

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

SOLUÇÕES EXATAS PARA PROBLEMAS DE DISPERSÃO DE  
POLUENTES – MODELO DIFUSIVO BASEADO NA EQUAÇÃO KDV

por

Renato Letizia Garcia

Tese para obtenção do Título de  
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, abril de 2009

SOLUÇÕES EXATAS PARA PROBLEMAS DE DISPERSÃO DE  
POLUENTES – MODELO DIFUSIVO BASEADO NA EQUAÇÃO KdV

por

Renato Letizia Garcia,  
Mestre em Engenharia

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em  
Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do  
Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Jorge Rodolfo da Silva Zabadal

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Edson Abel dos Santos Chiaramonte, Curso de Engenharia de Energia -  
UERGS

Prof. Dr. Volnei Borges, Denuc - UFRGS

Prof<sup>a</sup>. Dr<sup>a</sup>. Lígia Damasceno Ferreira Marczak - UFRGS

Prof. Dr. Álvaro Luiz de Bortoli - UFRGS

Prof. Dr. Horácio Antônio Vielmo  
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, abril de 2009.

## RESUMO

Neste trabalho é apresentado um novo método analítico para a resolução de problemas em poluição aquática. O método utiliza três restrições diferenciais de primeira ordem a partir das quais são encontradas transformações auto-Bäcklund para a equação advectivo-difusiva tridimensional em regime estacionário. Um modelo suplementar, baseado na equação KdV, foi formulado com o intuito de estimar o coeficiente de dispersão resultante da oscilação superficial. Esse fenômeno, provocado pela incidência de ventos, é responsável pela propagação isotrópica do poluente.

Esse modelo auxiliar dispensa o emprego de formulações tridimensionais para os casos nos quais a componente de velocidade na direção  $z$  possui caráter oscilante, característica típica dos corpos hídricos de baixa profundidade.

A formulação proposta fornece soluções exatas em formas de variedades, contendo funções arbitrárias de uma variável. Essa característica proporciona uma redução significativa no tempo de pós-processamento, em particular na confecção de mapas de distribuição de concentração. Isto ocorre porque a estrutura da solução satisfaz as condições de contorno presentes sobre trechos extensos do litoral correspondente. Assim é possível utilizar malhas bastante grossas ou até mesmo dispensar a discretização do domínio, dependendo do seu formato.

O tempo de processamento reduzido constitui uma característica fundamental no projeto do sistema de redes de esgoto. Esta aplicação prática exige a simulação de um elevado número de cenários de dispersão de poluentes, oriundos da combinação de tratamento e realocação de cargas de esgoto ao longo do corpo hídrico considerado. Para alguns desses cenários são apresentados mapas de distribuição de concentração para importantes parâmetros de qualidade da água. Esses mapas, que foram obtidos para três parâmetros (coliformes, nitrogênio e compostos de fósforo) concordam qualitativamente com dados experimentais obtidos em campanhas realizadas ao longo do Guaíba.

## ABSTRACT

This work presents new exact solutions to the unsteady three dimensional Navier-Stokes equations for incompressible viscous flows. These solutions are obtained by means of split and auto-Bäcklund transformations. The splitting procedure decouples the Navier-Stokes equations into a linear and a nonlinear inhomogeneous system of partial differential equations. The linear system, which contains only viscous terms and time derivatives, is solved via auto-Bäcklund transformations, furnishing the velocity field. The components of the velocity vector are then replaced into the nonlinear system to obtain the corresponding pressure field.

At first glance, the solution of the nonlinear system should be carried out numerically by direct integration. However, an auxiliary model for the pressure field was conceived in order to avoid the explicit evaluation of the integrals. The model was obtained from the Helmholtz equations and establishes a straightforward relationship between pressure and velocity fields.

The original aim of the proposed work is twofold: find analytical solutions for the Navier-Stokes equations and obtain closed-form expressions to the pressure field as a function of the velocity components. The analytical character of the solutions provides a significant reduction on the time processing required to simulate viscous flows, which virtually reduces to the time demanded to execute post-processing tasks. Taking this fact in mind, a three dimensional scalar formulation for the streamfunction was developed in order to simplify the most time-consuming post-processing task required, e.g., plotting the streamlines around arbitrary shaped bodies. At this stage of development, this formulation is employed to produce streamline maps for viscous flows around a sphere for high Reynolds numbers.

## ÍNDICE

1.	<b>Introdução</b> .....	1
1.1	Justificativa.....	3
1.2	Objetivos.....	4
1.3	Estrutura do trabalho.....	5
2.	<b>Qualidade das águas superficiais</b> .....	7
2.1.	Parâmetros de qualidade da água.....	8
2.2.	Classificação e uso da água.....	13
2.3.	Aplicação: o Lago Guaíba.....	16
3.	<b>Modelos de qualidade da água – Revisão</b> .....	25
3.1.	Modelos matemáticos de qualidade da água.....	26
3.2.	Classificação dos modelos.....	31
3.3.	Evolução dos modelos de qualidade da água .....	32
3.4.	Métodos atualmente utilizados na resolução da equação advectivo-difusiva....	38
4.	<b>Descrição do método</b> .....	42
4.1.	Desenvolvimento matemático – restrições diferenciais.....	42
4.2.	Condições de compatibilidade.....	48
4.3.	Resolução das equações auxiliares (4.35) a (4.37).....	52
4.4.	Forma final para a distribuição de concentrações.....	54
4.5.	Considerações sobre o fenômeno da difusão.....	56
4.6.	Cálculo do coeficiente de dispersão por oscilação superficial.....	60
4.7.	Determinação do formato das vagas utilizando a equação Kdv.....	63
5.	<b>Resultados</b> .....	72
5.1.	Concentrações de coliformes.....	73
5.2.	Concentrações de fosfato.....	75
5.3.	Concentrações de nitrogênio.....	76
5.4.	Impacto ambiental em locais de maior interesse.....	77
5.5.	Impacto ambiental em outros cenários de interesse.....	82
5.5.1.	Cenário 1.....	83
5.5.2.	Cenário 2.....	85
6.	<b>Conclusões</b> .....	87
7.	<b>Referências bibliográficas</b> .....	90

**Apêndices**

Apêndice A - Lista de modelos de qualidade da água.....	99
Apêndice B - Obtenção das restrições diferenciais para o campo de escoamento.....	100
Apêndice C - Obtenção de termos difusivos a partir de parcelas puramente advectivas – análise em granulação grosseira .....	116

**Anexos**

Anexo I – Dedução da equação KdV a partir das equações de Navier-Stokes.....	119
--	-----

## ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1:	Disponibilidade de água na Terra.....	7
Figura 2.2:	Imagem de satélite da Região Hidrográfica do Guaíba.....	17
Figura 2.3:	Mapa das bacias integrantes da Região Hidrográfica do Guaíba.....	18
Figura 2.4:	Qualidade das águas superficiais na RHG.....	21
Figura 2.5:	Classificação das águas do Lago Guaíba com base na concentração de coliformes fecais.....	23
Figura 3.1:	Fluxograma do esquema de resolução numérica de um modelo matemático de qualidade da água.....	28
Figura 3.2 :	Síntese cronológica da evolução dos modelos de qualidade da água.....	33
Figura 3.3:	Fluxograma dos processos químicos e biológicos representados no modelo QUAL2E.....	37
Figura 4.1:	Sistema binário (soluto + solvente) no estágio inicial.....	57
Figura 4.2:	Esquema ilustrativo do processo de formação de ondulações superficiais a partir da incidência de vento sobre a superfície do corpo hídrico.....	60
Figura 4.3:	Esquema ilustrativo do processo de circulação da água – formação e dissipação de vórtices.....	61
Figura 4.4:	Fluxo de água através da casca cilíndrica que delimita uma depressão....	62
Figura 4.5:	Gráfico tridimensional de uma função de duas variáveis e suas respectivas curvas de nível.....	65
Figura 4.6:	Perfil da vaga utilizado para o cálculo do volume de água transferido pelo respectivo sólido de revolução.....	69
Figura 5.1:	Mapa do Lago Guaíba, com destaque para o canal de navegação.....	72
Figura 5.2:	Distribuição de concentração de nitrogênio na região do Lago Guaíba para diferentes valores de D: (a) $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ , (b) $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ .....	73
Figura 5.3:	Distribuição de concentração de fosfato na região do Lago Guaíba para diferentes valores de D: (a) $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ , (b) $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ .....	76
Figura 5.4:	Distribuição de concentração de nitrogênio na região do Lago Guaíba para diferentes valores de D: (a) $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ , (b) $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ .....	77
Figura 5.5:	Distribuição de concentração de coliformes na região de Ipanema.....	78
Figura 5.6:	Distribuição da concentração de coliformes na região do Lami.....	80

Figura 5.7: Mapas com a distribuição de concentrações de fosfato nas regiões de Ipanema e Lami.....	81
Figura 5.8: Mapa com a distribuição de concentração de fosfato na Barra do Ribeiro.....	82
Figura 5.9: Distribuição de concentrações de coliformes no Lago Guaíba: Cenário 1.....	84
Figura 5.10: Distribuição de concentrações de coliformes no Lago Guaíba: Cenário 2.....	86



## ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1: Metais pesados: fontes e possíveis efeitos à saúde.....	12
Tabela 2.2: Usos previstos para as classes de água doce superficiais, segundo a Resolução CONAMA 357/05.....	14
Tabela 2.3: Parâmetros e padrões de qualidade segundo a classe de uso da água.....	15
Tabela 2.4: Tipos de sistema de esgotamento sanitário.....	20
Tabela 3.1: Estágios da evolução dos modelos de qualidade da água.....	34
Tabela 3.2: Quadro comparativo dos principais modelos de qualidade da água.....	38

## LISTA DE SÍMBOLOS

$a', a'', a'''$	Derivadas de primeira, segunda e terceira ordem da função $a(r)$	
$C(x, y, z, t)$	Concentração de poluente	[kg/m <sup>3</sup> ]
D	Coefficiente de difusão	[m <sup>2</sup> /s]
DBO	Demanda bioquímica de oxigênio	[mg/L]
DQO	Demanda química de oxigênio	[mg/L]
$g, h, p$	Funções arbitrárias de $x, y, z, u, v, w$ e $C$	
$g_x, g_y, g_z$	Derivadas parciais da função $g$ em relação às coordenadas cartesianas	
$g_u, g_v, g_w$	Derivadas parciais da função $g$ em relação às componentes de velocidade	
$g_C$	Derivada parcial da função $g$ em relação à concentração	
$\underline{g}$	Vetor aceleração da gravidade	[m/s <sup>2</sup> ]
$j$	Fluxo mássico	[kg/m <sup>2</sup> .s]
$k$	Constante de decaimento do poluente	[s <sup>-1</sup> ]
$K$	Taxa global de reação	[kg/m <sup>3</sup> .s]
$l$	Percurso livre médio	[m]
OD	Oxigênio dissolvido	[mg/L]
$p$	Pressão	[N/m <sup>2</sup> ]
$r(x, y, z)$	Função arbitrária	
$r_0$	Raio da oscilação superficial no corpo hídrico	[m]
R	Taxa global de reação	[kg/m <sup>3</sup> .s]
$t$	Tempo	[s]
$u, v, w$	Componentes de velocidade nas direções $x, y$ e $z$	[m/s]
$u(r, t)$	Amplitude da oscilação superficial no corpo hídrico	[m]
$\underline{V}$	Vetor velocidade	[m/s]
$x, y, z$	Coordenadas cartesianas	[m]
$\alpha, \beta, \theta$	Conjunto de funções arbitrárias	
$\mu$	Viscosidade	[kg/m.s]
$\psi$	Função corrente	
$\phi$	Função potencial velocidade	
$\tau$	Período entre duas oscilações sucessivas	[s]
$\omega_x, \omega_y, \omega_z$	Componentes do vetor vorticidade	

## 1. INTRODUÇÃO

Nas últimas décadas, a questão ambiental tem sido um dos aspectos mais relevantes nos projetos de implantação de unidades industriais e nos empreendimentos públicos e privados em infra-estrutura. Estudos e Relatórios de Impacto Ambiental (EIA/RIMA), que incluem a descrição e características da área ocupada, bem como do seu entorno, são necessários para que o projeto de um determinado empreendimento possa ser licenciado pelos órgãos ambientais competentes. Nessa descrição e caracterização da área é considerada, entre outros aspectos, a situação atual de qualidade do ar, da água e do solo da região.

Atualmente, no licenciamento ambiental de unidades industriais e outros empreendimentos de grande porte, exige-se, também, a elaboração de cenários de poluição ambiental associados aos efeitos da implantação destes empreendimentos. A descrição de uma situação futura ou potencial, associada aos efeitos da introdução de uma fonte poluidora num determinado local, carece de uma ferramenta que possa simular o transporte e a dispersão dos poluentes nas vizinhanças do ponto de despejo. Os modelos matemáticos de dispersão de poluentes são as ferramentas utilizadas para tal fim. A dispersão de poluentes está associada às características do meio, de forma que a contaminação de aquíferos, decorrente de vazamentos de tanques enterrados em postos de combustíveis, por exemplo, apresenta aspectos distintos da dispersão atmosférica dos gases emanados da chaminé de uma fábrica.

No meio aquático, a dispersão dos poluentes está associada às características do escoamento do corpo hídrico em pauta. Assim, a avaliação da qualidade da água de um corpo hídrico requer o emprego de um modelo que efetue a simulação da dispersão de poluentes acoplada à sua hidrodinâmica. Geralmente, esta simulação é feita através de métodos numéricos que buscam soluções aproximadas para as complexas formulações resultantes do equacionamento dos processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem no meio aquático [Garcia, 1997].

A solução adotada para o despejo de esgoto doméstico é o lançamento dos efluentes, na maioria das vezes sem tratamento prévio, no corpo d'água. Se o lançamento se faz em corpos d'água com bom poder de depuração, os riscos à saúde da população que utiliza estes recursos são pequenos; caso contrário, a possibilidade de exposição das populações à água contaminada é muito grande. A poluição de um rio devido ao lançamento de efluentes não ficará restrita ao trecho do rio onde ocorre o

lançamento, mas poderá eventualmente comprometer toda a bacia hidrográfica deste rio, bem como a região estuarina onde este rio lança suas águas [Leite, 2004].

O processo de urbanização ocorrido no Brasil, a contar da década de 50, teve um crescimento acelerado e descontrolado. Em consequência, nos sítios urbanos e em seus arredores, surgiram problemas como aumento de pobreza, desemprego, concentração de renda e poluição ambiental [Ceretta, 2004]. A capacidade de depuração dos corpos d'água situados junto aos grandes aglomerados urbanos foi gradativamente suplantada, resultando na deterioração da qualidade de suas águas.

Altos índices de pobreza, presente nos países em desenvolvimento, como no caso do Brasil, aliados ao processo de urbanização, levaram à ocupação de áreas urbanas ambientalmente mais frágeis, tais como fundos de vale, áreas de mananciais, lixões, aterros e várzeas. Desta forma, acentuou-se a deterioração da qualidade das águas de rios e lagos que banham ou abastecem as regiões metropolitanas do nosso país.

A Constituição Federal de 1988 estabeleceu como competência governamental a proteção do meio ambiente e o combate à poluição, em qualquer de suas formas. A instituição de uma Política Nacional de Recursos Hídricos e a criação do Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos, cujos objetivos incluem a preservação e recuperação dos recursos hídricos, resultou na formulação e implantação de programas e projetos nesta área [Borsoi e Torres, 1997]. Assim, o emprego de modelos matemáticos de qualidade da água, utilizados na obtenção dos cenários de poluição aquática necessários para subsidiar ações que visam o controle da poluição em corpos d'água contemplados nesses programas adquire significativa relevância no contexto da gestão ambiental.

O Lago Guaíba, importante manancial que banha e abastece a região metropolitana de Porto Alegre, é objeto de um dos maiores programas de manejo integrado de bacias, o Pró-Guaíba. Em 1993, ano de elaboração desse programa, as bacias que o integravam recebiam diariamente 3,7 mil toneladas de lixo domiciliar, 16,5 mil toneladas de resíduos líquidos contaminados com agrotóxicos, 890 metros cúbicos de resíduos industriais e 960 mil metros cúbicos de esgoto [SEMA, 2002].

O Pró-Guaíba inclui inúmeras ações, entre as quais se incluem programas de coleta e disposição de lixo e a construção e controle do despejo de esgotos domésticos. Conseqüentemente, torna-se importante avaliar as alterações da qualidade das águas desse corpo hídrico em decorrência de obras de implantação e ampliação de Estações de Tratamento de Água e Esgotos (ETAs/ETEs).

## 1.1 JUSTIFICATIVA

A definição de cenários de tratamento de esgotos, tais como localização de ETEs e escolha de métodos, níveis de tratamento e o destino dos efluentes líquidos nas estações, possibilita a elaboração de estratégias para a redução do impacto ambiental causado pela presença de cargas de esgoto doméstico no município de Porto Alegre. Para tanto, torna-se conveniente elaborar um sistema que estime a distribuição de concentração de poluentes ao longo de corpos hídricos.

O emprego de sistemas de simulação para a obtenção de distribuições de concentração de poluentes é de importância fundamental no planejamento de redes de esgotos, resultando em uma redução significativa de custos relacionados à implantação de obras de saneamento básico, a saber, a construção de dutos e estações de tratamento de esgoto.

A principal dificuldade na elaboração de sistemas dessa natureza consiste em resolver equações diferenciais parciais advectivo-difusivas com coeficientes variáveis em um domínio cuja geometria é complexa, devido às irregularidades representadas pelo contorno das margens do corpo hídrico.

Tais problemas demandam, em geral, altos tempos de processamento, quando são utilizados métodos numéricos em sua resolução. A fim de contornar estas dificuldades podem ser elaboradas formulações analíticas visando:

1. adaptar o sistema de coordenadas à geometria do corpo hídrico, por meio do emprego de mudança de variáveis que resultem na criação de um sistema de coordenadas auxiliares;
2. resolver o problema em coordenadas cartesianas, produzindo soluções contendo funções arbitrárias de argumentos nos quais figuram constantes arbitrárias.

Soluções contendo funções arbitrárias facilitam a aplicação das condições de contorno de primeira espécie para corpos hídricos com qualquer geometria concebível, sem que se faça necessário criar coordenadas curvilíneas que se adaptem ao formato de seus contornos.

Uma das principais vantagens dessa formulação reside no fato de utilizar as equações diferenciais em coordenadas cartesianas, mesmo quando os contornos do domínio possuem formato complexo. Esta vantagem advém do fato de ser possível

construir uma forma fatorada de primeira ordem para equações advectivo-difusivas cuja resolução é imediata (ver capítulo 4).

## 1.2 OBJETIVOS

Este trabalho tem como objetivo formular um novo método analítico, concebido com a finalidade de obter soluções exatas para problemas tridimensionais em poluição aquática, é apresentado. Esse método, incorporado ao sistema DMAEMAP, é baseado no emprego de transformações auto-Bäcklund [Polyanin, 2004], e produz soluções em forma fechada para equações advectivo-difusivas sujeitas a condições de contorno de primeira espécie.

O método apresentado constitui uma extensão do trabalho desenvolvido por Fernandez (2007), que utilizou transformações de Bäcklund a fim de obter soluções exatas para a equação advectivo-difusiva bidimensional. Essas soluções foram utilizadas com sucesso na simulação da propagação de coliformes e nitrogênio ao longo do Guaíba. Entretanto, as distribuições de concentração obtidas através desse método para o parâmetro fosfato apresentaram discrepâncias consideráveis frente os respectivos dados experimentais. Foi constatado posteriormente que essas discrepâncias poderiam ser provocadas pelo baixo valor do coeficiente de difusão utilizado, estimado através de um modelo de turbulência. Essa constatação levantou a hipótese da existência de um mecanismo adicional de transporte que justificasse o incremento na dispersão isotrópica do poluente. Esse mecanismo, identificado como a oscilação superficial do Lago Guaíba, motivou a formulação de um novo modelo para estimar o respectivo coeficiente de difusão.

A princípio, a implementação de um modelo tridimensional para simular a dispersão de poluentes no Lago Guaíba possibilitaria obter um resultado condizente com o aumento da dispersão provocada pelo fenômeno da ondulação superficial do corpo hídrico. Além disso, permitiria a obtenção de distribuições de concentração para as quais ocorre a estratificação na direção  $z$ , caso no qual se enquadram alguns tipos de bactérias, algas e compostos pouco solúveis. Entretanto, como será detalhado no capítulo 4, não se faz necessário implementar um modelo tridimensional a fim de estimar o aumento do coeficiente de dispersão provocado pela ondulação superficial. Basta, para tanto, utilizar um modelo auxiliar que descreva o comportamento das chamadas ondas de gravidade [Landau, 1987]. Deve-se considerar adicionalmente que

no Lago Guaíba as coletas são efetuadas tomando amostras na superfície do corpo hídrico, uma vez que os dutos de captação que conduzem às estações de tratamento se situam próximo à superfície (entre 1,0 m e 1,2 m de profundidade). Assim, no que diz respeito à estratificação na direção z, devido à forma pela qual são efetuadas as campanhas de coleta e à baixa profundidade deste corpo hídrico, não existe um grande interesse na obtenção de perfis verticais de poluentes em geral, ao menos no que se refere ao abastecimento de água.

### **1.3 ESTRUTURA DO TRABALHO**

O trabalho proposto encontra-se organizado em seis capítulos. No *caput* do capítulo 2 são abordados aspectos genéricos relativos à quantidade e qualidade das águas superficiais. A seção 2.1 conceitua e relaciona os principais parâmetros indicadores da qualidade da água. A seção 2.2 descreve aspectos relativos à classificação e uso dos corpos d'água, baseados em limites fixados para esses parâmetros, conforme legislação ambiental vigente. A seção 2.3 deste capítulo trata da qualidade das águas do Lago Guaíba e da Região Hidrográfica na qual este corpo hídrico está inserido.

O capítulo 3 inicia com uma breve descrição sobre a importância e necessidade do uso modelos de qualidade da água como ferramenta de planejamento e gestão de recursos hídricos. A seção 3.1 descreve a formulação dos matemáticos de qualidade e detalha alguns aspectos relativos ao seu emprego na obtenção de cenários de poluição aquática. A classificação dos modelos matemáticos de qualidade da água é o tema da seção 3.2. Nela são destacadas duas características que diferenciam a formulação dos modelos matemáticos de qualidade de água, a saber, a descrição do fenômeno de dispersão do ponto de vista de Euler e de Lagrange, e o emprego de modelos estacionários e transientes na simulação de cenários específicos.

A seção 3.3 apresenta uma síntese cronológica da evolução dos modelos de qualidade de água, destacando as principais características associadas a cada um dos períodos de seu desenvolvimento, desde o surgimento do modelo de Streeter-Phelps, em 1925. Nessa seção são relacionados e comparados alguns dos principais pacotes computacionais de simulação de qualidade da água, com destaque para o modelo QUAL2E. A seção 2.4 trata dos métodos empregados atualmente para a resolução da equação advectivo-difusiva. Nela é feita uma relação e caracterização dos principais

métodos numéricos empregados para tal fim, bem como uma comparação entre os métodos analíticos, numéricos e híbridos.

O leitor já familiarizado com as principais questões relativas à poluição aquática - no que tange aos seus aspectos qualitativos, quantitativos, normativos e legais - e com a situação do Lago Guaíba em particular – no que diz respeito à sua localização, geografia, condição sanitária e uso das águas – poderá dispensar a leitura do capítulo 2. O capítulo 3 discorre sobre o emprego de modelos de qualidade da água como ferramenta de análise da situação atual e previsão de cenários futuros de um corpo hídrico. Esse capítulo foi elaborado à título de revisão, uma vez que existem diversas estratégias computacionais utilizadas com freqüência na resolução de problemas envolvendo a dispersão de poluentes, que, no entanto, não se encontram documentadas de maneira objetiva na literatura especializada.

No capítulo 4 é descrito o método utilizado na resolução da equação advection-difusiva tridimensional que descreve a difusão e o transporte advection de um poluente no meio aquático. Na seção 4.1 é produzida uma transformação auto-Backlund a partir da fatoração da referida equação na forma matricial, em regime estacionário. Na seção 4.2 são feitas algumas considerações sobre o fenômeno da difusão. A seção 4.3 descreve o método empregado no cálculo do coeficiente de difusão em corpos hídricos de características bidimensionais sujeitos à incidência de ventos, como ocorre no Lago Guaíba. Para tanto, é utilizado um modelo de águas rasas que consiste na equação de Kortweg-de Vries (KdV), sujeita a condições de contorno periódicas.

O capítulo 5 apresenta os resultados obtidos na simulação de cenários associados à dispersão de coliformes, fosfato e nitrogênio total no Lago Guaíba. O capítulo 6 encerra o trabalho, resumizando as conclusões obtidas através da análise dos resultados referentes ao capítulo 5.



## 2. QUALIDADE DAS ÁGUAS SUPERFICIAS

A quantidade total de água existente na Terra tem se mantido constante desde o aparecimento do Homem. De toda água presente em nosso planeta, somente cerca de 3% é água doce; e, de toda a água doce disponível, menos de 1% trata-se de água doce superficial, conforme ilustrado na figura 2.1. Comparativamente, se a reserva de água do mundo tivesse apenas cem litros, nossa reserva utilizável de água doce seria de apenas 0,014 litros, quantia equivalente a duas colheres de chá [Miller Jr., 2006].

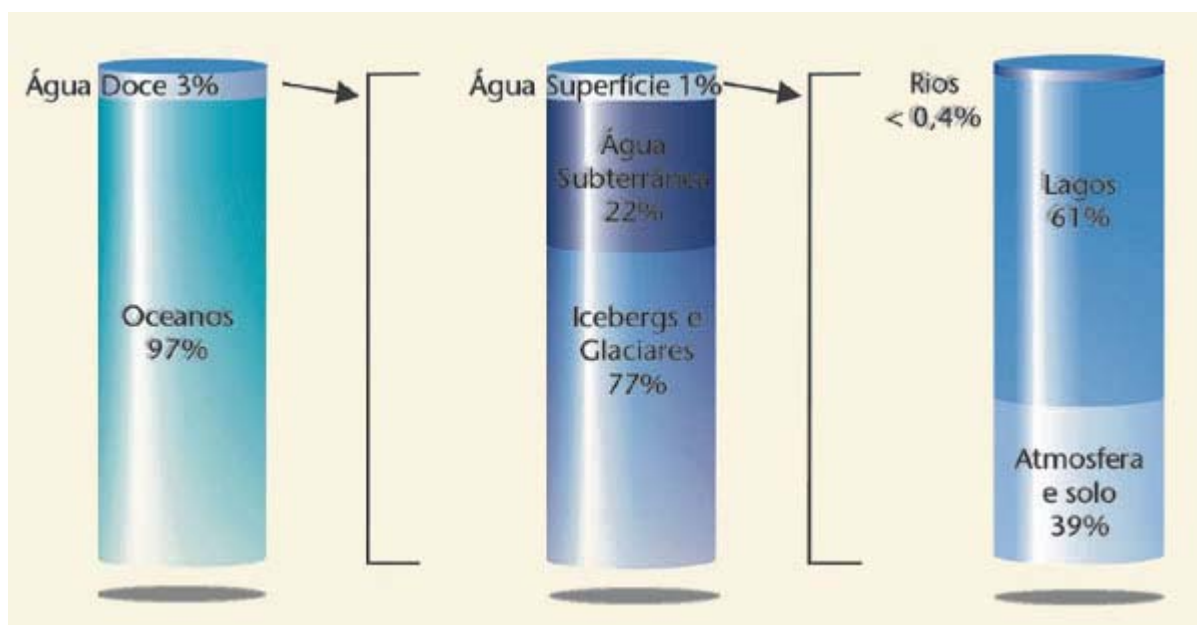


Figura 2.1 – Disponibilidade de água na Terra

O ciclo hidrológico, mantido pela energia solar e atração gravitacional, provoca a circulação da água, que é transferida continuamente da superfície da Terra para a atmosfera sob a forma de vapor, e retorna para os continentes e oceanos pela precipitação como chuva ou neve. O escoamento superficial, parte integrante deste ciclo e resultante do deslocamento das águas sobre o solo, formando córregos, lagos e rios, drena a água doce presente na superfície terrestre para os mares e oceanos. Conseqüentemente, promovendo a circulação contínua das águas nos continentes e atuando na forma de um sistema de destilação global, o ciclo hidrológico produz a renovação e purificação da água do planeta.

Contudo, o ciclo hidrológico, responsável pela circulação e manutenção do volume total de água inalterado na Terra, não impede alterações significativas na qualidade e quantidade da água em muitos locais. Estas alterações advêm principalmente da sua utilização para o atendimento das demandas urbanas, industriais e agrícolas, limitando a quantidade de água disponível para consumo humano. Segundo Porto et al. (1991), as modificações ocorridas na qualidade da água, ao longo das últimas décadas, representam uma das maiores evidências do impacto das atividades humanas sobre a biosfera. Neste período, fatores como o crescimento populacional acelerado, a concentração industrial e a falta de planejamento ambiental promoveram a **escassez** e determinaram uma piora significativa na **qualidade da água** em muitas regiões do planeta. No intuito de mensurar esses efeitos, foram estabelecidos parâmetros e padrões para que fosse possível indicar o que está poluindo e quantificar o valor máximo permitido para cada parâmetro considerado.

## 2.1 PARÂMETROS DE QUALIDADE DA ÁGUA

A avaliação da poluição em corpos d'água é feita através de alguns indicadores, de natureza física, química ou biológica, comumente denominados **parâmetros de qualidade da água**<sup>1</sup>. O monitoramento da qualidade das águas é realizado através da medição periódica de alguns desses parâmetros, entre os quais se destacam OD (Oxigênio Dissolvido), DBO (Demanda Bioquímica de Oxigênio), DQO (Demanda Química de Oxigênio), coliformes, nitrogênio e fósforo. Também são avaliadas a concentração de metais (Cromo, Cádmio, Ferro, entre outros) e sais (principalmente cloretos) dissolvidos na água, bem como de parâmetros físico-químicos como pH, cor, turbidez, etc.

---

<sup>1</sup> O termo “parâmetro” possui um significado bastante amplo e controverso na área de Engenharia Ambiental. Quando se analisam a estrutura das equações apresentadas por um modelo matemático de qualidade de água, alguns termos, tais como constantes de reações químicas e processos físicos ou biológicos, são denominados genericamente de parâmetros, ou parâmetros de ajuste do modelo. Estes parâmetros são estimados a partir de valores recomendados na literatura e, em muitos casos, a partir da calibração do modelo para uma determinada condição local ou regional. Por sua vez, o termo “parâmetro de qualidade da água” refere-se, quase sempre, a indicadores físicos, químicos e biológicos, determinados experimentalmente em campo ou calculados a partir de simulações realizadas com o uso do modelo. Em nosso trabalho, o termo parâmetro será utilizado nesta última acepção.

Nas situações em que se deseja avaliar a manutenção das formas de vida aquática responsáveis pelo equilíbrio ecológico do sistema do manancial, são utilizados os parâmetros utilizados **OD e DBO**. A concentração de oxigênio dissolvido na água vai depender do balanço entre a quantidade consumida por bactérias para oxidar a matéria orgânica e a quantidade produzida no próprio corpo d'água através de organismos fotossintéticos, processos de aeração natural e/ou artificial. Níveis de OD muito baixos durante períodos prolongados causam a geração de maus odores, proliferação de bactérias anaeróbias e morte de seres aquáticos aeróbios, inclusive peixes. [Leite, 2004].

A DBO traduz indiretamente a quantidade de matéria orgânica presente na água. A matéria orgânica, constituída por diversos componentes, encontra-se em suspensão ou dissolvida no seio da água. A DBO padrão representa o consumo de oxigênio no processo de oxidação da matéria orgânica presente em uma amostra de água durante o período de 5 dias, a 20°C; e está associada à porção biodegradável de matéria orgânica presente no corpo hídrico. Os esgotos domésticos, por exemplo, possuem uma DBO em torno de 300 mg/L.

Na análise do impacto ambiental causado pela emissão de efluentes industriais, os parâmetros **DQO e cloretos totais** são, em geral, os mais apropriados. A DQO consiste num processo de oxidação química da matéria orgânica presente em uma amostra de água, em que se emprega o dicromato de potássio ( $K_2Cr_2O_7$ ).

A DQO é muito útil quando utilizada conjuntamente com a DBO para observar a biodegradabilidade de despejos. A oxidação química produzida pelo dicromato de potássio é maior do que a oxidação da matéria orgânica realizada mediante a ação de microrganismos. Como na DBO mede-se apenas a fração biodegradável, quanto mais este valor se aproximar da DQO significa que mais facilmente biodegradável será o efluente.

Uma concentração elevada de cloretos provoca a corrosão de tubulações metálicas e influencia nas características dos ecossistemas aquáticos naturais, por provocar alterações na pressão osmótica em células de microrganismos. Os íons cloretos estão dissolvidos numa solução verdadeira em água, não sendo removidos em estações convencionais de tratamento de águas; exigindo, para tal fim, processos especiais como os de membrana (osmose reversa), destilação e processos à base de troca-iônica.

Os **coliformes totais** são considerados os maiores indicadores da possibilidade do surgimento de doenças de veiculação hídrica, constituindo-se num

indicador de referência para a saúde pública e o indicador sanitário básico que define a balneabilidade ou não de uma praia ou região ribeirinha. Cabe ressaltar que as bactérias do grupo coliforme são aquelas que predominam no intestino dos seres humanos e dos animais, e ali convivem com outras bactérias, vírus e protozoários. Esses últimos, embora ali presentes em número significativamente menores, incluem os microrganismos de caráter patogênico. Em função de sua predominância e do fato de serem um indicativo da presença de agentes patogênicos, a concentração de coliformes totais é o parâmetro de escolha para avaliação do aspecto sanitário da qualidade da água.

Os parâmetros nitrogênio, fósforo, nas suas diversas formas, e clorofila indicam o grau de **eutrofização** de um corpo hídrico e são os mais utilizados na avaliação e prevenção deste tipo de fenômeno.

A eutrofização, conceituada como “crescimento excessivo das plantas aquáticas, tanto planctônicas quanto aderidas, a níveis tais que sejam considerados como causadores de interferências com os usos desejáveis do corpo d’água [Thomann e Mueller, 1987]”, é um fenômeno freqüente em muitos corpos d’água, particularmente naqueles cujo escoamento ocorre a baixas velocidades, como no caso de lagos e estuários. As plantas aquáticas, sejam elas planctônicas, isto é, que se movem livremente com a água, ou fixas (aderidas ou enraizadas), obtêm energia pela absorção da luz através do processo de fotossíntese. Nesse processo, o principal fator de estímulo é um nível excessivo de nutrientes no corpo d’água, principalmente nitrogênio e fósforo. A diminuição excessiva do oxigênio dissolvido, eventuais maus odores, mortandade de peixes, mudança radical de cor e secreções tóxicas de certas algas são algumas conseqüências da eutrofização. Esse fenômeno, quando associado ao de assoreamento, pode culminar, em casos extremos, na morte e desaparecimento de um corpo d’água.

Além de despejos domésticos e industriais, fertilizantes e excrementos de animais são as principais fontes de **nitrogênio** no meio aquático. O nitrogênio, em seu ciclo na biosfera, alterna-se entre várias formas e estados de oxidação. No meio aquático, o nitrogênio pode ser encontrado nas seguintes formas:

- Nitrogênio Molecular ( $N_2$ ) liberado para a atmosfera;
- Nitrogênio Orgânico (dissolvido e em suspensão);
- Amônia na forma livre ( $NH_3$ ) ou ionizada ( $NH_4^+$ );

- Nitrito ( $\text{NO}_2^-$ );
- Nitrato ( $\text{NO}_3^-$ ).

Nas águas, a amônia, na forma livre, é tóxica para os peixes, e os nitritos e nitratos (nitrogênio inorgânico) são utilizados pelas plantas no processo de fotossíntese. Nos processos bioquímicos há conversão de amônia a nitrito e este a nitrato, consumindo o oxigênio dissolvido do meio. A presença de elevadas concentrações de íon nitrato na água pode produzir a intoxicação de seres humanos e animais.

A relativa concentração das diferentes formas de nitrogênio é um indicativo eficiente da natureza e do estágio de poluição do efluente. Um corpo d'água contendo altas concentrações de nitrogênio orgânico e amônia apresenta indica a presença de despejos lançados recentemente e o potencial consumo do oxigênio dissolvido no processo de nitrificação. Por outro lado, a ausência de nitrogênio orgânico e amônia e presença de algum nitrato sugerem um corpo d'água com poluição remota, pois a nitrificação já ocorreu [Mendonça e Pereira, 2003].

O **fósforo** é encontrado na água geralmente nas formas de ortofosfatos, polifosfato e fósforo orgânico. Os ortofosfatos são diretamente disponíveis para os microorganismos (metabolismo biológico) sem a necessidade de conversão à formas mais simples. O íon ortofosfato está presente em seus diversos graus de ionização, ocorrendo, predominantemente, nas faixas usuais de pH, na forma de  $\text{HPO}_4^{2-}$ . O fósforo é originado naturalmente da dissolução de compostos do solo e da decomposição da matéria orgânica. A origem antropogênica é oriunda dos despejos domésticos e industriais, detergentes, excrementos de animais e fertilizantes. A concentração de fósforo total é utilizada como um indicador do estado de eutrofização de um lago.

A **clorofila**, atuando na fotossíntese, promove uma reação de síntese, na qual ocorre a absorção de gás carbônico e a liberação de oxigênio. Portanto, a concentração de clorofila no meio aquático é um parâmetro que permite estimar a capacidade de reoxigenação das águas e a concentração de algas.

Finalmente, as concentrações de cromo e de outros **metais pesados** são parâmetros indicativos de despejos oriundos de atividades industriais e de mineração. Em geral, as concentrações de metais pesados na água estão aquém dos padrões de qualidade estabelecidos, situando-se na faixa de ppm ou ppb. Desta forma, uma concentração elevada de um metal pesado no meio aquático é indicativa de um despejo potencialmente nocivo ao corpo d'água, e a natureza da atividade que origina tal

despejo pode ser inferida de acordo com o metal pesado detectado, como no caso do cromo e sua associação com efluentes de curtumes.

Os sedimentos possuem uma elevada capacidade de retenção e acúmulo dos metais pesados contidos na coluna d'água. Em conseqüência, metais pesados depositam-se no fundo do corpo d'água, juntamente com as partículas de sedimentos nas quais foram adsorvidos. Desta forma, a maior parte destes contaminantes não está prontamente disponível para o meio aquático, embora a variação de algumas características físico-químicas, como pH e salinidade, pode provocar a sua remobilização para a fase aquosa.

