

UNIDADE 2
FUNDAMENTOS DA TEORIA DA DINÂMICA
DOS FLUIDOS

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

CURRÍCULO RESUMIDO



Maria Fernanda Mendes Fiedler,

Oceanógrafa, trabalha desde 02/2010 na empresa Applied Science Associates - Latin America. Especialista em análise de dados ambientais, modelagem hidrodinâmica, modelagem de ondas, modelagem de transporte de sedimentos e modelagem de transporte de óleo.

REVISORES TÉCNICOS

Itaipu Binacional:

Caroline Henn

Anderson Braga Mendes

Agência Nacional de Águas – ANA:

Flávia Carneiro da Cunha Oliveira

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Sumário

LISTA DE FIGURAS.....	04
LISTA DE TABELAS.....	04
1 FUNDAMENTOS DA TEORIA DA DINÂMICA DOS FLUIDOS.....	05
1.1 Hipótese do Contínuo.....	05
1.2 Descrição Lagrangeana e Euleriana do Movimento dos Fluidos.....	06
1.3 Fluidos Incompressíveis.....	08
1.4 Equações do Escoamento.....	08
1.5 Simplificação das Equações.....	15
1.5.1 Aproximação de Boussinesq.....	16
1.5.2 Aproximação Hidrostática.....	17
1.5.3 Aproximação Quasi-3D.....	18
1.5.4 Modelos do Escoamento Médio via Técnicas de Filtragem.....	18
1.5.5 Transporte de Constituintes.....	20
1.6 Equação de Balanço de Massa.....	28
REFERÊNCIA.....	30

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Esquema ilustrando as representações euleriana (volume de controle) e lagrangeana (volume de material).

Figura 2 - Espectro de Energia Cinética Turbulenta.

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Significado dos termos contidos na equação de Navier-Stokes.

Tabela 2 - Coeficientes de difusão molecular para substâncias típicas.

1 FUNDAMENTOS DA TEORIA DA DINÂMICA DOS FLUIDOS

O movimento das águas em ecossistemas aquáticos continentais ocorre em resposta a diversas forças, como o vento, que transfere energia para a superfície da água. Os movimentos gerados na superfície causam a dispersão de compostos químicos e organismos aquáticos. As correntes levam à heterogeneidade espacial desses compostos e de comunidades biológicas, afetando também as interações tróficas. A hidrodinâmica é, portanto, responsável pela mistura horizontal e vertical das águas em lagos, estuários e reservatórios (Fragoso et al, 2009).

Apesar do movimento das águas em lagos ser bem entendido teoricamente, de acordo com o mesmo autor, a simulação desse movimento em uma escala espacial e temporal longa, não é tão simples. Para aumentar o entendimento sobre o sistema a ser estudado, podem ser implementados modelos hidrodinâmicos.

Os modelos hidrodinâmicos são baseados no princípio de conservação de massa e do momento. Essa unidade tem como objetivo apresentar os Fundamentos da Teoria da Dinâmica dos Fluidos, fundamental para o entendimento e aplicação da modelagem numérica.

1.1 Hipótese do Contínuo

Os fluidos são compostos de moléculas em movimento, onde ocorrem colisões frequentes. Analisar a ação de cada molécula é pouco prático na maioria dos problemas. Interessam as manifestações médias mensuráveis de várias moléculas (como densidade, pressão e temperatura).

O conceito de contínuo é a base da mecânica dos fluidos clássica. Embora o fluido seja composto de moléculas, nosso interesse são os efeitos médios ou macroscópicos de muitas moléculas (uma porção de fluido). Assim o fluido é modelado como uma massa contínua e indivisível (e não um conjunto de moléculas).

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Esta definição auxilia em muito na análise de problemas de mecânica dos fluidos, pois permite que as propriedades dos fluidos, como massa específica, velocidade, sejam funções contínuas no espaço e no tempo.

