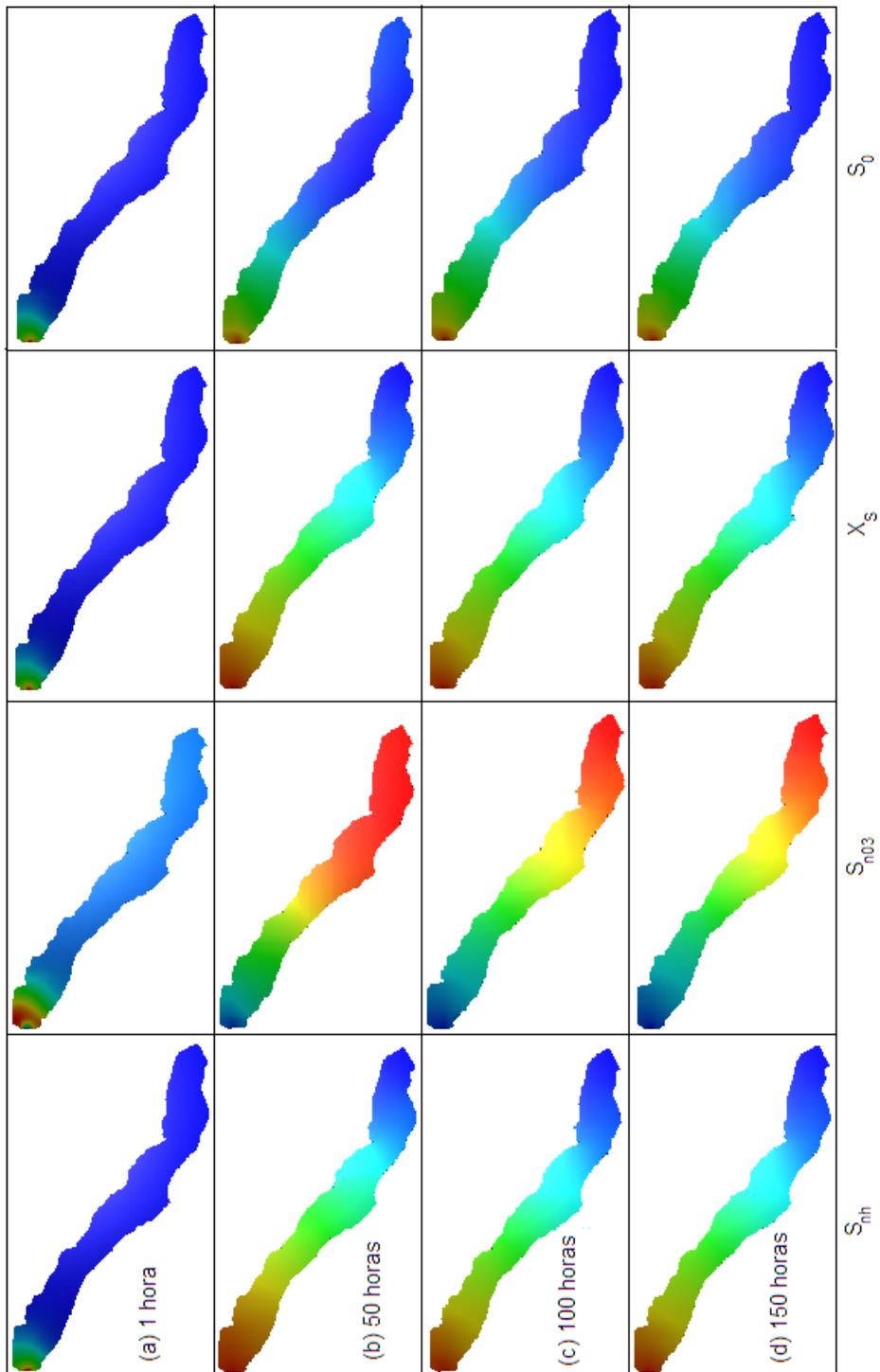


Figura 4.15: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10000 \text{ m}^2/h$.