Os metais pesados<sup>2</sup> estão dentre as várias substâncias que podem provocar problemas de intoxicação humana pela ingestão de alimentos contaminados. Este é um dos efeitos mais sérios da contaminação ambiental por metais pesados e decorre de sua bioacumulação pelos organismos vivos, a qual se caracteriza pelo transporte de contaminantes via teia alimentar, culminando com a ocorrência das maiores taxas de contaminação nos consumidores secundários e terciários, particularmente nos peixes e seres humanos. A tabela 2.1 ilustra alguns dos efeitos nocivos causados pelos metais pesados no organismo humano.

Tabela 2.1 – Metais pesados: fontes e possíveis efeitos à saúde

<b>Elemento</b>	<b>Fonte</b>	<b>Efeitos</b>
<b>Arsênio</b>	inseticidas, herbicidas, fungicidas, indústrias de vidro, tintas e corantes	carcinogênico, envenenamento agudo e crônico
<b>Selênio</b>	carvão, petróleo, enxofre	câncer em ratos e cárie em animais
<b>Mercúrio</b>	garimpo, eletrólise, desinfetantes, pigmentos e herbicidas	danos nervosos, morte
<b>Berílio</b>	carvão, indústria nuclear, mineração	envenenamento agudo e crônico, câncer
<b>Cádmio</b>	carvão, mineração de zinco, lonas de freio, fumaça de cigarro	doenças cardiovasculares e gastrointestinais, hipertensão
<b>Cobre</b>	canos de água, controle de algas, indústrias	danos ao fígado, tóxico às plantas
<b>Chumbo</b>	Galvanoplastia, pigmentos	danos ao cérebro, convulsões

<sup>2</sup> São definidos como metais pesados os elementos químicos cujo número atômico é superior a 22, ainda que não pertençam às família dos metais alcalinos, alcalino-terrosos e de transição. Alguns autores os caracterizam pela sua singular propriedade de serem precipitados por sulfetos. Do ponto de vista da saúde pública sua definição é mais genérica: elementos químicos que apresentam efeitos adversos à saúde humana.

<b>Cromo</b>	Galvanoplastia, curtumes	possível carcinogênico
<b>Zinco</b>	Galvanoplastia, mineração, carvão	efeitos no pulmão, danos aos peixes
<b>Alumínio</b>	abundante na crosta terrestre	tóxico às plantas, associado ao mal de Alzheimer

## 2.2 CLASSIFICAÇÃO E USO DA ÁGUA

A mensuração de parâmetros de qualidade de água permite avaliar e quantificar o nível de poluição de um corpo d'água. Por sua vez, o estabelecimento de níveis máximos e, em alguns casos, mínimos para cada um desses parâmetros é que permitirá classificar os corpos d'água e determinar critérios para regular as atividades de usuários que ali despejam seus efluentes.

Cada atividade humana tem seus próprios requisitos de qualidade para o uso da água: o abastecimento urbano, a aquicultura e a pesca exigem alto padrão de qualidade; o abastecimento industrial e a irrigação necessitam de média qualidade de água; e a geração de energia e a navegação podem usar água de baixa qualidade. Do ponto de vista quantitativo, as atividades antrópicas são classificadas quanto ao nível de consumo de água. Geração hidrelétrica, navegação fluvial, pesca e recreação, por exemplo, são atividades não consuntivas, realizadas sem a derivação de águas. Na irrigação o uso consuntivo é elevado, alcançando 90% em algumas situações. No abastecimento urbano o consumo é baixo, em torno de 10%, porém a qualidade das águas servidas que retornam ao corpo d'água é significativamente inferior à água bruta captada.

Os efeitos das atividades humanas sobre as águas são poluidores, variando, na forma e na intensidade, conforme o tipo de atividade. O abastecimento urbano e industrial provoca poluição orgânica, bacteriológica e despeja substâncias tóxicas; a irrigação carrega agrotóxicos e fertilizantes; a navegação lança óleos e combustíveis. A geração de energia elétrica, embora não seja diretamente poluidora, provoca alteração no regime e na qualidade das águas. A construção de grandes represas, com inundação de áreas com vegetação abundante, compromete bastante a qualidade da água e produz efeitos deletérios no entorno dessas áreas.

A necessidade de atender os diversos usuários de um corpo hídrico, na quantidade demandada e na qualidade exigida de acordo com o tipo de uso, tem

motivado o estabelecimento de sistemas de gestão de recursos hídricos. Além disso, impactos ambientais negativos decorrentes de graves casos de poluição hídrica reforçaram a necessidade de criar normas, instrumentos de controle e incentivos para evitar o problema de poluição na sua origem. O **enquadramento dos corpos d'água** em classes de uso é um desses instrumentos de controle, necessário à manutenção de um sistema de vigilância sobre a qualidade da água, sendo parte integrante do processo de gestão da bacia hidrográfica. A classificação dos corpos d'água superficiais segue a Resolução 257/05 do CONAMA (Conselho Nacional do Meio Ambiente), que estabeleceu treze classes para águas doces, salobras e salinas, definindo limites para vários parâmetros de qualidade de água, de modo a assegurar a qualidade necessária para o uso mais restritivo, dentre os diferentes usos previstos para cada classe. Os parâmetros de qualidade de água incluídos nesta Resolução foram escolhidos em função das características das águas superficiais, da probabilidade de ocorrência e de sua importância para gestão dos recursos hídricos. Os corpos de água doce foram divididos em cinco classes, cujos usos estão ilustrados na Tabela 2.3.

Tabela 2.2 – Usos previstos para as classes de água doce superficiais, segundo a Resolução CONAMA 357/05

U S O S		CLASSES				
		Esp	1	2	3	4
Consumo Humano	Com desinfecção					
	Com tratamento simplificado					
	Com tratamento convencional					
	Com tratamento convencional ou avançado					
Proteção e conservação	Ambientes aquáticos em UCPI					
	das comunidades aquáticas					
	comunidades aquáticas em terras indígenas					
Recreação	Contato primário conf. 274/2000					
	Contato secundário					
Irrigação	Hortaliças consumidas cruas e frutas rentes ao solo					
	Hortaliças, plantas, parques, jardins c/ contato direto					
	Culturas arbóreas, cerealíferas e forrageiras					
Agricultura e atividades de pesca						
Pesca amadora						
Dessedentação de animais						
Navegação						
Harmonia paisagística						



As águas da Classe especial são aquelas cujas características naturais não poderão ser alteradas, sendo aptas para uso doméstico sem tratamento prévio. Para esta classe de águas não são previstos usos múltiplos, nem tampouco definidos padrões ou permitidos lançamentos de efluentes. Sua finalidade precípua é a manutenção do ecossistema.

Quanto maior o número da classe, menos nobres são os usos destinados para a água, e conseqüentemente os padrões ambientais de qualidade da água serão menos exigentes. Águas da classe de número menor sempre garantem todos os usos da classe subsequente, em termos de qualidade requerida para os usos. Na tabela 2.4 constam alguns parâmetros ambientais de qualidade de água doce, com os respectivos limites associados a cada uma das classes de uso da água.

Tabela 2.3 – Parâmetros e padrões de qualidade segundo a classe de uso da água

<b>Parâmetros</b>	<b>Unidade</b>	<b>Classe 1</b>	<b>Classe 2</b>	<b>Classe 3</b>	<b>Classe 4</b>
<b>Oxigênio Dissolvido</b>	mg/L O <sub>2</sub>	>= 6,0	>= 5,0	>= 4,0	> 2,0
<b>Coliformes fecais</b>	nmp/100mL	200	1.000	4.000	--
<b>pH</b>	-	6,0 a 9,0	6,0 a 9,0	6,0 a 9,0	6,0 a 9,0
<b>DBO 5/20</b>	mg/L O <sub>2</sub>	<= 3,0	<= 5,0	<= 10,0	--
<b>Nitrogênio Amoniacal</b>	mg/L N	3,7 (pH<7,5) 2,0 (7,5<pH<8) 1,0 (8<pH<8,5) 0,5 (pH>8,5)	Idem Classe 1	13,3 (pH<7,5) 5,5 (7,5<pH<8) 2,0 (8<pH<8,5) 1,0 (pH>8,5)	--
<b>Fósforo Total</b>	mg/L P	Lêntico 0,02 Interm 0,025 Lótico 0,1	Lêntico 0,03 Interm 0,05 Lótico 0,1	Lêntico 0,05 Interm 0,075 Lótico 0,15	--
<b>Turbidez</b>	UNT	<= 40	<= 100	<= 100	--
<b>Sólidos Totais</b>	mg/L	500	500	500	--
<b>Cádmio</b>	m/L Cd	0,001	0,001	0,01	--
<b>Chumbo</b>	m/L PB	0,01	0,01	0,033	--
<b>Cobre</b>	mg/L Cu	0,009	0,009	0,013	--
<b>Cromo Total</b>	mg/L Cr	0,05	0,05	0,05	--
<b>Mercúrio</b>	µg/L Hg	0,2	0,2	2,0	--
<b>Níquel</b>	mg/L Ni	0,025	0,025	0,025	--
<b>Zinco</b>	mg/L Zn	0,18	0,18	5,0	--

Além de fixar critérios para a classificação dos corpos d'água, a Resolução 357/05 fornece diretrizes para o seu enquadramento e estabelece condições e padrões de lançamento de efluentes.

No que tange ao lançamento de efluentes em cursos d'água, a Resolução 357/05 estabelece que o lançamento de efluentes não poderá conferir ao corpo de água características em desacordo com as metas obrigatórias progressivas, intermediárias e final, do seu enquadramento. Na ausência dessas metas, devem ser obedecidos os padrões de qualidade da classe em que o corpo receptor estiver enquadrado. Para os corpos d'água doce cujo enquadramento não tenha sido aprovado será atribuída a classe 2.

### **2.3. APLICAÇÃO: O LAGO GUAÍBA**

O estado do Rio Grande do Sul encontra-se dividido, para fins de gestão de recursos hídricos, em três grandes regiões hidrográficas. Conceitualmente, uma região hidrográfica é formada por diversas bacias que escorrem para um corpo de água único: rio, lago ou laguna. As regiões hidrográficas nas quais se subdivide o estado do Rio Grande do Sul e os corpos d'água correspondentes são:

- \* Região Hidrográfica do Guaíba – Lago Guaíba
- \* Região Hidrográfica Litorânea – Lagoa dos Patos<sup>3</sup>
- \* Região Hidrográfica do Uruguai – Rio Uruguai

Situada na porção centro-leste do Estado do Rio Grande do Sul, com uma área aproximada de 84.555 km<sup>2</sup> - cerca de 30% do território gaúcho – e com uma população estimada (2006) em 7,1 milhões de habitantes - cerca de 65% da população do Estado – a Região Hidrográfica do Guaíba, ilustrada na figura 2.2, destaca-se, frente às demais, pela deterioração da qualidade de suas águas e pela elevada densidade demográfica (84 hab./km<sup>2</sup>) [SEMA, 2002]. Nesta região a atividade econômica é intensa, respondendo pela geração de aproximadamente 71% do PIB do Estado. Sua população, distribuída em 250 municípios, concentra-se na Região Metropolitana de Porto Alegre, situada na margem esquerda do Lago Guaíba.

---

<sup>3</sup> Algumas bacias da Região Hidrográfica Litorânea drenam suas águas diretamente para o Oceano Atlântico.

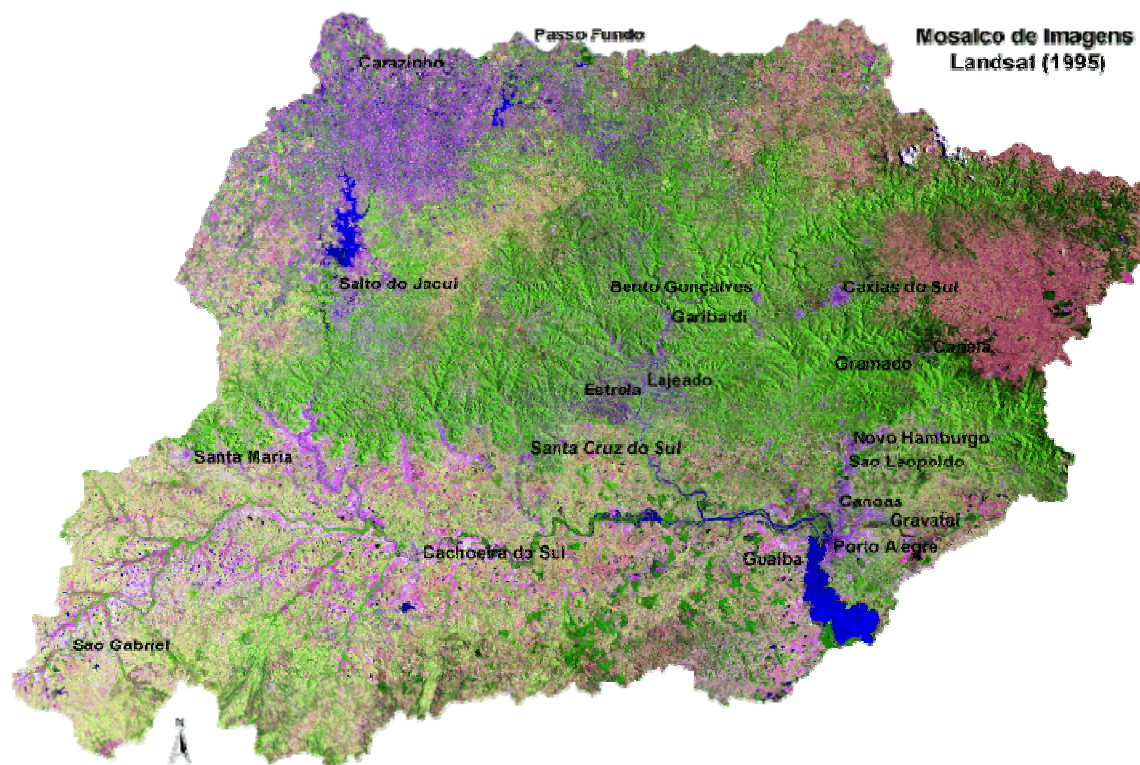


Figura 2.2 – Imagem de satélite da Região Hidrográfica do Guaíba

O Lago Guaíba possui um comportamento hidráulico peculiar, condicionado por fatores climáticos. Esses fatores, principalmente os ventos predominantes na região, afetam seu regime hidrológico, que também é influenciado pelas ondas de seiche que se formam na Lagoa dos Patos. Como consequência desses efeitos, as componentes de velocidade oriundas da agitação superficial são mais intensas do que as próprias componentes da velocidade do escoamento principal. Tal comportamento atípico favorece o aumento do tempo de residência dos poluentes nele despejados.

Na figura 2.3 são apresentadas as diversas bacias que integram a Região Hidrográfica do Guaíba (RHG), cujo exutório é o Lago Guaíba; sendo que 85% das águas formadoras deste manancial advêm do Rio Jacuí. A qualidade da água dos demais rios que desembocam no Delta do Jacuí tem se deteriorado significativamente nos últimos anos.

O Rio dos Sinos é considerado o mais poluído da Região, possuindo importante parque industrial, onde se destacam os ramos coureiro-calçadista, petroquímico e metalúrgico [FEPAM].

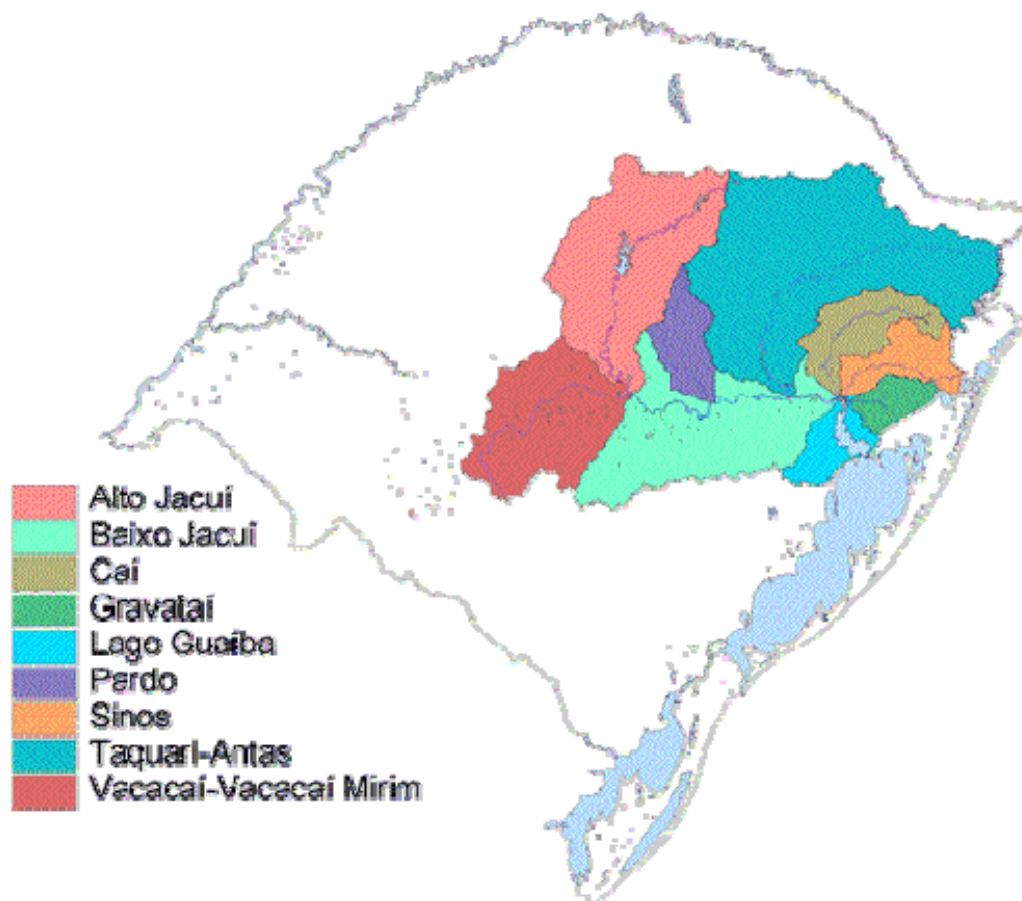


Figura 2.3 – Mapa das bacias integrantes da Região Hidrográfica do Guaíba

Na bacia do Rio Caí são lançados os esgotos domésticos da região de Caxias do Sul, bem como os efluentes do Pólo Petroquímico e dos curtumes instalados em seus dois principais afluentes: Cadeia e Feitoria.

A bacia do Rio Gravataí encontra-se degradada em decorrência de modificações produzidas no regime hidrológico associadas à cultura do arroz e agravadas pelo crescimento urbano acentuado O Banhado Grande, que atua como regulador de vazão, originalmente ocupava uma área de 450 km<sup>2</sup>, que foi reduzida para 50 km<sup>2</sup>, devido à irrigação das culturas de arroz [Gutiérrez, 2001].

Na bacia do Lago Guaíba, com população estimada de 1 milhão de habitantes, 96% dos quais residentes em área urbana, a densidade populacional situa-se na faixa de 440 hab./km<sup>2</sup>. As atividades econômicas predominantes na região são o comércio, os serviços e a indústria e, na porção sul, a agricultura, especialmente o cultivo de arroz [Bendati et al., 2000].

A qualidade das águas do Lago Guaíba é afetada pelo aporte de cargas dos rios que nele afluem e pelas ações existentes em seu entorno. O contínuo lançamento de efluentes doméstico e industrial tem provocado um progressivo decréscimo da qualidade de suas águas, sendo mais intensos os despejos provenientes dos rios Gravataí e Sinos, sendo que no último ocorreram eventos recentes de mortandade de peixes associada à poluição de origem industrial.

Atualmente, o maior problema do Lago Guaíba não é a poluição de origem industrial, mas os esgotos domésticos, devido à grande quantidade de cargas de esgotos, correspondentes às emissões de esgoto cloacal de todo o perímetro urbano de Porto Alegre e parte do município de Canoas. Essas cargas totalizam cerca de 1000 toneladas de matéria orgânica lançadas diariamente neste corpo hídrico e se concentram na sua margem esquerda.

O parâmetro de escolha para avaliação do nível de poluição de um corpo hídrico em que predominam os despejos de origem doméstica é o coliforme fecal. Embora o coliforme não seja um microorganismo patogênico, a sua presença em um rio ou lago indica que outras bactérias potencialmente nocivas à saúde também ali estejam presentes. Na verdade, a maior preocupação com a propagação de bactérias oriundas de esgotos cloacais é relativa à presença de salmonelas, entretanto a correlação entre a concentração de coliformes e salmonelas é tão forte que o primeiro parâmetro pode ser utilizado como uma medida confiável do segundo.

O monitoramento da qualidade das superficiais do Lago Guaíba, nos últimos anos, tem comprovado que fatores como crescimento econômico, explosão demográfica, êxodo rural, aumento da população marginal e do parque industrial, estão deteriorando a qualidade de suas águas acima de sua capacidade de autodepuração.

A deterioração da qualidade das águas de rios e estuários situados em áreas densamente povoadas vem produzindo, em todo o mundo, graves casos de poluição hídrica. Em consequência, em muitos locais, a pressão da sociedade civil tem culminado em iniciativas governamentais para a elaboração e execução de programas de revitalização e despoluição de corpos hídricos de grande importância. O Tâmesa, na Inglaterra, um rio que foi considerado morto há quase 40 anos, abriga hoje mais de 120 espécies de peixe, em razão do esforço dispensado, ao longo de várias décadas, na despoluição de suas águas. Além dele, o rio Sena, na França, e o rio Tietê, em São Paulo, são alvos de programas de despoluição.

No estado do Rio Grande do Sul, foi criado o Pró-Guaíba, um projeto voltado para a despoluição das águas do Lago Guaíba e destinado a promover o desenvolvimento sócio-ambiental da Região Hidrográfica do Guaíba. Em 1995, teve início o Módulo I do Pró-Guaíba, cujas metas incluem a despoluição do Arroio Dilúvio e a construção de Estações de Tratamento de Esgotos (ETEs) na região metropolitana de Porto Alegre.

O projeto Pró-Guaíba foi responsável pela ampliação dos sistemas coletivos de coleta e tratamento sanitário, que atingiu aproximadamente 653.000 habitantes, cerca de 10% da população residente na RHG, com um crescimento da ordem de 138%, no período 1998-2002; basicamente em razão da implantação das ETEs São João/Navegantes e Ipanema, em Porto Alegre. A distribuição dos tipos de sistemas de esgotamento sanitário sobre a população da RHG é apresentada na Tabela 2.5, destacando-se que menos de 7% da população residente nessa região é atendida através de sistemas inadequados conforme a classificação adotada pelo IBGE [SEMA, 2002].

Tabela 2.4 - Tipos de sistema de esgotamento sanitário

<b>Tipo de Sistema</b>	<b>População Atendida (%)</b>
Canalização Mista	43,5
Decantação/Infiltração	24,0
Sistema com Rede	15,9
Sistema com Rede e Tratamento	9,8
Soluções Inadequadas	6,8

A figura 2.4 representa a qualidade das águas superficiais, avaliada em alguns pontos da RHG, com base nos resultados do monitoramento efetuado no ano de 2002, nos pontos da Rede do Pró-Guaíba, pelo IQA (Índice de Qualidade da Água) baseado nos critérios adotados pela *National Sanitation Foundation* (NSF). As faixas consideradas para a determinação da qualidade das águas são as seguintes:

- Muito Ruim: de 0 a 25.
- Ruim: de 26 a 50.
- Regular: de 51 a 60.
- Boa: de 71 a 90.
- Excelente: de 91 a 100.

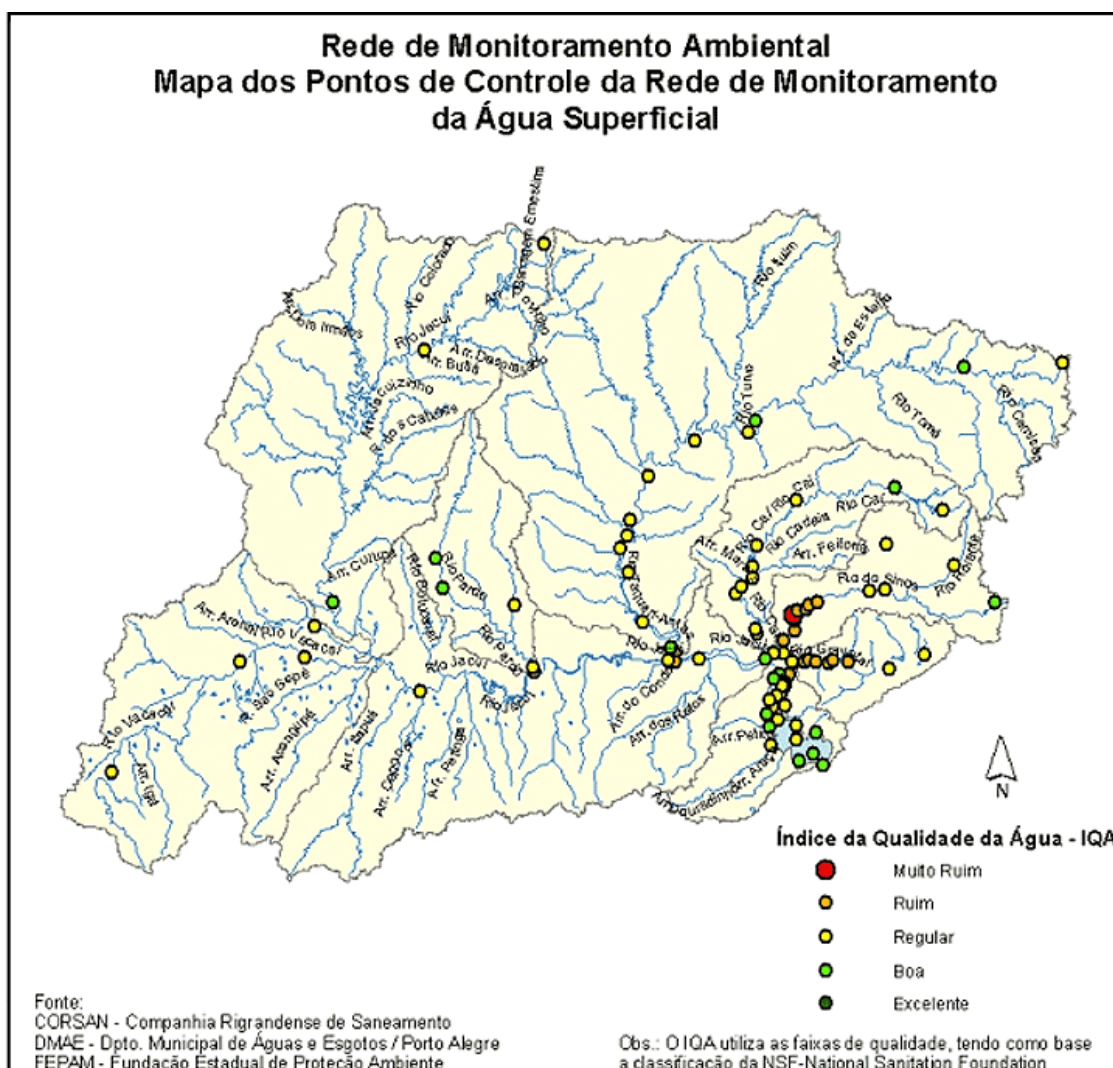


Figura 2.4 – Qualidade das águas superficiais na RHG

Os resultados apresentados indicam que a qualidade das águas superficiais é variável, conforme o corpo hídrico analisado e a ponto de amostragem. Em geral, as piores situações estão associadas às aglomerações urbano-industriais, face ao lançamento de efluentes sem o adequado tratamento (bacias do Lago Guaíba, Gravataí e Sinos). Na ilustração apresentada, é possível ainda identificar um padrão de decréscimo da qualidade da água no sentido de montante para jusante, nos rios que integram a RHG; excetuando-se a área correspondente ao Lago Guaíba e ao Delta do Jacuí.

A extensão e a morfologia do Lago Guaíba, bem como suas características hidrodinâmicas, afetam diretamente a qualidade de suas águas, de modo que alguns parâmetros de qualidade podem variar grandemente entre pontos de amostragem

relativamente próximos. Para analisar tal situação, devemos tecer algumas considerações sobre este corpo hídrico.

O Lago Guaíba ocupa uma área de 470 km<sup>2</sup>, numa extensão de 50 km de comprimento e com largura variável entre 900 m e 19 km, armazenando um volume aproximado de 1,5 bilhões de metros cúbicos de água (Bendati et al., 2000). Constitui uma importante via de navegação, ligando a região central do Estado com a Lagoa dos Patos e o Oceano Atlântico. Pesca, irrigação e recreação de contato primário são atividades exercidas em algumas regiões da orla do Guaíba, cujas águas se destinam também ao lazer, turismo e harmonia paisagística.

Bendati et. al (2000) elaboraram uma proposta de enquadramento do Lago Guaíba a partir da avaliação da qualidade de suas águas, com dados relativos a uma rede com 24 pontos de amostragem, analisados de 1998 a 2000. Os autores selecionaram alguns parâmetros de qualidade da água para elaboração de um Índice de Qualidade da Água relativo ao corpo hídrico. A partir dos resultados obtidos, concluíram que o parâmetro coliformes fecais era o mais relevante na avaliação da qualidade das águas do Lago Guaíba. Na seqüência, os autores avaliam a qualidade das águas exclusivamente a partir deste parâmetro, resultando no mapa ilustrado na Figura 2.5.

Os resultados apresentados permitem caracterizar o canal de navegação como um “emissário de cargas”, uma vez que nessa região existe uma correnteza apreciável, que transporta, efetivamente, as cargas na direção longitudinal, dificultando a dispersão transversal por uma simples questão de tempo de residência. O canal de navegação é uma estreita região, com profundidade média de sete metros, na qual as velocidades podem ser superiores a 20 cm/s. No restante do lago, o fluxo é predominantemente bidimensional e sua velocidade lenta (menor que 10cm/s), de forma que os poluentes que afluem ao Guaíba, apresentam elevado tempo de residência, podendo-se compará-lo a uma lagoa de estabilização. Conseqüentemente, a carga lançada na margem esquerda do Guaíba, correspondente a 99% dos efluentes domésticos produzidos em Porto Alegre, resulta na deterioração das suas águas, conforme ilustrado no mapa [Zabadal et al, 1999]. Cabe ressaltar ainda que, em suas conclusões, os autores transcrevem “..... os trechos definidos para o lago constituem-se em uma primeira aproximação das condições reais de qualidade das águas, podendo seus limites serem aprimorados com base em estudos mais específicos e com a densificação, em pontos estratégicos, da rede de monitoramento.”



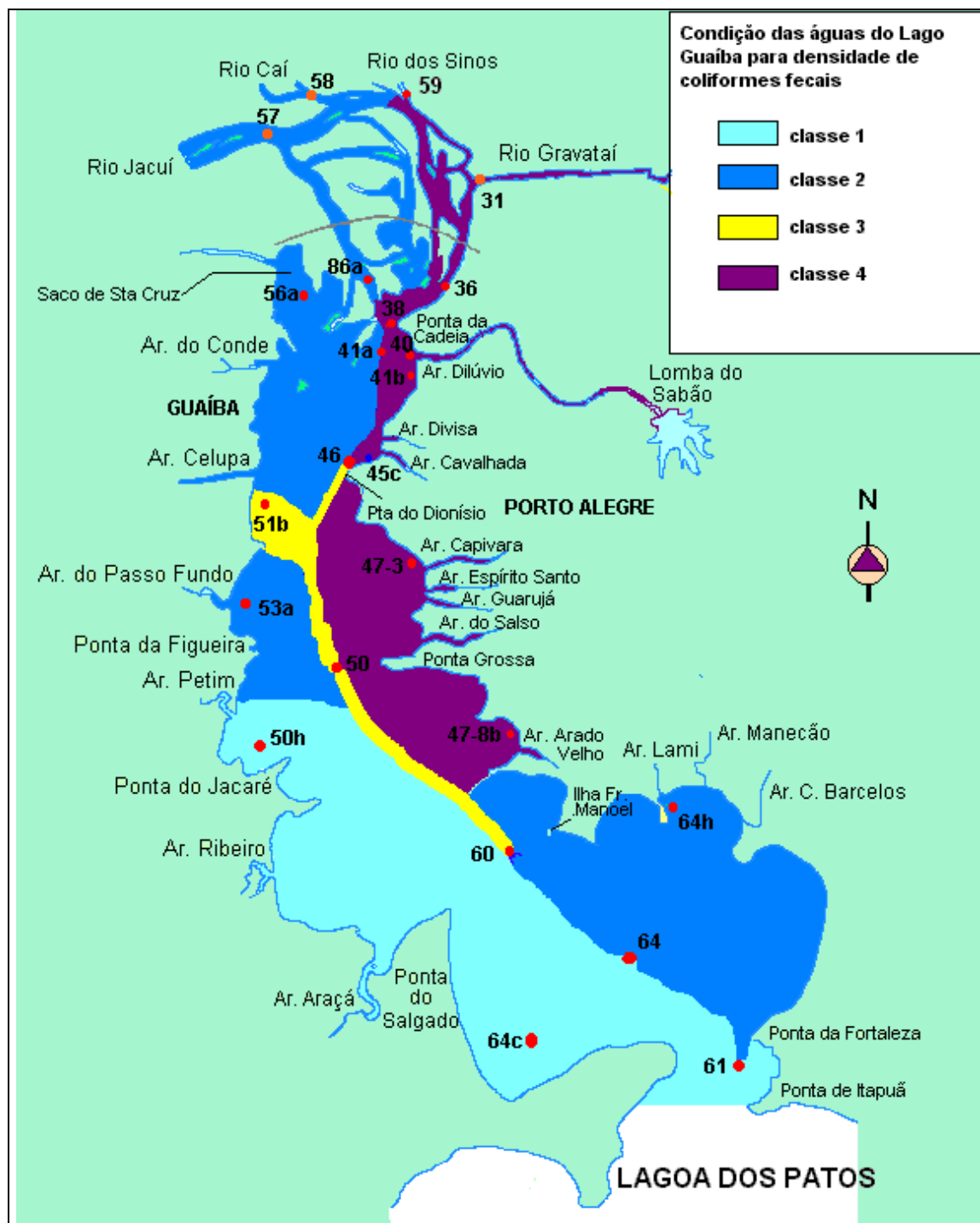


Figura 2.5 – Classificação das águas do Lago Guaíba com base na concentração de coliformes fecais

O trabalho proposto apresenta, nos seus resultados, o perfil de distribuição de coliformes fecais, bem como de nitrogênio total e fósforo, ao longo de toda a extensão do Lago Guaíba, a partir de um modelo matemático de transporte de poluentes que produz a visualização gráfica deste corpo hídrico no grau de detalhamento desejado,

permitindo sua classificação e enquadramento não apenas para o cenário atual de despejo de efluentes, mas também para outros cenários de interesse ambiental.

### 3. MODELOS DE QUALIDADE DA ÁGUA - REVISÃO

A avaliação da qualidade das águas de um corpo hídrico, a partir de seu monitoramento, realizado através da medição periódica de alguns parâmetros em determinados pontos do seu curso, propicia uma visão estática e fragmentada do fenômeno da dispersão de poluentes no meio aquático. Em decorrência dos custos envolvidos no seu levantamento, os dados ambientais assim obtidos são escassos e consistem de séries temporais de valores medidos em uns poucos pontos distribuídos na área de interesse. Dessa forma, uma visão integrada, espacial e temporalmente, do fenômeno de dispersão de poluentes, deve ser feita através de um modelo que, a partir da simulação da dinâmica do processo de dispersão, possibilite a interpolação espacial e temporal de tais dados.

Segundo Rosman (2001), “modelos são ferramentas indispensáveis aos estudos e projetos, à gestão e ao gerenciamento de corpos de água naturais, pois permitem integrar informações espacialmente dispersas, interpolar informações para regiões nas quais não há medições, ajudar a interpretação de medições feitas em estações pontuais, propiciar o entendimento da dinâmica de processos e prever situações simulando cenários futuros.”

Na representação do escoamento e da dispersão de poluentes, num corpo hídrico, são empregados **modelos matemáticos**, baseados em princípios de conservação expressos em termos de equações diferenciais e condições de contorno adequadas.

Outra possibilidade é a representação do fenômeno de interesse a partir de um **modelo físico**, que consiste, geralmente, na reprodução, em uma escala reduzida, do sistema objeto de estudo. Ainda que muito utilizados até meados da década de 70, principalmente na modelagem hidrodinâmica de rios, estuários e barragens, os modelos físicos, com o crescimento acentuado da capacidade de processamento e armazenamento dos computadores, foram sendo substituídos, gradativamente, por modelos matemáticos. Os modelos matemáticos são constituídos por equações diferenciais que regem os fenômenos de interesse, sujeitas a condições de contorno e a uma condição inicial. Sua solução é obtida com o emprego de métodos numéricos e, em alguns casos mais recentes, analíticos.

A utilização de modelos físicos, na avaliação do comportamento de corpos hídricos, atualmente restringe-se a alguns casos especiais. Isto se deve aos altos custos associados ao patrimônio imobiliário, gastos em equipamentos eletromecânicos,

elevado consumo de energia, e grande número de técnicos especializados empregados; sendo incomparavelmente mais lentos e custosos de serem implementados que os modelos matemáticos correspondentes. Destaca-se, ainda, a facilidade de compreensão do fenômeno proporcionada pelo modelo físico, principalmente para os mais leigos. Contudo, tal enfoque pode ser propiciado pelas animações computacionais obtidas a partir de soluções do modelo matemático estabelecido [Amaral, 2003].

### 3.1 MODELOS MATEMÁTICOS DE QUALIDADE DE ÁGUA

Os modelos matemáticos de qualidade da água fornecem a distribuição espacial e temporal de indicadores físicos, químicos ou biológicos. Estes indicadores são denominados escalares passivos ou não-conservativos, quando se referem às concentrações de poluentes e aos demais parâmetros de qualidade da água cuja distribuição está associada à hidrodinâmica de circulação das águas e processos advectivo-difusivos de dispersão. Os indicadores associados à concentração de poluentes cuja distribuição está associada a processos físicos, químicos e biológicos que atuam como fontes e sumidouros internos ao meio aquático são denominados substâncias não-conservativas [Rosman, 2000].