Esta hipótese é válida somente quando as dimensões envolvidas no problema são muito, muito maiores que o caminho livre médio das moléculas (Mecânica dos Fluidos), pois se desprezam o espaçamento e atividades moleculares, ou seja, entre as moléculas se supõe não haver vazios (Loureiro, 2012).

1.2 Descrição Lagrangeana e Euleriana do Movimento dos Fluidos

O **método de Lagrange** descreve o movimento de cada partícula, acompanhando-a em sua trajetória total. O observador desloca-se simultaneamente como a partícula. As partículas individuais são observadas como uma função do tempo.

O **método de Euler** consiste em adotar um intervalo de tempo, escolher uma seção ou um volume de controle no espaço e considerar todas as partículas que passem por esse local. Na descrição Euleriana do movimento, as propriedades do escoamento são função do espaço (pontos de observação) e do tempo.

Para facilitar o entendimento, a figura 1 adaptada de Price (2006), ilustra um campo de velocidades, representado por uma matriz de vetores de velocidade:

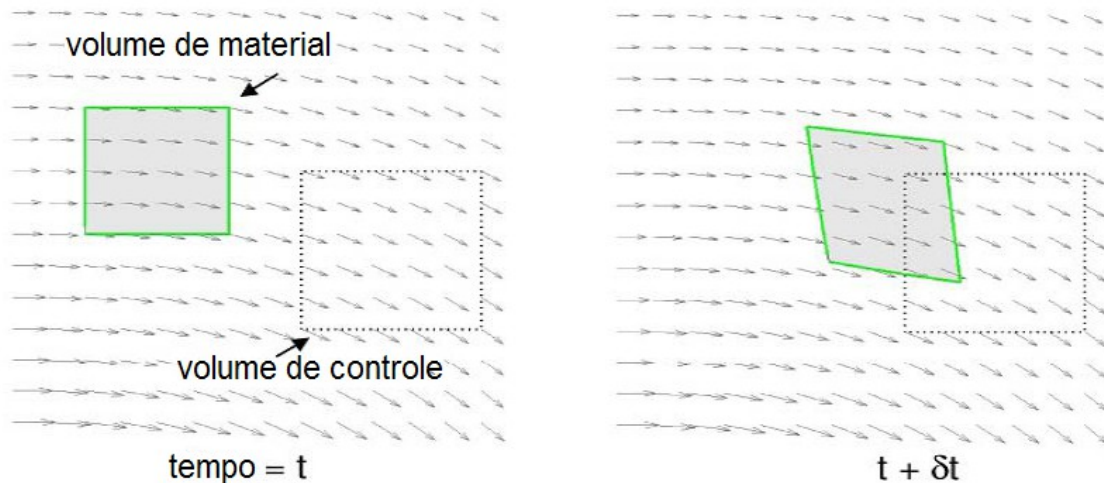
- Dentro deste campo de velocidades há um volume de material (contorno verde) e um volume de controle (contorno pontilhado);
- O volume de material (**lagrangeano**) é composto de parcelas específicas de um fluido que são transportadas com o fluxo;
- O volume de controle (**euleriano**) é fixo no espaço, e os seus lados são imaginários, ou seja, não representa uma barreira, e o fluxo passa livremente. Há controle do que passa por este volume de controle;
- Na representação lagrangeana se determina a posição e propriedades do volume de material;

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

- Na representação euleriana, observa-se o que passa dentro de um volume de controle.

Figura 1 - Esquema ilustrando as representações euleriana (volume de controle) e lagrangeana (volume de material).



Fonte: Nota do Autor

De acordo com Rosman (2012), focando no caso de manchas e plumas contaminantes (pequenas em relação ao domínio modelado), no SisBAHIA:

- **Metodologias de modelos de transporte Euleriano com discretização adaptativa:** a mancha ou pluma é representada por uma distribuição de concentrações, havendo necessidade de se gerar uma sub malha suficientemente refinada no entorno da mesma de modo a viabilizar o cálculo das concentrações com a acurácia devida. À medida que a mancha ou pluma é transportada e se espalha, a zona de discretização refinada precisa englobá-la, e portanto muda frequentemente.
- **Metodologias de modelos de transporte Lagrangeanos:** a mancha ou pluma é representada por uma nuvem com inúmeras partículas. Como o espaço de posição das partículas é contínuo, o conflito de escalas desaparece, porque a discretização do modelo hidrodinâmico é utilizada apenas para interpolações do campo de velocidades.