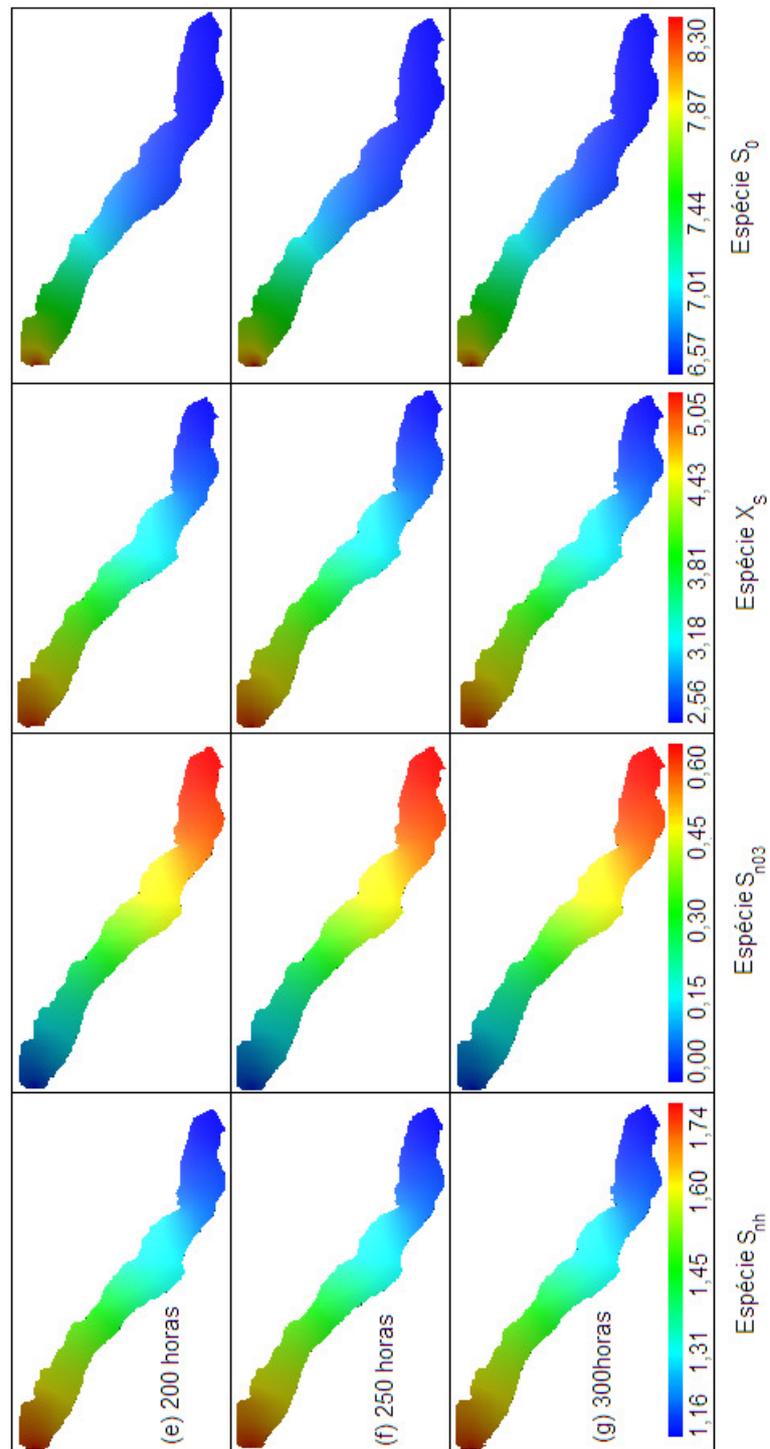


Figura 4.16: Evolução das quatro espécies reativas com $D = 10000 \text{ m}^2/h$.

Capítulo 5

Conclusões

Neste trabalho elaboramos um modelo de transporte e reações para simular a evolução de uma descarga de poluentes no corpo d'água do lago Igapó 1. Na modelagem do problema, supomos que o Lago Igapó 1 caracteriza-se por ser uma lâmina d'água, de modo que o escoamento hidrodinâmico foi descrito por um modelo 2DH, dado pelas equações de Navier-Stokes e da pressão em (3.54 - 3.57). Neste modelo hidrodinâmico, a água foi considerada um fluido newtoniano incompressível. Supomos também que o transporte das espécies reativas (ciclos do carbono e do nitrogênio) ocorre de modo passivo, enquanto que as reações, durante o escoamento, são descritas pelo modelo descrito em AMBROSE, *et al.* (2001) linearizado, mostradas de forma esquemática na figura 3.6. Enfim, as equações em (3.75) são o nosso modelo bidimensional horizontal de transporte advectivo-difusivo-reactivo, dos ciclos do carbono e nitrogênio.

Portanto, por meio de simulações numéricas dos sistema de equações (3.54 - 3.57) e (3.75), em função do coeficiente de difusão D , foi possível obter uma melhor compreensão da dinâmica dos processos envolvidos no escoamento de espécies reativas, tais como, a dinâmica do processo de nitrificação, da demanda bioquímica de oxigênio e do nível de oxigênio dissolvido no corpo d'água. Nas simulações consideramos uma descarga contínua de 1,74 miligramas de amônia por litro na entrada do lago Igapó 1. As figuras 4.1 a 4.16 apresentam os resultados das simulações do transporte das concentrações de amônia, de nitrito+nitrato, da demanda bioquímica de oxigênio e do oxigênio dissolvido, em todo domínio do lago, em todo instante, para os seguintes valores do coeficiente de difusão: $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 0,01 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 0,1 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 1 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 10 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 100 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 1000 \text{ m}^2/\text{h}$, $D = 10000 \text{ m}^2/\text{h}$, respectivamente.

Analisando os resultados numéricos apresentados nas figuras 4.1 a 4.6, quando a difusão tem caráter molecular, verificamos o efeito local dos quatro grandes vórtices, capturados pelo modelo hidrodinâmico, na dinâmica das concentrações de amônia, de nitrito+nitrato, da demanda bioquímica de oxigênio e do oxigênio dissolvido. O fato mais relevante é a verificação que neste regime de difusão, as maiores concentrações de nitrito e de nitrato ocorrem justamente nos vórtices do lago, caracterizando-os como as regiões mais poluídas por nitrito e nitrato. Já para valores de difusão no regime turbulento, resultados apresentados nas figuras 4.6 a 4.16, o escoamento das espécies reativas no lago é semelhante ao escoamento em um rio, com o desaparecimento dos vórtices hidrodinâmicos. Enfim,

para um coeficiente de difusão intermediário, da ordem de $D = 10 \text{ m}^2/h$, temos uma dinâmica de escoamento compatível com observações realizadas no lago Igapó 1 por uma equipe do Laboratório de Simulação e Análise Numérica (LabSAN).

Como continuação deste trabalho pretendemos estudar a sensibilidade da dinâmica das concentrações das espécies reativas com respeito às variações no lançamento contínuo. Com relação ao escoamento hidrodinâmico, estudaremos a influência do número de Reynolds na topologia deste. Pretendemos também adicionar, no modelo de reações, ciclos de outras espécies reativas. Enfim, a validação do modelo de reações descrito em AMBROSE, *et al.* (2001) linearizado, comparado ao modelo de reações descrito em AMBROSE, *et al.* (2001), não-linear, é um dos nossos objetivos.