Modelos matemáticos de qualidade da água são fundamentados nas equações de conservação de quantidade de movimento e continuidade (modelo hidrodinâmico), de conservação de massa (modelo de transporte advectivo-difusivo), e dos processos físicos e biológicos e reações químicas (modelo biogeoquímico) [Romeiro, 2003]. O conjunto destas equações, para um sistema de coordenadas qualquer é dado por [Modenesi et al., 2004] :

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad (3.1)$$

$$\rho \left( \frac{\partial \mathbf{V}}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) \mathbf{V} \right) = \rho \cdot \mathbf{g} - \nabla p + \mu \cdot \nabla^2 \mathbf{V} \quad (3.2)$$

$$\left( \frac{\partial C}{\partial t} + (\mathbf{V} \cdot \nabla) C \right) = D \cdot \nabla^2 C - k \cdot C \quad (3.3)$$

onde  $\mathbf{V}$  representa o vetor velocidade,  $\rho$  a densidade do fluido,  $t$  o tempo,  $p$  a pressão hidrostática,  $\mathbf{g}$  o vetor aceleração da gravidade,  $\mu$  a viscosidade dinâmica,

$C$  a concentração do poluente,  $D$  o coeficiente de difusão do poluente e  $k$  a constante de velocidade da reação de degradação, cuja cinética é considerada de primeira ordem.

As equações (3.1) e (3.2), representando a continuidade e a conservação da quantidade de movimento, respectivamente, constituem o modelo hidrodinâmico, que pode ser resolvido independentemente da equação (3.3). A resolução do modelo hidrodinâmico permite obter a distribuição de velocidades ao longo do tempo, no domínio definido pelo corpo d'água analisado. Na grande maioria dos casos, a distribuição de concentrações não afeta o campo de velocidades, uma vez que a vazão das cargas poluentes é desprezível em relação à vazão local do corpo hídrico. Nesses casos, diz-se que existe um desacoplamento unidirecional entre o modelo hidrodinâmico e o modelo de qualidade de água. Em outras palavras, o campo de velocidades pode ser calculado independentemente da distribuição de concentrações, mas o inverso não é válido.

Os modelos hidrodinâmicos visam determinar o campo de velocidades de um rio, canal, lago ou reservatório, de forma a estabelecer níveis de água, a montante e a jusante de um empreendimento, definindo os limites de inundação e as áreas a serem desapropriadas. Além disso, podem efetuar a simulação das enchentes naturais e daquelas provocadas pela incorreta operação de uma represa. Estudos de rompimento de barragens, com a simulação dos níveis atingidos e os tempos correspondentes, ao longo de um vale a jusante, constituem uma outra aplicação do modelo hidrodinâmico. As informações obtidas nesse tipo de simulação tornam esses modelos uma importante ferramenta para a elaboração de planos de ações emergenciais [Müller, 2004].

A distribuição de concentrações de poluentes no meio aquático é obtida pela resolução da equação advectivo-difusiva, dada por (3.3). Uma vez que a dispersão dos poluentes está associada a hidrodinâmica do corpo hídrico, há a necessidade do conhecimento prévio do campo de velocidades para se obter a distribuição de concentrações. Uma outra alternativa é a resolução acoplada dos modelos<sup>4</sup> hidrodinâmico e de transporte de massa [Garcia, 1997], conforme ilustrado na figura 3.1.

Na maioria dos casos, é adotada uma abordagem euleriana<sup>5</sup> na resolução das equações integrantes do modelo de qualidade de água. Tradicionalmente, são

---

<sup>4</sup> Na situação em que os modelos hidrodinâmico e de transporte de massa estão integrados em um único sistema de simulação, eles podem ser caracterizados como módulos de um modelo de qualidade de água.

<sup>5</sup> vide seção 3.2.

empregadas técnicas numéricas que incluem a discretização espacial e temporal das derivadas presentes nessas equações diferenciais, obtendo-se um sistema de equações algébricas. A discretização acarreta na subdivisão do domínio, com a superposição de uma malha virtual sobre a região correspondente, em cujos pontos são obtidos valores de velocidade e concentrações. Nos algoritmos assim concebidos, a equação de transporte de massa é solucionada na mesma malha adotada para a resolução do módulo hidrodinâmico [Fernandez, 2008]. Na discretização de uma equação diferencial parcial, podem surgir problemas associados a erros de truncamento, ao emprego de malhas inadequadas e à limitação do número de dígitos significativos exatos que podem, em alguns casos, comprometer a exatidão da solução resultante. Wrobel et al. (1989), Lo & Chen (1991) e Walton & Webb (1994) apontam para a ocorrência de erros numéricos no emprego do modelo QUAL2E<sup>6</sup> em simulações em regime transiente [Lima e Giorgetti, 1997].

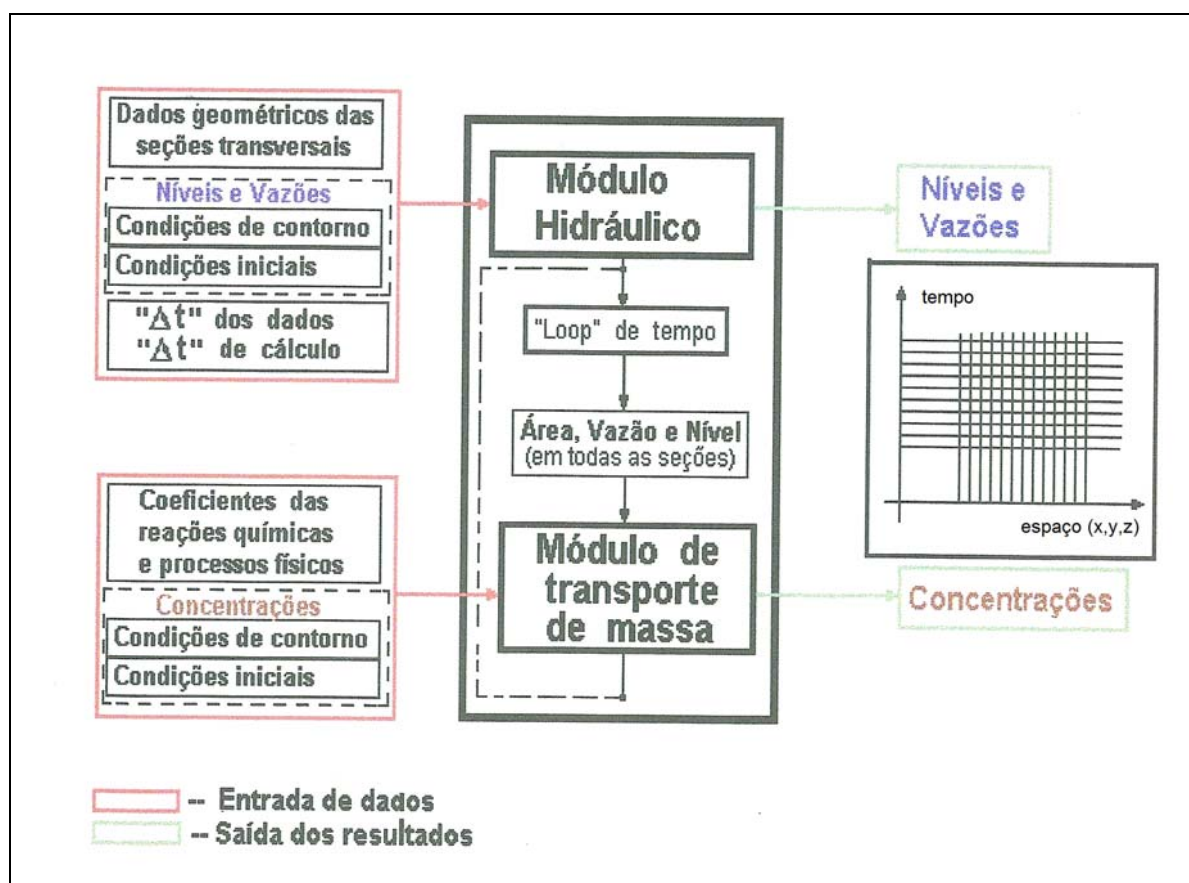


Figura 3.1 – Fluxograma do esquema de resolução numérica de um modelo matemático de qualidade da água

<sup>6</sup> “pacote” computacional descrito na seção 3.3.

Quando os poluentes não são conservativos – isto é, na ocorrência de reações químicas ou processos biológicos que resultam na geração ou consumo do poluente - incluem-se, no modelo de transporte, termos fontes e decaimentos associados a reações químicas e processos físicos e biológicos, que ocorrem internamente ao meio aquático. Também são incluídos no modelo os termos relativos a fontes e sumidouros externos ao corpo d'água, representando as entradas e saídas de poluentes e demais parâmetros de qualidade da água simulados no modelo. Os termos fontes e decaimentos, externos e internos ao corpo d'água, integram o modelo biogeoquímico.

O modelo de transporte advectivo-difusivo assim constituído envolve  $n$  espécies reativas e é composto por um sistema de equações diferenciais parciais não lineares, acoplado por meio do modelo biogeoquímico. Em sua maior parte, as reações químicas e os processos biológicos que envolvem escalares não conservativos são representados por uma cinética de primeira ordem, resultando, para um poluente  $i$  genérico num modelo tridimensional de um sistema de coordenadas cartesianas, na seguinte equação de transporte:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} - D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + kC = 0 \quad (3.4)$$

onde  $x$ ,  $y$  e  $z$  representam as coordenadas cartesianas; e,  $u$ ,  $v$  e  $w$  as componentes do vetor velocidade nesse sistema de coordenadas.

No modelo biogeoquímico são equacionados os processos e reações que descrevem a poluição advinda da emissão de efluentes industriais, do lançamento de esgotos domésticos, dos despejos de atividades agrícolas, bem como da poluição de origem microbiana ou decorrente da eutrofização do corpo hídrico. Cada uma dessas formas de poluição está relacionada, em maior ou menor grau, a um ou mais parâmetros de qualidade da água, conforme detalhado na seção 2.1. No sistema de equações constituintes do modelo advectivo-difusivo gerado pela incorporação do modelo biogeoquímico, cada equação, associada à concentração de um dos parâmetros de qualidade da água simulados, é composta de termos correspondentes aos vários processos, que, integrados, compõem a transformação global desses parâmetros.

As reações mais freqüentes nos modelos biogeoquímicos buscam representar os processos associados ao balanço de OD e DBO, transformação de N e P, e variação no conteúdo da biomassa, conforme discriminado abaixo:

- biomassa: respiração, fotossíntese, crescimento, morte e sedimentação;
- ciclo do P: crescimento, morte, decaimento e sedimentação da biomassa, mineralização do fosfato orgânico;
- ciclo do N: crescimento, sedimentação e hidrólise da biomassa; nitrificação e desnitrificação;
- DBO: morte da biomassa, decaimento da DBO particulada, oxidação da matéria orgânica (carbonácea e nitrogenada);
- OD: reaeração, oxidação da matéria orgânica, nitrificação, demanda bentônica, respiração e crescimento da biomassa.

Os modelos matemáticos de qualidade da água assim elaborados representam uma valiosa ferramenta de engenharia ambiental, destinada à simulação dos processos de transporte e autodepuração de um corpo hídrico, propiciando, assim, antever e avaliar, para diferentes cenários, as alterações na qualidade das águas de um efetivo ou passível corpo receptor de descargas de poluentes e contaminantes [Lima e Giorgetti, 1997]. Esses aspectos, bem como o desenvolvimento computacional ocorrido nas últimas décadas, ampliaram a pesquisa e difundiu o emprego deste tipo de modelo. Paralelamente, mais elementos foram sendo incorporados nas formulações matemáticas de modo a melhor representar as reações químicas e os processos físicos e biológicos que afetam a qualidade da água [Rocha, 2007].

Contudo, devemos atentar para o fato que a aplicação de um modelo matemático requer um considerável banco de dados e, quanto maior o número de escalares conservativos e não-conservativos agregados no modelo biogeoquímico, maior o volume do banco de dados exigido para tal fim. Além disso, na medida em que se incorporam termos de reações que detalham os processos associados à transformação desses escalares, aumenta a complexidade do sistema de equações diferenciais integrante do modelo advectivo-difusivo correspondente, assim como aumenta o número de coeficientes<sup>7</sup> relativos a esses termos. Estes coeficientes são calculados a partir de ensaios laboratoriais ou através de experimentos de campo, adquirindo valores

---

<sup>7</sup> Estes coeficientes são, em sua grande maioria, constantes de reações de primeira ordem. Contudo, podem incluir também outras constantes, de natureza diversa, que afetam direta ou indiretamente estas reações. Muitos autores utilizam o termo parâmetro, ou parâmetro de ajuste, para designar alguns desses coeficientes.



dentro de uma faixa específica. Em alguns casos, recorre-se a valores publicados na literatura.

O coeficiente de dispersão longitudinal, presente na equação (3.4), relaciona a dispersão de um poluente com o laplaciano da concentração. Nas seções 4.2 e 4.3 deste trabalho é feita uma descrição detalhada dos mecanismos de transporte e dispersão dos poluentes no meio aquático, relacionando este coeficiente com esses fenômenos.

### 3.2 CLASSIFICAÇÃO DOS MODELOS

Além de constituírem uma valiosa ferramenta de engenharia ambiental; o emprego dos modelos matemáticos de qualidade da água na gestão de recursos hídricos e, de um ponto de vista mais amplo, do meio ambiente atende uma das considerações presentes no texto da Resolução 357/05 do CONAMA 20: “a necessidade de se criar instrumentos para avaliar a evolução da qualidade das águas, em relação às classes estabelecidas no enquadramento, de forma a facilitar a fixação e controle de metas visando atingir gradativamente os objetivos propostos”.

A disponibilidade de dados, os objetivos a serem alcançados, os recursos técnicos, financeiros e computacionais acessíveis e o prazo de implantação pré-estabelecido irão delimitar a complexidade do modelo matemático a ser utilizado na simulação do sistema hídrico. O grau de complexidade e outros aspectos relativos à formulação matemática propiciarão o surgimento de um conjunto de modelos com características distintas.

Nenhum modelo isolado é o melhor para todas as situações, de forma que as necessidades e peculiaridades de cada sistema a ser modelado, bem como o tipo e as fontes de poluentes mais relevantes irão orientar a seleção do modelo mais adequado para aquele sistema [Bittencourt et al., 1999]. A forma de abordagem do problema e as hipóteses e simplificações adotadas na sua formulação determinarão as características do modelo empregado, que poderá ser classificado segundo vários critérios. Nesse trabalho abordaremos as características julgadas mais importantes na para uma melhor análise e entendimento do modelo proposto.

Na quantificação dos parâmetros de qualidade de água podem ser utilizadas as abordagens **euleriana** e **lagrangeana**. Os modelos lagrangeanos permitem acompanhar as trajetórias das partículas ao longo do tempo, sendo mais eficazes na

descrição do transporte de escalares quando a dimensão da fonte é pequena frente à discretização espacial empregada; como no caso de emissários, onde a dimensão do difusor é, em geral, muito menor que a malha utilizada na simulação [Pinho et al., 2000].

Os modelos eulerianos resolvem a equação de transporte sobre uma malha fixa, diferentemente dos modelos lagrangeanos, onde a malha se move junto com o escalar. A distribuição espacial e temporal da concentração de um poluente obtida com um modelo euleriano pode ser comparada diretamente com os dados de monitoramento ambiental, permitindo efetuar a verificação da evolução temporal de um determinado parâmetro numa localização específica.

Os problemas envolvendo a dispersão de poluentes em meio aquático podem ser tratados matematicamente empregando-se modelos **transientes e estacionários**.

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

Os **modelos estacionários** são empregados nas situações em que o campo de velocidades pode ser considerado permanente. Nesses casos, é possível resolver a equação (4) sem o termo de variação temporal da concentração; obtendo-se a solução da equação de transporte de massa resultante representada pela distribuição espacial de concentrações das substâncias de interesse, no domínio correspondente.

### **3.3. EVOLUÇÃO DOS MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA**

O modelo de Streeter-Phelps [Steeter & Phelps, 1925], publicado no início do século passado, marca o princípio do desenvolvimento de modelos matemáticos de qualidade da água. Os autores apresentam um modelo unidimensional, transiente, envolvendo um sistema de equações para OD e DBO, que pode ser resolvido analiticamente. O trabalho se baseia na depuração da matéria orgânica no meio

aquático, estimando a qualidade da água, caracterizada pelo parâmetro OD, ao longo do curso de um rio, a partir do conhecimento da quantidade de matéria orgânica nele despejada, avaliada pela DBO e pela quantidade do efluente lançado. O **Apêndice A** detalha o processo de depuração da matéria orgânica num curso d'água, descrevendo as alterações ocorridas no meio aquático e sua relação com esses dois parâmetros de qualidade da água.

O aumento dos problemas de poluição no meio aquático, a maior preocupação da sociedade com as questões ambientais e o grande avanço computacional foram fatores determinantes na evolução dos modelos matemáticos de qualidade de água. A figura 3.2 apresenta uma síntese cronológica desta evolução [Romeiro, 2003].

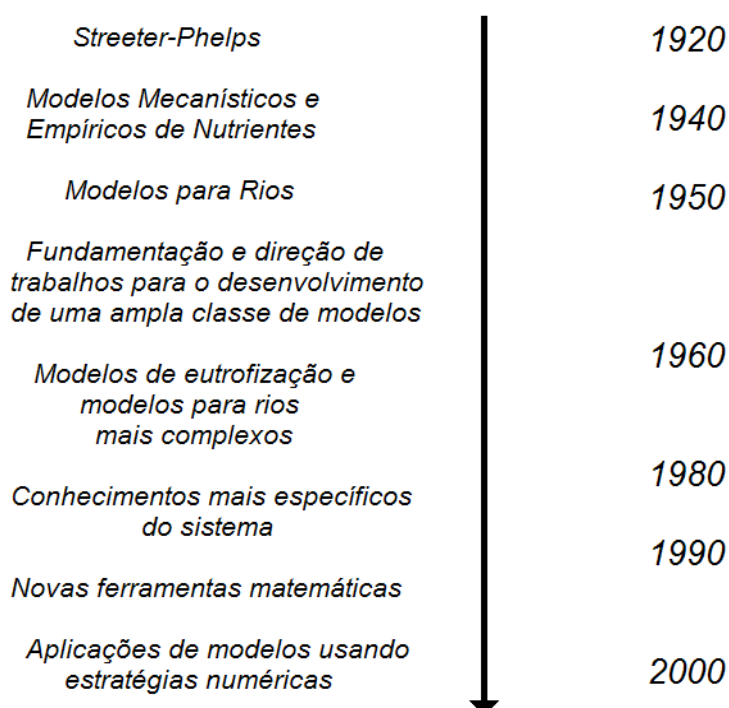


Figura 3.2 – Síntese cronológica da evolução dos modelos de qualidade da água

Segundo Pinho (2000), a modelação da qualidade das águas superficiais se desenvolveu em quatro estágios distintos, conforme apresentado na tabela 3.1.

No primeiro período, a maior preocupação era a avaliação do impacto das descargas de águas residuais em rios ou estuários. Na impossibilidade de acesso a meios de cálculo automático, a avaliação da concentração do oxigênio dissolvido em águas superficiais, parâmetro de qualidade utilizado para aferir o impacto provocado pelos despejos, era efetuada adotando-se cinéticas lineares na descrição dos processos,

geometrias simplificadas dos sistemas naturais e regimes permanentes na caracterização da hidrodinâmica dos corpos receptores.

O avanço computacional, na década de 60, possibilitou o desenvolvimento dos modelos de qualidade de água pelo emprego de técnicas numéricas. Os modelos assim obtidos permitiam a resolução de problemas que envolviam geometrias mais complexas e incluíam processos como a fotossíntese e decomposição da matéria orgânica no sedimento nas equações de balanço de OD.

A eutrofização, importante problema ambiental originado a partir de fontes difusas de nutrientes e associado ao incremento do uso de fertilizantes na década de 70, marcou a terceira fase de desenvolvimento dos modelos matemáticos de qualidade da água. Pesquisas realizadas sobre os mecanismos associados ao ciclo do nitrogênio e fósforo no meio aquático produziram conhecimentos mais profundos sobre o processo de transformação que ocorre entre as diversas formas de N e P presentes na água, que foram incluídas nos parâmetros de qualidade da água avaliados nos modelos.

A modelagem do transporte e transformação das substâncias tóxicas, entre as quais incluem-se os metais pesados, decorrente de sua associação ao fitoplâncton e ingestão por organismos de nível trófico superior, nos quais poderá ocorrer a sua concentração, caracteriza a quarta fase de desenvolvimento dos modelos de qualidade da água.

Tabela 3.1 – Estágios da evolução dos modelos de qualidade da água

<b>1º PERÍODO (1925-1960)</b>				
<b>PROBLEMAS</b>	<b>VARIÁVEIS</b>	<b>APLICAÇÕES</b>	<b>CINÉTICAS</b>	<b>SOLUÇÕES</b>
Descargas pontuais de efluentes sem tratamento e/ou com tratamento primário	Oxigênio dissolvido e carência bioquímica de oxigênio	Rios e estuários 1D	Lineares	Analíticas
<b>2º PERÍODO (1960-1970)</b>				
<b>PROBLEMAS</b>	<b>VARIÁVEIS</b>	<b>APLICAÇÕES</b>	<b>CINÉTICAS</b>	<b>SOLUÇÕES</b>
Descargas de efluentes com tratamento primário e secundário	Oxigênio dissolvido e carência bioquímica de oxigênio	Rios e estuários 1D/2D	Lineares	Analíticas e numéricas
<b>3º PERÍODO (1970-1977)</b>				
<b>PROBLEMAS</b>	<b>VARIÁVEIS</b>	<b>APLICAÇÕES</b>	<b>CINÉTICAS</b>	<b>SOLUÇÕES</b>
Eutrofização	Nutrientes	Rios, lagos e estuários 1D/2D/quase-3D	Não lineares	Numéricas

<b>4º PERÍODO (1977-Presente)</b>				
<b>PROBLEMAS</b>	<b>VARIÁVEIS</b>	<b>APLICAÇÕES</b>	<b>CINÉTICAS</b>	<b>SOLUÇÕES</b>
Substâncias tóxicas	Metais pesados	Rios, lagos e estuários (sedimentos) 1D/2D/quase-3D	Lineares	Numéricas e analíticas

Cabe destacar ainda que, no desenvolvimento dos modelos de qualidade da água, a par da sofisticação dos algoritmos e das técnicas numéricas neles presentes, verificou-se um refinamento do modelo biogeoquímico acoplado na equação de transporte, em decorrência de um melhor entendimento dos diversos processos cinéticos que ocorrem internamente no meio aquático. Conseqüentemente, foi incorporada aos modelos uma série de equações que descrevem estes processos; havendo, atualmente, modelos bastante complexos, como o modelo tridimensional da Baía de Chesapeake, envolvendo 22 parâmetros de qualidade de água [Romeiro, 2003].

O surgimento de novas estratégias numéricas, propiciadas pelo crescimento da tecnologia computacional no decorrer das últimas décadas, promoveu uma melhora na exatidão e eficiência na resolução dos modelos de qualidade da água. Desta forma, a modelagem numérica tornou-se uma ferramenta matemática bastante difundida, levando a criação de muitas instituições e o desenvolvimento de ferramentas (softwares), envolvendo pacotes com modelos, que simulam a qualidade da água. Dentre essas instituições e ferramentas, destacam-se os seguintes: EPA (*Environmental Protection Agency*), USGS (Surface-water Quality and flow Modelling Interest Group – SMIG), USACE (Army Corps of Engineers Model Archives), NWA (National Weather Service Models), USDA (USDA model Archives), DHI (Danish Hydraulic Institute) e Delft Hydraulic [Romeiro, 2003].

Os pacotes desenvolvidos por estas instituições diferenciam-se em vários aspectos. Nos modelos unidimensionais (1D) a geometria do corpo hídrico é descrita na forma de uma reta, o que limita a aplicação destes modelos em rios ou canais cujas dimensões transversais e verticais sejam significativamente menores que sua extensão longitudinal. Os modelos bidimensionais são do tipo vertical (2DV) e horizontal (2DH). Modelos 2DH aplicam-se a estuários com pouca estratificação, cujo perfil pode ser considerado verticalmente homogêneo. Modelos 2DV permitem variações na direção longitudinal e vertical; sendo empregados na simulação de corpo hídrico com estratificação de densidade na coluna d'água. Modelos tridimensionais (3D) são os mais

completos, não apresentando restrições ao seu emprego no que diz respeito à geometria do corpo hídrico. Além da forma de abordagem geométrica do corpo d'água, os pacotes computacionais podem ser assim classificados<sup>8</sup>:

- estacionários ou transientes;
- presença ou ausência de modelo hidrodinâmico acoplado;
- parâmetros de qualidade da água simulados;
- emprego de temperatura e outras variáveis extrínsecas na avaliação do coeficiente de reaeração e das taxas das reações químicas;

Um dos pacotes computacionais mais difundidos e empregados na simulação de cenários de poluição é o modelo QUAL2E. O modelo e o seu manual estão disponíveis para serem obtidos gratuitamente na página da EPA na Internet. Além disso, o programa é de fácil manuseio, o que explica a sua popularidade como ferramenta de apoio ao gerenciamento da qualidade d'água e o grande número de artigos científicos com o seu uso.

O modelo QUAL2E é unidimensional e puramente difusivo, sendo válido, portanto, apenas para corpos hídricos estagnados. Desta forma, o modelo assume que os solutos são completamente misturados através da seção transversal, e o transporte dispersivo é proporcional ao gradiente de concentração (Lei de Fick). Quanto às reações cinéticas que acontecem no modelo QUAL2E, elas incluem a degradação do material orgânico, o crescimento das algas (quantificadas pela clorofila), a nitrificação, a hidrólise do fósforo e nitrogênio orgânico (de algas), a reaeração, a sedimentação das algas e compostos orgânicos de nitrogênio e fósforo, a demanda de oxigênio do sedimento, a liberação do nitrogênio e fósforo do sedimento. Todos estes processos consideram o efeito dos ciclos do nitrogênio e do fósforo no balanço de oxigênio. A maior parte das reações acontece como decaimento de primeira ordem. A figura 3.3 ilustra os processos descritos no modelo biogeoquímico associado ao QUAL2E.

Na tabela 3.2 é mostrada uma comparação entre alguns dos mais utilizados modelos de qualidade de água disponíveis no mercado. O **Apêndice A** apresenta uma breve descrição de outros pacotes computacionais comercialmente disponíveis.

---

<sup>8</sup> Aqui são destacados apenas os aspectos julgados mais relevantes ou mais freqüentes na diferenciação dos pacotes computacionais.

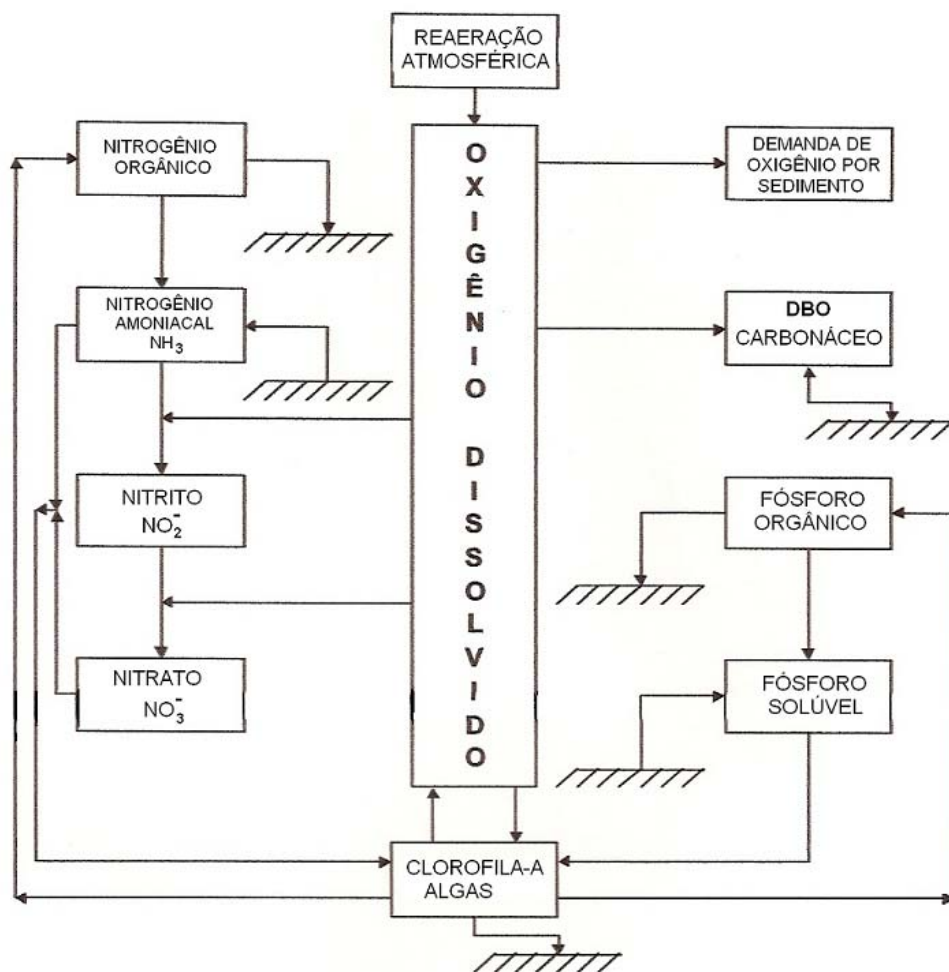


Figura 3.3 – Fluxograma dos processos químicos e biológicos representados no modelo QUAL2E

Tabela 3.2 – Quadro comparativo dos principais modelos de qualidade da água

Processo	Programa	Modelo de Qualidade									
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10
Hidrodinâmica	Input externo	S	S	N	N	S	N	N	N	N	S
	Simulado	N	S	S	S	S	S	S	S	S	S
Transporte	Advecção	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S
	Dispersão	S	S	S	S	S	S	S	S	S	S
Sedimentos	Modelos de qualidade	N	S	S	N	S	S	N	N		S
Qualidade da água	Temperatura	S	N	S	S	S	S	S			N
	Bactérias	N	N	S	S	S	S	S			N
	OD-DBO	S	S	S	S	S	S	S			S
	Nitrogênio	S	S	S	S	S	S	S			S
	Fósforo	S	S	S	S	S	S	S			S
	Silício	N	N	S	N	S	S	S			N
	Fitoplâncton	S	S	S	S	S	S	S			S
	Zooplâncton	N	N	S	N	S	S	N			N
Algas bentônicas	N	N	N	N	S	S	S			N	
Análise do sistema	Estimativa de parâmetros	N	-	-	-	-	-	-	-	S	S
	Análise de sensibilidade/incerteza	S	-	-	-	-	-	-	-	S	S

1 = QUAL2E (US EPA)

2 = WASP5 (US EPA)

3 = CE-QUAL-ICM (US Army Engineer Waterways Experiment Station)

4 = HEC5Q (US Army Engineer Hydrologic Engineering Center)

5 = MIKE11 (Danish Hydraulic Institute)

6 = ATV Model (ATV, Germany)

7 = Salmon-Q (HR Wallingford, UK)

8 = DUFLOW (University of Wageningen, The Netherlands)

9 = AQUASIM (EA WAG, Switzerland)

10 = DESERT (IIASA)

Fonte: Rauch et al. (1998)

### 3.4. MÉTODOS ATUALMENTE UTILIZADOS NA RESOLUÇÃO DA EQUAÇÃO ADVECTIVO-DIFUSIVA

Na resolução da equação (4.4) são utilizados diversos métodos analíticos, numéricos e híbridos [Zwillinger, 1992], mas ainda não são conhecidas soluções analíticas para diversos problemas de grande interesse em engenharia ambiental. O emprego de soluções analíticas possui várias vantagens em relação às numéricas: a solução é expressa em forma fechada e os códigos-fonte baseados nestas soluções são executados em um tempo menor de processamento, uma vez que há uma redução no número de operações a serem realizadas. Além disso, há uma diminuição significativa da quantidade de memória requerida para a execução de rotinas necessárias para a obtenção da solução [Poffal, 2005].

Os métodos numéricos usualmente empregados na resolução de equações diferenciais parciais [Ortega, 1981; Reddy, 1986 ; Greenspan, 1988; Carnahan, 1972]



(diferenças finitas, volumes finitos, elementos finitos, elementos de contorno e métodos espectrais) fornecem, geralmente, excelentes resultados para problemas de transporte advectivo-difusivo [Meyer, 2007; Pastres et al., 1995; Solidoro et al., 1995; Solidoro et al., 1996; Solidoro et al., 1997a; Pastres et al., 1997; Solidoro et al., 1997b]. Porém, em geral, demandam alto custo computacional devido à grande quantidade de memória e ao elevado tempo de processamento requerido.

O método das diferenças finitas aproxima as derivadas parciais das equações diferenciais por quocientes de diferenças de valores das variáveis incógnitas escolhidos em pontos discretos do domínio de cálculo. Dependendo da forma como são obtidas as equações de diferenças, o esquema numérico pode ser explícito ou implícito. No esquema explícito, as variáveis incógnitas têm seus valores definidos, em cada ponto do espaço, em função dos valores conhecidos dos intervalos de tempos anteriores. Quando isto não acontece, o esquema é implícito e resultam sistemas de equações algébricas onde as variáveis incógnitas são resolvidas simultaneamente a cada intervalo de tempo, geralmente em uma linha de espaço com condições de contorno definidas. Os simuladores que utilizam formulações em diferenças finitas em problemas cujo domínio possui geometria simples possuem boa velocidade de processamento e requerem quantidade de memória aceitável para os modelos de computadores atuais. Já em domínios com geometria de maior complexidade, a geração de malhas retangulares exige a discretização em um número elevado de elementos, sendo assim, faz-se necessário o uso de malhas com densidade variável [Carnahan, 1972; Ortega et al., 1981; Böhm, 1981; Reali et al., 1984; Silveira, 2005; Greenspan et al., 1988; Casallas, 1996; Yang et al., 1998; Garcia, 1997] ou o emprego de coordenadas curvilíneas que se adaptem à geometria dos contornos [Churchill, 1975; Spiegel, 1977; Hauser et al., 1986]. Rajar et al., em 1997 desenvolveram e aplicaram modelos bi e tridimensionais hidrodinâmicos, de transporte e dispersão baseados no esquema de diferenças finitas com a combinação de diferenças central e ascendente.

O método dos elementos finitos é versátil na representação de geometrias complexas, uma vez que possui geradores automáticos de malhas triangulares e hexagonais, permite a variação no tamanho dos elementos que compõem a malha e as condições de contorno podem ser facilmente implementadas [Dhaubabel et al., 1987; Silvestrini, 1989; Schettini, 1991]. Mpimpas et al., em 2001, utilizaram o algoritmo bidimensional de elementos finitos associado à lógica fuzzy para obtenção de solução para a equação advectivo-difusiva que descreve as variáveis de qualidade da água.

O método dos volumes finitos usa a forma integral das equações de conservação como ponto de partida. O domínio de cálculo é dividido em um número finito de volumes de controles contínuos, e as equações de conservação são aplicadas para cada volume de controle. No centróide de cada volume de controle existe um nodo computacional no qual os valores da variável têm que ser calculados. A interpolação é usada para expressar os valores das variáveis na superfície do volume de controle em termo dos valores nodais. As integrais de volume e superfície são aproximadas usando formulação de quadratura. Como resultado obtém-se equações algébricas para cada volume de controle.

Simuladores que utilizam formulações explícitas em diferenças finitas [Reali, 1984] têm boa velocidade de processamento e necessitam de quantidade de memória aceitável no tratamento de problemas em domínios retangulares. Domínios mais complexos requerem a geração de malhas com densidade variável [Dhaubadel, 1987; Hauser, 1986]. Simuladores que utilizam formulações em elementos finitos possuem, em geral, geradores automáticos de malha, contornando satisfatoriamente o problema. Entretanto, para problemas bidimensionais produzem sistemas algébricos de ordem demasiadamente elevada [Maliska, 1995].

A propagação de poluentes na água é um problema típico de transporte advectivo-difusivo para o qual a utilização de métodos analíticos e híbridos é particularmente vantajosa, em relação às formulações numéricas, possibilitando a obtenção de soluções em forma fechada, desde que o campo de velocidades do corpo hídrico em estudo seja previamente conhecido.

A alta velocidade de processamento dos sistemas baseados em métodos híbridos permite simular a dispersão de poluentes em tempo real, empregando microcomputadores de baixa performance [Moreira, 2004a; Moreira, 2004b; Moreira, 2005a; Moreira, 2005b]. O emprego de soluções aproximadas em forma analítica facilita a obtenção de estimativas de incerteza (margens de erro). Isto ocorre por que os métodos analíticos não produzem erros de arredondamento elevados, uma vez que efetuam um número bastante reduzido de operações seqüenciais de ponto flutuante. Assim as soluções obtidas, podem ser diretamente substituídas nas equações que lhes deram origem, a fim de verificar sua validade.

Nos últimos cinco anos, algumas formulações analíticas baseadas em simetrias de Lie e “split” foram desenvolvidas com o intuito de obter soluções em forma fechada para equações advectivo-difusivas que descrevem a propagação de poluentes na

água e na atmosfera. Nessas formulações são utilizados grupos de Lie, regras para a manipulação de exponenciais de operadores e mapeamento entre equações diferenciais com o objetivo de transformar soluções exatas, mas particulares, de equações advectivo-difusivas em novas soluções exatas contendo maior número de elementos arbitrários e, portanto, capazes de satisfazer condições de contorno que descrevem cenários físicos típicos de problemas de propagação de poluentes em corpos hídricos com formato arbitrário [Zabadal & Poffal, 2004; Zabadal et al, 2004; Zabadal et al, 2005; Zabadal et al, 2005].

No trabalho de Fernandez (2008), baseado em um modelo bidimensional, foram negligenciados três efeitos tridimensionais que o autor considera, a princípio, capazes de fornecer resultados mais refinados para a distribuição de concentrações. O primeiro efeito, que consiste na estratificação da concentração de poluentes ao longo da direção  $z$ , é de fundamental importância na avaliação de um fenômeno denominado “boom” de algas, evento que ocorre com frequência ao longo de toda a extensão do Lago Guaíba em períodos de água baixa e alta insolação (em geral, no mês de fevereiro). O segundo efeito, denominado “barreira de profundidade”, consiste na redução da concentração de poluentes de alta solubilidade ao longo de bancos de areia. O terceiro efeito reside no incremento da difusividade mássica devido à oscilação superficial da lâmina da água. A formação de cristas e depressões ao longo da superfície da água proporciona a propagação isotrópica de um poluente de alta solubilidade resultando em um coeficiente efetivo de difusão cerca de cem vezes maior do que o coeficiente clássico, que considera apenas o movimento browniano.