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelos Lagrangeanos são absolutamente seguros, não apresentando problemas de conservação de massa que por vezes ocorrem em modelos Eulerianos (Rosman, 2012).

1.3 Fluidos Incompressíveis

Um escoamento incompressível existe se a massa específica de cada partícula de fluido permanece relativamente constante enquanto a partícula se move através do campo de escoamento.

Isso não exige que a massa específica seja constante em todo lugar. Se a massa específica é constante em todo lugar, então, obviamente, o escoamento é incompressível, mas isso seria uma condição mais restrita.

O escoamento atmosférico, no qual $\rho = \rho(z)$, em que z é vertical, assim como os escoamentos que envolvem camadas adjacentes de água doce e salgada, são exemplos de escoamentos incompressíveis nos quais a massa específica varia.

Além de escoamentos de líquidos, escoamentos de gás com baixa velocidade, tais como o escoamento atmosférico, são também considerados como escoamentos incompressíveis.

1.4 Equações do Escoamento

Adaptado de Ji (2008)

A lei de conservação de massa descreve que a massa não pode ser produzida ou destruída. Geralmente essa lei é expressa através da **Equação de Balanço de Massa** (também denominada **Equação da Continuidade**), que considera o fluxo de massa que entra em uma determinada área e o fluxo de massa que deixa determinada área.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Na hidrodinâmica, a equação de conservação de massa é frequentemente ilustrada em e aplicada a "colunas de água". Uma coluna de água seria uma porção de massa d'água que se estende desde a superfície até o fundo - é uma coluna vertical de água "imaginária" utilizada como um volume de controle para propósitos computacionais. Um volume de controle é um domínio espacial para análise separado do restante do espaço por um contorno definido. As variáveis podem entrar, sair e ser armazenadas neste domínio, mas seu contorno (forma) e posição não se modificam. Para uma determinada coluna de água, o fluxo que entra menos o que sai é igual à mudança de volume ao longo do tempo:

$$dm = (m_{in} - m_{out} + m_r) \cdot dt$$

onde:

dm = acúmulo de massa;

m_{in} = taxa de fluxo de entrada de massa;

m_{out} = taxa de fluxo de saída de massa;

m_r = taxa líquida de produção de todas as fontes e sumidouros;

dt = incremento do tempo.

Para desenvolver uma equação em termos de fluxo de massa (a taxa na qual a massa entra ou sai de uma coluna de água), a equação acima é dividida pelo incremento do tempo, dt , resultando na seguinte equação de balanço de massa da água (ou de um poluente qualquer):

$$\frac{dm}{dt} = \frac{\partial m}{\partial t} + \nabla \cdot (m\vec{v}) = m_{in} - m_{out} + m_r$$

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Esta equação é a equação básica de conservação de massa e é utilizada em estudos hidrodinâmicos e de qualidade de água.

Se outros compostos reagirem para formar este poluente, a taxa líquida de produção (m_r) será positiva. Se este poluente reage para formar outros compostos, resulta em uma perda deste poluente e m_r será negativo.

Se ocorrer aumento de um poluente num corpo d'água (um lago, por exemplo) isto se deve a um (ou ambos) dos seguintes motivos:

- Há fontes externas que descarregam no lago;
- Há reações químicas/biológicas de outros compostos que formam este poluente.

Quando as reações de entrada e saída são negligenciadas, a equação diferencial para a conservação de massa será:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v}) = 0$$

Esta é conhecida como a equação da continuidade.