Apêndice A

Medições do índice de qualidade de água do lago Igapó 1

A pedido do Clube de Engenharia e Arquitetura de Londrina (Ceal), a empresa TI Solution de Londrina, começou a desenvolver, no ano de 2007, um sistema de informação geográfica informatizado. O sistema cruza uma extensa base de dados com mapas, fotografias de satélites, relatórios e resultados do IQA dos rios urbanos de Londrina em vários pontos de coleta. As medidas do IQA foram realizadas por meio de uma colaboração entre o Instituto Ambiental do Paraná (IAP), o Conselho Municipal do Meio Ambiente (CONSEMMA), a Universidade Estadual de Londrina (UEL) e o Clube de Engenharia e Arquitetura de Londrina (CEAL). Entre estes relatórios e resultados do IQA encontra-se um estudo sobre a qualidade da água no lago Igapó 1 (TI SOLUTION, 2009).

O IQA é um Índice de Qualidades das Águas que surgiu a partir de um estudo realizado em 1970 pela National Sanitation Foundation (NSF) dos Estados Unidos. A CETESB adaptou e desenvolveu o IQA indicando os parâmetros a serem avaliados, o peso relativo dos mesmos e a condição com que se apresenta cada parâmetro, segundo uma escala de valores. O IQA é calculado pelo produto ponderado das qualidades de água correspondentes aos nove parâmetros: temperatura, potencial hidrogeniônico (pH), oxigênio dissolvido, demanda bioquímica de oxigênio, coliformes fecais, nitrogênio total, fósforo total, sólidos totais e turbidez (CETESB, 2009), ou seja,

$$IQA = \prod_{i=1}^9 q_i^{w_i}, \quad (\text{A.1})$$

onde IQA é o índice de qualidade das águas variando entre 0 e 100, q_i é a qualidade do i -ésimo parâmetro variando entre 0 e 100, obtido da respectiva curva média de variação de qualidade em função de sua concentração e w_i é o peso correspondente ao i -ésimo parâmetro, atribuído em função da sua importância para a conformação global de qualidade. O peso de cada parâmetro é dado na tabela A.1 e as curvas médias de variação para cada parâmetro, bem como seu peso relativo correspondente, são apresentados nas figuras A.1, A.2, A.3, A.4, A.5, A.6, A.7, A.8 e A.9 a seguir (CETESB, 2009).

Tabela A.1: Peso atribuído a cada parâmetro do IQA.

Número	Parâmetro	Unidade	Peso (w)
1	Oxigênio Dissolvido	% saturação	0,17
2	Coliformes Fecais	NMP/100ml	0,15
3	pH	- - -	0,12
4	DBO ₅	mg O ₂ /L	0,10
5	Nitrogênio Total	mg N/L	0,10
6	Fósforo Total	mg P/L	0,10
7	Turbidez	uT	0,08
8	Sólidos Totais	mg/L	0,08
9	Temperatura	°C	0,10

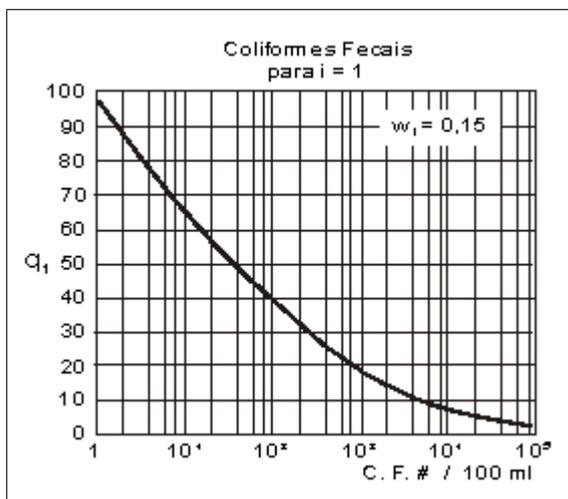


Figura A.1: Curva média de variação do coliforme fecal.

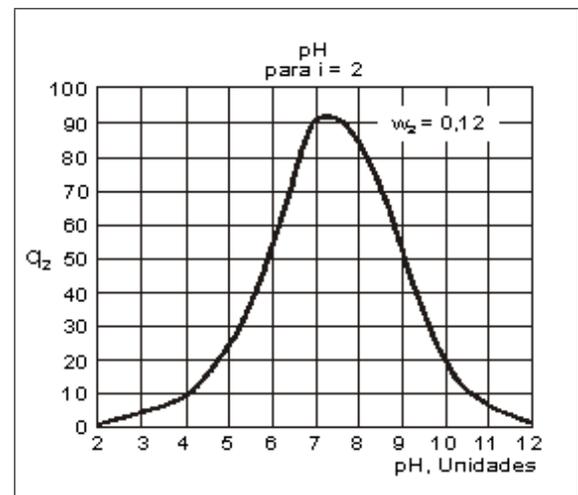


Figura A.2: Curva média de variação do pH.

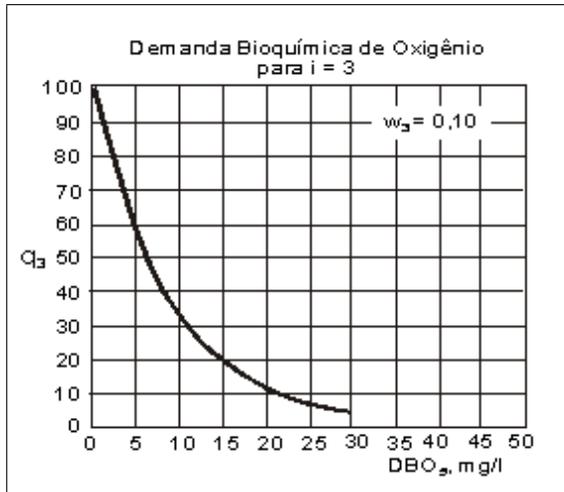


Figura A.3: Curva média de variação da DBO.