No trabalho proposto é apresentado um novo método analítico para obtenção de soluções para a equação advectivo-difusiva tridimensional em coordenadas cartesianas que descreve os fenômenos de dispersão de contaminantes na água. Nesse novo método analítico, as distribuições de concentração são expressas em função das componentes do campo de velocidades, ou das funções corrente e potencial velocidade. Os resultados obtidos através do emprego do método, a saber, as distribuições de concentração de coliformes, nitrogênio e fosfato, apresentaram concordância qualitativa com dados experimentais obtidos em campanhas de coleta realizadas pelo DMAE. Esses resultados são discutidos de forma mais detalhada no capítulo 5.

## 4. DESCRIÇÃO DO MÉTODO

Os problemas de maior interesse em poluição aquática são divididos em dois conjuntos de cenários típicos de dispersão de poluentes. O primeiro conjunto de cenários descreve problemas de deriva de mancha, isto é, cenários transientes nos quais um despejo instantâneo é efetuado em um determinado local do corpo hídrico, produzindo uma mancha que é transportada pela correnteza, sofrendo simultaneamente difusão e eventualmente degradação, evaporação ou precipitação.

O segundo conjunto de cenários é descrito por problemas tipicamente estacionários nos quais dutos de esgoto e de transporte de substâncias químicas efetuam o lançamento de carga contínua num determinado local do corpo hídrico produzindo uma pluma.

Em ambos os casos se faz necessário que as soluções da equação advectivo-difusiva contenham apenas uma função arbitrária de um argumento específico. Isto ocorre por que nestes cenários a equação advectivo-difusiva está sujeita a duas condições de contorno, sendo que apenas uma delas realmente especifica a função arbitrária.

A primeira condição de contorno, de primeira espécie, descreve a conformação aproximada de um despejo instantâneo, no caso de cenários envolvendo acidentes com cargas tóxicas, ou a conformação da seção transversal da pluma que descreve um lançamento contínuo em regime estacionário. Essa condição de contorno particulariza a função arbitrária presente na solução.

A segunda condição de contorno especifica o mecanismo de propagação do poluente junto as margens do corpo hídrico, e correspondem a condições de segunda ou terceira espécie, conforme o tipo de interface água-solo considerado. Essa condição de contorno especifica apenas constantes arbitrárias que eventualmente figurem na solução obtida.

### 4.1. DESENVOLVIMENTO MATEMÁTICO – RESTRIÇÕES DIFERENCIAIS

A equação advectivo-difusiva tridimensional em regime transiente para poluentes não conservativos é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} - D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + kC = 0. \quad (4.1)$$

Para o caso no qual o campo de velocidades não varia significativamente com o tempo, o único efeito transiente sobre a distribuição de concentrações se deve à cinética de degradação, evaporação, sedimentação ou a redissolução do componente. Deste modo a equação pode ser reescrita como um sistema de duas equações diferenciais que regem respectivamente, a cinética e o transporte advectivo-difusivo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + kC = 0 \quad (4.2)$$

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} - D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (4.3)$$

A primeira equação do sistema pode ser resolvida via separação de variáveis e integração direta, enquanto a segunda sofrerá um processo de redução de ordem baseado em gênese e transformação de Backlund.

Para resolver a primeira equação do sistema basta efetuar uma separação de variáveis,

$$\frac{\partial C}{C} = -k \partial t \quad (4.4)$$

Integrando ambos os membros, resulta

$$\ln C = -kt + \ln r(x, y, z) \quad (4.5)$$

onde  $r(x, y, z)$  é uma função arbitrária. Exponenciando ambos os membros, temos

$$C = r(x, y, z)e^{-kt} \quad (4.6)$$

A função  $r(x,y,z)$  por sua vez é solução exata da segunda equação do sistema. De fato, substituindo (4.6) em (4.3), resulta

$$\left[ u \frac{\partial r}{\partial x} + v \frac{\partial r}{\partial y} + w \frac{\partial r}{\partial z} - D \left( \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial z^2} \right) \right] e^{-kt} = 0 \quad (4.7)$$

Uma vez que a exponencial presente na equação (4.7) não pode ser nula, o conteúdo entre colchetes deve ser igual a zero:

$$u \frac{\partial r}{\partial x} + v \frac{\partial r}{\partial y} + w \frac{\partial r}{\partial z} - D \left( \frac{\partial^2 r}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 r}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (4.8)$$

Resta, portanto, encontrar soluções exatas para a respectiva equação em regime estacionário, dada por

$$u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} - D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) = 0 \quad (4.9)$$

uma vez que as equações (4.8) e (4.3) são idênticas.

O método proposto baseia-se na fatoração da equação advectivo-difusiva estacionária em forma matricial, resultando na obtenção de três restrições diferenciais de primeira ordem que induzem uma transformação auto Backlund sobre equações advectivo-difusivas em regime estacionário. O primeiro passo na obtenção da forma fatorada consiste em uma tripla gênese dada por

$$D \frac{\partial C}{\partial x} = g(x, y, z, u, v, w, C) \quad (4.10)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial y} = h(x, y, z, u, v, w, C) \quad (4.11)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial z} = p(x, y, z, u, v, w, C) \quad (4.12)$$

Derivando a equação (4.10) em relação a x, e utilizando a regra da cadeia, resulta

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = g_x + g_c \frac{\partial C}{\partial x} + g_u \frac{\partial u}{\partial x} + g_v \frac{\partial v}{\partial x} + g_w \frac{\partial w}{\partial x} \quad (4.13)$$

Derivando a equação (4.11) em relação a y resulta

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} = h_y + h_c \frac{\partial C}{\partial y} + h_u \frac{\partial u}{\partial y} + h_v \frac{\partial v}{\partial y} + h_w \frac{\partial w}{\partial y} \quad (4.14)$$

Derivando a equação (4.12) em relação a z resulta

$$D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} = p_z + p_c \frac{\partial C}{\partial z} + p_u \frac{\partial u}{\partial z} + p_v \frac{\partial v}{\partial z} + p_w \frac{\partial w}{\partial z} \quad (4.15)$$

As equações (4.13) a (4.15) utilizam diferentes notações para as derivadas parciais de C, g, h e p a fim de facilitar a identificação dos coeficientes da equação alvo via comparação direta. Somando as equações resultantes obtém-se

$$D \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) = g_x + g_c \frac{\partial C}{\partial x} + g_u \frac{\partial u}{\partial x} + g_v \frac{\partial v}{\partial x} + g_w \frac{\partial w}{\partial x} + h_y + h_c \frac{\partial C}{\partial y} + h_u \frac{\partial u}{\partial y} + h_v \frac{\partial v}{\partial y} + h_w \frac{\partial w}{\partial y} + p_z + p_c \frac{\partial C}{\partial z} + p_u \frac{\partial u}{\partial z} + p_v \frac{\partial v}{\partial z} + p_w \frac{\partial w}{\partial z} \quad (4.16)$$

Comparando o resultado obtido com a equação alvo (4.3), obtém-se

$$g_c = u \quad (4.17)$$

$$h_c = v \quad (4.18)$$

$$p_c = w \quad (4.19)$$

Os termos excedentes devem ser nulos, de maneira que:

$$g_x + h_y + p_z + g_u \frac{\partial u}{\partial x} + g_v \frac{\partial v}{\partial x} + g_w \frac{\partial w}{\partial x} + h_u \frac{\partial u}{\partial y} + h_v \frac{\partial v}{\partial y} + h_w \frac{\partial w}{\partial y} + p_u \frac{\partial u}{\partial z} + p_v \frac{\partial v}{\partial z} + p_w \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (4.20)$$

Essa equação auxiliar atua como uma restrição diferencial adicional, cuja resolução é efetuada fazendo novamente o processo split. Fazendo:

$$g_x + h_y + p_z = 0 \quad (4.21)$$

$$g_u \frac{\partial u}{\partial x} + h_v \frac{\partial v}{\partial y} + p_w \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (4.22)$$

$$g_v \frac{\partial v}{\partial x} + g_w \frac{\partial w}{\partial x} + h_u \frac{\partial u}{\partial y} + h_w \frac{\partial w}{\partial y} + p_u \frac{\partial u}{\partial z} + p_v \frac{\partial v}{\partial z} = 0 \quad (4.23)$$

Na equação (4.22), caso os coeficientes das derivadas  $\frac{\partial u}{\partial x}$ ,  $\frac{\partial v}{\partial y}$ ,  $\frac{\partial w}{\partial z}$  sejam iguais, a equação é identicamente satisfeita levando em conta a equação da continuidade incompressível para regime estacionário. Uma escolha conveniente para os coeficientes das derivadas é obtida quando:

$$g_u = h_v = p_w = C(x, y, z) \quad (4.24)$$

As equações (4.21) e (4.23) são identicamente satisfeitas quando todas as derivadas parciais de  $g$ ,  $h$  e  $p$  que nela figuram são nulas, isto é:

$$g_x = g_v = g_w = h_y = h_u = h_w = p_z = p_u = p_v = 0 \quad (4.25)$$

Esse procedimento fornece as seguintes formas para as derivadas das funções  $g$ ,  $h$  e  $p$ :

$$\frac{\partial g(y, z, u, C)}{\partial u} = C(x, y, z) \quad (4.26)$$

$$\frac{\partial h(x, z, u, C)}{\partial v} = C(x, y, z) \quad (4.27)$$

$$\frac{\partial p(x, y, u, C)}{\partial w} = C(x, y, z) \quad (4.28)$$



A solução dessas equações diferenciais é imediata:

$$g(y, z, u, C) = u.C(x, y, z) + \alpha(y, z) \quad (4.29)$$

$$h(x, z, u, C) = v.C(x, y, z) + \beta(x, z) \quad (4.30)$$

$$p(x, y, u, C) = w.C(x, y, z) + \theta(x, y) \quad (4.31)$$

Substituindo as expressões (4.29) a (4.31) nas equações (4.10) a (4.12), obtêm-se:

$$D \frac{\partial C}{\partial x} = u.C(x, y, z) + \alpha(y, z) \quad (4.32)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial y} = v.C(x, y, z) + \beta(x, z) \quad (4.33)$$

$$D \frac{\partial C}{\partial z} = w.C(x, y, z) + \theta(x, y) \quad (4.34)$$

As equações (4.32) a (4.34) formam um conjunto de restrições diferenciais que produzem transformações auto-Bäcklund admitidas pela equação (4.9), isto é, a equação advectivo-difusiva em sua forma original.

A resolução das equações (4.32) a (4.34) é imediata:

$$C(x, y, z) = l(y, z).e^{\frac{\phi}{D}} + \frac{\alpha(y, z)}{D}.e^{\frac{\phi}{D}} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dx \quad (4.35)$$

$$C(x, y, z) = m(x, z).e^{\frac{\phi}{D}} + \frac{\beta(x, z)}{D}.e^{\frac{\phi}{D}} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dy \quad (4.36)$$

$$C(x, y, z) = l(y, z).e^{\frac{\phi}{D}} + \frac{\alpha(y, z)}{D}.e^{\frac{\phi}{D}} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dx \quad (4.37)$$

Uma vez que as expressões definem as distribuições de concentrações devem resultar idênticas:

$$l(y, z) + \frac{\alpha(y, z)}{D} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dx = m(x, z) + \frac{\beta(x, z)}{D} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dy \quad (4.38)$$

$$l(y, z) + \frac{\alpha(y, z)}{D} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dx = n(x, y) + \frac{\theta(x, y)}{D} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dz \quad (4.39)$$

$$m(x, z) + \frac{\beta(x, z)}{D} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dy = n(x, y) + \frac{\theta(x, y)}{D} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dz \quad (4.40)$$

Derivando a equação (4.38) em relação a x e a y, e simplificando termos, vem:

$$D.\alpha_y - v.\alpha = D.\beta_x - u.\beta \quad (4.41)$$

De forma análoga, derivando a equação (4,39) em relação a x e a z, e simplificando termos:

$$D.\alpha_z - w.\alpha = D.\theta_x - u.\theta \quad (4.42)$$

Finalmente, derivando a equação (4.40) em relação a x e a y, e simplificando termos:

$$D.\beta_z - w.\beta = D.\theta_y - v.\theta \quad (4.43)$$

Essas equações serão resolvidas após a aplicação das chamadas condições de compatibilidade, que visam impor a consistência entre as derivadas cruzadas de  $C(x,y,z)$ .

## 4.2. CONDIÇÕES DE COMPATIBILIDADE

A fim de simplificar o sistema formado pelas equações (4.41) a (4.43), bem como verificar o surgimento de eventuais restrições sobre o campo de velocidades, são aplicadas as condições de compatibilidade, obtidas quando se igualam as derivadas cruzadas resultantes da diferenciação das equações (4.32) a (4.34):

$$C(v_x - u_y) - u.C_y + v.C_x + \beta_x - \alpha_y = 0 \quad (4.44)$$

$$C(w_x - u_z) - u.C_z + w.C_x + \theta_x - \alpha_z = 0 \quad (4.45)$$

$$C(w_y - v_z) + w.C_y - v.C_z + \theta_y - \beta_z = 0 \quad (4.46)$$

Nas equações (4.44) a (4.46) os termos que multiplicam a variável  $C$  constituem, respectivamente, as componentes  $\omega_z$ ,  $\omega_y$  e  $\omega_x$  da vorticidade, que são nulas para o caso de um escoamento invíscido. Em nosso trabalho, será adotada a hipótese de escoamento invíscido, tendo em vista que nas aplicações em que o modelo será utilizado, isto é, a simulação de dispersão de poluentes em corpos hídricos, a dimensão caracterísitca do domínio é várias ordens de grandeza superior à dimensão da respectiva camada limite hidrodinâmica.

Eliminando os termos que correspondem às componentes da vorticidade nas direções  $x$ ,  $y$  e  $z$  e substituindo as equações de  $C_x$ ,  $C_y$  e  $C_z$  dadas pelas equações (4.32) a (4.34) nas equações (4.44) a (4.46), resulta o seguinte sistema:

$$\frac{w.\beta - v.\theta}{D} + \theta_y - \beta_z = 0 \quad (4.47)$$

$$\frac{w.\alpha - u.\theta}{D} + \theta_x - \alpha_z = 0 \quad (4.48)$$

$$\frac{v.\alpha - u.\beta}{D} + \beta_x - \alpha_y = 0 \quad (4.49)$$

Isolando as variáveis  $u$ ,  $v$  e  $w$  nas três últimas equações apresentadas é possível obter a seguinte equação auxiliar:

$$\alpha(\theta_y - \beta_z) + \beta(\alpha_z - \theta_x) + \theta(\beta_x - \alpha_y) = 0. \quad (4.50)$$

Essa equação constitui uma restrição diferencial que relaciona as funções  $\alpha(y,z)$ ,  $\beta(x,z)$  e  $\theta(x,y)$ . Também são obtidas as seguintes expressões para as componentes de velocidade  $u(x,y,z)$  e  $w(x,y,z)$ , que apresentam dependência com a componente  $v(x,y,z)$ :

$$u = \frac{D.\beta.\alpha_z - D.\alpha.\beta_z - v.\alpha.\theta + D.\alpha.\theta_y - D.\beta.\theta_x}{\beta.\theta} \quad (4.51)$$

$$w = \frac{v \cdot \theta + D(\beta_z - \theta_y)}{\beta} \quad (4.52)$$

No Apêndice B é apresentado respectivo código-fonte, redigido no software Maple V, que detalha as operações matemáticas aplicadas no sistema formado pelas equações (4.32) a (4.34), a fim de impor a consistência entre as definições das derivadas cruzadas  $C_{xy}$ ,  $C_{yz}$  e  $C_{xz}$ .

Nesse ponto cabe ressaltar que o objetivo do tratamento matemático até aqui implementado é verificar se a partir destas equações vão surgir restrições excessivamente severas sobre o formato do campo de velocidades que o tornem incompatível com o problema físico, ou que exijam discretização em malha fina, tornando a formulação analítica inviável.

Dentro dessa perspectiva, será assumida a hipótese mais restritiva possível que ainda corresponda a um cenário fisicamente realista para o campo de velocidades. Sendo assim, será considerado que na direção  $z$  ocorre apenas difusão, não havendo advecção nesta direção. Conseqüentemente,  $w = 0$ ,  $u = u(x,y)$  e  $v = v(x,y)$ .

Aplicando novamente as condições de compatibilidade, resultam as seguintes expressões para  $u(x,y)$  e  $v(x,y)$ :

$$u = \frac{D(\theta_x - \alpha_z)}{\theta} \quad (4.53)$$

$$v = \frac{D(\theta_y - \beta_z)}{\theta} \quad (4.54)$$

O desenvolvimento matemático dessa hipótese é feito a partir das equações (4.32) a (4.34), e o código-fonte correspondente também é apresentado no Apêndice B. A mesma restrição diferencial, relacionando as funções  $\alpha(y,z)$ ,  $\beta(x,z)$  e  $\theta(x,y)$ , expressa pela equação (4.50) é obtida nesse caso.

Analisando as expressões (4.53) e (4.54), é possível verificar que elas relacionam as componentes  $u$  e  $v$  da velocidade com derivadas parciais em  $z$  das funções  $\alpha(y,z)$  e  $\beta(x,z)$ . Contudo, na hipótese adotada,  $u$  e  $v$  não dependem da variável  $z$ ; logo, é necessário que as derivadas de  $\alpha$  e  $\beta$  nesta variável sejam nulas. Assim,

aplicando novamente as condições de compatibilidade, e considerando  $\alpha=\alpha(y)$  e  $\beta=\beta(x)$ , obtêm-se as seguintes definições para as componentes da velocidade:

$$u = \frac{D.\theta_x}{\theta} \quad (4.55)$$

$$v = \frac{D.\theta_y}{\theta} \quad (4.56)$$

$$v = \frac{D.\left(\frac{\beta.\theta_x}{\theta} + \alpha_y - \beta_x\right)}{\alpha} \quad (4.57)$$

A partir das equações (4.55) e (4.56) verifica-se que

$$D.\ln \theta = \phi \quad (4.58)$$

onde a função  $\phi(x,y)$  é o potencial velocidade associado ao escoamento. Isolando  $\theta$  na equação (4.58) obtêm-se:

$$\theta(x, y) = \exp\left(\frac{\phi(x, y)}{D}\right) \quad (4.59)$$

Substituindo a expressão obtida para a função  $\phi(x,y)$  na equação (4.57) e simplificando a expressão resultante, obtêm-se uma equação auxiliar que atua como restrição diferencial para o potencial velocidade:

$$\alpha.\phi_y - \beta.\phi_x + D.(\beta_x - \alpha_y) = 0 \quad (4.60)$$

Uma vez que o escoamento é invíscido e bidimensional, o potencial velocidade obedece a equação de Laplace no plano, isto é,

$$\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} = 0 \quad (4.61)$$

o que permite relacionar as derivadas parciais do potencial velocidade, em x e y, pela seguinte expressão:

$$\frac{\partial \phi}{\partial y} = +i \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} . \quad (4.62)$$

Assim, eliminando a derivada em y na equação (4.60) resulta:

$$(i\alpha - \beta) \cdot \phi_x + D \cdot (\beta_x - \alpha_y) = 0 \quad (4.63)$$

cuja solução é imediata:

$$\phi(x, y) = \int \frac{D \cdot (\beta_x - \alpha_y)}{-i\alpha + \beta} \cdot dx + f1(y) , \quad (4.64)$$

onde f1(y) é uma função arbitrária. Esta definição para o potencial velocidade permite que sejam prescritos campos de escoamento em torno de corpos submersos com geometria arbitrária.

Uma vez que as funções  $\alpha(y)$  ,  $\beta(x)$  e  $f1(y)$  são arbitrárias, podem ser substituídas por séries de Taylor com coeficientes a determinar. Esses coeficientes são determinados através do ajuste das equações paramétricas que definem os contornos das margens presentes nos subdomínios do corpo hídrico a considerar.

### 4.3. RESOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES AUXILIARES (4.35) A (4.37)

Pode-se agora retomar o processo de resolução das equações auxiliares (4.35) a (4.37) com o objetivo de verificar se novas restrições sobre o potencial velocidade podem eventualmente surgir.

Substituindo  $\alpha = \alpha(y)$  ,  $\beta = \beta(x)$  e  $\theta = \exp(\phi/D)$  nas equações (4.41) a (4.43), resulta:

$$D \cdot \alpha_y - \alpha \cdot \phi_y = D \cdot \beta_x - \beta \cdot \phi_x \quad (4.65)$$

$$\alpha \cdot \phi_z = 0 \quad (4.66)$$

$$\beta \cdot \phi_z = 0 \quad (4.67)$$

As equações (4.66) e (4.67) informam que  $w = 0$ , enquanto a equação (4.65) será utilizada, a exemplo da seção anterior, para obter uma variedade que define o potencial velocidade utilizado. Derivando essa equação em relação a  $x$ , obtém-se:

$$\phi_{xy} = -\frac{D.\beta_{xx} - \beta.\phi_{xx} - \beta_x.\phi_x}{\alpha} \quad (4.68)$$

Derivando a mesma equação em relação a  $y$ , resulta:

$$\phi_{xy} = \frac{-D.\alpha_{yy} + \alpha.\phi_{yy} + \alpha_y.\phi_y}{\beta} \quad (4.69)$$

Isolando a derivada cruzada  $\phi_{xy}$  nas equações (4.68) e (4.69) e igualando as expressões obtidas, vem:

$$\frac{D.\beta_{xx} - \beta.\phi_{xx} - \beta_x.\phi_x}{\alpha} + \frac{-D.\alpha_{yy} + \alpha.\phi_{yy} + \alpha_y.\phi_y}{\beta} = 0 \quad (4.70)$$

Considerando que o escoamento é potencial,  $\frac{\partial\phi}{\partial y} = \pm i.\frac{\partial\phi}{\partial x}$  e, conseqüentemente,

$$\frac{\partial^2\phi}{\partial y^2} = \frac{\partial^2\phi}{\partial x^2} \text{ . Assim}$$

$$D.\beta.\beta_{xx} - \beta^2.\phi_{xx} - \beta.\beta_x.\phi_x - D.\alpha.\alpha_{yy} + \alpha^2.\phi_{xx} + i.\alpha.\alpha_y.\phi_x = 0 \quad (4.71)$$

A solução desta equação também é imediata:

$$\phi(x, y, z) = \int \left[ f_1(y, z) - D. \left( \int \frac{e^{\int \frac{i.\alpha.\alpha_y - \beta.\beta_x}{\alpha^2 + \beta^2}.dx} . (\alpha.\alpha_{yy} - \beta.\beta_{xx})}{\alpha^2 + \beta^2} dx \right) \right] . e^{\int \frac{i.\alpha.\alpha_y - \beta.\beta_x}{\alpha^2 + \beta^2}.dx} . dx + f_2(y, z) \quad (4.72)$$

Tal como ocorreu na equação (4.64), a função  $\phi$  contém uma série de elementos arbitrários, de modo que cabem considerações análogas sobre a estrutura dessa variedade. Uma vez que a equação (4.64) constitui uma restrição mais severa ao campo de velocidades do que a equação (4.72), é possível concluir que a estrutura da função potencial velocidade contém elementos arbitrários suficientes para evitar a discretização do domínio em malha fina. Por ora, o principal objetivo do trabalho proposto consiste no estudo exploratório do potencial de aplicação das equações (4.32) a (4.34) em problemas de poluição aquática. Uma vez que as funções  $\alpha(y)$ ,  $\beta(x)$  e  $f_1(y)$  são arbitrárias, as restrições diferenciais resultante da aplicação das condições de compatibilidade sobre as soluções obtidas consistem nas equações (4.58) e (4.63), para as quais a função incógnita é o potencial velocidade; parece razoável supor que as distribuições de concentração expressas em termos da função corrente e do potencial velocidade devam, na pior das hipóteses, ser válidas em subdomínios relativamente extensos do corpo hídrico de modo que seja necessário, eventualmente, construir soluções em “malha grossa” ao invés de obter soluções em forma fechada para toda a extensão do domínio.

Uma vez obtida a forma para a função potencial velocidade, e havendo sido verificado que essa expressão pode ser utilizada em subdomínios relativamente extensos resta obter a expressão final para a distribuição de concentrações.

#### 4.4. FORMA FINAL PARA A DISTRIBUIÇÃO DE CONCENTRAÇÕES

Para obter a forma final da função de distribuição de concentrações, basta utilizar qualquer das três funções soluções obtidas para as equações auxiliares, a saber, equações (4.35) a (4.37). Tomando a equação (4.36) e substituindo  $\beta(x,z)$  por  $\beta(x)$  resulta:

$$C(x, y, z) = m(x, z).e^{\frac{\phi}{D}} + \frac{\beta(x)}{D}.e^{\frac{\phi}{D}} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dy \quad (4.73)$$

Essa solução não leva em consideração a difusão transversal, tendo em vista que na equação (4.73) a função corrente não figura de forma explícita. Essa deficiência é suprida lançando mão da solução apresentada no modelo proposto por Zabadal e Poffal



(2006). A solução do problema estacionário consiste em uma combinação linear entre a equação (4.73) e a solução obtida por Zabadal, Poffal e Leite (2006), a saber:

$$C(x, y, z) = m(x, z).e^{\frac{\phi}{D}} + \frac{\beta(x)}{D}.e^{\frac{\phi}{D}} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dy + C_1 \cdot \left( D.\phi.\psi + \frac{\psi^3}{6} \right) + C_2 \cdot \left( D.\phi + \frac{\psi^2}{2} \right) + C_3.\psi + C_4 \quad (4.74)$$

A solução final do problema é obtida multiplicando a solução do problema estacionário pela exponencial que define a cinética, considerada, a princípio, de primeira ordem:

$$C(x, y, z) = e^{-k.t} \cdot \left[ m(x, z).e^{\frac{\phi}{D}} + \frac{\beta(x)}{D}.e^{\frac{\phi}{D}} \int e^{-\frac{\phi}{D}} dy + C_1 \cdot \left( D.\phi.\psi + \frac{\psi^3}{6} \right) + C_2 \cdot \left( D.\phi + \frac{\psi^2}{2} \right) + C_3.\psi + C_4 \right] \quad (4.75)$$

Embora um dos objetivos do trabalho consista em resolver um problema tipicamente estacionário, relacionado ao planejamento de redes de esgotos, a presença do termo transiente se faz necessária, uma vez que, em geral, os poluentes a considerar não são conservativos. Neste caso, entretanto, a variável tempo atua como uma “coordenada” do ponto de vista de Lagrange, que considera o tempo de decaimento transcorrido desde a emissão de carga até o ponto considerado no interior do corpo hídrico.

Essa solução, embora tenha sido originalmente concebida para aplicações em coordenadas curvilíneas, utilizando como variáveis independentes a função corrente e o potencial velocidade, pode ser facilmente empregada em coordenadas cartesianas. Isto ocorre porque a função corrente e o potencial velocidade podem ser expressos em termos das variáveis  $x$ ,  $y$  e  $z$ , permitindo que a formulação seja aplicada em coordenadas cartesianas mesmo que o corpo hídrico possua contornos irregulares. Essa característica constitui uma vantagem adicional sobre a solução mencionada.

A presença de elementos arbitrários torna possível a aplicação de condições de primeira espécie a montante, que substituem com vantagem as cargas originais do sistema. Para isso, basta efetuar um ajuste de curvas que aproxima o perfil de concentrações sobre a interface a montante do domínio, e prescrever a função ajustada como condição de contorno de primeira espécie sobre esta mesma interface. Desse

modo, uma seqüência de soluções exatas pode ser obtida em cascata partindo de regiões a montante do corpo hídrico de interesse, calculando a distribuição de concentrações na respectiva interface a jusante, e utilizando essa condição de jusante como condição à montante para obtenção da distribuição de concentrações no próximo subdomínio a considerar. A estratégia geral do método se assemelha a das formulações TDT (“time dependent techniques”), que são amplamente utilizadas em mecânica de fluidos para reduzir o tempo de processamento na simulação de escoamentos ao redor de corpos submersos com contornos arbitrários. Entretanto, no método proposto, o domínio de interesse pode ser discretizado em um pequeno número de regiões, ao passo que, nas formulações TDT originais o domínio é discretizado em malha fina.

#### **4.5 CONSIDERAÇÕES SOBRE O FENÔMENO DA DIFUSÃO**

O modelo clássico de difusão, baseado na Lei de Fick, considera que o fluxo de massa entre regiões adjacentes de um meio material é proporcional ao respectivo gradiente de potencial químico. Essa hipótese induz alguns autores a concluir que o gradiente de potencial constitui a principal força motriz responsável pelo movimento das moléculas de um soluto através de um solvente. Contudo, essa concepção é equivocada, pois o movimento relativo entre moléculas ocorre também em meios homogêneos contendo apenas uma espécie química. A fim de exemplificar o argumento, considere-se um recipiente contendo um sistema binário constituído por um soluto utilizado como traçador (por exemplo, um corante) e um solvente incolor. Considere-se também que estas substâncias estejam isoladas inicialmente por uma parede (ver figura 4.1).

Em ambos os compartimentos, as moléculas do soluto e do solvente executam um deslocamento aleatório, denominado movimento browniano. Assim que a parede isolante é removida, o movimento continua ocorrendo. Há, no entanto, uma diferença em relação à situação inicial: existem moléculas de solvente deslocando-se em direção à região ocupada inicialmente apenas pelo soluto, e também um movimento inverso, no qual as moléculas do soluto invadem a região inicialmente ocupada pelo solvente. Uma observação precipitada do fenômeno em macroescala poderia induzir a concluir que as moléculas de soluto se deslocam de regiões de maior concentração para regiões de menor concentração. Isso não necessariamente é verdade: ocorre apenas que um

gradiente apreciável de concentração do traçador não é uma condição necessária para que o movimento aconteça, mas apenas para que este possa ser observado em macroescala.

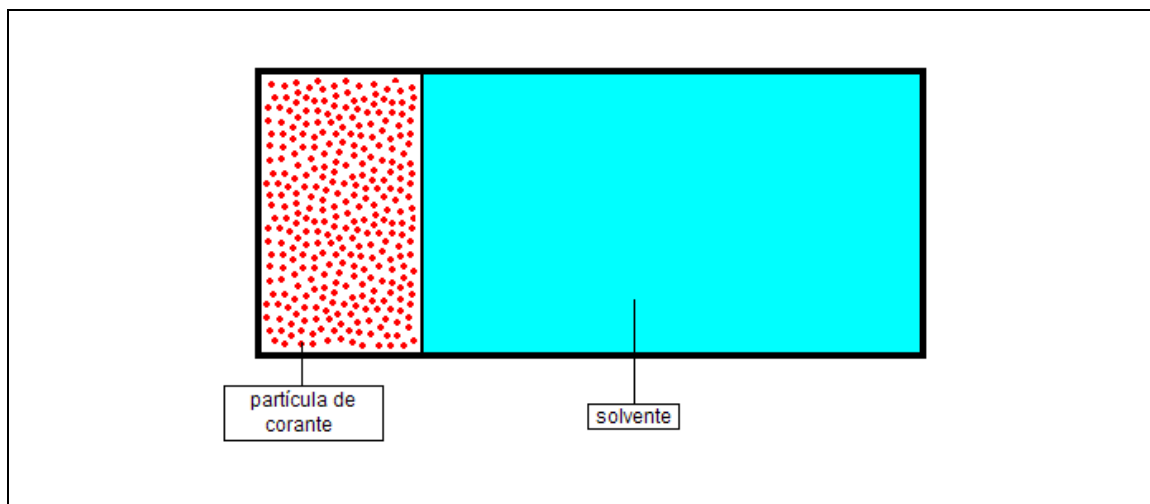


Figura 4.1 – Sistema binário (soluto + solvente) no estágio inicial

A principal força motriz responsável pelo fenômeno da difusão parece ser, a princípio, o próprio escoamento do solvente. Existem alguns argumentos que corroboram essa premissa. O primeiro deles se refere ao fato de que a turbulência proporciona uma mistura mais eficiente entre soluto e solvente, fato constatado na clássica experiência de Reynolds (Bird et al., 2004). O segundo diz respeito ao estado físico dos componentes que formam a mistura. É sabido que o processo difusivo em fase sólida é extremamente lento quando comparado à difusão dos mesmos componentes em fase líquida, razão pela qual parece razoável supor que o gradiente de concentração não desempenha papel crucial no processo de mistura soluto-solvente.

Existe ainda um terceiro argumento em favor da hipótese de que o escoamento seja o principal fenômeno responsável pela difusão. Ocorre que não existe realmente processo de difusão em escala molecular, uma vez que a hipótese do contínuo não é válida nessa escala de observação. Em outras palavras, não é possível fragmentar moléculas e em seguida espargir seus fragmentos isotropicamente em torno de suas vizinhanças. As moléculas preservam sua integridade ao longo do processo de mistura, não sendo possível conceber, ao longo desse processo, qualquer forma de movimento senão o deslocamento individual das partículas, fenômeno associado um mecanismo puramente advectivo. A caracterização do processo difusivo como uma consequência do

movimento individual das partículas é descrita no Apêndice C. Neste apêndice é apresentada uma formulação matemática a partir da qual o termo difusivo emerge naturalmente como consequência da observação de um processo advectivo em “granulação grosseira”, isto é, em uma escala de medida superior ao percurso livre médio das partículas de fluido. Assim, o processo difusivo, somente detectável em macroescala, é certamente um efeito produzido pelo escoamento, em microescala, dos componentes participantes da mistura. Isto se torna evidente em nossa própria experiência diária. Ao preparar uma xícara de café instantâneo, a simples agitação do líquido proporciona uma homogeneização praticamente imediata. Nesse caso específico, parece claro que a advecção produziu a mistura entre a água e o café.

As idéias apresentadas fornecem fortes indícios de que, qualquer que seja o modelo usado para estimar um coeficiente de dispersão em corpos hídricos, este deva ser baseado na análise de suas características hidrodinâmicas. Numa primeira tentativa de formulação poderiam ser utilizados os modelos clássicos de difusão turbulenta disponíveis na literatura [Hinze, 1959; Schlichting, 1968]. Entretanto, para valores típicos de velocidade de escoamento ao longo do Lago Guaíba, o coeficiente de dispersão a ser utilizado em sistemas de simulação deve ser, em geral, uma ordem de grandeza superior ao coeficiente estimado através de modelos de turbulência de qualquer natureza, a fim de reproduzir adequadamente dados experimentais relativos à concentração de coliformes. Além disso, para poluentes que sofrem sedimentação e redissolução, tais como fosfato e outros componentes de depósitos bentônicos, as discrepâncias entre os valores obtidos através de simulação e os respectivos dados experimentais se tornam ainda maiores quando utilizados coeficientes de dispersão baseados em modelos de turbulência. Isto ocorre porque o coeficiente de dispersão turbulento é fortemente dependente do valor local da componente principal de velocidade de escoamento do corpo hídrico. No caso específico do Lago Guaíba, o coeficiente de dispersão turbulenta sofre acréscimo significativo somente nas proximidades do canal de navegação. Entretanto, a análise da distribuição de concentração de fosfato ao longo de todo o corpo hídrico resulta relativamente uniforme. Isto indica que o coeficiente de dispersão possui um valor numérico também uniforme ao longo de toda a extensão do Lago, inclusive em regiões estagnadas, de modo que a redissolução e a propagação isotrópica de fosfato ocorre de forma semelhante em regiões de alta e baixa velocidade de escoamento.

Havendo sido excluída a hipótese de que o gradiente de concentração constitui a principal força motriz responsável pelo processo difusivo, e uma vez verificado que os modelos de turbulência não produzem coeficientes de dispersão compatíveis com os resultados experimentais obtidos para os parâmetros coliformes e fosfato, torna-se necessário identificar a origem dos efeitos hidrodinâmicos responsáveis pelo incremento do coeficiente de dispersão ao longo de toda a extensão do corpo hídrico.

Em campanhas de coletas realizadas pelo DMAE, desde maio de 1991 até o presente momento, foi constatado que a incidência de ventos provoca a formação de ondulações em toda a superfície desse lago. A amplitude, a frequência e o comprimento de onda dessas oscilações não variam significativamente entre os pontos de amostragem (cerca de 150, no total), mas apenas com a velocidade do vento. Assim, foi levantada a hipótese de que esse mecanismo advectivo em particular fosse o principal responsável pelo aumento considerável do coeficiente de dispersão, e também pelo caráter uniforme dessa amplificação.

#### 4.6 CÁLCULO DO COEFICIENTE DE DISPERSÃO POR OSCILAÇÃO SUPERFICIAL

A incidência de vento sobre a superfície de corpos hídricos produz zonas alternantes de alta e baixa pressão que provocam a formação de vagas, cujo formato se assemelha a calotas esféricas circundadas de depressões (ver figura 4.2). Ao contrário das frentes planas de onda, esse conjunto de calotas e depressões promove a homogeneização da concentração de poluentes através de uma transferência aproximadamente isotrópica de água a cada período de oscilação. Em outras palavras, cada vez que surge uma calota centrada em determinado ponto da superfície do corpo hídrico, existe um fluxo convergente de água transversal à superfície cilíndrica delimitada pelo perímetro da calota, que produz perturbações que se propagam até o leito do rio. De forma análoga, cada vez que surge uma depressão centrada em determinado ponto nas vizinhanças de uma calota, passa a existir um fluxo divergente de água transversal à superfície cilíndrica delimitada pelo perímetro dessa depressão, que igualmente produz perturbações, as quais também propagam até o leito do rio.