Sob coordenadas cartesianas, tem-se:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho w)}{\partial z} = 0$$

O primeiro termo é a variação relativa da densidade do fluido seguindo o escoamento, e o segundo é a divergência do escoamento.

Para fluidos incompressíveis (ou seja, ρ é considerado constante), ela se reduz a:

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

$$\nabla \cdot \vec{v} = 0$$

Sob coordenadas cartesianas, tem-se:

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

onde:

u , v e w são as componentes da velocidade nas direções x , y e z , respectivamente.

A conservação do momentum pode ser derivada da **segunda lei de Newton**:

$$\vec{F} = m \cdot \vec{a}$$

onde:

\vec{F} = forças externas;

m = massa do objeto;

\vec{a} = aceleração do objeto.

Além das forças externas (como por exemplo o vento), há três forças importantes para a hidrodinâmica:

- Forças gravitacionais: devido à ação gravitacional da terra;
- Força do gradiente de pressão da água: causada pelo gradiente de pressão em um corpo d'água;
- Força de viscosidade: devido à viscosidade da água e a difusão turbulenta.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Assim, a **equação de momentum** (que tem origem na segunda lei de Newton):

$$\rho \frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{v} \vec{v}) = \rho \{ \vec{g} - \nabla p + \vec{f}_{vis} \}$$

onde:

\vec{f}_{vis} = forças de viscosidade;

p = pressão da água;

\vec{g} = força da gravidade;

ρ = densidade da água;

Essa última equação não inclui a forçante do vento, que pode ser incorporada como condições de contorno.

A força de **pressão** enquadra-se no grupo das forças perpendiculares que atuam sobre um volume de água. Como a pressão é a mesma em faces opostas de um volume, apenas os gradientes de pressão são capazes de produzir a aceleração da água. A aceleração aponta para um gradiente de pressão negativo, pois o sentido do escoamento é de um ponto de maior pressão para um ponto de menor pressão (Fragoso, 2009).

Para um fluido Newtoniano incompressível, a força viscosa pode ser expressa por:

$$\vec{f}_{vis} = \nabla \cdot \vec{\tau} = \mu \nabla^2 \vec{v}$$

onde:

$\vec{\tau}$ = tensão de cisalhamento;

μ = viscosidade absoluta (assume-se constante);

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Um fluido Newtoniano é aquele no qual a tensão é linearmente proporcional à taxa de deformação. Os fluidos mais comuns são Newtonianos (como água e ar).

Sob coordenadas Cartesianas, a tensão de cisalhamento da água é:

$$\tau_{xy} = \mu \frac{dv}{dx}$$

$$\tau_{yx} = \mu \frac{du}{dy}$$

onde:

u = componente da velocidade na direção x;

v = componente da velocidade na direção y.

Quando consideramos as forças externas e de rotação da terra, a equação do momentum muda para:

$$\frac{d\vec{v}}{dt} = \frac{\partial \rho \vec{v}}{\partial t} + \nabla \cdot (\vec{v}\vec{v}) = \vec{g} - \frac{1}{\rho} \nabla p + \nu \nabla^2 \vec{v} + \vec{F}$$

onde:

Ω
= velocidade angular da terra;

\vec{F}_{ext} = forças externas;

$\nu = \frac{\mu}{\rho}$ = viscosidade cinemática.

Esta é a equação de Navier-Stokes, válida para fluidos incompressíveis e Newtonianos. O significado dos termos é apresentado na tabela 1.

Ω

A velocidade angular da terra () está relacionada com o parâmetros de Coriolis (f):

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

$$f=2\sin\phi\Omega$$

onde:

Ω = magnitude da velocidade angular da terra;

ϕ = latitude.

O efeito de Coriolis é produto da rotação do globo relativo a um sistema de referência em movimento (no caso da Terra, girando), sendo essencial para o entendimento da dinâmica da atmosfera e dos oceanos. Não tem um papel importante em ecossistemas aquáticos continentais de pequenas dimensões (Fragoso et al, 2009), porém é significativa quando estudamos grandes corpos d'água.