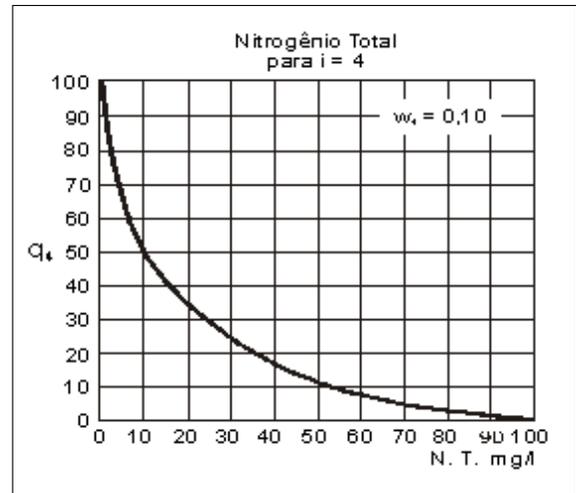


Figura A.4: Curva média de variação do nitrogênio.

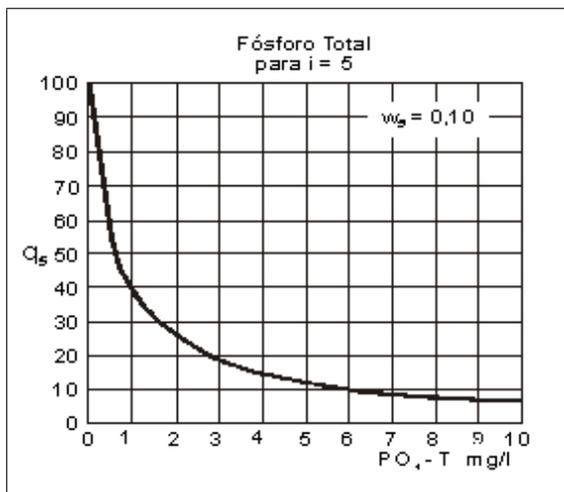


Figura A.5: Curva média de variação do fósforo.

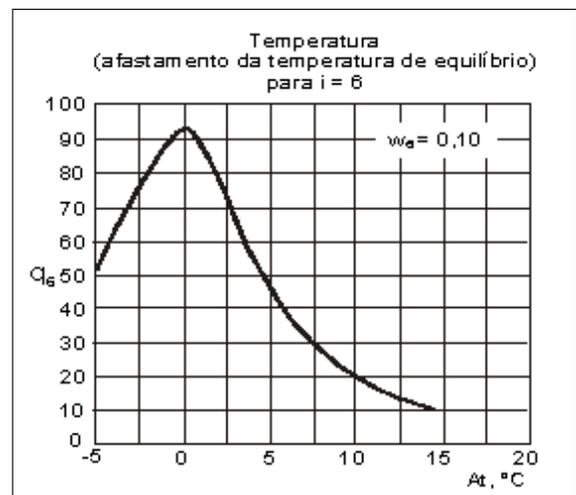


Figura A.6: Curva média de variação da temperatura.

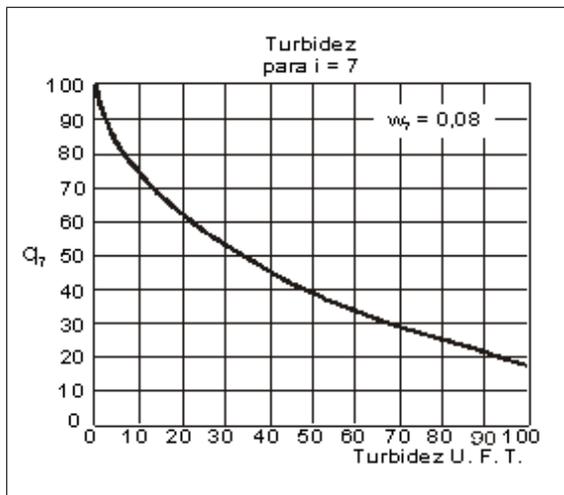


Figura A.7: Curva média de variação da turbidez.

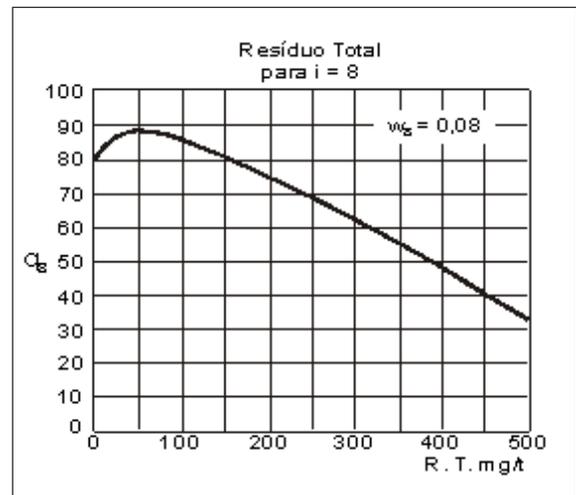


Figura A.8: Curva média de variação dos sólidos totais.