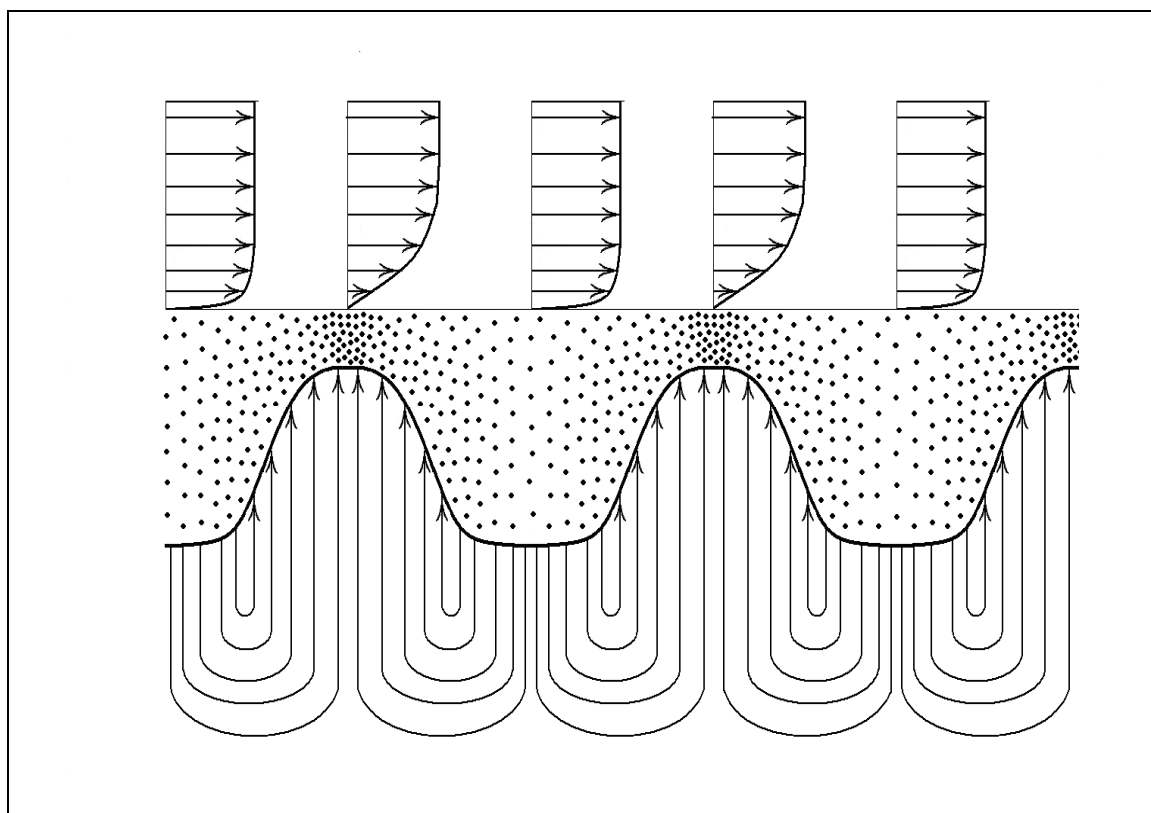


Figura 4.2 – Esquema ilustrativo do processo de formação de ondulações superficiais a partir da incidência de ventos sobre a superfície do corpo hídrico

Essas perturbações consistem em estruturas de vórtices cujo detalhamento é mostrado na figura abaixo.

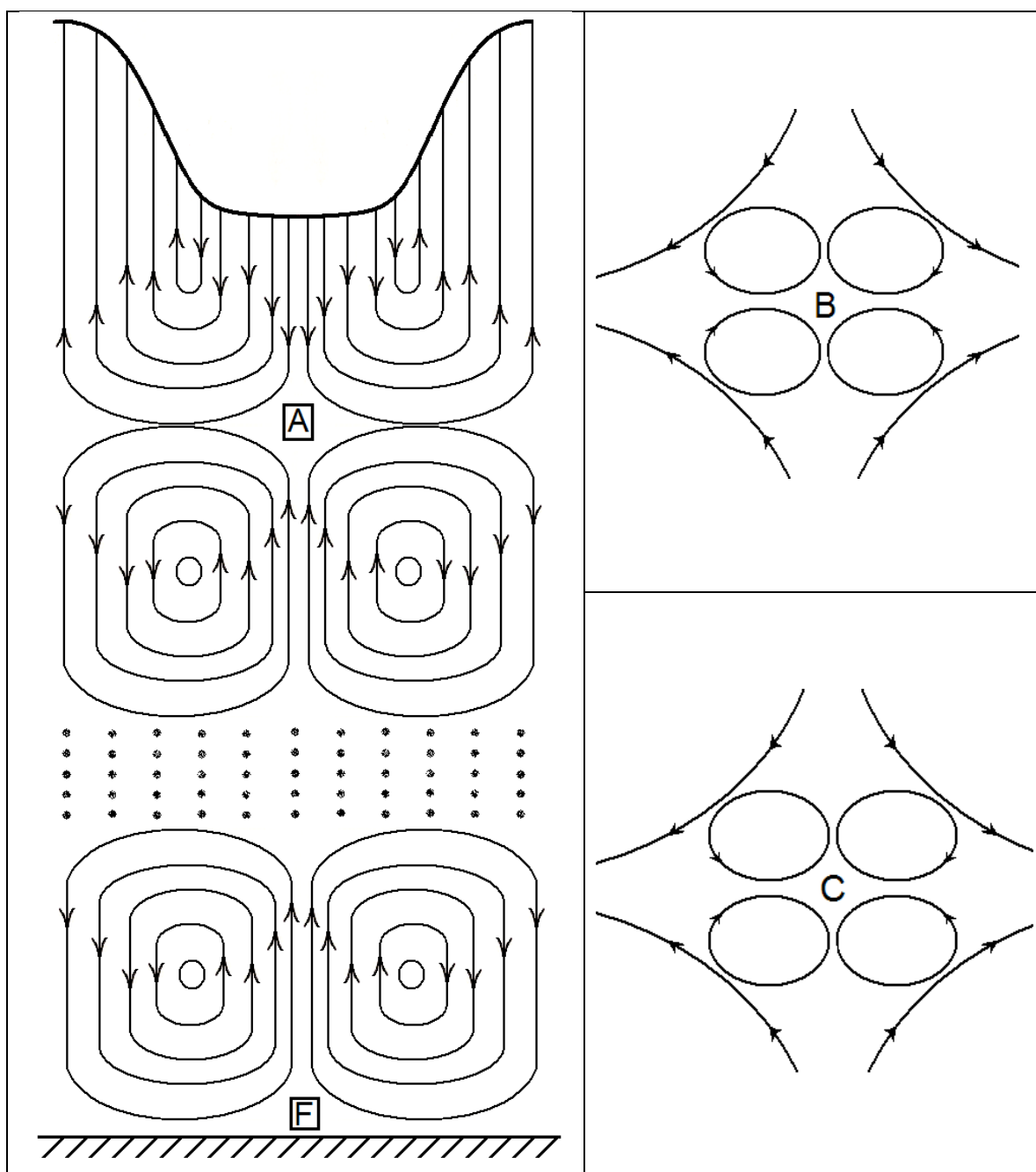


Figura 4.3 – Esquema ilustrativo do processo de circulação da água - formação e dissipação de vórtices

Uma ampliação da região indicada pela letra A, na ilustração maior à esquerda, é mostrada esquematicamente na ilustração superior à direita. Observa-se que os grandes vórtices que circundam a região A produzem pequenos vórtices de

orientação inversa, conciliando os movimentos de rotação nesta região intersticial. Entretanto, esses pequenos vórtices também delimitam novas regiões intersticiais, em menor escala, tais como a região indicada pela letra B. Uma ampliação desta última região é mostrada na porção inferior à direita. Nesta figura, os pequenos vórtices mostrados na região B produzem vórtices ainda menores, cuja orientação é inversa, de forma análoga ao que ocorre na região A. Esse processo se propaga até a escala molecular, de forma semelhante ao desenvolvimento das esteiras de vórtice produzidas a jusante de corpos submersos.

Uma vez formada a calota, as forças restauradoras (gravitacionais) a transformam gradualmente em uma depressão. Durante esse processo, o fluido é transferido isotropicamente para fora da superfície cilíndrica, produzindo um fluxo divergente, conforme ilustrado na Figura 4.4.

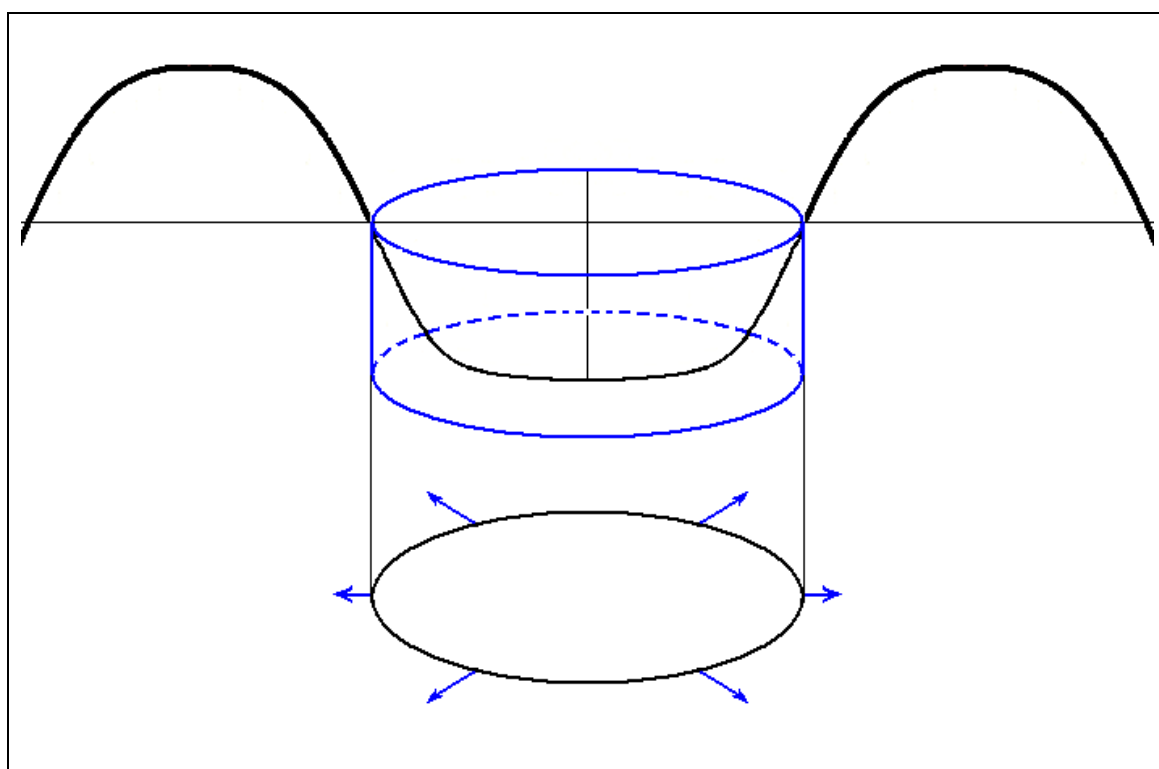


Figura 4.4 – Fluxo de água através da casca cilíndrica que delimita uma depressão

Esse processo, que descreve a oscilação superficial do corpo hídrico nas vizinhanças de cada ponto considerado, produz um aumento considerável no coeficiente de difusão em escala geográfica. A exemplo do procedimento utilizado para estimar a difusividade turbulenta, é possível calcular um coeficiente de difusão associado à



contribuição dos fluxos transversais produzidos pelo fenômeno da oscilação superficial. Será demonstrado a seguir que, para corpos hídricos de baixa profundidade (águas rasas), a contribuição das oscilações superficiais para o coeficiente de difusão é, em geral, uma ordem de grandeza superior ao coeficiente de difusão turbulento.

#### 4.7. DETERMINAÇÃO DO FORMATO DAS VAGAS UTILIZANDO A EQUAÇÃO KdV

Em 1895, Diederik Johannes Korteweg e Gustav de Vries [Kortweg e de Vries, 1895] propuseram um modelo de ondas de gravidade efetuando algumas simplificações sobre as equações de Navier-Stokes (ver anexo I). Este modelo, denominado equação KdV [Whitam, 1974; Jager, 2006], válido para águas rasas, é dado em coordenadas cilíndricas [Polyanin e Zaitsev, 2004] por:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = 6.u.\frac{\partial u}{\partial r} - \frac{\partial^3 u}{\partial r^3} - \frac{u}{2.t} \quad (4.76)$$

Ao contrário dos procedimentos usuais para a resolução da equação KdV, baseados no método do espalhamento inverso, será utilizado um método analítico que emprega mapeamentos entre equações diferenciais a fim de obter soluções exatas para alguns cenários de interesse. A equação (4.76) será resolvida através do método generalizado de separação de variáveis [Polyanin, 2004]. Fazendo a substituição

$$u(r,t) = a(r).b(t) \quad (4.77)$$

na equação KdV, resulta:

$$a.\frac{db}{dt} = 6.a.b^2.\frac{da}{dr} - b.\frac{d^3 a}{dr^3} - \frac{a.b}{2.t} \quad (4.78)$$

Dividindo ambos os membros por a.b e reagrupando termos, obtém-se:

$$\frac{1}{b} \cdot \frac{db}{dt} + \frac{1}{2t} = 6b \cdot \frac{da}{dr} - \frac{1}{a} \cdot \frac{d^3a}{dr^3} \quad (4.79)$$

Note-se que a separação de variáveis foi incompleta, uma vez que a primeira parcela do membro direito da equação contém uma função que depende de ambas as variáveis. Entretanto, torna-se possível prosseguir no processo de separação, desde que seja efetuada a derivação em uma das variáveis independentes. Derivando em relação a r, resulta:

$$6b \cdot \frac{d^2a}{dr^2} = \frac{1}{a^2} \cdot \left( a \cdot \frac{d^4a}{dr^4} - \frac{da}{dr} \cdot \frac{d^3a}{dr^3} \right) \quad (4.80)$$

Dividindo por  $\frac{d^2a}{dr^2}$ , obtêm-se:

$$6b = C_1 = \frac{a \cdot \frac{d^4a}{dr^4} - \frac{da}{dr} \cdot \frac{d^3a}{dr^3}}{a^2 \cdot \frac{d^2a}{dr^2}} \quad (4.81)$$

Observa-se que essa separação fornece b(t) igual a constante. Essa particularização não constitui uma restrição significativa para a aplicação desejada, que consiste em obter o formato da calota que forma a vaga da superfície do rio. Assim, somente a parte espacial da solução será utilizada no cálculo do coeficiente de difusão. A parte espacial, por sua vez, consiste na solução da equação

$$C_1 \cdot \frac{d^2a}{dr^2} = \frac{d \left( \frac{1}{a} \cdot \frac{d^3a}{dr^3} \right)}{dr} \quad (4.82)$$

obtida reescrevendo o membro direito de (4.82) como uma derivada de produto. A equação expressa nessa forma pode sofrer redução de ordem por integração direta:

$$C_1 \cdot \frac{da}{dr} = \frac{1}{a} \cdot \frac{d^3 a}{dr^3} + C_2 \quad (4.83)$$

Isolando a derivada de mais alta ordem, resulta:

$$\frac{d^3 a}{dr^3} = C_1 \cdot a \cdot \frac{da}{dr} + C_2 \cdot a \quad (4.84)$$

Esta equação diferencial ordinária não-linear pode ser mapeada em uma equação parcial linear de primeira ordem, sem que nenhuma aproximação seja efetuada.

Para tanto, basta criar uma função  $f\left(a, r, \frac{da}{dr}, \frac{d^2 a}{dr^2}\right)$  que possui a seguinte propriedade:

suas isolinhas coincidem com a família de curvas que representa o conjunto de soluções da equação diferencial ordinária. A figura 4.5 ilustra essa situação para uma função com menor número de argumentos.

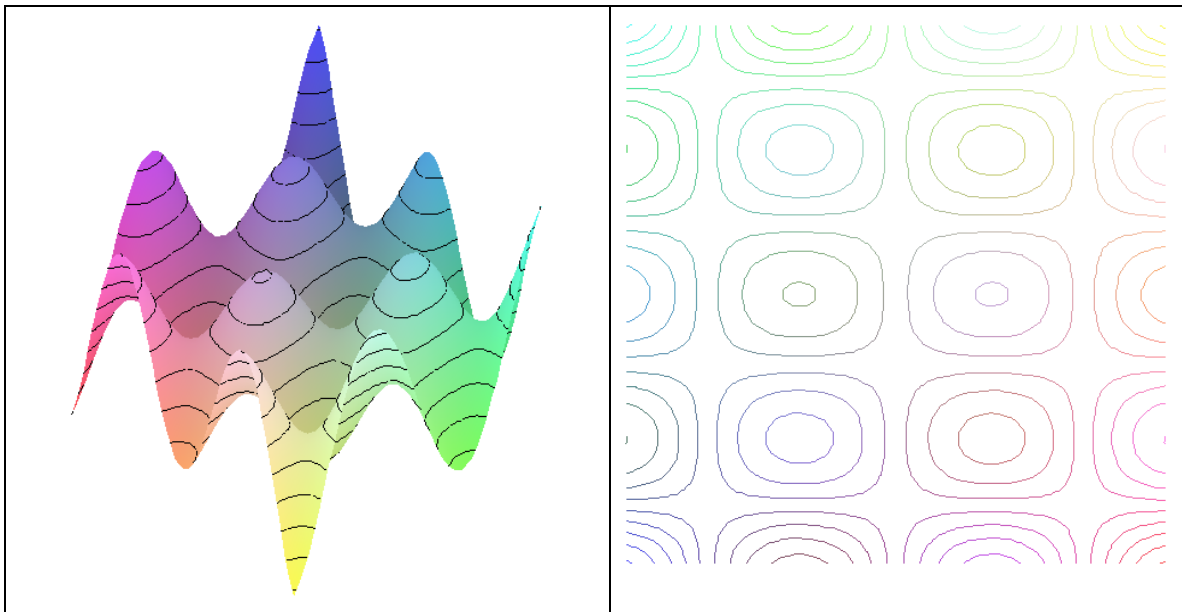


Figura 4.5 – Gráfico tridimensional de uma função de duas variáveis e suas respectivas curvas de nível

Essa condição equivale a exigir que a derivada material da função  $f$  em relação a  $r$  seja nula, isto é,

$$\frac{\partial f}{\partial r} + a' \cdot \frac{\partial f}{\partial a} + a'' \cdot \frac{\partial f}{\partial a'} + a''' \cdot \frac{\partial f}{\partial a''} = 0 \quad (4.85)$$

Nessa equação a notação utilizando linhas foi empregada por uma questão de simplicidade. Lembrando que a derivada terceira da função  $a$  é expressa em termos das demais parcelas através da equação (4.84), a equação (4.85) torna-se:

$$\frac{\partial f}{\partial r} + a' \cdot \frac{\partial f}{\partial a} + a'' \cdot \frac{\partial f}{\partial a'} + a \cdot (C_1 \cdot a' + C_2) \cdot \frac{\partial f}{\partial a''} = 0 \quad (4.86)$$

Essa equação pode ser resolvida diretamente utilizando o método das características. As equações características resultantes são dadas por:

$$dr = \frac{da'}{a''} \quad (4.87)$$

$$dr = \frac{da''}{a \cdot (C_1 \cdot a' + C_2)} \quad (4.88)$$

$$\frac{da'}{a''} = \frac{da''}{a \cdot (C_1 \cdot a' + C_2)} \quad (4.89)$$

Resolvendo as equações (4.87) a (4.89), sucessivamente, resultam as seguintes equações:

$$a'' \cdot r - a' - C_3 = 0 \quad (4.90)$$

$$C_4 - a \cdot (C_1 \cdot a' + C_2) \cdot r + a'' = 0 \quad (4.91)$$

$$C_5 - \frac{(a'')^2}{2} + a \cdot \left( \frac{C_1 \cdot (a')^2}{2} + C_2 \cdot a' \right) = 0 \quad (4.92)$$

Isolando  $a''$  na equação (4.90) obtém-se:

$$a'' = -C_4 + a.(C_1.a' + C_2).r \quad (4.93)$$

Substituindo a expressão obtida nas expressões (4.91) e (4.92), resulta:

$$C_3 - (C_4 + a.(C_1.a' + C_2).r).r + a' = 0 \quad (4.94)$$

$$C_5 - \frac{(-C_4 + a.(C_1.a' + C_2).r)^2}{2} + a.\left(\frac{C_1.(a')^2}{2} + C_2.a'\right) = 0 \quad (4.95)$$

Isolando  $a'$  na equação (4.94) e substituindo o resultado em (4.95) vem:

$$-a^2.r^2.C_2^2 + 2.C_5.a.r^2.C_1 - a.C_1.C_3^2 + 2.a.C_2.C_3 - 2.C_5 + C_4^2 = 0 \quad (4.96)$$

Essa equação fornece uma solução implícita para  $a(r)$ , que pode ser tornada explícita fazendo  $C_2$  igual a zero:

$$a(r) = -\frac{-2.C_5 + C_4^2}{C_1.(2.C_5.r^2 - C_3^2)} \quad (4.97)$$

Uma vez que a função é par, satisfaz identicamente a condição de derivada nula na origem. Os extremos da calota são delimitados pelos seus respectivos pontos de inflexão (ver figura 4.6). Inicialmente, especifica-se a amplitude máxima da vaga (0,05m), situada sobre o ponto de raio nulo:

$$a(0) = 0,05 + h = +\frac{-2.C_5 + C_4^2}{C_1.C_3^2} \quad (4.98)$$

Isolando a constante  $C_5$  e substituindo em (4.97):

$$a(r) = -\frac{-0,05.C_3.C_1^2 + h.C_3^2.C_1}{C_1.(2.(0,5.C_4^2 - 0,025.C_3^2.C_1 - 0,5.h.C_3^2.C_1).r^2 - C_3^2)} \quad (4.99)$$

Na extremidade da calota, no ponto correspondente ao raio máximo (0,5m), a amplitude da vaga é nula, logo:

$$a(0,5) = h = -\frac{-0,05.C_3.C_1^2 + h.C_3^2.C_1}{C_1.(0,25.C_4^2 - 0,0125.C_3^2.C_1 - 0,25.h.C_3^2.C_1 - C_3^2)} \quad (4.100)$$

Isolando a constante  $C_1$  na expressão obtida e substituindo na equação (4.99):

$$a(r) = \frac{0,25.h.(1 + 20.h)}{r^2 + 5.h} \quad (4.101)$$

Aplicando a condição de inflexão nos extremos da calota, que corresponde à derivada segunda nula da função  $a(r)$  em  $r$  igual a 0,5m:

$$\left. \frac{d^2 a}{dr^2} \right|_{r=0,5} = 0 \quad \rightarrow \quad a(r) = \frac{0,15}{r^2 + 0,75} \quad (4.102)$$

A partir da função que descreve a amplitude da calota, será obtida uma estimativa para o coeficiente de difusão. Para isso, é necessário calcular o volume do sólido de revolução produzido a partir da função  $a(r)$ , no intervalo  $0 < r < 0,5$ . O volume de água transferido durante o período no qual uma calota se converte numa depressão, correspondente ao dobro do volume do respectivo sólido de revolução, é dado por:

$$V = 4.\pi.\int_0^{r_0} r.[f(r) - h].dr = 0,0355 \text{ m}^3 \quad (4.103)$$

Esse volume é então dividido pela área da superfície cilíndrica mostrada na figura 4.3 e pelo período de oscilação da vaga considerada. Este período foi estimado

em campanhas de coleta realizadas a partir de maio de 1991, em diversos pontos do Lago Guaíba, e equivale a cerca de 1 segundo. Assim, é obtida uma velocidade média correspondente ao fluxo induzido pela oscilação superficial:

$$u = \frac{V}{A.t} = \frac{V}{2.\pi.r_0.h.t} = 0,226 \text{ m/s} \quad (4.104)$$

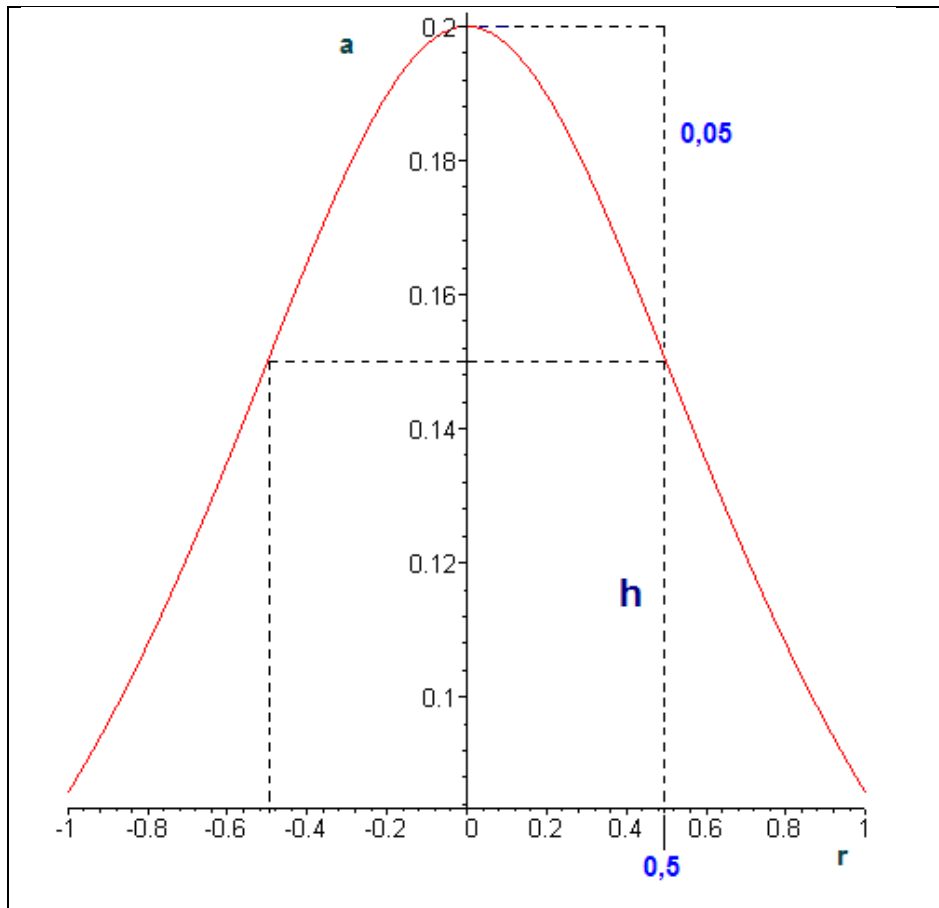


Figura 4.6 – Gráfico da função  $a(r)$  que descreve o perfil da vaga no intervalo  $-0.5 < r < 0.5$ .

A partir do valor da velocidade média, utiliza-se a Lei de Fick para avaliar o coeficiente de difusão correspondente:

$$j = (u - u_0).C = D.\frac{dC}{dr} \quad (4.105)$$

Nessa equação, o fator multiplicativo da concentração que figura no membro esquerdo é tomado como a própria velocidade  $u$ , pelo fato de haver sido escolhida como velocidade de referência  $u_0 = 0$ . Tomando uma concentração de referência  $C_0$  dentro do volume cilíndrico e assumindo uma concentração nula nas vizinhanças, obtém-se:

$$\frac{dC}{dr} ; \frac{C_0 - 0}{2.r_0} = \frac{C_0}{2.0,5} = C_0 \quad (4.106)$$

Nesta equação, o incremento  $dr$  é tomado como sendo igual à distância entre o centro de uma depressão e o centro de uma calota adjacente. Substituindo o resultado obtido na equação (4.96), vem:

$$u.C_0 ; D.C_0 \quad (4.107)$$

Assim, o valor numérico do coeficiente de difusão resulta igual ao da velocidade induzida pela oscilação superficial, ou seja:

$$D = 0,23 \text{ m}^2/\text{s} \quad (4.108)$$

Uma segunda estimativa para o coeficiente de difusão pode ser obtida através de sua definição em Mecânica Estatística [Reichl, 1980]:

$$D ; \frac{l^2}{2.\tau} \quad (4.109)$$

Nessa equação,  $l$  representa o percurso livre médio de um elemento de volume fictício, e  $\tau$  o período entre duas colisões sucessivas. Este modelo considera que, em escala geográfica, as ondulações superficiais se comportam como partículas infinitesimais. Caso fosse aplicado sobre esse conjunto de partículas um modelo colisional, o respectivo percurso livre médio seria da ordem do próprio raio das vagas, sendo que o



período entre duas colisões sucessivas seria dado pelo próprio período de oscilação, durante o qual uma calota se converte em uma depressão.

Esse argumento pode ser elucidado lançando mão da seguinte analogia: ao observar o comportamento da torcida em um estádio de futebol durante a execução de uma "ola", surgem imediatamente dois pontos de vista aparentemente distintos quanto à descrição geométrica do fenômeno. O primeiro, relativo a um observador situado junto à torcida, descreve o movimento individual de cada torcedor ao sentar e levantar em sincronismo parcial com seus vizinhos mais próximos. Esse ponto de vista corresponde ao modelo de oscilação de superfície, tomado em uma escala de observação compatível com o tamanho das calotas. O segundo, relativo a um observador situado a uma distância razoável da torcida, descreve o movimento aparente de um sóliton ou de um trem de ondas, dependendo da frequência e da defasagem do movimento oscilatório. Esse ponto de vista diz respeito ao modelo em escala geográfica. Nesse modelo, o percurso livre médio é da ordem de  $r_0$  (0,5 metros) e o período entre duas colisões sucessivas é a metade do período de oscilação das vagas formadas na superfície (0,5 segundos). Assim, o coeficiente estimado através da equação (4.100) resulta

$$D ; \frac{(0,5 \text{ m})^2}{2 \cdot 0,5 \text{ s}} = 0,25 \text{ m}^2/\text{s} \quad (4.110)$$

No trabalho proposto foi adotado como coeficiente de difusão um valor intermediário entre a estimativa fornecida pelo modelo baseado na equação KdV e o valor obtido a partir da Mecânica Estatística. Assim, foi escolhido D igual a 0,24 m<sup>2</sup>/s como valor numérico para o coeficiente de difusão ao longo de toda a extensão do Lago Guaíba. Esse valor é compatível com medições efetuadas ao longo do Lago Guaíba em campanha realizada pelo DMAE no período de novembro de 1990 a maio de 1991. Durante essa campanha foram realizados experimentos que consistiam no despejo de corantes e na subsequente medição da taxa de variação temporal da área delimitada pela frente de propagação desse traçador em diversos locais do corpo hídrico.

## 5. RESULTADOS

O método proposto foi empregado na simulação de cenários de dispersão dos componentes nitrogênio total, fósforo total e coliformes, na região correspondente ao Lago Guaíba e Delta do Jacuí. A figura 5.1 ilustra a área objeto de estudo e destaca o canal de navegação, cujo esboço da respectiva linha central é definido pela linha traçada em vermelho.

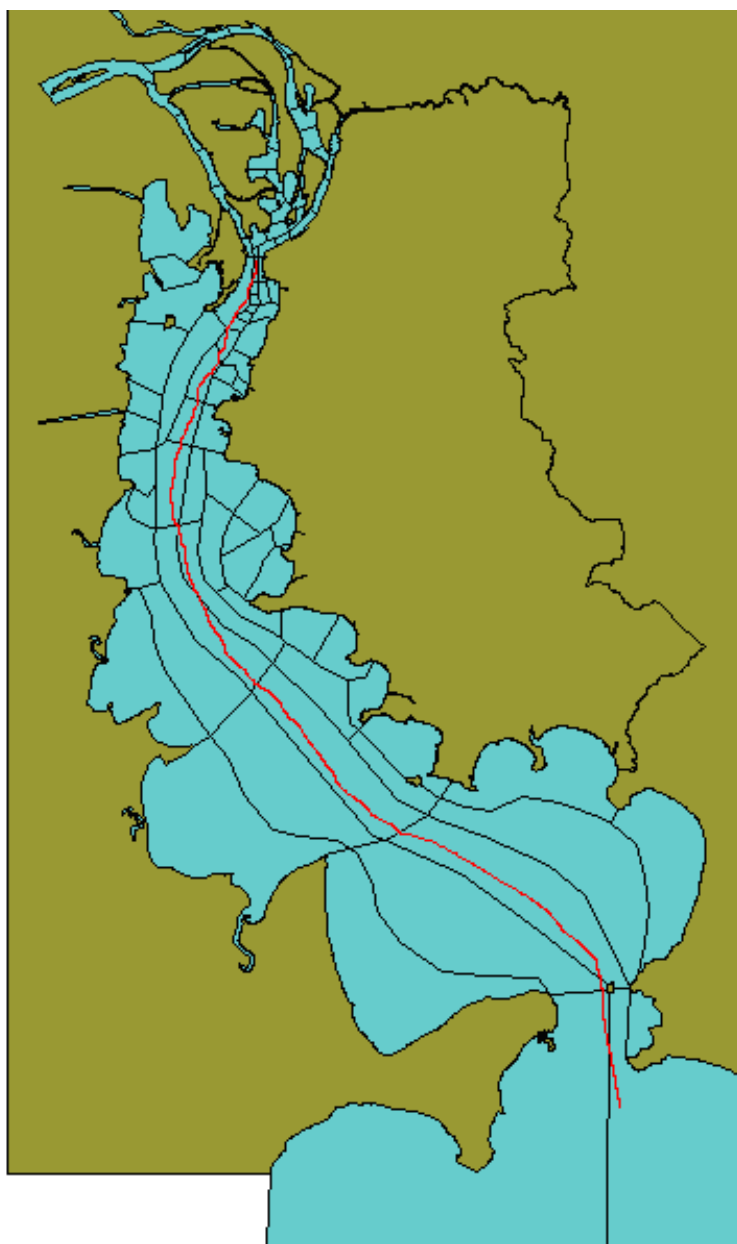
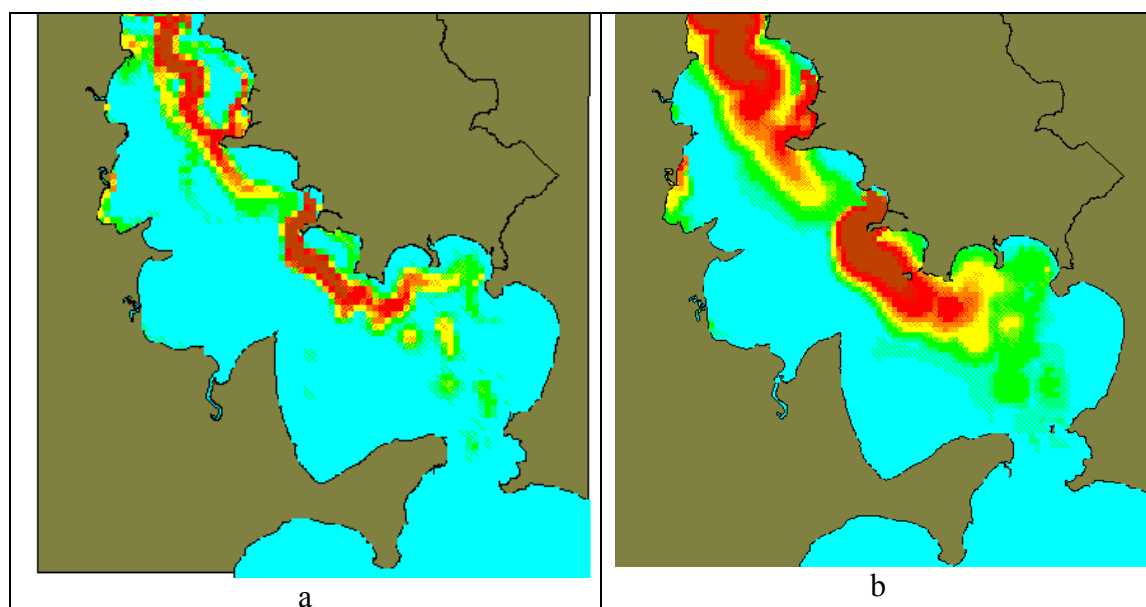


Figura 5.1 – Mapa do Lago Guaíba, com destaque para o canal de navegação.

Os resultados numéricos obtidos para os valores de concentração de parâmetros de qualidade de água foram confrontados com dados experimentais mensurados em campanhas de coleta realizadas pelo Departamento Municipal de Água e Esgotos (DMAE). Os resultados apresentaram discrepâncias aceitáveis em relação aos dados de campo, da ordem do desvio verificado entre os próprios dados experimentais. Os cenários simulados e os resultados obtidos para cada um dos três parâmetros de qualidade da água são apresentados a seguir.

### 5.1. CONCENTRAÇÕES DE COLIFORMES

A figura 5.2 mostra a distribuição de coliformes fecais ao longo do Lago Guaíba e Delta do Jacuí, sendo que o mapa da esquerda corresponde a um valor de coeficiente de dispersão longitudinal baixo ( $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ ), da ordem de grandeza dos valores empregados em outros trabalhos de engenharia ambiental, e o outro mapa ilustra o cenário associado ao valor de  $D$  obtido conforme metodologia descrita no capítulo 4 ( $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ ).



Legenda: Coliforme (organismos/100ml)







	Até 200		Entre 200 e 1000		Entre 1000 e 4000
	Entre 4000 e 10000		Entre 10000 e 50000		Acima de 50000

Figura 5.2 – Distribuição de concentração de coliformes no Lago Guaíba para diferentes valores de  $D$ : (a)  $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ , (b)  $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ .

Inicialmente cabe destacar que a área correspondente à faixa de concentração mínima de coliformes (de cor azul) é significativamente maior no mapa da esquerda. Tal fato indica, aparentemente, que a utilização de um coeficiente de difusão menor implica numa menor presença de coliformes no corpo hídrico. Contudo, tal afirmação não corresponde à realidade dos fatos, pois, embora as áreas de concentração elevada de coliformes (demais cores, à exceção do azul) sejam proporcionalmente maiores no mapa da esquerda; as áreas de máxima concentração de coliformes (cor marrom) apresentam nesse mapa valores mais elevados que aqueles correspondentes às áreas de mesma cor no mapa da direita<sup>9</sup>. Assim, é possível concluir que a utilização de um valor de  $D$  mais baixo resulta num cenário em que há uma menor dispersão transversal de poluentes no corpo hídrico como um todo e uma concentração mais elevada de poluentes em áreas específicas.

O alcance da pluma de poluentes, transversalmente ao escoamento do Lago Guaíba, ou seja, na direção leste-oeste, é maior nas imediações da Avenida Diário de Notícias, que corresponde ao do topo da figura 5.2. Na respectiva seção transversal, no cenário correspondente ao valor de  $D$  mais elevado, a concentração de coliformes se situa praticamente na faixa superior (ou máxima), inclusive junto às margens. Esse ponto marca o início da região do Guaíba de maior interesse no que diz respeito ao turismo. Esse interesse se refere à preocupação com a balneabilidade da orla da zona sul de Porto Alegre. A condição de balneabilidade pode ser alcançada tomando medidas relativas ao tratamento ou realocação de cargas, como será mostrado em seções posteriores.

Os resultados obtidos concordam qualitativamente com os valores medidos em campanha pelo DMAE. A exemplo do trabalho de Fernandez (2008), a principal causa de erro decorre do fato do cenário simulado ser tipicamente bidimensional, o que provoca o surgimento de desvios associados a discrepâncias locais entre os campos de velocidade calculado e real. Conseqüentemente, a trajetória da linha central de propagação da carga passa por pontos ligeiramente distintos dos amostrados originalmente para fins de comparação. Assim, um deslocamento na direção transversal à linha de fluxo pode eventualmente minimizar o desvio entre os valores estimado e experimental. Como exemplo, nas proximidades do canal de navegação, local onde os

---

<sup>9</sup> Tal aspecto não pode ser visualizado na figura correspondente pois a faixa de concentração máxima de coliformes, ou qualquer outro poluente, não possui um limite superior.

desvios relativos entre o dado experimental e o valor calculado pode chegar a 100%, um pequeno deslocamento da solução obtida na direção transversal à linha de fluxo pode reduzir esse erro relativo à cerca de 5%. Por essa razão, os mapas de concentração relativos aos dados experimentais não foram apresentados: esse efeito os torna indistinguíveis dos mapas de concentração obtidos através das simulações efetuadas neste trabalho.

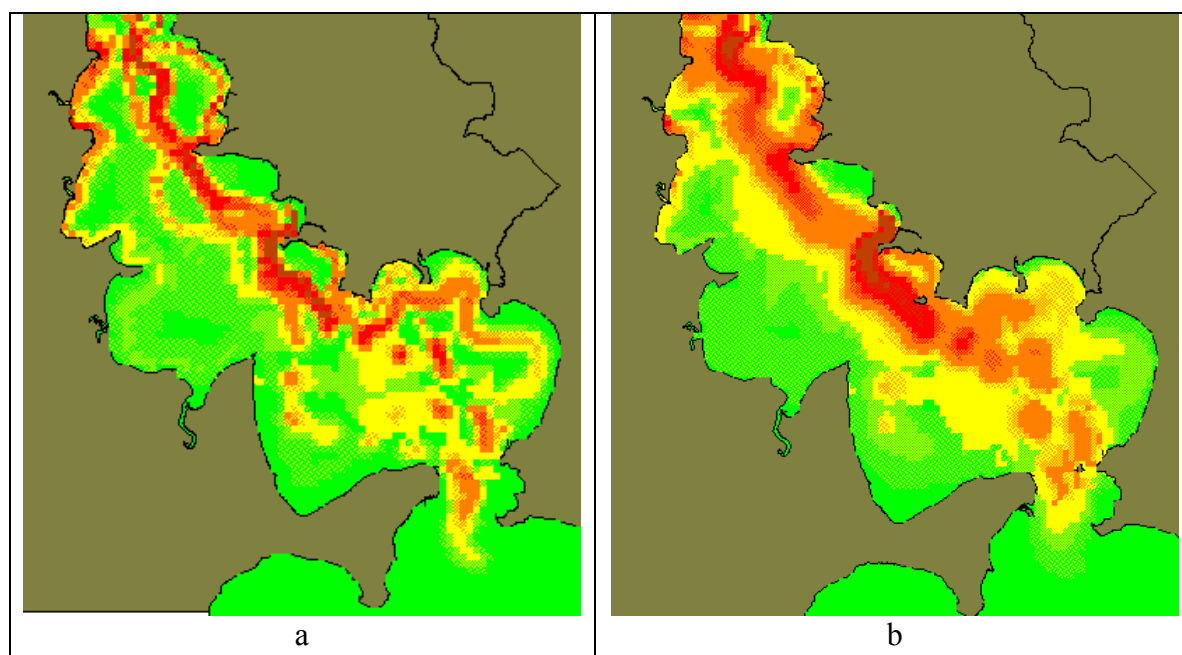
Uma análise da distribuição de concentrações na região situada a jusante do Lago Guaíba ilustra o potencial de depuração desse corpo hídrico. De fato, percebe-se claramente que na zona que define a interface entre o Lago Guaíba e a Lagoa dos Patos a concentração de coliformes já situa-se na faixa mínima. Isto permite caracterizar o Lago Guaíba como uma lagoa de estabilização, uma vez que se trata de corpo hídrico essencialmente estagnado, isto é, que proporciona alto período de residência para as cargas que nele são despejadas.

Essa característica do corpo hídrico permite que a simples realocação de cargas reduza consideravelmente a concentração de coliformes em alguns pontos estratégicos, o que justifica plenamente a utilização de sistemas de simulação com o objetivo de minimizar custos relativos à implantação de obras de saneamento básico

## **5.2. CONCENTRAÇÕES DE FOSFATO**

A Figura 5.3 mostra a distribuição de fosfato ao longo do Lago Guaíba e Delta do Jacuí, sendo que o mapa da esquerda corresponde a um valor de coeficiente de dispersão longitudinal (  $D$  ) baixo, e o outro mapa ilustra o cenário associado ao valor de  $D$  obtido conforme metodologia descrita no capítulo 4.

Inicialmente cabe destacar que não há, em nenhum dos mapas, áreas onde a faixa de concentração de fosfato é mínima (cor azul). Além disso, é possível verificar que, embora o mapa da esquerda corresponda a um cenário de menor dispersão de poluentes, a diferença entre os dois mapas, para o parâmetro fosfato, não é tão significativa como aquela verificada quando se simula o perfil de concentrações de coliformes. No caso do parâmetro fosfato, a distribuição de concentrações resulta relativamente uniforme, em parte, pelo fato de ocorrer a redissolução de sedimento a partir de depósitos distribuídos homogeneamente no leito do lago. Esses depósitos se originam pela precipitação da matéria orgânica contida no esgoto doméstico, acumulado durante décadas de aporte de efluentes no Lago Guaíba.



Legenda: Fosfato (mg/L)







	Até 0,08		Entre 0,08 e 1		Entre 1 e 2
	Entre 2 e 5		Entre 5 e 10		Acima de 10

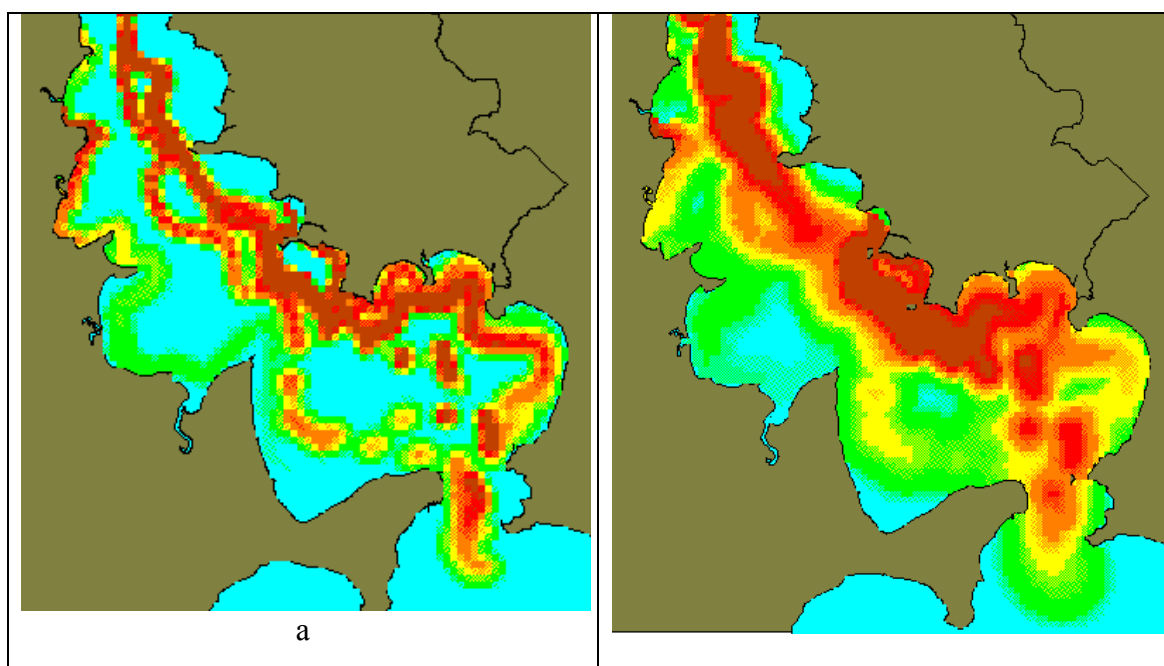
Figura 5.3 – Distribuição de concentração de fosfato na região do Lago Guaíba para diferentes valores de D: (a)  $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ , (b)  $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ .

### 5.3. CONCENTRAÇÕES DE NITROGÊNIO

A Figura 5.4 mostra a distribuição de nitrogênio ao longo do Lago Guaíba e Delta do Jacuí, sendo que o mapa da esquerda corresponde a um valor de coeficiente de dispersão longitudinal ( $D$ ) baixo, e o outro mapa ilustra o cenário associado ao valor de  $D$  obtido conforme metodologia descrita na seção 4.7.

Nessa figura constata-se uma diferença razoável entre os dois mapas apresentados, notadamente na porção mais central do Lago Guaíba, distanciada das duas margens. Contudo, nas zonas correspondentes à orla do Guaíba, o perfil de concentrações é similar nos dois casos, indicando que a adoção de um valor de  $D$  mais elevado não modifica de forma significativa a situação das praias no que diz respeito ao parâmetro nitrogênio total (levando em consideração a escala adotada para a rampa de cores).

No que diz respeito à diferença de dispersão de poluentes, quando se comparam os cenários correspondentes aos dois valores de  $D$ , nos mapas apresentados nas figuras 5.2, 5.3 e 5.4, é possível afirmar que o parâmetro nitrogênio situa-se numa posição intermediária entre o fosfato e o coliforme; sendo que, para este último, o emprego de um coeficiente de difusão mais elevado produz uma maior diferença nos cenários de dispersão. Isto acontece porque a amplitude do intervalo de variação dos valores numéricos do parâmetro coliforme é várias ordens de grandeza superior a amplitude de variação dos demais parâmetros.



Legenda: Nitrogênio (mg/L)







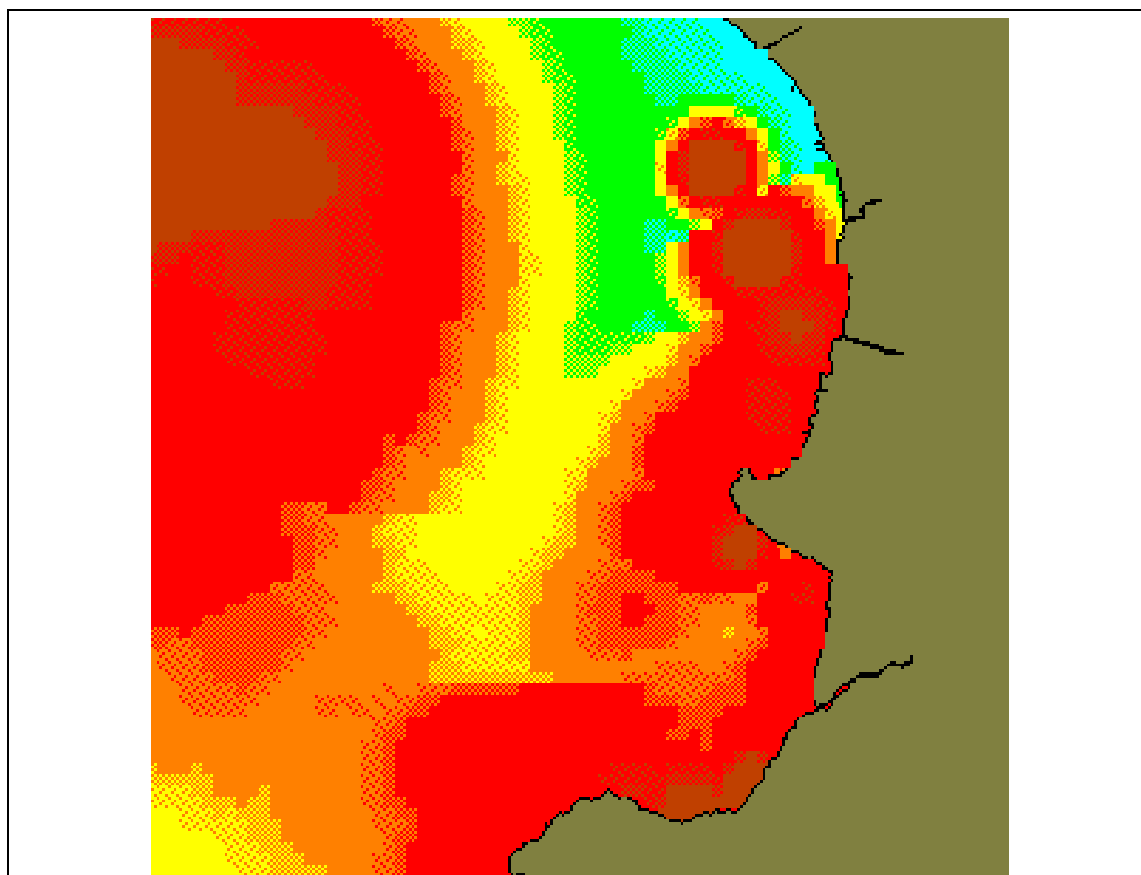
	Até 0,1		Entre 0,1 e 0,5		Entre 0,5 e 1
	Entre 1 e 2		Entre 2 e 3		Acima de 3

Figura 5.4 – Distribuição de concentração de nitrogênio no Lago Guaíba Guaíba para diferentes valores de  $D$ : (a)  $D = 0,03 \text{ m}^2/\text{s}$ , (b)  $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$ .

#### 5.4. IMPACTO AMBIENTAL EM LOCAIS DE MAIOR INTERESSE

Um dos principais objetivos do emprego de sistemas de simulação consiste na avaliação do impacto ambiental decorrente do lançamento de cargas de esgoto ao

longo das margens. Nesse caso, o interesse em estimar a concentração de poluentes se deve à preocupação com a balneabilidade de locais propícios à exploração do turismo. Um exemplo típico de local de interesse para fins de balneabilidade é a praia de Ipanema, cujo mapa de concentração local de coliformes fecais é apresentado na figura 5.5.



Legenda: Coliformes (organismos/100ml)







	Até 200		Entre 200 e 1000		Entre 1000 e 4000
	Entre 4000 e 10000		Entre 10000 e 50000		Acima de 50000

Figura 5.5 – Distribuição de concentração de coliformes na região de Ipanema

A princípio, seria de se esperar que as cargas locais de esgoto cloacal fossem responsáveis pela poluição da baía de Ipanema, de modo que haveria interesse no tratamento dessas cargas, bem como na construção de emissários que despejassem esses



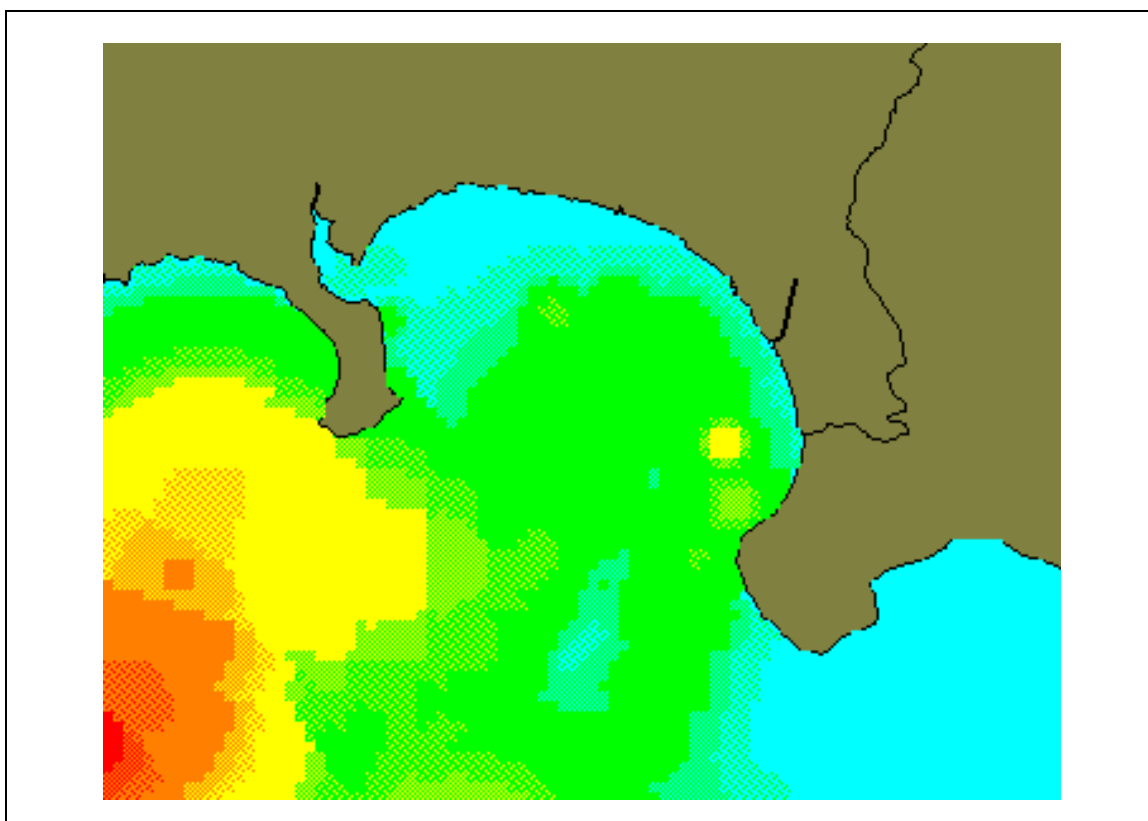
efluentes longe da orla, a fim de possibilitar a balneabilidade local. Entretanto, simulações com cargas isoladas mostram que a maior parte das despejos que atingem as imediações dessa baía são oriundas da região central de Porto Alegre, especialmente dos arroios Dilúvio e Cavallhada e do Cais número 4 da Avenida Mauá. Seria, portanto, necessário efetuar o tratamento desses dois despejos para obter efetivamente uma condição sanitária compatível com os limites especificados pela Resolução 357/05 do CONAMA. Esta resolução estabelece que as águas próprias para banho devem estar enquadradas na classe 2, que corresponde a um limite superior de 1000 organismos por 100 mL de água.

A aplicação mencionada justifica plenamente o uso de sistemas de simulação para avaliação de impacto ambiental. Caso não fosse conhecido o campo de velocidades ao longo de toda a extensão do Lago Guaíba, não seria possível identificar a presença de poluentes na baía de Ipanema como influência tipicamente não-local. Situações dessa natureza ocorrem em corpos hídricos que contém canais de escoamento rápido, cercado por regiões onde o escoamento é relativamente lento. No caso específico do Lago Guaíba, a via de escoamento rápido consiste no canal de navegação, enquanto a região de escoamento lento corresponde à baía de Ipanema (ou áreas das margens).

Um segundo exemplo de influência não-local ocorre nas vizinhanças da região do Lami, mostrada na figura 5.6. Essa região possui um número relativamente baixo de pontos de despejo, com cargas difusas de baixa vazão. Essas cargas não contribuem significativamente para a condição sanitária local. A exemplo do que ocorre na região de Ipanema, as principais contribuições que determinam a qualidade da água na orla do Lami são originárias de pontos de despejo localizados a montante, mais especificamente da região de Belém Novo.

Os exemplos mencionados ilustram a importância da utilização de sistemas de simulação no planejamento de obras de saneamento básico em perímetros urbanos. Caso esta ferramenta não estivesse disponível, poderiam ser desperdiçados recursos na construção de emissários cuja localização resultasse na deterioração da qualidade das águas em áreas mais críticas, tal como porções da região litorânea destinadas à recreação de contato primário. Além disso, poderiam ser empregadas grandes somas na construção de estações de tratamento de esgotos que poderiam resultar extremamente ineficientes, no sentido de purificar despejos já diluídos, de baixa vazão, ou cuja depuração natural pelo corpo hídrico proporcionaria uma redução na concentração dos poluentes similar àquela obtida através do processo de tratamento. Essa última situação

ocorre quando o potencial de auto-depuração de determinadas regiões do corpo hídrico é capaz de garantir a melhoria obtida com a ETE planejada, sem produzir efeitos deletérios significativos em locais estratégicos.



Legenda: Coliformes (organismos/100ml)







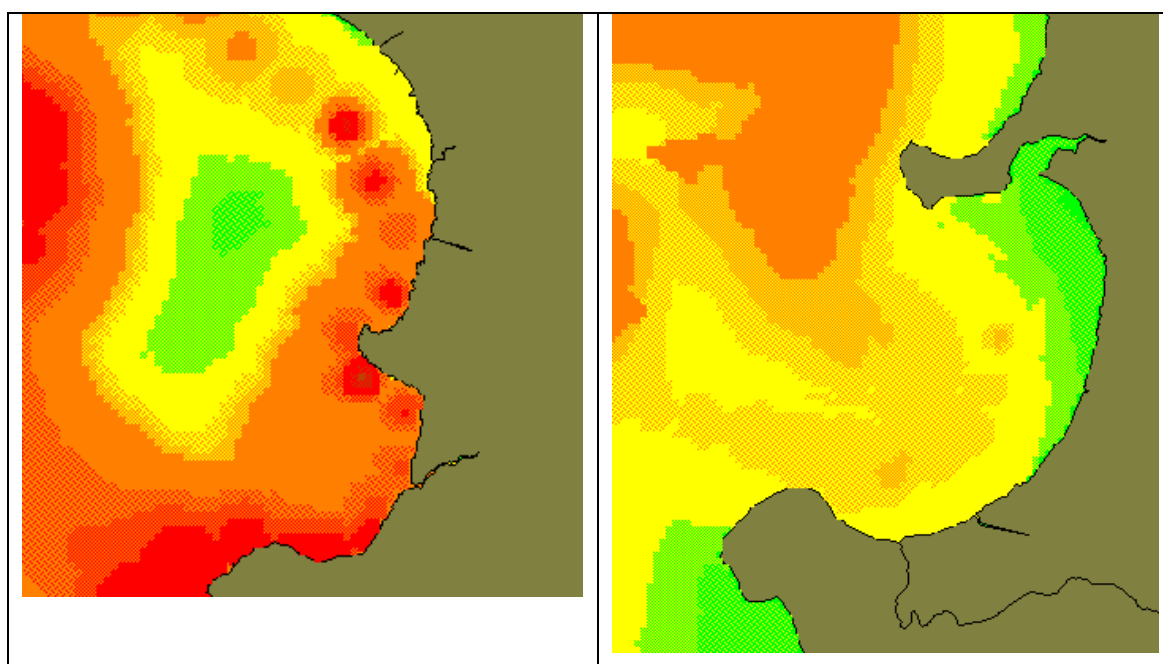
	Até 200		Entre 200 e 1000		Entre 1000 e 4000
	Entre 4000 e 10000		Entre 10000 e 50000		Acima de 50000

Figura 5.6 – Distribuição da concentração de coliformes na região do Lami.

Ao contrário dos coliformes, o parâmetro fosfato não é utilizado para análise de impacto ambiental relativo aos efeitos resultantes do despejo de esgotos domésticos, mas para identificar locais propensos à ocorrência da explosão populacional de algas em períodos de clima quente e seco. Esse fenômeno, também conhecido como "boom" de algas, é responsável pelo comprometimento no abastecimento de água para as populações ribeirinhas. Eventualmente, esse parâmetro pode também ser utilizado para localizar áreas rurais empregadas na agricultura devido a presença de fertilizantes do tipo N-P-K. Naturalmente, a identificação dessas áreas só pode ser efetuada quando a

densidade populacional local é relativamente baixa, e portanto não existe quantidade significativa de sedimentos oriundos de esgoto doméstico.

A figura 5.7 mostra as distribuições de concentração de fosfato nas vizinhanças das regiões de Ipanema e do Lami. A influência não-local, observada claramente nessas regiões para o parâmetro coliformes (vide Figuras 5.6 e 5.7), não é tão pronunciada quando se analisa a distribuição de concentrações de fosfato. Isto se deve ao fato de grande parte da carga lançada ser depositada ao longo do leito do corpo hídrico e, portanto, não atingir, de forma direta, locais relativamente distantes dos pontos de despejo. Além disso, os depósitos locais de fosfato, acumulados durante longos períodos de tempo, sofrem redissolução, contribuindo significativamente para a formação da distribuição local de concentrações.



Legenda: Fosfato (mg/L)







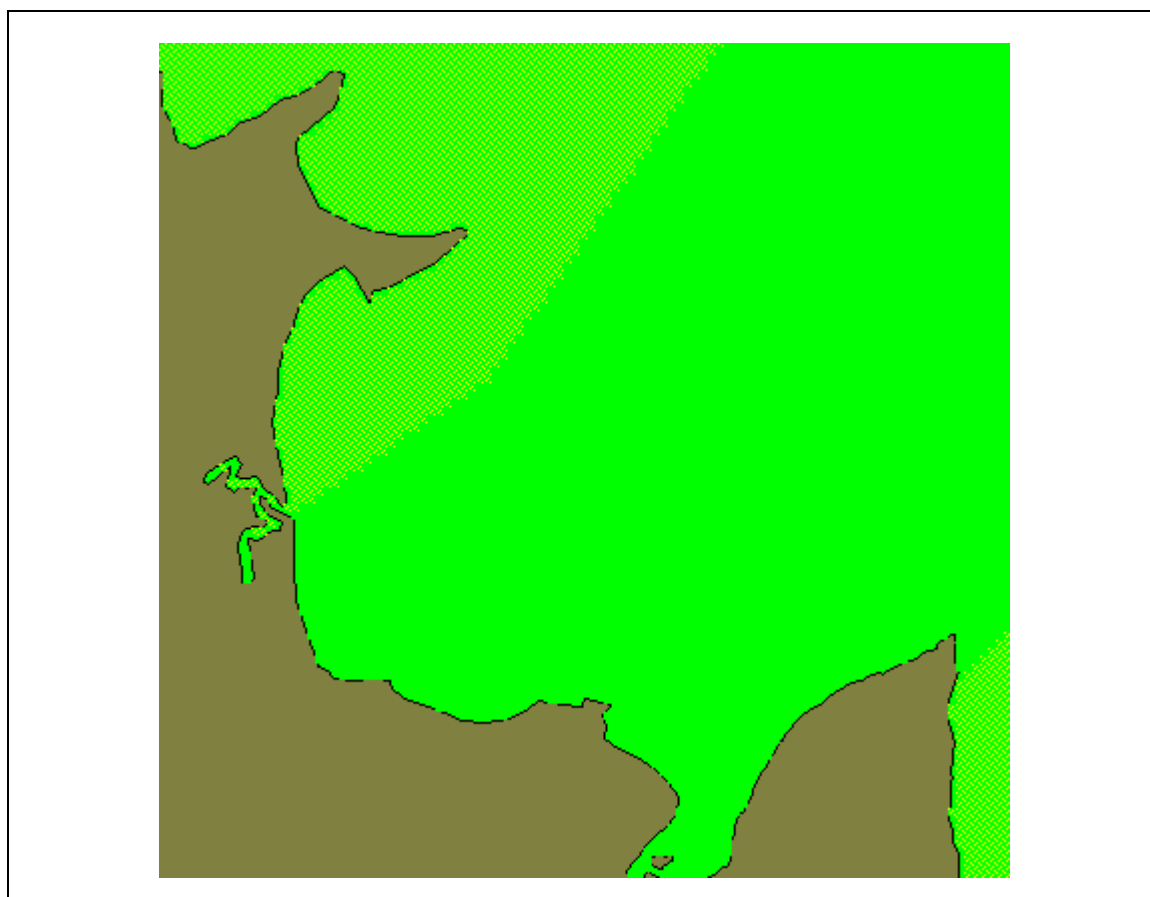
	Até 0,08		Entre 0,08 e 1		Entre 1 e 2
	Entre 2 e 5		Entre 5 e 10		Acima de 10

Figura 5.7 – Mapas com a distribuição de concentrações de fosfato nas regiões de Ipanema e Lami.

A redissolução do fosfato depositado no leito do Lago Guaíba se faz presente até mesmo em locais relativamente distantes dos pontos de despejo de cargas

importantes. Nesses locais, a dinâmica do processo de sedimentação e redissolução de fosfato, que ocorre continuamente ao longo de décadas, produz um perfil de concentrações de fosfato acima do esperado. Um exemplo típico é a região da Barra do Ribeiro, na margem oeste do Lago Guaíba, cujo perfil de distribuição da concentração de fosfato é apresentado na Figura 5.8. O mapa ali apresentado mostra uma região onde a concentração de fosfato é bastante homogênea.



Legenda: Fosfato (mg/L)







	Até 0,08		Entre 0,08 e 1		Entre 1 e 2
	Entre 2 e 5		Entre 5 e 10		Acima de 10

Figura 5.8 – Mapa com a distribuição de concentração de fosfato na Barra do Ribeiro.

O caráter difuso da distribuição de concentração de fósforo constitui um dos indícios que induzem a concluir que existe um mecanismo de transporte responsável pela amplificação do coeficiente de difusão no modelo proposto. Caso fosse

considerada apenas a contribuição da turbulência para o termo difusivo, a distribuição de concentrações de fosfato resultaria mais homogênea apenas junto aos locais nos quais o escoamento é rápido. Verifica-se, contudo, que, mesmo em regiões nas quais o meio é estagnado, a concentração de fosfato é significativa. Assim, conclui-se que a provável causa da uniformização da concentração de fosfato possa ser atribuída ao fenômeno da oscilação superficial. Essa é a razão pela qual foi utilizado um modelo baseado na equação KdV para estimar o coeficiente de difusão adotado no modelo proposto.

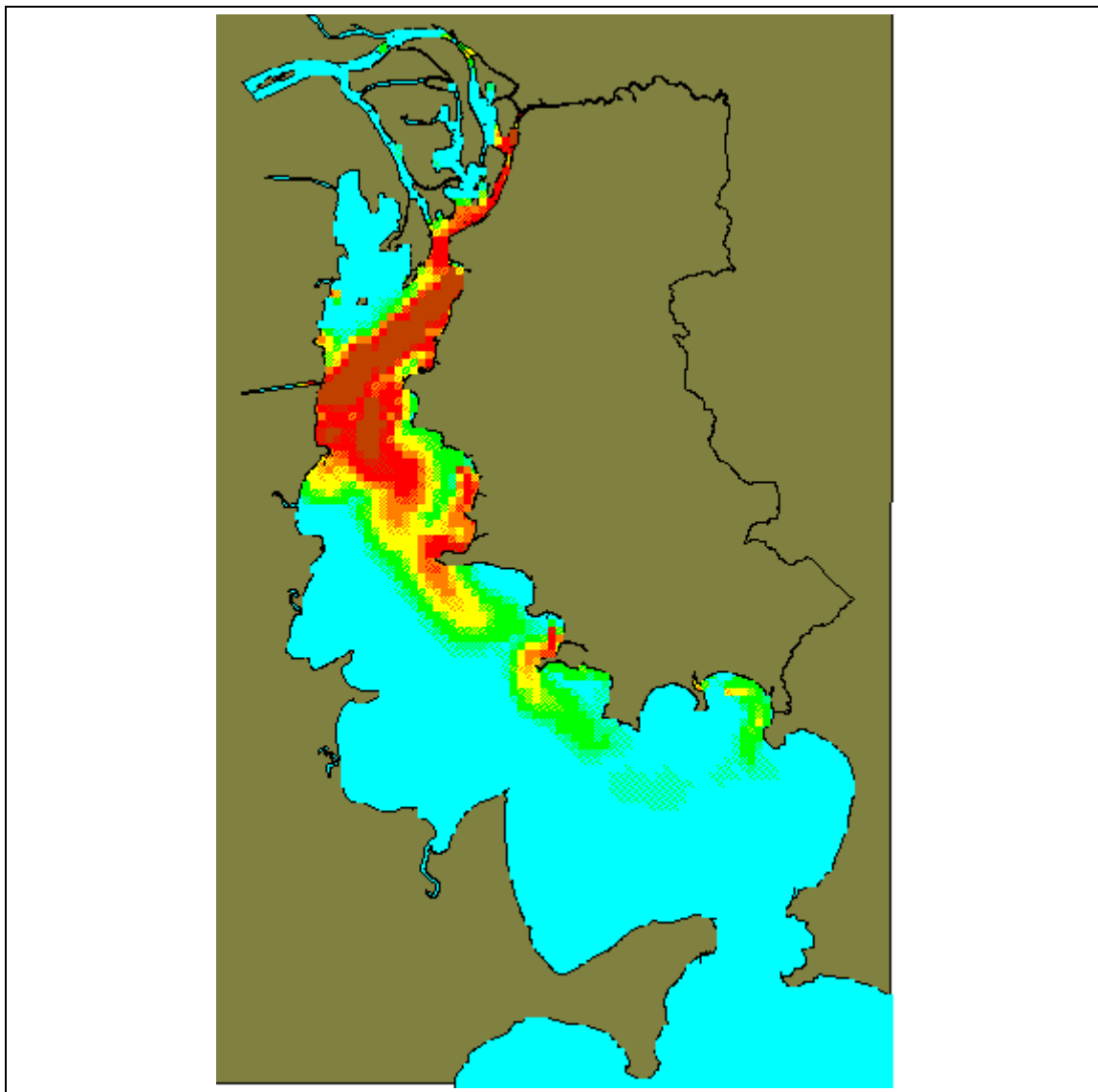
## **5.5. IMPACTO AMBIENTAL EM OUTROS CENÁRIOS DE INTERESSE**

Além da avaliação do impacto ambiental decorrente do lançamento de cargas de esgoto em um corpo hídrico numa situação presente, o emprego de sistemas de simulação pode ser utilizado na avaliação do impacto ambiental associado a situações futuras ou potenciais, resultantes da implantação de obras sanitárias - especialmente construção ou ampliação de ETEs - que reduzam a carga de esgoto despejada nesse corpo hídrico. Tal forma de emprego é uma das mais relevantes aplicações do modelo proposto, pois o Lago Guaíba é o corpo hídrico de maior importância dentro da área abrangida pelo Pró-Guaíba, programa que inclui projetos destinados prioritariamente ao tratamento de esgotos da região metropolitana de Porto Alegre. Em consequência, foram avaliados dois cenários fictícios para o Lago Guaíba, com o fim de verificar a viabilidade da construção e ampliação de ETEs em locais de interesse. O primeiro, denominado Cenário 1, consiste na transposição, para um único emissário, das cargas que atualmente desembocam na região compreendida entre o Estaleiro Só e a baía de Ipanema. O outro, denominado Cenário 2, consiste na simulação da redução a 5% da concentração original, de todas as cargas lançadas no Lago Guaíba, utilizando um processo denominado “gradeamento”, no qual a maior parte da matéria sólida é retida, dando passagem apenas à fase líquida do esgoto.

### **5.5.1. Cenário 1**

A figura 5.9 corresponde à distribuição de concentração de coliformes relativas ao Cenário 1. Confrontando esse resultado com aquele representado pelo mapa presente no lado direito da figura, é possível perceber que não há uma variação

significativa na distribuição da concentração de coliformes ao longo da margem leste, até as imediações de Belém Novo. Desta forma, as condições de balneabilidade das praias compreendidas nesse trecho não são afetadas.



Legenda: Coliformes (organismos/100ml)







	Até 200		Entre 200 e 1000		Entre 1000 e 4000
	Entre 4000 e 10000		Entre 10000 e 50000		Acima de 50000

Figura 5.9 – Distribuição de concentrações de coliformes no Lago Guaíba: Cenário 1.

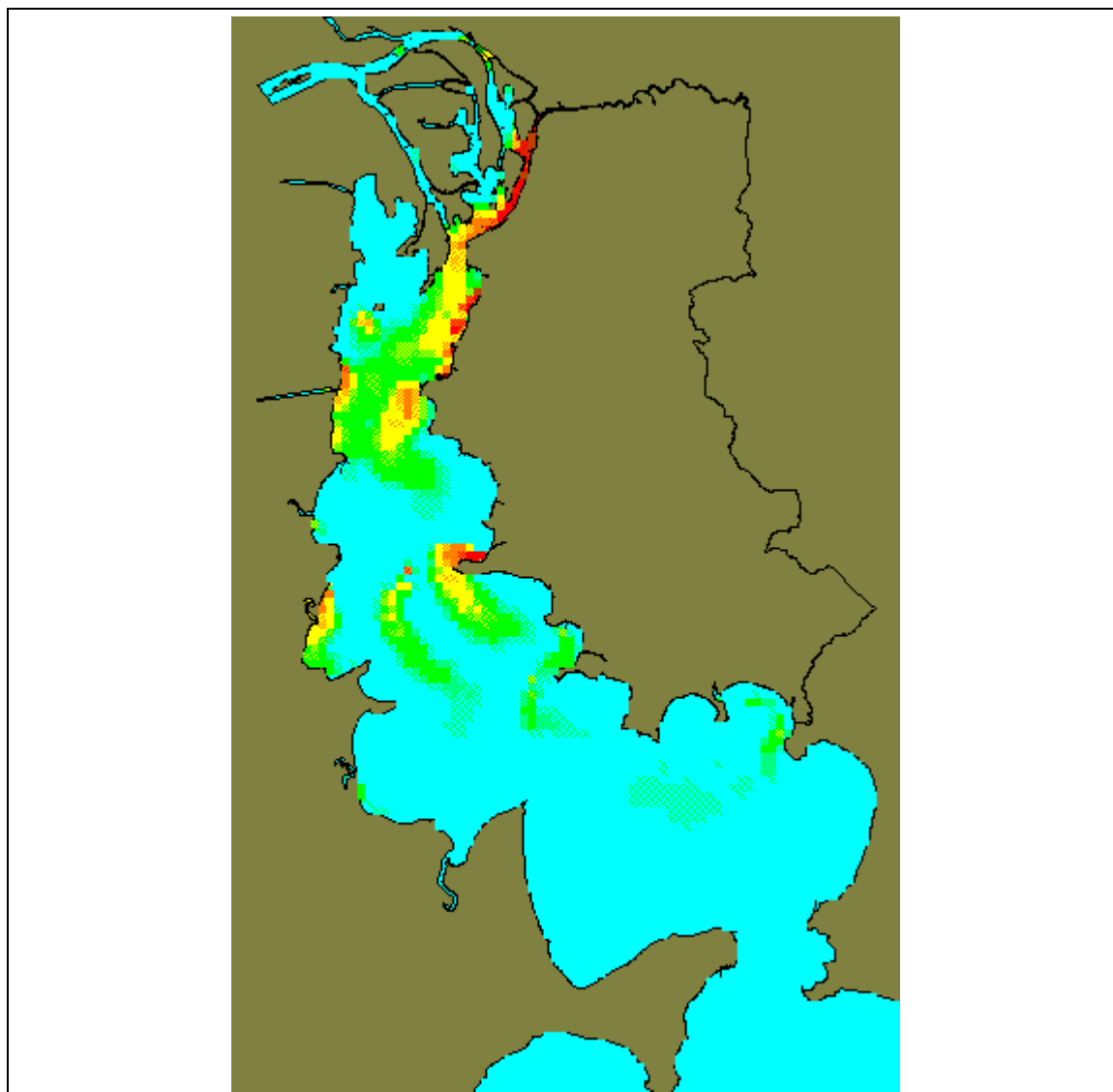
Esse fato corrobora o argumento relativo aos efeitos não-locais, tendo em vista que a balneabilidade da baía de Ipanema e de Belém Novo depende

essencialmente do aporte das grandes cargas lançadas na região central de Porto Alegre, que chegam à zona sul por meio do canal de navegação. Observa-se que nesse cenário específico, a região do Lami não é influenciada por efeitos não-locais, vide região indicada em vermelho na figura 5.12, o que demonstra claramente a capacidade de auto-depuração do corpo hídrico. Em qualquer região do Lago, os efeitos não-locais são consideravelmente restringidos por esse efeito de auto-depuração, confirmando a hipótese, mencionada anteriormente, de que a mera realocação de cargas pode exercer efeitos apreciáveis sobre as condições de balneabilidade em regiões a jusante do lançamento das cargas.