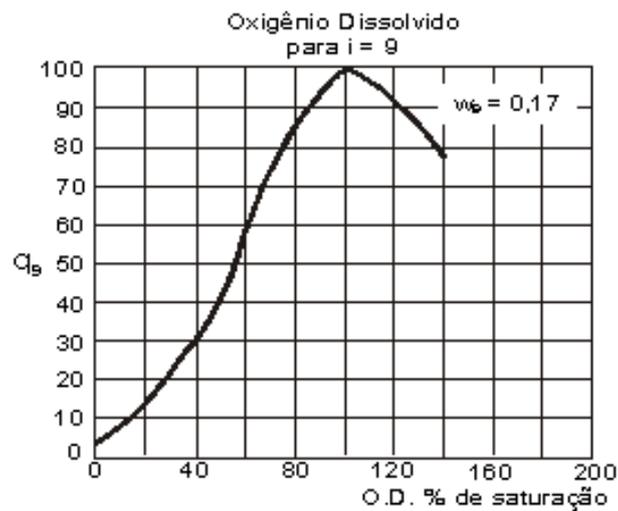


Figura A.9: Curva média de variação do OD.

A CETESB definiu cinco categorias para classificar a qualidade das águas de acordo com o IQA calculado. A tabela A.2 mostra as faixas de classificação das águas conforme os critérios da CETESB.

Tabela A.2: Categorias para a qualidade da água segundo a CETESB.

Categoria	Ponderação
Ótima	$79 < IQA \leq 100$
Boa	$51 < IQA \leq 79$
Regular	$36 < IQA \leq 51$
Ruim	$19 < IQA \leq 36$
Péssima	$IQA \leq 19$

Uma vantagem importante do IQA é a facilidade de comunicação com o público não técnico, pois representa uma média de diversas variáveis em um único número, combinando unidades de medidas diferentes em um única unidade. Quanto as desvantagens temos a perda de informações das variáveis individuais e a não contemplação de parâmetros também muito importantes, tais como a quantidade de metais pesados nas águas, entre outros. Salientamos que o parâmetro metais pesados são avaliados por outros índices de qualidade.

Sobre os resultados do IQA nos rios urbanos de Londrina, temos sete coletas realizadas nos anos de 2007 e 2008 em cada um dos trinta e oito pontos distribuídos pelos rios urbanos de Londrina. Em particular, apresentaremos os resultados dos parâmetros nos pontos de coleta que se referem ao lago Igapó 1, denominados CAM 10 (região da passagem do lago Igapó sob a Avenida Higienópolis) e o CAM 11 (barragem do lago Igapó 1), que correspondem a entrada e saída do lago Igapó 1, respectivamente. Nas tabelas A.3, A.4, A.5, A.6, A.7, A.8, A.9, A.10 e A.11 temos o relatório dos parâmetros nas coletas nos pontos CAM 10 e CAM 11.

Tabela A.3: Concentração de oxigênio dissolvido encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

OD (<i>mg Zn/L</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	5,83	8,32
Coleta 2	11,27	7,48
Coleta 3	5,64	4,85
Coleta 4	5,88	5,66
Coleta 5	11,06	9,56
Coleta 6	0	5,48
Coleta 7	5,95	6,4

Tabela A.4: Concentração de coliforme fecal encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Coliforme fecal (<i>NPM</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	9200	1100
Coleta 2	170	120
Coleta 3	9200	5400
Coleta 4	160000	24000
Coleta 5	11000	2100
Coleta 6	160000	54000
Coleta 7	170000	35000

Tabela A.5: O potencial hidrogeniônico das amostras do lago Igapó 1.

Potencial Hidrogeniônico	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	7	7,1
Coleta 2	9	7,7
Coleta 3	7,4	7,5
Coleta 4	7,3	7,4
Coleta 5	0	7,5
Coleta 6	7	7,2
Coleta 7	7	7,2

Tabela A.6: A demanda bioquímica de oxigênio encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Demanda bioquímica de oxigênio (<i>mg O₂/L</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	0	3
Coleta 2	4	0
Coleta 3	3	0
Coleta 4	4	0
Coleta 5	10	17
Coleta 6	3	3
Coleta 7	4	3

Tabela A.7: Concentração de nitrogênio Kjeldahl total encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Nitrogênio total (<i>mg N/L</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	0,21	0,11
Coleta 2	0,44	0,72
Coleta 3	0,73	0,62
Coleta 4	0,73	0,47
Coleta 5	0,98	0,93
Coleta 6	0,32	0,47
Coleta 7	0,66	0,39

Tabela A.8: Concentração de fósforo total encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Fósforo total (<i>mg P/L</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	0,064	0,04
Coleta 2	0,041	0,073
Coleta 3	0,071	0,078
Coleta 4	0,033	0,013
Coleta 5	0,14	0,11
Coleta 6	0,062	0,041
Coleta 7	0,071	0,028

Tabela A.9: A turbidez encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Turbidez (<i>N.T.U</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	12,23	9
Coleta 2	6	6
Coleta 3	6	5
Coleta 4	9,4	4,6
Coleta 5	17	14
Coleta 6	17,9	6,8
Coleta 7	26,5	6,9

Tabela A.10: Concentração de sólido total encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Sólidos totais (<i>mg/L</i>)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	78	97
Coleta 2	169	126
Coleta 3	77	82
Coleta 4	109	90
Coleta 5	103	91
Coleta 6	83	76
Coleta 7	81	78

Tabela A.11: Temperatura da água encontrada nas amostras do lago Igapó 1.

Temperatura ($^{\circ}C$)	CAM 10	CAM 11
Coleta 1	17,9	18,4
Coleta 2	24,4	23
Coleta 3	25	25
Coleta 4	0	0
Coleta 5	0	0
Coleta 6	0	0
Coleta 7	0	0

Com base nas medidas dos parâmetros do IQA realizadas na entrada (CAM 10) e na saída (CAM 11) do lago Igapó 1, classificou-se a água deste, nas várias coletas realizadas entre 2007 e 2008, conforme as tabelas A.12 e A.13 abaixo.