### 5.5.2. Cenário 2

A figura 5.10 corresponde à distribuição de concentração de coliformes relativas ao Cenário 2. O leitor mais atento pode constatar a aparente presença de cargas pontuais no interior do corpo hídrico, representadas pelas pequenas manchas isoladas de coloração predominantemente verde indicadas por setas nessa figura. Na figura 5.14 são destacadas duas regiões onde é possível visualizar um somatório dos despejos, até mesmo em áreas situadas no meio do corpo hídrico, onde há uma descontinuidade de coloração. Na verdade, essas manchas não indicam necessariamente a presença de cargas isoladas de qualquer natureza, tais como emissários ou depósitos bentônicos eventualmente redissolvidos pelo efeito de agitação de superfície. Trata-se apenas de regiões de sobreposição entre cargas adjacentes, cuja soma das contribuições resulta em valores de concentração superiores aos de suas vizinhanças imediatas. Esse efeito é ocasionalmente amplificado pelas peculiaridades da convenção que define a rampa de cores referente ao parâmetro em estudo.

Observa-se pela inspeção do mapa da figura 5.13 que a instalação de um sistema de gradeamento resulta em uma redução significativa da concentração de coliformes junto aos pontos de maior interesse na orla correspondente à zona sul de Porto Alegre. Existem, entretanto, certos detalhes operacionais que até o presente momento inviabilizam a implantação desse sistema primário de tratamento de esgoto.



Legenda: Coliformes (organismos/100ml)







	Até 200		Entre 200 e 1000		Entre 1000 e 4000
	Entre 4000 e 10000		Entre 10000 e 50000		Acima de 50000

Figura 5.10 – Distribuição de concentrações de coliformes no Lago Guaíba: Cenário 2.



## 6. CONCLUSÕES

Este capítulo resume as principais conclusões obtidas através da análise dos resultados apresentados no capítulo 5. Como mencionado anteriormente, o trabalho proposto teve como objetivo formular um novo método analítico, concebido com a finalidade de obter soluções exatas para problemas tridimensionais em poluição aquática. Em particular, o trabalho proposto visava suprir uma deficiência no método desenvolvido por Fernandez (2008), que consistia na elevada discrepância verificada entre os resultados obtidos e os respectivos dados experimentais para o parâmetro fosfato.

A principal diferença entre o trabalho apresentado e o modelo de Fernandez, que também utiliza transformações de Backlund para a obtenção de soluções exatas para a equação advectivo-difusiva, reside fundamentalmente em dois aspectos:

- i) o modelo proposto foi concebido originalmente em três dimensões, embora tenha sido utilizada a sua versão bidimensional para a obtenção dos resultados;
- ii) o coeficiente de difusão foi estimado a partir de um modelo de oscilação superficial, baseado na equação de Kortweg-de-Vries.

O fato de ter sido utilizada uma versão bidimensional na geração dos resultados decorre de uma característica inerente ao processo de propagação de poluentes em águas rasas: uma vez que o Lago Guaíba possui baixa profundidade em praticamente toda a sua extensão, não se faz necessário considerar a estratificação do perfil de concentrações na direção  $z$ , tomado como uniforme. Além disso, as oscilações superficiais provocadas pela incidência de ventos contribuem consideravelmente para a homogeneização local da distribuição de concentrações. A incidência de ventos sobre a superfície do corpo hídrico produz zonas alternadas de alta e baixa pressão, que provocam o surgimento de oscilações superficiais. Essas oscilações aumentam significativamente o coeficiente de difusão em relação ao respectivo valor clássico, que leva em conta apenas o movimento browniano. Isso ocorre porque quando uma protuberância produzida sobre a superfície da água se transforma em uma depressão, um determinado volume de água é transferido de forma aproximadamente isotrópica para suas vizinhanças, caracterizando um processo advectivo que, quando analisado em escala geográfica, pode ser interpretado como um incremento no coeficiente de difusão. Assim, a partir de um modelo de ondulação de superfície, baseado na equação de Kortweg-DeVries [Polyanin, 2004], foi calculada a vazão de água transferida

isotropicamente para as vizinhanças, em cada ponto considerado no interior do domínio, com o objetivo de estimar um coeficiente de difusão em escala geográfica.

A inclusão do modelo de oscilação superficial resultou na obtenção de distribuições de concentração equivalentes àquelas obtidas através do modelo tridimensional em sua forma original. Contudo, o fato de ser utilizado um modelo bidimensional proporcionou uma redução de cerca de 90% em relação ao tempo de processamento requerido pelo modelo proposto em sua forma original. O tempo de processamento resultante da implementação do modelo bidimensional, com o coeficiente de difusão estimado a partir da equação KdV, é da ordem de 10 minutos por cenário simulado, utilizando um microcomputador com CPU Semprom 2.6 GHz, 1 Gb de memória RAM e disco rígido de 80 Gb, havendo sido implementado o código fonte na linguagem Visual Basic, versão 6.0.

No que diz respeito à concordância com os dados experimentais, os resultados obtidos apresentaram discrepâncias distintas em relação aos parâmetros de qualidade de água considerados. Com relação ao parâmetro coliforme, houve uma pequena redução na discrepância entre os valores calculados e os dados experimentais, em relação ao trabalho de Fernandez (2008). A redução da discrepância se deve ao fato de haver sido utilizado um coeficiente de difusão da ordem de  $0,3 \text{ m}^2/\text{s}$ , valor superior ao empregado por Fernandez ( $\sim 0,08 \text{ m}^2/\text{s}$ ), estimado a partir do modelo de difusão turbulenta (referência). Para o parâmetro fosfato, o modelo de Fernandez não foi utilizado por não ser capaz de reproduzir, com exatidão aceitável, os respectivos dados de campo. Ocorre que o coeficiente de difusão obtido através do modelo de difusão turbulenta sofre incremento significativo apenas em locais onde o escoamento é relativamente rápido, produzindo componentes flutuantes que caracterizam o regime turbulento. No caso do Lago Guaíba, o regime turbulento só se verifica nas proximidades do canal de navegação, única região na qual o modelo de Fernandez reproduz adequadamente os dados experimentais para o parâmetro fosfato.

No trabalho apresentado, o coeficiente de difusão foi incrementado em todo o corpo hídrico, inclusive nas regiões onde o escoamento é lento. Dessa forma, o fenômeno da redissolução de fosfato a partir dos depósitos acumulados no leito do lago é adequadamente representado pelo modelo, resultando numa discrepância inferior a 10% em relação aos dados experimentais, ao longo de toda extensão do corpo hídrico.

A principal limitação do método proposto reside no fato de não haver sido considerado, no cálculo do coeficiente de dispersão, os gradientes das componentes de

velocidade junto ao canal de navegação e a outras regiões nas quais as tensões de cisalhamento são particularmente acentuadas. Como sugestão para trabalhos futuros, podem ser implementados modelos auxiliares relativos à hidrodinâmica do sistema, visando obter estimativas mais acuradas para os valores locais coeficientes de dispersão.

## 7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Amaral, K. J., 2003. **“Estuário do rio Macaé: Modelagem Computacional como Ferramenta para o Gerenciamento Integrado de Recursos Hídricos”**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio de Janeiro – COOPPE. Rio de Janeiro, RJ.

Bendati, M. M. A., Schwarzbach, M. S., Maizonave, C. R. M., Almeida, L. M., Bringhenti, M. L., 2000. **“Avaliação da qualidade da água do Lago Guaíba (Rio Grande do Sul, Brasil) como suporte para a gestão da bacia hidrográfica”**. In: XXVII Congresso Interamericano de Engenharia Sanitária e Ambiental. Porto Alegre, RS.

Bittencourt A. G., Pereira, C.A. A. O., Takiishi, M., Oliveira, L. H. W., Mercer, G., Roberts, M., 1999. **“Desenvolvimento de Modelo Matemático de Qualidade da Água para a Implantação da Agência da Bacia do Rio das Velhas”**. In: 19º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental, Foz de Iguaçu, PR.

Bird, R. B., Stewart, W. E., Lightfoot, E. N., 2004. **“Fenômenos de transporte”**, 2.<sup>a</sup> ed., Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 838 pp.

Borsoi, Z. M. F., Torres, S. D. A., 1997. **“A política de recursos hídricos no Brasil”**. **Revista do BNDES**, n. 8, 15p. Brasília, DF.

Böhm, L., 1981. **“Modelo matemático de dispersão de bactérias”**, Departamento Municipal de Água e Esgotos, Porto Alegre.

Bluman, G., 1989. **“Symmetries and differential equations”**, Springer, New York.

Branco, S. M. 1999. **“Ecosistêmica – uma abordagem integrada dos problemas do meio ambiente”**. São Paulo, SP. Editora Edgard Blücher, 202 p.

Brown, L.C., T.O. Barnwell. T. O., 1987. **“The Enhanced Stream Water Quality Models QUAL2E and QUAL2E-UNCAS: Documentation and User Manual”**. U.S. Environmental Protection Agency, Athens, Georgia.

Carnahan, J., 1972. **“Applied numerical methods”**, McGraw-Hill, New York.

Casalas, A., 1996. **“Aplicativo para modelação de estuários e lagos: manual de uso”**, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Porto Alegre.

Ceretta, M. C., 2004. **“Avaliação dos aspectos da qualidade da água na sub-bacia hidrográfica do arroio Cadena – município de Santa Maria – RS”**. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Maria – PPGEC.

Churchill, R. V., 1975. **Variáveis complexas e suas aplicações**. Editora McGraw-Hill do Brasil, São Paulo.

Dhaubadel, M., Leddy, J., Tellions, D., 1987. “Finite-element analysis of fluid flow and heat transfer for staggered bundles of cylinders in cross flow”, **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, vol. 7, pp. 1325-1342.

FEPAM - Fundação Estadual Proteção Ambiental do Estado do Rio Grande do Sul. **“Qualidade ambiental”**. Porto Alegre. Disponível em: [www.fepam.rs.gov.br/qualidade/guaiba.asp](http://www.fepam.rs.gov.br/qualidade/guaiba.asp). Acesso em: junho de 2007.

Fernandez, L., 2008. **“Simulação da propagação de poluentes utilizando transformação de Bäcklund – modelo bidimensional”**, dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Garcia, R., 1997. **“Simulação da qualidade da água em regime não-permanente no Rio dos Sinos”**, dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Greenspan, D., Casuli, V., 1988. **“Numerical Analysis for Applied Mathematics, Science and Engineering”**, CRC Press, Florida.

Gutiérrez, R., 2001. **“A bacia do Rio Gravataí, Rio Grande do Sul – 2001”**. In: Projeto Marca d'água. Brasília, DF.

Haag, A., 2003. “**Simulação da propagação de poluentes no canal do Jacuí e no Rio dos Sinos**”, dissertação (Mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Hantush, M., Shoemaker, L, Dai, T., Koenig, J., 2005. “**TMDL Model Evaluation and Research Needs**”. Land Remediation and Pollution Control Division, National Risk Management Research Laboratory, Cincinnati, Ohio.

Hauser, J., Paap, H., Eppel, D., 1986. “**Boundary Conformed Coordinate System for Fluid Flow Problems**”, Pineridge Press, Swansea.

Hinze, J.O., 1959. “**Turbulence**”, McGraw-Hill book Company.

Jager, E.M., 2006. “**On the Origin of the Korteweg–de Vries Equation**”, <<http://arxiv.org/abs/math/0602661>>Arxiv math.HO/0602661.

Landau, L. D., Lifshitz, E. M., 1987. “**Fluids Mechanics**”, 2<sup>a</sup> ed., Pergamon, Nova York.

Leite, A. E. B., 2004. “**Simulação do lançamento de esgotos domésticos em rios usando um modelo de qualidade da água, SisBAHIA®**”. Dissertação de Mestrado, Escola Nacional de Saúde Pública – Fiocruz. Rio de Janeiro, RJ.

Lima, C. A. A., Giorgetti, M. F., 1997. “**Aplicação do Modelo QUAL2E na Simulação de Descargas Acidentais Contaminantes**”. In: 19º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. Foz do Iguaçu, PR. Anais do 19º Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. Rio de Janeiro : ABES, 1997. p. 14-20.

Lo, K.S.L. Chen, H. H., 1991. “**Numerical errors of water quality models**”. *Proceeding of Conference in Environment Hydraulics*, Lee & Cheung eds. Balkema, Rotterdam.

Maliska, C., 1995. “**Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional**”, LTC Editora, Rio de Janeiro.

Mendonça, A. S. F., Pereira, T. V., 2003. “**Aplicação de modelagem computacional na simulação de parâmetros de qualidade da água relacionados com nitrogênio em curso d’água**”. In: V Seminário Estadual de Saneamento e Meio Ambiente, Vitória, ES.

Meyer, J. F . C. A., Diniz, G. L., 2007. “Pollutant dispersion in wetland systems: mathematical modelling and numerical simulation.” **Ecological Modelling**, v. 200, p. 360-370.

Miller Jr., G. T., 2006. “**Ciência Ambiental**”. 11<sup>a</sup> edição, Thompson Learning Edições Ltda. São Paulo, SP.

Modenesi, K., Furlan, L.T., Guirardello, R., Nunhez, J.R., Tomaz, E., 2004. “A CFD model por pollutant dispersion in rivers”. **Brazilian Journal of Chemical Engineering**, v. 21, n. 4, p. 557-568. São Paulo, SP.

Moreira, D. M., 2004. “Analytical solution of the advection-diffusion equation with nonlocal closure of the turbulente diffusiion.” **Environmental Modelling and Software**, v. 20, n. 10, p. 1347-1351.

Moreira, D. M., 2004. “Analytical solution of the Eulerian dispersion equation for nonstationary conditions: development and evaluation.” **Environmental Modelling and Software**, v. 20, n. 9, p. 1159-1165.

Moreira, D. M., 2005. “Near-source atmospheric pollutant dispersion using the new GILLT method.” **Atmospheric environment**, v. 39, n. 34, p. 6289-6294.

Moreira, D. M., 2005. “A semi-analytical model for the Tritium dispersion simulation in the PBL from the ANGRA I nuclear power plant”. **Ecological Modelling**, v. 189, n. 3, p. 413-424.

Mpimpas, H.; Anagostopoulos, P.; Ganoulis, J., 2001. “Modelling of Water Pollution in Thermaikos Gulf with Fuzzy Parameters”, **Ecological Modelling**, vol 142, pp. 91-104.

Müller, M. et al., 2004. **“Extração de seções transversais a partir da tecnologia de mapeamento digital a laser para fins de estudos hidrodinâmicos”**. In: IV Simpósio Brasileiro sobre pequenas e médias centrais hidrelétricas. Porto de Galinhas, PE.

Olver, P., 1993. **“Applications of Lie Groups to Differential Equations”**, Springer, New York.

Ortega, J.; Poole, W., 1981. **“Numerical Methods for Differential Equations”**. Pitman Publishing, Marshfield.

Pastres, R., Franco D., Peceník G., Solidoro C. and Dejak C., 1995. “Using parallel computers in environmental modelling: a working example.” **Ecological Modelling**, v. 80, p.69-85.

Pastres R., Franco D. , Peceník G., Solidoro C., Dejak C. 1997. “Local sensitivity analysis of a distributed parameters water quality model.” **Reliability Engineering & System Safety**, v. 57, n. 1, pp.21-30.

Pinho, J. L. S., 2000. **Aplicação de modelação matemática ao estudo da hidrodinâmica e da qualidade da água em zonas costeiras**. Tese de doutorado. Universidade do Minho, Portugal.

Pinho, J.L.S., Vieira, J.M.P., Carmo, J.S.A., 2000. **Aplicação de Modelação Matemática no Estudo da Evolução de Plumas Efluentes de Emissários Submarinos. O Caso da Ria Arosa**. In: Anais do Seminário Perspectivas de Gestão Integrada de Ambientes Costeiros (EUROCOAST), Coimbra, Portugal.

Poffal, C., 2005. **“Solução da equação advectivo-difusiva utilizando regras para manipulação de exponenciais de operadores diferenciais e simetrias de Lie: aplicações em engenharia ambiental”**, tese (Doutorado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

Polyanin, A., Zaitsev, V., 2004. **Handbook of nonlinear partial differential equations**, editora Chapman & Hall/CRC, Boca Raton, EUA.



Porto, F.A., Branco, S.M., Luca, S.J., 1991. “**Caracterização da qualidade da água**”. In: Hidrologia ambiental. p.375-390. EDUSP. São Paulo, SP.

Rajar, R., Matjaz, C., 1997. “Hydrodynamic and Water Quality Modeling: an Experience”, **Ecological Modeling**, vol 101, pp. 195-207.

Reali, M., Rangnoni, R., Pennati, V., 1984. “Compact analytic expressions of two-dimensional finite difference forms”, **International Journal for Numerical Methods in Engineering**, vol 20, pp. 121-130.

Reddy, J., 1986. “**Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering**”, McGraw-Hill, New York.

Reichl, J., 1980. **A modern course in statistical physics**, editora Arnold Publishers.

Rocha, G. S., 2007. “**Aplicação da teoria dos números fuzzys nos modelos de transporte de poluentes para avaliar sua capacidade de previsão do risco de contaminação em rios naturais**”, dissertação (Mestrado), Curso de Pós-Graduação em Engenharia Civil, Universidade Federal do Ceará, Fortaleza.

Romeiro, N. M. L., 2003. “**Simulação numérica de modelos de qualidade de água usando o método de elementos finitos estabilizados**”, Tese de Doutorado, COOPE – Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, RJ.

Rosman, P. C. C., 2000. “**Guia do Usuário do SisBAHIA - Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental**”. Rio de Janeiro, RJ.

Rosman, P.C.C., 2001. “**Um Sistema Computacional de Hidrodinâmica Ambiental**”. In: Métodos Numéricos em Recursos Hídricos, vol. 5, 1ª ed., capítulo 1, Rio de Janeiro, RJ. Associação Brasileira de Recursos Hídricos – ABRH.

Schlichting, H., 1968. “**Boundary Layer Theory**”, MacGraw-Hill.

Schettini, E., 1991. “**Modelo Matemático Bidimensional de Transporte de Massa em Elementos Finitos com Ênfase em Estuários**”, dissertação (mestrado), Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

SEMA – Secretaria Estadual do Meio Ambiente do Governo do Estado do Rio Grande do Sul, 2002. “**Pró-Guaíba, um exemplo de recuperação**”. Disponível em: <http://www.sema.rs.gov.br//sema/html/proguaiba.htm>.

Silva, C. A. A., 1994. “**Padrões de qualidade ambiental no Brasil**”. Estudo analítico n° 3, Buenos Aires, Argentina.

Silvestrini, J., Schettini, E., Rosauero, N., 1989. “**EFAD: Código Numérico para Resolver problemas de tipo advecção-difusão pelo método dos elementos Finitos**”, trabalho apresentado no 6° Encuentro Nacional de Investigadores y Usuarios Del Métodos de Elementos Finitos, San Carlos de Bariloche.

Solidoro C., Dejak C., Franco D., Pastres R. and Pecenic G., 1995. “A Model for Macroalgae and Phytoplankton Growth in the Venice Lagoon”. **Environment International**, v. 21, n. 5, p.619-626.

Solidoro C., Pastres R., Franco D., Pecenic G. and Dejak C. 1996. “Sensitivity analysis of an eutrophication model for shallow water environments colonised by *Ulva r.*”. **International Journal of Environmental and Analytical Chemistry**, v. 86, p. 677-684.

Solidoro C., Pecenic G., Pastres R., Franco D., Dejak C., 1997. Modelling macroalgae (*Ulva rigida*) in the Venice Lagoon: Model structure identification and first parameters estimation. **Ecological Modelling**, v. 94, n. 2, p.191-206.

Solidoro C., Brando V.E., Dejak C, Franco D., Pastres R, Pecenic G., 1997. “Long term simulation of population dynamics of *Ulva r.* in the lagoon of Venice”. **Ecological Modelling**, v. 102, n. 2, p.259-272.

Spiegel, M., 1977. **Variáveis complexas**, série Schaum, editora Mc-Graw-Hill, São Paulo.

Streeter, H.W., Phelps, E.B., 1925. **A study of the pollution and natural purification of the Ohio river**. U.S. *Public Health Serv. Bull.*, Washington, DC.

Thomann, R. V., Mueller, J. A., 1987. **“Principles of Surface Water Quality Modeling and Control”**. Harper Collins Publishers Inc. New York

Walton, R., Webb, M., 1994. “Qual2e simulations of pulse loads”. **Journal of Environmental Engineering**, v.120, n.5, p.1017-1031.

Whitam, G.B., 1974. **Linear and nonlinear waves**. John Wiley, Nova York.

Wrobel, L. C. et al., 1989. “A study of river pollution using the QUICKEST finite difference algorithm”, **Hydrosoft**, v.2, p. 172-175.

Yang, Y., Wilson, L., Makela, M., Marchetti, M., 1998. “Accuracy of Numerical Methods for Solving the Advection-diffusion Equation as Applied to Spore and Insect Dispersal”, **Ecological Modeling**, vol. 109, pp. 1-24.

Zabadal, J., Lersch, E., Hoffmann, C., Soares, P., Staruck, J., 1999. Sistema Híbrido de Simulação para Propagação de Poluentes no Lago Guaíba. **Revista Ecos**, v. 14, p. 25-27.

Zabadal, J., Poffal, C., 2004. **“Solução da equação de difusão multidimensional utilizando simetrias de Lie: Simulação da dispersão de poluentes na atmosfera – Encontro Nacional de Ciências Térmicas - ENCIT, Rio de Janeiro.**

Zabadal, J., Poffal, C., Vilhena, M., 2004. **“Solução analítica da equação advectivo-difusiva cartesiana bidimensional utilizando simetrias de Lie” - XXVII Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - CNMAC, Porto Alegre, 2004.**

Zabadal, J., Vilhena, M., Bogado, S., Poffal, C., 2005. “Solving Unsteady Problems in Water Pollution Using Lie Symmetries” – **Ecological Modeling**, v. 186, pp. 271-279.

Zabadal, J., Poffal, C., Bogado, S., 2005. “**Closed form solutions for Water Pollution Problems**” – XXV Iberian Latin American Congress on Computational Methods in Engineering (CILAMCE, Recife, 2005).

Zabadal, J., Poffal, C., Leite, S. B., 2006. “**Closed form solutions for Water Pollution Problems - II**” – Latin Journal of Solids and Structures, v.3, n.4, pp. 377-392.

Zwillinger, D., 1997. “**Handbook of Differential Equations**”, Academic Press, San Diego.

## APÊNDICE A – LISTA DE MODELOS DE QUALIDADE DE ÁGUA

CE-QUAL-ICM	O modelo CE-QUAL-ICM pode ser aplicado em uma, duas ou três dimensões e deve ser ligado a um modelo hidrodinâmico. O modelo inclui processos detalhados de qualidade d'água para temperatura, salinidade, balanço de OD/carbono, ciclos de nitrogênio, fósforo e sílica e interações de fitoplâncton, zooplâncton, bactéria e sedimentos. O CE-QUAL-ICM requer uma grande quantidade de dados para calibragem de processos químicos e biológicos.
CE-QUAL-RIVI	O modelo CE-QUAL-RIVI é um modelo hidrodinâmico de dinâmica unidimensional e de qualidade da água usado para simular escoamentos altamente variáveis em rios com barragens ou outras estruturas. O transporte de poluentes por advecção e dispersão é ligado à hidrodinâmica e transformações de poluentes também são simuladas.
CE-QUAL-W2	O CE-QUAL-W2 é um modelo bidimensional vertical hidrodinâmico e de qualidade da água. O modelo inclui temperatura, salinidade, ciclo de OD/carbono, ciclos de nitrogênio, fósforo, fitoplâncton e bactéria. Vários níveis de complexidade são possíveis devido à organização modular das simulações de qualidade d'água. O CE-QUAL-W2 tem sido aplicado largamente para rios, lagos, reservatórios e estuários nos Estados Unidos.
CE-QUAL2E	O QUAL2E é um modelo unidimensional de estado permanente usado frequentemente para simular os efeitos de descargas de poluição de fontes pontuais e não pontuais na qualidade da água de rios. Ciclos detalhados de OD/DBO e de nutriente são simulados, considerando os efeitos de respiração de algas, reaeração e demanda de oxigênio de sedimentos. Os metais podem ser simulados arbitrariamente como constituintes conservativos ou não. A hidrodinâmica é baseada na equação unidimensional de advecção-dispersão. Este modelo é largamente utilizado em todo o mundo, havendo diversos exemplos de aplicação no Brasil.
HSPF	Descrito na tabela 3
MIKE 11	O modelo MIKE foi desenvolvido pelo Instituto Dinamarquês de Hidráulica para simular processos de águas pluviais/escoamento em bacias e hidrodinâmica e qualidade da água em corpos de água unidimensionais. A hidrodinâmica é baseada em uma solução diferencial finita para as equações completas de St. Venant para escoamento de canal aberto; é simulado escoamento não permanente. Os módulos de águas pluviais-escoamento usam uma abordagem parâmetro global para simular escoamentos, mas cargas poluentes na bacia não são simuladas.
SIMOX	Dissolved Oxygen Simulation Model - O Modelo de Simulação de Oxigênio Dissolvido foi aplicado para a bacia do Rio das Velhas pela YKS Serviços em 1996. O modelo SIMOX inclui OD/DBO, bactéria (Chick's Law), e uma substância conservativa, a versão mais recente também inclui decaimento de primeira ordem de nitrogênio e fósforo para representar sedimentação, absorção e transformação.
SOBEK/DELWAQ	O Modelo de hidrodinâmica unidimensional SOBEK, assim chamado em menção ao deus egípcio do rio, é usado em conjunto com o Delft Water Quality Model - DELWAQ para simular o destino e transporte de contaminantes de água de superfície. O modelo SOBEK é baseado na solução das equações de St. Venant para escoamento dinâmico. O DELWAQ inclui vários compartimentos que representam processos particulares de qualidade da água; estes compartimentos podem ser usados individualmente ou em grupos.
WASP	Water Analysis Simulation Program - O Programa de Simulação de Análise da Água foi desenvolvido para simular os processos de hidrodinâmica e de grande qualidade de água em 1,2 ou 3 dimensões para avaliar o destino e transporte de contaminantes convencionais e tóxicos. Ciclos de OD/DBO detalhados, nitrogênio, fósforo e fitoplâncton são simulados usando o componente de qualidade da água EUTRO. O módulo TOXI também avalia a cinética de substâncias tóxicas. O WASP tem sido usado em conjunto com o SWMM frequentemente; o modelo tem sido aplicado largamente nos Estados Unidos e frequentemente na América Latina.

## APÊNDICE B – OBTENÇÃO DAS RESTRIÇÕES DIFERENCIAIS PARA O CAMPO DE ESCOAMENTO

O objetivo da aplicação das condições de compatibilidade é o de verificar se existem restrições severas sobre a função que define o campo potencial de velocidades utilizado no modelo de qualidade de água. O código-fonte correspondente à aplicação das condições de compatibilidade para as derivadas cruzadas  $C_{xy}$ ,  $C_{xz}$  e  $C_{yz}$  é listado a seguir:

> restart:

> with(PDEtools):

> with(DEtools):

>

> e1:=D\*diff(C(x,y,z),x)-u(x,y,z)\*C(x,y,z)-alpha(y,z);

$$e1 := D \left( \frac{\partial}{\partial x} C(x, y, z) \right) - u(x, y, z) C(x, y, z) - \alpha(y, z)$$

> e2:=D\*diff(C(x,y,z),y)-v(x,y,z)\*C(x,y,z)-beta(x,z);

$$e2 := D \left( \frac{\partial}{\partial y} C(x, y, z) \right) - v(x, y, z) C(x, y, z) - \beta(x, z)$$

> e3:=D\*diff(C(x,y,z),z)-w(x,y,z)\*C(x,y,z)-theta(x,y);

$$e3 := D \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) - w(x, y, z) C(x, y, z) - \theta(x, y)$$

> Cx:=rhs(isolate(e1,diff(C(x,y,z),x)));

$$C_x := \frac{u(x, y, z) C(x, y, z) + \alpha(y, z)}{D}$$

> Cy:=rhs(isolate(e2,diff(C(x,y,z),y)));

$$C_y := \frac{v(x, y, z) C(x, y, z) + \beta(x, z)}{D}$$

> Cz:=rhs(isolate(e3,diff(C(x,y,z),z)));

$$C_z := \frac{w(x, y, z) C(x, y, z) + \theta(x, y)}{D}$$

> l:={diff(C(x,y,z),x)=Cx,diff(C(x,y,z),y)=Cy,diff(C(x,y,z),z)=Cz};

$$l := \left\{ \frac{\partial}{\partial x} C(x, y, z) = \frac{u(x, y, z) C(x, y, z) + \alpha(y, z)}{D}, \right.$$

$$\left. \begin{aligned} \frac{\partial}{\partial y} \alpha(x, y, z) &= \frac{v(x, y, z) \alpha(x, y, z) + \beta(x, z)}{D}, \\ \frac{\partial}{\partial z} \alpha(x, y, z) &= \frac{w(x, y, z) \alpha(x, y, z) + \theta(x, y)}{D} \end{aligned} \right\}$$

> e12:=diff(e1,y)-diff(e2,x);

$$\begin{aligned} e12 := & - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y, z) \right) \alpha(x, y, z) - u(x, y, z) \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(x, y, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) \\ & + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y, z) \right) \alpha(x, y, z) + v(x, y, z) \left( \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x, y, z) \right) \\ & + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right) \end{aligned}$$

> e120:=subs(1,e12);

$$\begin{aligned} e120 := & - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y, z) \right) \alpha(x, y, z) - \frac{u(x, y, z) (v(x, y, z) \alpha(x, y, z) + \beta(x, z))}{D} \\ & - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y, z) \right) \alpha(x, y, z) \\ & + \frac{v(x, y, z) (u(x, y, z) \alpha(x, y, z) + \alpha(y, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right) \end{aligned}$$

> e121:=subs(C(x,y,z)=m,e120);

$$\begin{aligned} e121 := & - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y, z) \right) m - \frac{u(x, y, z) (v(x, y, z) m + \beta(x, z))}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) \\ & + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y, z) \right) m + \frac{v(x, y, z) (u(x, y, z) m + \alpha(y, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right) \end{aligned}$$

> omega[z]:=coeff(e121,m,1);

$$\omega_z := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y, z) \right)$$

> exy:=coeff(e121,m,0);

$$exy := - \frac{u(x, y, z) \beta(x, z)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) + \frac{v(x, y, z) \alpha(y, z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right)$$

> e13:=diff(e1,z)-diff(e3,x);

$$e13 := - \left( \frac{\partial}{\partial z} u(x, y, z) \right) C(x, y, z) - u(x, y, z) \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial x} w(x, y, z) \right) C(x, y, z) + w(x, y, z) \left( \frac{\partial}{\partial x} C(x, y, z) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e130:=subs(1,e13);

$$e130 := - \left( \frac{\partial}{\partial z} u(x, y, z) \right) C(x, y, z) - \frac{u(x, y, z) (w(x, y, z) C(x, y, z) + \theta(x, y))}{D} \\ - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} w(x, y, z) \right) C(x, y, z) \\ + \frac{w(x, y, z) (u(x, y, z) C(x, y, z) + \alpha(y, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e131:=subs(C(x,y,z)=m,e130);

$$e131 := - \left( \frac{\partial}{\partial z} u(x, y, z) \right) m - \frac{u(x, y, z) (w(x, y, z) m + \theta(x, y))}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial x} w(x, y, z) \right) m + \frac{w(x, y, z) (u(x, y, z) m + \alpha(y, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> omega[y]:=coeff(e131,m,1);

$$\omega_y := - \left( \frac{\partial}{\partial z} u(x, y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} w(x, y, z) \right)$$

> exz:=coeff(e131,m,0);

$$exz := - \frac{u(x, y, z) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \frac{w(x, y, z) \alpha(y, z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e23:=diff(e2,z)-diff(e3,y);

$$e23 := - \left( \frac{\partial}{\partial z} v(x, y, z) \right) C(x, y, z) - v(x, y, z) \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right)$$



$$+ \left( \frac{\partial}{\partial y} w(x, y, z) \right) C(x, y, z) + w(x, y, z) \left( \frac{\partial}{\partial y} C(x, y, z) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> e230:=subs(1,e23);

$$e230 := - \left( \frac{\partial}{\partial z} v(x, y, z) \right) C(x, y, z) - \frac{v(x, y, z) (w(x, y, z) C(x, y, z) + \theta(x, y))}{D} \\ - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} w(x, y, z) \right) C(x, y, z) \\ + \frac{w(x, y, z) (v(x, y, z) C(x, y, z) + \beta(x, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> e231:=subs(C(x,y,z)=m,e230);

$$e231 := - \left( \frac{\partial}{\partial z} v(x, y, z) \right) m - \frac{v(x, y, z) (w(x, y, z) m + \theta(x, y))}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial y} w(x, y, z) \right) m + \frac{w(x, y, z) (v(x, y, z) m + \beta(x, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> omega[x]:=coeff(e231,m,1);

$$\omega_x := - \left( \frac{\partial}{\partial z} v(x, y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} w(x, y, z) \right)$$

> eyz:=coeff(e231,m,0);

$$eyz := - \frac{v(x, y, z) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) + \frac{w(x, y, z) \beta(x, z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> exz;

$$- \frac{v(x, y, z) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \frac{w(x, y, z) \alpha(y, z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> exy;

$$- \frac{v(x, y, z) \beta(x, z)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) + \frac{v(x, y, z) \alpha(y, z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right)$$

> w0:=rhs(isolate(eyz,w(x,y,z)));

$$w0 := \frac{\left( \frac{v(x, y, z) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) \right)}{\beta(x, z)}$$

> exz0:=subs(w(x,y,z)=w0,exz);

$$\begin{aligned} \text{exz0} := & - \frac{u(x, y, z) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) \\ & + \frac{\left( \frac{v(x, y, z) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) \right)}{\beta(x, z)} \alpha(y, z) \\ & + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right) \end{aligned}$$

> u0:=rhs(isolate(exz0,u(x,y,z)));

$$\begin{aligned} u0 := & - \frac{1}{\theta(x, y)} \left( \left( \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) \right. \right. \\ & \left. \left. \frac{\left( \frac{v(x, y, z) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) \right) \alpha(y, z)}{\beta(x, z)} \right. \right. \\ & \left. \left. - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right) \right) D \right) \end{aligned}$$

> exy0:=numer(simplify(subs(u(x,y,z)=u0,exy)));

$$\begin{aligned} \text{exy0} := & \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) \beta(x, z) - \alpha(y, z) \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) + \alpha(y, z) \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) \\ & - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right) \beta(x, z) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) \theta(x, y) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right) \theta(x, y) \end{aligned}$$

```

> v0:=v(x,y,z);
                                v0 := v(x, y, z)
> u1:=simplify(subs(v(x,y,z)=v0,u0));
u1 := - \frac{1}{\beta(x, z) \theta(x, y)} \left( \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) D \beta(x, z) - \alpha(y, z) v(x, y, z) \theta(x, y) \right.
      - \alpha(y, z) \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) D + \alpha(y, z) \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) D
      \left. - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right) D \beta(x, z) \right)
> w1:=simplify(subs({u(x,y,z)=u1,v(x,y,z)=v0},w0));
w1 := \frac{v(x, y, z) \theta(x, y) + \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) D - \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) D}{\beta(x, z)}
>

```

Este código sofre uma ligeira modificação ao introduzir as simplificações  $w(x,y,z)=0$ ,  $u=u(x,y)$  e  $v=v(x,y)$ :

```

> restart:
> with(PDEtools):
> with(DEtools):
>
> e1:=D*diff(C(x,y,z),x)-u(x,y)*C(x,y,z)-alpha(y,z);
e1 := D \left( \frac{\partial}{\partial x} C(x, y, z) \right) - u(x, y) C(x, y, z) - \alpha(y, z)
> e2:=D*diff(C(x,y,z),y)-v(x,y)*C(x,y,z)-beta(x,z);
e2 := D \left( \frac{\partial}{\partial y} C(x, y, z) \right) - v(x, y) C(x, y, z) - \beta(x, z)
> e3:=D*diff(C(x,y,z),z)-0*C(x,y,z)-theta(x,y);
e3 := D \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) - \theta(x, y)
> Cx:=rhs(isolate(e1,diff(C(x,y,z),x)));

```

$$C_x := \frac{u(x, y) \alpha(x, y, z) + \alpha(y, z)}{D}$$

> Cy:=rhs(isolate(e2,diff(C(x,y,z),y)));

$$C_y := \frac{v(x, y) \alpha(x, y, z) + \beta(x, z)}{D}$$

> Cz:=rhs(isolate(e3,diff(C(x,y,z),z)));

$$C_z := \frac{\theta(x, y)}{D}$$

> l:={diff(C(x,y,z),x)=Cx,diff(C(x,y,z),y)=Cy,diff(C(x,y,z),z)=Cz};

$$l := \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x, y, z) = \frac{u(x, y) \alpha(x, y, z) + \alpha(y, z)}{D}, \\ \frac{\partial}{\partial y} \alpha(x, y, z) = \frac{v(x, y) \alpha(x, y, z) + \beta(x, z)}{D}, \\ \frac{\partial}{\partial z} \alpha(x, y, z) = \frac{\theta(x, y)}{D} \end{array} \right\}$$

> e12:=diff(e1,y)-diff(e2,x);

$$e12 := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y) \right) \alpha(x, y, z) - u(x, y) \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(x, y, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y) \right) \alpha(x, y, z) + v(x, y) \left( \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x, y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right)$$

> e120:=subs(l,e12);

$$e120 := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y) \right) \alpha(x, y, z) - \frac{u(x, y) (v(x, y) \alpha(x, y, z) + \beta(x, z))}{D} \\ - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y) \right) \alpha(x, y, z) \\ + \frac{v(x, y) (u(x, y) \alpha(x, y, z) + \alpha(y, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right)$$

> e121:=subs(C(x,y,z)=m,e120);

$$e121 := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y) \right) m - \frac{u(x, y) (v(x, y) m + \beta(x, z))}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right)$$

$$+ \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y) \right) m + \frac{v(x, y) (u(x, y) m + \alpha(y, z))}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right)$$

> omega[z]:=coeff(e121,m,1);

$$\omega_z := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y) \right)$$

> exy:=coeff(e121,m,0);

$$exy := - \frac{u(x, y) \beta(x, z)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) + \frac{v(x, y) \alpha(y, z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right)$$

> e13:=diff(e1,z)-diff(e3,x);

$$e13 := -u(x, y) \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(x, y, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e130:=subs(1,e13);

$$e130 := - \frac{u(x, y) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e131:=subs(C(x,y,z)=m,e130);

$$e131 := - \frac{u(x, y) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> omega[y]:=coeff(e131,m,1);

$$\omega_y := 0$$

> exz:=coeff(e131,m,0);

$$exz := - \frac{u(x, y) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e23:=diff(e2,z)-diff(e3,y);

$$e23 := -v(x, y) \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(x, y, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> e230:=subs(1,e23);

$$e230 := - \frac{v(x, y) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> e231:=subs(C(x,y,z)=m,e230);

$$e231 := - \frac{v(x, y) \theta(x, y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> omega[x]:=coeff(e231,m,1);

$$\omega_x := 0$$

> eyz:=coeff(e231,m,0);

$$eyz := -\frac{v(x,y)\theta(x,y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x,z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x,y) \right)$$

> exz;

$$-\frac{u(x,y)\theta(x,y)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y,z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right)$$

> exy;

$$-\frac{u(x,y)\beta(x,z)}{D} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y,z) \right) + \frac{v(x,y)\alpha(y,z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x,z) \right)$$

> u0:=rhs(isolate(exz,u(x,y)));

$$u0 := -\frac{\left( \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y,z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) \right) D}{\theta(x,y)}$$

> exy1:=subs(u(x,y)=u0,exy);

$$exy1 := \frac{\left( \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y,z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) \right) \beta(x,z)}{\theta(x,y)} - \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y,z) \right) + \frac{v(x,y)\alpha(y,z)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x,z) \right)$$

> v1:=rhs(isolate(exy1,v(x,y)));

$$v1 := \frac{1}{\alpha(y,z)} \left( \left( -\frac{\left( \left( \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y,z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) \right) \beta(x,z) \right)}{\theta(x,y)} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y,z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x,z) \right) \right) D \right)$$

> v2:=rhs(isolate(eyz,v(x,y)));

$$v2 := - \frac{\left( \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) - \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) \right) D}{\theta(x, y)}$$

> ea:=numer(simplify(v2-v1));

$$\begin{aligned} ea := & -D \left( \alpha(y, z) \left( \frac{\partial}{\partial z} \beta(x, z) \right) - \alpha(y, z) \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right) \right) \\ & - \beta(x, z) \left( \frac{\partial}{\partial z} \alpha(y, z) \right) + \beta(x, z) \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(y, z) \right) \theta(x, y) \\ & - \left( \frac{\partial}{\partial x} \beta(x, z) \right) \theta(x, y) \end{aligned}$$

Uma vez que as definições de  $u(x,y)$  e  $v(x,y)$  não apresentam dependência na variável  $z$ , torna-se necessário implementar novas simplificações:  $\alpha = \alpha(y)$  e  $\beta = \beta(x)$ . Desse modo, o código-fonte sofre uma nova simplificação, assumindo a forma mostrada a seguir:

> restart;

> with(PDEtools);

> with(DEtools);

>

> e1:=D\*diff(C(x,y,z),x)-u(x,y)\*C(x,y,z)-alpha(y);

$$e1 := D \left( \frac{\partial}{\partial x} C(x, y, z) \right) - u(x, y) C(x, y, z) - \alpha(y)$$

> e2:=D\*diff(C(x,y,z),y)-v(x,y)\*C(x,y,z)-beta(x);

$$e2 := D \left( \frac{\partial}{\partial y} C(x, y, z) \right) - v(x, y) C(x, y, z) - \beta(x)$$

> e3:=D\*diff(C(x,y,z),z)-0\*C(x,y,z)-theta(x,y);

$$e3 := D \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) - \theta(x, y)$$

> Cx:=rhs(isolate(e1,diff(C(x,y,z),x)));

$$C_x := \frac{u(x,y) \alpha(x,y,z) + \alpha(y)}{D}$$

> Cy:=rhs(isolate(e2,diff(C(x,y,z),y)));

$$C_y := \frac{v(x,y) \alpha(x,y,z) + \beta(x)}{D}$$

> Cz:=rhs(isolate(e3,diff(C(x,y,z),z)));

$$C_z := \frac{\theta(x,y)}{D}$$

> l:={diff(C(x,y,z),x)=Cx,diff(C(x,y,z),y)=Cy,diff(C(x,y,z),z)=Cz};

$$l := \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial}{\partial z} \alpha(x,y,z) = \frac{\theta(x,y)}{D}, \quad \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x,y,z) = \frac{u(x,y) \alpha(x,y,z) + \alpha(y)}{D}, \\ \frac{\partial}{\partial y} \alpha(x,y,z) = \frac{v(x,y) \alpha(x,y,z) + \beta(x)}{D} \end{array} \right.$$

> e12:=diff(e1,y)-diff(e2,x);

$$e12 := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x,y) \right) \alpha(x,y,z) - u(x,y) \left( \frac{\partial}{\partial y} \alpha(x,y,z) \right) - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x,y) \right) \alpha(x,y,z) + v(x,y) \left( \frac{\partial}{\partial x} \alpha(x,y,z) \right) + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right)$$

> e120:=subs(l,e12);

$$e120 := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x,y) \right) \alpha(x,y,z) - \frac{u(x,y) (v(x,y) \alpha(x,y,z) + \beta(x))}{D} - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) \\ + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x,y) \right) \alpha(x,y,z) + \frac{v(x,y) (u(x,y) \alpha(x,y,z) + \alpha(y))}{D} \\ + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right)$$

> e121:=subs(C(x,y,z)=m,e120);

$$e121 := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x,y) \right) m - \frac{u(x,y) (v(x,y) m + \beta(x))}{D} - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right)$$



$$+ \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y) \right) m + \frac{v(x, y) (u(x, y) m + \alpha(y))}{D} + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right)$$

> omega[z]:=coeff(e121,m,1);

$$\omega_z := - \left( \frac{\partial}{\partial y} u(x, y) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} v(x, y) \right)$$

> exy:=coeff(e121,m,0);

$$exy := - \frac{u(x, y) \beta(x)}{D} - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) + \frac{v(x, y) \alpha(y)}{D} + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right)$$

> e13:=diff(e1,z)-diff(e3,x);

$$e13 := -u(x, y) \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e130:=subs(l,e13);

$$e130 := - \frac{u(x, y) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e131:=subs(C(x,y,z)=m,e130);

$$e131 := - \frac{u(x, y) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> omega[y]:=coeff(e131,m,1);

$$\omega_y := 0$$

> exz:=coeff(e131,m,0);

$$exz := - \frac{u(x, y) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x, y) \right)$$

> e23:=diff(e2,z)-diff(e3,y);

$$e23 := -v(x, y) \left( \frac{\partial}{\partial z} C(x, y, z) \right) + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> e230:=subs(l,e23);

$$e230 := - \frac{v(x, y) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> e231:=subs(C(x,y,z)=m,e230);

$$e231 := - \frac{v(x, y) \theta(x, y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x, y) \right)$$

> omega[x]:=coeff(e231,m,1);

$$\omega_x := 0$$

> eyz:=coeff(e231,m,0);

$$eyz := -\frac{v(x,y)\theta(x,y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x,y) \right)$$

> exz;

$$-\frac{u(x,y)\theta(x,y)}{D} + \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right)$$

> exy;

$$-\frac{u(x,y)\beta(x)}{D} - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) + \frac{v(x,y)\alpha(y)}{D} + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right)$$

> u0:=rhs(isolate(exz,u(x,y)));

$$u0 := \frac{\left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) D}{\theta(x,y)}$$

> exy1:=subs(u(x,y)=u0,exy);

$$exy1 := -\frac{\left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) \beta(x)}{\theta(x,y)} - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) + \frac{v(x,y)\alpha(y)}{D} + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right)$$

> v1:=rhs(isolate(exy1,v(x,y)));

$$v1 := \frac{\left( \frac{\left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) \beta(x)}{\theta(x,y)} + \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) - \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right) \right) D}{\alpha(y)}$$

> v2:=rhs(isolate(eyz,v(x,y)));

$$v2 := \frac{\left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x,y) \right) D}{\theta(x,y)}$$

> ea:=numer(simplify(v2-v1));

$$ea := D \left( \left( \frac{\partial}{\partial y} \theta(x,y) \right) \alpha(y) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \theta(x,y) \right) \beta(x) - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) \theta(x,y) \right)$$

$$+ \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right) \Theta(x, y)$$

> theta(x,y):=exp(phi(x,y)/D);

$$\Theta(x, y) := e^{\left( \frac{\phi(x, y)}{D} \right)}$$

> ea;

$$D \left( \frac{\left( \frac{\partial}{\partial y} \phi(x, y) \right) e^{\left( \frac{\phi(x, y)}{D} \right)} \alpha(y) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y) \right) e^{\left( \frac{\phi(x, y)}{D} \right)} \beta(x)}{D} - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) e^{\left( \frac{\phi(x, y)}{D} \right)} + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right) e^{\left( \frac{\phi(x, y)}{D} \right)} \right)$$

> ea1:=simplify(ea/exp(phi(x,y)/D));

$$ea1 := \left( \frac{\partial}{\partial y} \phi(x, y) \right) \alpha(y) - \left( \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y) \right) \beta(x) - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) D + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right) D$$

> ea2:=subs(diff(phi(x,y),y)=I\*diff(phi(x,y),x),ea1);

$$ea2 := \left( \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y) \right) \alpha(y) I - \left( \frac{\partial}{\partial x} \phi(x, y) \right) \beta(x) - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) D + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right) D$$

> phi0:=rhs(pdsolve(ea2,phi(x,y),build));

$$\phi0 := \int \frac{\left( - \left( \frac{d}{dy} \alpha(y) \right) + \left( \frac{d}{dx} \beta(x) \right) \right) D}{-I \alpha(y) + \beta(x)} dx + \_F1(y)$$

Uma vez que existem três funções arbitrárias presentes na definição do potencial velocidade, o respectivo campo de escoamento possui graus de liberdade suficientes para

representar a hidrodinâmica local do corpo hídrico em subdomínios relativamente extensos.

## APÊNDICE C – OBTENÇÃO DE TERMOS DIFUSIVOS A PARTIR DE PARCELAS PURAMENTE ADVECTIVAS – ANÁLISE EM GRANULAÇÃO GROSSEIRA

Como mencionado na seção 4.5, não é possível conceber processos difusivos em escala molecular. Isto ocorre porque o meio difusivo é composto, em última análise, de moléculas que não podem ser fragmentadas e espargidas isotropicamente em torno de suas vizinhanças. Em outras palavras, a hipótese do contínuo não deve ser considerada seriamente quando fenômenos de transporte são analisados nessa escala de observação.

Dessa forma, os termos difusivos presentes nas equações que descrevem fenômenos dessa natureza só poderão surgir de uma análise em baixa resolução espacial de termos puramente advectivos. A fim de exemplificar o argumento exposto, considere-se o processo de obtenção de uma estimativa para o valor médio de um termo advectivo unidimensional em uma escala comparável a de um percurso livre médio das moléculas que compõem o meio material. Esse valor médio é definido como:

$$\overline{u \cdot \frac{\partial C}{\partial x}} = \frac{1}{l} \int_0^l u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \cdot dx \quad (1)$$

Efetuada a integração por partes, resulta:

$$\frac{1}{l} \int_0^l u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \cdot dx = \frac{1}{l} \left[ \left( \int_0^l \frac{u \cdot dx}{\phi} \right) \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right]_0^l - \frac{1}{l} \int_0^l \left( \int_0^l \frac{u \cdot dx}{\phi} \right) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cdot dx \quad (2)$$

Na equação acima,  $\phi$  representa o respectivo potencial velocidade. A segunda parcela do membro direito de (2) também deve ser avaliada utilizando integração por partes:

$$\frac{1}{l} \int_0^l \phi \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cdot dx = \frac{1}{l} \left[ \left( \int_0^l \phi \cdot dx \right) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right]_0^l - \frac{1}{l} \int_0^l \left( \int_0^l \phi \cdot dx \right) \cdot \frac{\partial^3 C}{\partial x^3} \cdot dx \quad (3)$$

Na equação (3) a derivada de terceira ordem foi desprezada pelo fato de representar um termo colisional cuja ocorrência é bastante improvável. Esta premissa baseia-se na hipótese de que uma molécula provavelmente não sofrerá mais de uma colisão ao longo de um percurso livre médio. Como consequência dessa premissa, a derivada segunda da distribuição de concentrações é tomada como constante, de modo que a primeira parcela do membro direito de (3) pode ser aproximada da seguinte forma:

$$\frac{1}{l} \cdot \left[ \left( \int \phi \cdot dx \right) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right]_0^l \cong \frac{1}{l} \cdot \left[ \int \phi \cdot dx \right]_0^l \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} . \quad (4)$$

Além disso, a primeira parcela do membro direito de (2) pode ser aproximada como:

$$\frac{1}{l} \cdot \left[ \phi \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \right]_0^l \cong \frac{1}{l} \cdot \phi'_0 \cdot \frac{\partial C}{\partial x} \cong \bar{u} \cdot \frac{\partial C}{\partial x} , \quad (5)$$

onde  $\bar{u}$  representa a velocidade média de translação da molécula:

$$\frac{1}{l} \cdot \phi'_0 = \frac{\phi_l - \phi_0}{l} \cong \frac{\partial \phi}{\partial x} \cong \bar{u} . \quad (6)$$

Uma vez que

$$\left[ \int \phi \cdot dx \right]_0^l = \frac{\int \phi \cdot dx \Big|_l - \int \phi \cdot dx \Big|_0}{l} \cong \frac{\partial \left( \int \phi \cdot dx \right)}{\partial x} \cong \phi , \quad (7)$$

a equação (4) se reduz a :

$$\frac{1}{l} \cdot \left[ \left( \int \phi \cdot dx \right) \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right]_0^l \cong \frac{1}{l} \cdot \phi \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} . \quad (8)$$

Entretanto, a função potencial velocidade quando analisada em microescala assume uma definição idêntica ao coeficiente de difusão, conforme estabelecido pela Mecânica Estatística [Reichl, 1980]:

$$\phi = \int_0^l u \cdot dx \cong \int_0^l \frac{x}{t} \cdot dx = \frac{x^2}{2t} \Big|_0^l = \frac{l^2}{2t} = \frac{l^2}{2\tau} = D \quad , \quad (9)$$

onde  $\tau$  é o chamado “período de colisão”, que representa o intervalo de tempo médio decorrido entre duas colisões sucessivas.

Este resultado corrobora a hipótese mencionada na seção 4.5, segundo a qual a principal força motriz responsável pelo processo difusivo não é o gradiente de potencial químico, mas a hidrodinâmica do sistema. Assim, o gradiente de potencial químico, que nas circunstâncias consideradas se reduz a diferenças locais de concentração, constitui meramente uma condição necessária para que seja detectado fluxo efetivo de massa. Substituindo os resultados obtidos no membro direito da equação (2), resulta:

$$\frac{1}{l} \int_0^l u \cdot \frac{\partial C}{\partial x} = \bar{u} \frac{\partial C}{\partial x} - D \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (10)$$

A expressão acima mostra que, embora as moléculas que compõem o meio material executem efetivamente apenas movimento translacional, o termo difusivo emerge de uma observação em macroescala do ruído sobreposto ao campo médio de velocidades. Esse ruído proporciona a dispersão do poluente na direção transversal às linhas de corrente deste campo médio.

## ANEXO I - DEDUÇÃO DAS EQUAÇÕES KdV A PARTIR DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

fonte: <http://panda.unm.edu/Courses/Finley/p573/solitons/KdVDeriv.pdf>

### The Korteweg-De Vries Equation: A Derivation

We begin with the standard “conservation” equations for fluid motion:

$$\begin{aligned}\partial_t \rho + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) &= 0, \\ \rho(\partial_t + \vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} &= -\nabla P + \vec{f},\end{aligned}\tag{1}$$

where  $\rho$  is the density and  $\vec{v}$  the velocity of the fluid, while  $P$  is the internal pressure and  $\vec{f}$  is the external force density. The first one is a statement about conservation of mass, the second one about conservation of momentum. We next assume that our fluid is incompressible and irrotational, which gives us the additional constraints:

$$\nabla \rho = 0, \quad \partial_t \rho = 0, \quad \nabla \times \vec{v} = 0.\tag{2}$$

The last equation allows us to consider the velocity in terms of some potential, and insertion of that form into the first of our hydrodynamic equations requires that this potential satisfy Laplace’s equation:

$$\vec{v} = \nabla \phi, \quad \nabla^2 \phi = 0,\tag{3}$$

with the momentum density equation still to be satisfied as well. Considering that one further, we first note that we intend to consider the case when the external force is that caused by gravity, so that we will set  $\vec{f} = -\rho g \hat{y}$ . Next we will note the following 3-vector identity, which is quite useful for irrotational vectors:

$$\begin{aligned}\vec{v} \times (\nabla \times \vec{v}) &= -(\vec{v} \cdot \nabla) \vec{v} + \frac{1}{2} \nabla (\vec{v}^2), \\ \text{Proof: } [\vec{v} \times (\nabla \times \vec{v})]^\ell &= \epsilon^{\ell mi} v_m \epsilon_{ijk} \partial^j v^k = \delta_{jk}^{\ell m} v_m \partial^j v^k = v_m \partial^\ell v^m - v_m \partial^m v^\ell.\end{aligned}\tag{4}$$

As our velocity field has zero curl, i.e., is irrotational, this allows us the easy substitution generated by Eq. (4), which then allows the entirety of the momentum equation to be written as a gradient:

$$\nabla \left( \partial_t \phi + \frac{1}{2} \vec{v}^2 + P/\rho + gy \right) = 0.\tag{5}$$

We note then that the quantity under the  $\nabla$  must then depend only on the time, which is a term that may be absorbed into our potential function, since adding a function only of the time will not affect its role, namely to determine the velocities. This gives us then two equations to determine our potential, namely Laplace’s equation and the following one:

$$\partial_t \phi + \frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + P/\rho + gy = \partial_t \phi + \frac{1}{2} (u^2 + v^2) + P/\rho + gy = 0, \quad \vec{v} = \nabla \phi \equiv u \hat{x} + v \hat{y}.\tag{6}$$

We must now describe the problem, set up the geometry, and, in particular, determine the boundary conditions. We are interested in the (irrotational) flow of this (incompressible) water down a long channel which is so narrow as to allow us to consider it one-dimensional. We therefore set up an  $\hat{x}$ -axis along the length of the channel, and a  $\hat{y}$ -axis vertically, ignoring totally the  $\hat{z}$ -direction. The meaning of shallow is that the waves that we want to study should be much longer than the depth of the water; a very different way of saying this is that we are making a *long wavelength approximation*. We describe this in some detail by saying that the depth of the water at rest is given by  $h$ , a characteristic length of the waves to be searched for is given by  $\ell$  and we assume that  $\ell \gg h$ . On the other hand, we also want, surely, to have this irrotational flow, i.e., we want to avoid any turbulence in the motion; therefore, we propose as well to restrain these searched-for waves so that their amplitude is characterized by some length  $a$ , and we require that  $a \ll h$ . It will be useful to define two small quantities, created by these requirements:

$$\epsilon \equiv \frac{a}{h}, \quad \delta \equiv \left( \frac{h}{\ell} \right)^2,\tag{7}$$



and we propose to treat both of these quantities as perturbations to the simple, laminar flow, and to suppose that they are both of the same (small) size. Although they appear “different,” since they are different powers of their ratios, we will see that, modulo overall factors, only this quadratic power of  $h/\ell$  actually appears in the final equations.

As well we suppose that the surface of the water at rest is the zero for the vertical direction, so that the bottom of the channel corresponds to  $y = -h$ , and, also we take the pressure to vanish at, and near, the surface. [This gives us what is often referred to as Bernoulli’s equation.] As the bottom is rigidly fixed, the water cannot move it, so that a boundary condition is surely that

$$(\vec{v})^y|_{\text{bottom}} = v|_{\text{bottom}} = \frac{\partial\phi}{\partial y}(x, 0) = 0 . \quad (8)$$

We will take some amplitude for the travelling waves,  $\eta = \eta(x, t)$ , so that the surface of the liquid that has waves travelling on it will be given by

$$\begin{aligned} y|_{\text{surface}} &= h + \eta(x, t) , \\ \implies v|_{\text{surface}} &= \frac{dy}{dt}|_{\text{surface}} = \partial_t\eta + \partial_x\eta \frac{dx}{dt}|_{\text{surface}} , \\ \implies \phi_y|_{\text{surface}} &= \partial_t\eta + \phi_x|_{\text{surface}}\partial_x\eta . \end{aligned} \quad (9)$$

We may also re-write Eq. (6) at the surface, remembering that the pressure vanishes there:

$$\phi_t|_{\text{surface}} + \frac{1}{2}(u^2 + v^2)|_{\text{surface}} + g\eta = 0 , \quad (10)$$

where I have ignored the constant term  $gh$ .

It is of some mild interest to first resolve these equations for gravity-forced, linear waves before running ahead to obtain the (better, nonlinear) approximation that gives the KdV equation. To do that we consider first the linear approximation to all the above equations, which amounts to considering them for very small amplitudes:

$$\begin{aligned} \nabla^2\phi &= 0 , \quad \phi_y(x, y = -h) = 0 , \\ \text{and at the surface: } \partial_t\eta - \partial_y\phi &= 0 = \partial_t\phi + g\eta . \end{aligned} \quad (11a)$$

We first eliminate the wave amplitude function,  $\eta$  from the three equations other than the last one, by differentiating it and substituting, which gives

$$\partial_{tt}\phi + g\partial_y\phi = 0 , \quad (11b)$$

and allows us to use that last equation to determine  $\eta$  when we have found the potential  $\phi$ . To do that, since we know we are interested in wavelike solutions, we first propose an ansatz

$$\phi = Y(y) \sin(kx - \omega t) . \quad (11c)$$

The Laplace equation requires that  $Y = Ae^{ky} + Be^{-ky}$ . When this is inserted into the boundary condition at the bottom, we find that  $B/A = e^{-2kh}$ , which then gives us a form for  $\phi$ :

$$\phi = 2Ae^{-kh} \cosh k(y + h) \sin(kx - \omega t) . \quad (11d)$$

Inserting this into the requirement we had that eliminated  $\eta_t$ , earlier, i.e., Eq. (11b), gives us an equation for the frequency:

$$\omega^2 = gk \tanh k(y+h)|_{\text{surface}} = gk \tanh kh . \quad (11e)$$

Lastly, we may use that “extra” equation to determine the wave amplitude:

$$\eta = -\frac{1}{g} \phi_t = A \sqrt{(2k/g) \sinh(2kh)} \sin(kx - \omega t) . \quad (11f)$$

We see that the wave has an interesting wavelength-dependent amplitude, and a dispersion relation for its frequency that says that  $\omega$  is just proportional to  $k$ , with factor between them, i.e., the speed, equal to  $c_0 \equiv \sqrt{gh}$ , for very long wavelengths, i.e.,  $k$  near 0, but which goes more like  $\sqrt{g/k} = c_0/\sqrt{kh} = 2\pi c_0 \sqrt{\lambda/h}$  as the wavelengths become shorter. This tells us that the important factor, defining what it means for the wavelength to be longer, or shorter, is the ratio of the wavelength to the depth,  $h$ , of the channel; as well, of course, since this last relationship is the limit for very short wavelengths, that the long wavelength waves travel faster and with less dispersion.

Now let us go forward, with the insight created by this simpler example, and look in some detail at the next higher levels of perturbation to this problem. Returning to Eq. (6), and differentiating it along the channel, i.e., with respect to  $x$ , and evaluating at the surface of the water, we obtain

$$\phi_{xt} + \phi_x \phi_{xx} + \phi_y \phi_{xy} + g\eta_x = u_t + uu_x + vv_x + g\eta_x = 0 . \quad (12)$$

We then take a standard sort of an approach for small amplitude deviations and expand  $\phi$  in a power series in  $y$ :

$$\phi = \sum_0^{\infty} y^n \phi_n(x, t) \quad \implies \quad \phi_y = \sum_1^{\infty} n y^{n-1} \phi_n . \quad (13)$$

Evaluating our constraint at the bottom, Eq. (8), gives us the important requirement that

$$\phi_1 = 0 . \quad (14)$$

On the other hand, insertion of this sum into Laplace’s equation gives us the following, generating a recursion relationship among the coefficients:

$$\sum_0^{\infty} y^n \{ \phi_{n,xx} + (n+2)(n+1)\phi_{n+2} \} = 0 \quad \implies \quad \phi_{n,xx} + (n+2)(n+1)\phi_{n+2} = 0 . \quad (15)$$

As we already know that  $\phi_1 = 0$ , this tells us that all the odd terms vanish, and we have the straightforward form for  $\phi$  given by

$$\begin{aligned} \phi &= \sum_{m=0}^{\infty} \frac{(-1)^m y^{2m}}{(2m)!} f^{(2m)} , \quad f \equiv \phi_0(x, t) , \\ \implies \quad \begin{cases} u = \phi_x = f_x - \frac{1}{2}y^2 f_{xxx} + \dots , \\ v = \phi_y = -y f_{xx} + \frac{1}{6}y^3 f_{xxxx} + \dots . \end{cases} \end{aligned} \quad (16)$$

where the notation  $f^{(2m)}$  refers to the  $2m$ -derivative of  $f$  with respect to  $x$ .

At this point, when dealing perturbatively with a nonlinear problem, it is quite useful to first create some new, dimensionless variables, which will allow us to introduce the quantities of small order already

named earlier. We scale the horizontal distance in terms of its characteristic length,  $\ell$ . We scale the time in terms of the simplest, linear speed,  $c_0 \equiv \sqrt{gh}$ , from Eq. (11e) above, and the amplitude in terms of its maximum  $a$ , so that, eventually, we define the following dimensionless variables via the following scalings, where we recall that our potential has such dimensions that its derivative, with respect to either  $x$  or  $y$ , should be a velocity:

$$\begin{aligned} \bar{x} &\equiv \frac{x}{\ell}, & \bar{y} &\equiv \frac{y}{h}, & \bar{t} &\equiv \frac{t}{\ell/c_0} \\ \bar{\eta} &\equiv \frac{\eta}{a}, & \bar{\phi} &\equiv \frac{h\phi}{a\ell c_0} = \frac{\phi}{\epsilon\ell c_0}, & \implies & \text{the surface is now at } \bar{y} = 1 + \epsilon\bar{\eta}, \\ & & \implies & \begin{cases} \bar{u} = u/\epsilon c_0, \\ \bar{v} = (\delta/\epsilon c_0)v, \\ \bar{f} = f/\epsilon\ell c_0. \end{cases} & & \end{aligned} \quad (17)$$

The dimensionless versions of the equations of interest may now be worked out. It is useful to first write out the equations for the (dimensionless) velocity components in this approach, to lowest order in small quantities, where I recall that  $\epsilon$  and  $\delta$  are of the same order of smallness, so that the symbol  $O^2$  means any terms of second-order in these quantities, such as  $\epsilon\delta$ ,  $\epsilon^2$ , or  $\delta^2$ :

$$\begin{aligned} \bar{\phi} &= \bar{f} - \frac{1}{2}(1 + \epsilon\eta)^2 \delta \bar{f}_{\bar{x}\bar{x}} + O^2, \\ \bar{u} &= \bar{f}_{\bar{x}} - \frac{1}{2}\delta \bar{f}_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}} + O^2, & \bar{v} &= -\delta \left[ (1 + \epsilon\bar{\eta}) \bar{f}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{6}\delta \bar{f}_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}} + O^2 \right]. \end{aligned} \quad (18)$$

With that available, we now re-write our constraint on the vertical liquid velocity, as given in Eq. (9), in terms of these quantities, and then divide out by the common factor  $\epsilon c_0/\delta^{1/2}$ , which gives

$$\bar{\phi}_{\bar{y}} = \delta(\bar{\eta}_{\bar{t}} + \epsilon\bar{\eta}_{\bar{x}}\bar{\phi}_{\bar{x}}). \quad (19a)$$

When our expansions for these quantities, in Eqs. (16), are inserted, a common factor of  $\delta$  emerges, which we divide out, and the result is then

$$\bar{\eta}_{\bar{t}} + \epsilon\bar{\eta}_{\bar{x}}\bar{f}_{\bar{x}} + (1 + \epsilon\bar{\eta})\bar{f}_{\bar{x}\bar{x}} - \frac{1}{6}\delta\bar{f}_{\bar{x}\bar{x}\bar{x}\bar{x}} + O^2 = 0. \quad (19b)$$

In the same way our other boundary condition at the surface, Eq. (10), when these re-definitions are inserted, and when it is divided out by the common factor  $ag$ , gives us

$$\bar{\phi}_{\bar{t}} + \frac{1}{2}\epsilon[(\bar{\phi}_{\bar{x}})^2 + (\bar{\phi}_{\bar{y}})^2/\delta] + \bar{\eta} = 0. \quad (20a)$$

Again when the expansions of these quantities are inserted, we obtain

$$\bar{f}_{\bar{t}} - \frac{1}{2}\delta\bar{f}_{\bar{x}\bar{x}\bar{t}} + \frac{1}{2}\epsilon(\bar{f}_{\bar{x}})^2 + \bar{\eta} + O^2 = 0. \quad (20b)$$

As previously, when we looked at the linear problem, it is useful to go ahead and find how this equation changes along the channel. Therefore, we differentiate it with respect to  $x$ , and then re-write both that equation and the previous Eq. (19b) using  $w \equiv \bar{f}_{\bar{x}}$ . At the same time, since all our variables are now in this dimensionless form, we stop writing explicitly the overbars, remembering from now on that all our variables are in fact dimensionless and, were we to want to go backwards we would have to use Eqs. (17):

$$\begin{aligned} w_t - \frac{1}{2}\delta w_{xxt} + \epsilon w w_x + \eta_x &= 0, \\ \eta_t + \epsilon w \eta_x + (1 + \epsilon\eta)w_x - \frac{1}{6}\delta w_{xxx} &= 0, \end{aligned} \quad (21)$$

where, lastly, we have also stopped writing down the reminder that all these equations are correct only to second-order, in  $\epsilon$  and  $\delta$ , separately.

We now need to resolve this complicated pair of equations into something more manageable. The clear beginning is to make sure that the equations are satisfied to zero-th order. Therefore, ignoring both the  $\epsilon$ - and the  $\delta$ -terms, the current pair of equations reduces simply to

$$w_t + \eta_x = 0 = w_x + \eta_t . \quad (22a)$$

We may separate the unknown functions in this pair of equations, which then implies that

$$w_{tt} = w_{xx} \quad \text{and} \quad \eta_{xx} = \eta_{tt} . \quad (22b)$$

In other words, at the lowest order, it is necessary that both  $w$  and  $\eta$  satisfy waves equations that have (dimensionless) speed 1, as already expected by the method which we used to make the variables dimensionless. The next requirement, then, is an ansatz based on the thought that  $w$  and  $\eta$  seem fairly similar, and that their differences are probably somewhere in, at least, first-order terms. Therefore, we now suppose that there may exist a solution for  $w$  in terms of  $\eta$  plus small terms:

$$w \equiv \eta + \epsilon F + \delta G + O^2 , \quad (23)$$

where  $F$  and  $G$  depend on  $x$  and  $t$ , and it is important to recall that the physical meanings of  $\epsilon$  and  $\delta$  are quite different, so that, in principle even though they are the same approximate size they are quite different and therefore must be studied separately. It is for this reason that we write an additional, first-order term for the difference between  $w$  and  $\eta$  for each of them. Since we must still satisfy Eqs. (22), we insert this ansatz into them, which implies that  $\eta_t + \eta_x$  is of first order in  $\epsilon$  and  $\delta$ . This will be important because we will soon find a term in our equations which is of the form  $\delta(\eta_x - \eta_t)$ , which we see must be the same as  $\delta(2\eta_x) + O^2$ . On the other hand, we have already seen that to lowest order we must have  $w_t + w_x$  to vanish; therefore, we must impose on our “extra terms,” i.e.,  $F$  and  $G$ , which are already multiplied by a small parameter, that they also have this property:  $F_x + F_t = O^1$  and  $G_x + G_t = O^1$ . With these provisos in hand, we now insert this ansatz into our two equations, Eqs. (21), and note that the purpose is to determine consistently the functions  $F$  and  $G$  in such a way that both our equations are satisfied, at least to the order at which they have been written. These equations then take the following form:

$$\begin{aligned} \eta_t + \eta_x + \epsilon(F_t + \eta\eta_x) + \delta(G_t - \frac{1}{2}\eta_{xxt}) &= 0 , \\ \eta_x + \eta_t + \epsilon(F_x + 2\eta\eta_x) + \delta(G_x - \frac{1}{6}\eta_{xxx}) &= 0 ; \end{aligned} \quad (24)$$

where of course we have now dropped any explicit statement that there are higher-order terms which are being ignored.

The next thing to do is to subtract these two equations, which cancels out the zero-th order terms, although we do, eventually, need to ensure that we have satisfied both of them:

$$\epsilon(F_x - F_t + \eta\eta_x) + \delta(G_x - G_t - \frac{1}{6}\eta_{xxx} + \frac{1}{2}\eta_{xxt}) = 0 . \quad (25a)$$

However, our requirements in the previous paragraph relate, at appropriate orders, the  $x$  and  $t$  derivatives that appear above. As well, we recall that  $\epsilon$  and  $\delta$  should be treated independently—which is why we inserted two multipliers for them in our first-order ansatz above. Therefore we now end up with two rather simple equations that determine  $F$  and  $G$ , modulo ...

$$\begin{aligned} 2F_x = -\eta\eta_x = -\frac{1}{2}(\eta^2)_x , \quad 2G_x &= \frac{2}{3}\eta_{xxx} , \\ \implies F = -\frac{1}{4}\eta^2 , \quad G = \frac{1}{3}\eta_{xx} , \\ \implies w = \eta - \frac{1}{4}\epsilon\eta^2 + \frac{1}{3}\delta\eta_{xx} + O^2 . \end{aligned} \quad (25b)$$

We lastly insert this form for  $w$  into either one of the two original equations in the set Eqs. (21); we choose the second one, which gives us the form:

$$\eta_t + \eta_x + \frac{3}{2}\epsilon\eta\eta_x + \frac{1}{6}\delta\eta_{xxx} . \quad (26)$$

This is essentially the KdV equation; however, we still need to do some “prettifying.” We begin by re-scaling, one last time, the variables, to eliminate the first-order small coefficients. Since the equation is nonlinear and involves three quantities for which we may choose new scales, there are quite a few ways to do this, depending on the order. Perhaps the most straightforward is to first eliminate the (linear)  $\eta_x$  term. We do this as follows, by translating  $\eta$  by a constant:

$$\eta_x + \frac{3}{2}\epsilon\eta\eta_x = \eta_x(1 + \frac{3}{2}\epsilon\eta) = \frac{3}{2}\epsilon\eta_x(\eta + \frac{2}{3}/\epsilon) = \frac{3}{2}\epsilon(\eta + \frac{2}{3}/\epsilon)_x(\eta + \frac{2}{3}/\epsilon) \equiv \frac{3}{2}\epsilon\sigma_x\sigma , \quad (27)$$

where  $\sigma \equiv \eta + \frac{2}{3}/\epsilon$  is simply the original wave amplitude translated by this “large” constant value. The equation then becomes

$$\sigma_t + \frac{3}{2}\epsilon\sigma\sigma_x = \frac{1}{6}\delta\sigma_{xxx} . \quad (28)$$

Next, we choose to re-scale  $\sigma$  and  $t$  as follows, and then dividing the overall equation by  $\delta$ :

$$\left. \begin{array}{l} \sigma = (\delta/\epsilon)\rho , \\ t = \tau/\delta , \end{array} \right\} \implies \rho_\tau + \frac{3}{2}\rho\rho_x + \frac{1}{6}\rho_{xxx} = 0 . \quad (29)$$

This is a perfectly reasonable form for our equation. On the other hand, there are still many things that are done to make it even “cleaner”; unfortunately, at this point there is no consensus at all concerning what should be done. I will take the one which I prefer, noting the others. One of the options is to change, or not to change, the sign of  $x$  (or  $\tau$ ) so that the wave motion is toward increasing values of  $x$  instead of the other way around. An entirely different sort of option is to re-scale one last time the wave amplitude  $\rho$  so as to arrange the numerical constants in the equation according to one’s liking. It is true that if we arrange the nonlinear term to have the coefficient 6 then other things become simpler; on the other hand, the coefficient 1 is also quite nice. Lastly, some people really want to have a coefficient 4 multiplying the term which is a time derivative. I will then choose to re-scale one last time with

$$\left. \begin{array}{l} \tau \equiv -6t , \\ \rho \equiv u/9 , \end{array} \right\} \implies u_t = uu_x + u_{xxx} . \quad (30)$$

It is also perhaps worthwhile, and certainly interesting, to recall the relationship of these latest variables to the original physical ones:

$$\eta = \frac{1}{9\epsilon}(\delta u - 6) , \quad t = -\frac{6\ell^2}{\delta c_0}t , \quad (31)$$

where in the second equation the symbol  $t$  on the left is the physical time, while the one on the right is simply the dimensionless variable we are using in our form of the equation.