Tabela A.12: Relatório de IQA no CAM 10 (passagem do lago Igapó sob a Av. Higienópolis).

Coleta	<i>IQA</i>	Categoria	Condição do tempo
1	61,56	Bom	Chuvoso
2	60,96	Bom	Bom
3	61,19	Bom	Chuvoso
4	41,36	Regular	Chuvoso
5	34,39	Ruim	Bom
6	29,54	Ruim	Bom
7	39,98	Regular	Chuvoso

Tabela A.13: Relatório de IQA no CAM 11 (barragem do lago Igapó 1).

Coleta	<i>IQA</i>	Categoria	Condição do tempo
1	71,09	Bom	Chuvoso
2	80,17	Ótimo	Bom
3	63,08	Bom	Chuvoso
4	48,79	Regular	Chuvoso
5	55,25	Bom	Bom
6	44,06	Regular	Bom
7	47,71	Regular	Chuvoso

Apêndice B

Estudo local das concentrações das espécies reativas

Neste apêndice, apresentamos os resultados obtidos nas simulações para o coeficiente de difusão $D = 10 \text{ m}^2/h$, nos 22 nós selecionados arbitrariamente da malha do lago Igapó 1. Nas tabelas B.1-B.22, mantivemos as concentrações iniciais e de fronteira propostas no Capítulo 4.

Tabela B.1: Nó 540.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.63125E+000	.28516E+000	.14225E+001	.70575E+001
100	.99547E+000	.57786E+000	.21041E+001	.67288E+001
150	.10400E+001	.66334E+000	.21674E+001	.66617E+001
200	.10462E+001	.68777E+000	.21744E+001	.66523E+001
250	.10475E+001	.70095E+000	.21763E+001	.66501E+001
300	.10481E+001	.70509E+000	.21772E+001	.66492E+001

Tabela B.2: Nó 1080.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.62195E+000	.27393E+000	.14071E+001	.70654E+001
100	.99289E+000	.57344E+000	.21012E+001	.67369E+001
150	.10385E+001	.65998E+000	.21651E+001	.66693E+001
200	.10385E+001	.65998E+000	.21651E+001	.66693E+001
250	.10459E+001	.70211E+000	.21752E+001	.66577E+001
300	.10466E+001	.70528E+000	.21754E+001	.66570E+001

Tabela B.3: N^o 1620.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.62544E+000	.26868E+000	.14402E+001	.70842E+001
100	.62544E+000	.26868E+000	.14402E+001	.70842E+001
150	.10435E+001	.66610E+000	.21803E+001	.66673E+001
200	.10504E+001	.68781E+000	.21913E+001	.66575E+001
250	.10501E+001	.70041E+000	.21918E+001	.66552E+001
300	.10520E+001	.70501E+000	.21934E+001	.66541E+001

Tabela B.4: N^o 2160.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.12012E+001	.33482E+000	.29418E+001	.67155E+001
100	.13009E+001	.40274E+000	.31390E+001	.65956E+001
150	.13117E+001	.42344E+000	.31563E+001	.65673E+001
200	.13135E+001	.43254E+000	.31598E+001	.65625E+001
250	.13140E+001	.43586E+000	.31602E+001	.65611E+001
300	.13141E+001	.43687E+000	.31604E+001	.65607E+001

Tabela B.5: N^o 2700.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.90832E+000	.34249E+000	.21017E+001	.68456E+001
100	.11442E+001	.50960E+000	.25635E+001	.65964E+001
150	.11644E+001	.55326E+000	.25964E+001	.65603E+001
200	.11681E+001	.57190E+000	.26027E+001	.65528E+001
250	.11692E+001	.57841E+000	.26035E+001	.65504E+001
300	.11693E+001	.58097E+000	.26057E+001	.65496E+001

Tabela B.6: N^o 3240.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.14121E+001	.23095E+000	.36918E+001	.69169E+001
100	.14566E+001	.25907E+000	.37856E+001	.68734E+001
150	.14629E+001	.27243E+000	.37943E+001	.68634E+001
200	.14646E+001	.27767E+000	.37969E+001	.68604E+001
250	.14647E+001	.28023E+000	.37971E+001	.68597E+001
300	.14646E+001	.28209E+000	.37981E+001	.68583E+001

Tabela B.7: Nó 3780.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.14949E+000	.17320E+000	.40281E+001	.71519E+001
100	.15279E+000	.19336E+000	.40919E+001	.71228E+001
150	.15322E+001	.20386E+000	.40998E+001	.71161E+001
200	.15338E+001	.20872E+000	.41026E+001	.71140E+001
250	.15339E+001	.21047E+000	.41023E+001	.71121E+001
300	.15338E+001	.21176E+000	.41021E+001	.71124E+001

Tabela B.8: Nó 4320.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.16089E+001	.10930E+000	.44654E+001	.74953E+001
100	.16191E+001	.11589E+000	.44888E+001	.74843E+001
150	.16209E+001	.11978E+000	.44876E+001	.74841E+001
200	.16222E+001	.12042E+000	.44937E+001	.74833E+001
250	.16221E+001	.12178E+000	.44902E+001	.74825E+001
300	.16221E+001	.12116E+000	.44888E+001	.74806E+001

Tabela B.9: Nó 4860.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.16471E+001	.72751E-001	.46446E+001	.77394E+001
100	.16574E+001	.77871E-001	.46640E+001	.77294E+001
150	.16586E+001	.81054E-001	.46664E+001	.77283E+001
200	.16592E+001	.82264E-001	.46724E+001	.77303E+001
250	.16595E+001	.83011E-001	.46715E+001	.77264E+001
300	.16599E+001	.83135E-001	.46695E+001	.77280E+001

Tabela B.10: Nó 5400.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.13145E+001	.19082E+000	.34559E+001	.71426E+001
100	.14078E+001	.26508E+000	.36525E+001	.70554E+001
150	.14219E+001	.29722E+000	.36790E+001	.70218E+001
200	.14259E+001	.31135E+000	.36827E+001	.70128E+001
250	.14267E+001	.31696E+000	.36846E+001	.70080E+001
300	.14272E+001	.31953E+000	.36855E+001	.70073E+001

Tabela B.11: Nó 5940.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.11362E+001	.37696E+000	.27066E+001	.66493E+001
100	.12381E+001	.46214E+000	.29013E+001	.65439E+001
150	.12509E+001	.48605E+000	.29163E+001	.65208E+001
200	.12522E+001	.49561E+000	.29205E+001	.65162E+001
250	.12535E+001	.49960E+000	.29207E+001	.65150E+001
300	.12540E+001	.50111E+000	.29200E+001	.65143E+001

Tabela B.12: Nó 6480.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.10906E+001	.33951E+000	.26286E+001	.67262E+001
100	.12036E+001	.44559E+000	.28413E+001	.66417E+001
150	.12247E+001	.48742E+000	.28663E+001	.66128E+001
200	.12282E+001	.50614E+000	.28718E+001	.66065E+001
250	.12307E+001	.51541E+000	.28719E+001	.66040E+001
300	.12313E+001	.51985E+000	.28734E+001	.66025E+001

Tabela B.13: Nó 7020.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.10165E+000	.35672E-001	.21508E+000	.74737E+001
100	.33085E+000	.66272E+000	.61773E+000	.77225E+001
150	.45287E+000	.66267E+000	.76619E+000	.75699E+001
200	.50406E+000	.84630E+000	.80922E+000	.75007E+001
250	.52245E+000	.98302E+000	.82188E+000	.74757E+001
300	.52957E+000	.10838E+000	.82443E+000	.74669E+001

Tabela B.14: Nó 7560.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.12462E+001	.32594E+000	.30854E+001	.66966E+001
100	.13160E+001	.39506E+000	.32180E+001	.66334E+001
150	.13272E+001	.41179E+000	.32320E+001	.66171E+001
200	.13284E+001	.41841E+000	.32342E+001	.66147E+001
250	.13300E+001	.42148E+000	.32325E+001	.66128E+001
300	.13303E+001	.42215E+000	.32346E+001	.66115E+001

Tabela B.15: N^o 8100.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.10103E+000	.67316E-001	.21280E+000	.74678E+001
100	.37246E+000	.39801E+000	.67993E+000	.76504E+001
150	.51650E+000	.72917E+000	.85204E+000	.74604E+001
200	.56602E+000	.92947E+000	.89680E+000	.73945E+001
250	.58179E+000	.10509E+000	.90915E+000	.73729E+001
300	.58830E+000	.11172E+000	.91149E+000	.73672E+001

Tabela B.16: N^o 8640.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.13699E+001	.30273E+000	.34881E+001	.67273E+001
100	.14071E+001	.32140E+000	.35605E+001	.66913E+001
150	.14106E+001	.33434E+000	.35630E+001	.66912E+001
200	.14106E+001	.33701E+000	.35624E+001	.66922E+001
250	.14129E+001	.33763E+000	.35558E+001	.66952E+001
300	.14134E+001	.33898E+000	.35629E+001	.66921E+001

Tabela B.17: N^o 9180.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.11635E+001	.30252E+000	.28721E+001	.68035E+001
100	.12714E+001	.41045E+000	.30774E+001	.67149E+001
150	.12857E+001	.44538E+000	.30924E+001	.66771E+001
200	.12879E+001	.45648E+000	.30947E+001	.66728E+001
250	.12907E+001	.45939E+000	.30904E+001	.66676E+001
300	.12919E+001	.46174E+000	.30961E+001	.66650E+001

Tabela B.18: N^o 9720.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.12228E+001	.28810E+000	.30742E+001	.68612E+001
100	.13113E+001	.37297E+000	.32482E+001	.67657E+001
150	.13249E+001	.40668E+000	.32537E+001	.67396E+001
200	.13283E+001	.41474E+000	.32581E+001	.67342E+001
250	.13313E+001	.41876E+000	.32507E+001	.67324E+001
300	.13319E+001	.42097E+000	.32653E+001	.67297E+001

Tabela B.19: Nó 10260.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.11392E+001	.26445E+000	.28503E+001	.64488E+001
100	.12591E+001	.39259E+000	.30816E+001	.68412E+001
150	.12786E+001	.44170E+000	.30917E+001	.68025E+001
200	.12835E+001	.45619E+000	.31046E+001	.67931E+001
250	.12864E+001	.46268E+000	.30967E+001	.67859E+001
300	.12882E+001	.46552E+000	.31037E+001	.67857E+001

Tabela B.20: Nó 10800.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.67055E+000	.26137E+000	.15465E+001	.70815E+001
100	.96162E+000	.52215E+000	.20757E+001	.68693E+001
150	.10139E+001	.63900E+000	.21377E+001	.67943E+001
200	.10224E+001	.68705E+000	.21476E+001	.67790E+001
250	.10272E+001	.70274E+000	.21507E+001	.67732E+001
300	.10282E+001	.71380E+000	.21522E+001	.67707E+001

Tabela B.21: Nó 11340.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.14612E+001	.28477E+000	.37626E+001	.68430E+001
100	.14703E+001	.28312E+000	.37997E+001	.67988E+001
150	.14717E+001	.28575E+000	.37998E+001	.67885E+001
200	.14714E+001	.28694E+000	.38005E+001	.67855E+001
250	.14723E+001	.28756E+000	.38021E+001	.67835E+001
300	.14278E+001	.28747E+000	.38019E+001	.67817E+001

Tabela B.22: Nó 11880.

tempo (h)	S_{nh}	S_{n03}	X_S	S_0
50	.29030E+000	.15638E+000	.63335E+000	.73429E+001
100	.66259E+000	.50291E+000	.12938E+001	.72114E+001
150	.75045E+000	.69756E+000	.13987E+001	.70900E+001
200	.77395E+000	.81849E+000	.14217E+001	.70567E+001
250	.78255E+000	.88699E+000	.14308E+001	.70445E+001
300	.78802E+000	.91893E+000	.14312E+001	.70402E+001

Referências bibliográficas

- AMBROSE, R. B.; WOOL, T.A.; MARTIN, J.L. *WASP7 Benthic Algae Model theory and user's guide*. U.S. Environmental Protection Agency, Washington, 2006.
- AMBROSE, R.B.; WOOL, T.A.; MARTIN, J.L. *The Water Quality Analysis Simulation Program, WASP6*. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, 2001.
- BASTOS, F. A. *Problemas de mecânica dos fluidos*. Rio de Janeiro: Guanabara Dois S.A., 1983.
- BICKNELL, B. et al. *HSPF, Version 12, User's Manual*. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, p. 120–128, 2001.
- BROOKS, A. N.; HUGHES, T. J. R. *Streamline upwind/Petrov-Galerkin formulation for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier-Stokes equation*. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, vol. 32, p. 199-259, 1982.
- BROWN, L. C. and BARNWELL, T. O. *The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and User Manual*. U. S. Environmental Protection Agency, Athens, p. 3-87, 1987. p. 3-87, 1987.
- CETESB. *IQA - Índice de qualidade das águas*. Disponível em <http://www.cetesb.sp.gov.br/Agua/rios/indiceapiqa.asp>. São Paulo, 2009. Acessado em janeiro de 2009
- CHAPRA, S. C. *Surface water-quality modeling*. New York: McGraw-Hill, 1997.
- CIRILO, E. R.; DE BORTOLI, A.L. Geração do grid da traquéia e dos tubos bronquiais por splines cúbicos. *Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas*, v. 27, n. 2, p. 147-155, 2006.
- CONAMA 357/2005. *Resolução Conama 357 de 17 de Março de 2005*. Disponível em <http://www.mma.gov.br/port/conama/res/res05/res35705.pdf>. Acessado em janeiro de 2009.
- DERISIO, J. C. *Introdução ao controle de poluição ambiental*. São Paulo: Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 1992.
- FOX, R. W.; MACDONALD, A. T. *Introdução à mecânica dos fluidos*. Rio de Janeiro: Livros técnicos e científicos S.A., 1998.
- GRESHO, P.M.; SANI, R.L. On pressure boundary conditions for the incompressible Navier-Stokes equations. *International Journal for Numerical Methods in Fluids*, v. 7, p.

1111-1145, 1987.

HENZE, M. et al. Activated sludge models ASM1, ASM2 and ASM3. *IAW Scientific and Technical Report*. IAW Publishing, p. 1–28, 2000.

O'CONNOR, D. J.; DOBBINS, W. E. Mechanism of reaeration in natural streams. *Journal Sanitary Engineering Division*, p. 641-666, 1967.

POTTER, M. C.; SCOTT, E. P. *Ciências Térmicas*. São Paulo: Thomson Learning, 2007.

ROMEIRO, N.M.L; CASTRO, R.G.S. Simulação numérica do modelo de transporte advectivo-difusivo-reativo nos rios Negro e Solimões. *X encontro de modelagem computacional*, Nova Friburgo. Anais do evento, 2007.

ROMEIRO, N.M.L; CASTRO, R.G.S; LANDAU, L. Simulação numérica do transporte de poluentes envolvendo quatro espécies reativas nos rios Negro e Solimões. *I Simpósio de Recursos Hídricos da Amazônia*, Caderno de Resumos do I Simpósio de Recursos Hídricos da Amazônia, v. 1. p. 50, 2003.

ROMEIRO, N.M.L. *Simulação numérica de modelos de qualidade de água usando o método de elementos finitos estabilizados*. Tese (Doutorado)- Coordenação de Pós graduação e Pesquisa em Engenharia-Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2003.

ROSMAN, P. C. C. Subsídios para Modelagem de Sistemas Estuarinos. *Métodos Numéricos em Recursos Hídricos*. Associação Brasileira de Recursos Hídricos. In: Rui Vieira (Org.),v. 3, p. 231-343, 1997.

SHANAHAN, P.E. et al. River Water Quality Model nº 1 (RWQM1): I - modeling approach. *Water Science of Technology*, v. 43, p. 1-9, 2001.

SCHLICHTING, H. *Boundary-layer theory*. New York: McGraw Hill, 1968.

STREETER, H.W.; PHELPS, E.B. *A study of the natural purification of the Ohio River*. Public Health Bulletin 146, U.S. Public Health Service, Washington, 1925.

TI SOLUTION. *Geoambiental*. Disponível em <http://sistemas.tisolution.com/geo/TIMap.aspx>. Londrina, Paraná, 2009. Acessado em janeiro de 2009.

TUCCI, C. E. M. *Modelos hidrológicos*. Porto Alegre: Editora da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 1998.