Tabela 1 - Significado dos termos contidos na equação de Navier-Stokes.

$\frac{d\vec{v}}{dt}$	Termo de aceleração ($\vec{a} = \frac{\vec{F}}{m}$)
$\frac{\partial\vec{v}}{\partial t}$	Taxa local de variação devido a variação do tempo
$\nabla \cdot (\vec{v}\vec{v})$	Taxa de variação devido a advecção do fluxo
\vec{g}	Força gravitacional
$\frac{1}{\rho} \nabla p$	Termo de gradiente de pressão ¹
$\nu \nabla^2 \vec{v}$	Termo de viscosidade ²
$-2\vec{v}\Omega$	Efeito de Coriolis
\vec{F}_{fr}	Forças externas ³

Fonte: Nota do Autor

1 Os gradientes de pressão fazem com que a água se movimente. Os fatores que contribuem para os gradientes de pressão são as variações na superfície da água e as mudanças de densidade.

2 Inclui efeitos de viscosidade da água. Este termo pode ser modificado para representar a mistura turbulenta.

3 Geralmente utilizado para incluir o vento como forçante.

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

A equação de continuidade expressa a conservação de massa de um volume de água e as equações de Navier-Stokes descrevem o escoamento geral dos fluidos. Elas permitem determinar os campos de velocidade, densidade e pressão (Fragoso et al, 2009).

1.5 Simplificação das Equações

As equações vistas até agora fornecem os princípios fundamentais para os modelos hidrodinâmicos. No entanto, estas equações são complexas para serem resolvidas numericamente para grandes domínios e por longos períodos de tempo. Por isso, simplificações são bastante utilizadas.

Uma aproximação muito utilizada para estudo de rios, lagos, estuários e águas costeiras é chamada de aproximação de águas rasas. Esta aproximação assume que as escalas horizontais de interesse são muito maiores que a profundidade da água. Quando a profundidade da água é muito menor que o comprimento da onda, tem-se:

$$\frac{1}{k} = \frac{L}{2\pi}$$

H

onde:

H = profundidade;

k = número de onda;

L = comprimento de onda.

Na aproximação de águas rasas, a celeridade (velocidade de propagação da onda) depende apenas da profundidade:

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

$$c = \sqrt{gH}$$

Neste caso a onda é não dispersiva e a celeridade não depende do número de onda. Assume-se, ainda, que L é muito maior que H . A aproximação de águas rasas

costuma ser utilizada quando $\frac{H}{L} \leq 0,05$.

1.5.1 Aproximação de Boussinesq

A variação temporal da quantidade de movimento pode ser expandida em duas partes: uma devido à variação da velocidade e outra à da massa. Utilizando como base o exemplo dado por Almeida et al (1997):

- Considerando um caso de um corpo d'água onde em um ponto do domínio observa-se variação de velocidade entre -1,0 e +1,0 m/s e de massa específica entre 1020 e 1018 kg/m³, em um intervalo de aproximadamente 6 horas;
- Verifica-se que o módulo da primeira parte será cerca de 1000 vezes maior que o da segunda.

Considerando o explicado acima, pode-se concluir que em corpos d'água naturais, apenas a parte relativa à variação da velocidade é relevante, desprezando-se a segunda parcela e adotando-se a aproximação de Boussinesq.

Ainda no contexto desta aproximação é comum se desprezar a variabilidade da densidade (exceto no termo de gravidade), substituindo-se a densidade variável por uma densidade constante (Almeida et al, 1997).

É utilizada na maior parte dos corpos d'água, onde as variações de densidade são pequenas. As mudanças de densidade devido aos gradientes de pressão, nas

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

equações de momentum horizontal, são negligenciadas. A massa d'água é tratada como incompressível.

1.5.2 Aproximação Hidrostática

Muitos corpos de água superficiais apresentam como característica uma razão de escala horizontal em relação à profundidade muito grande (aproximação de águas rasas). Isto leva a uma aproximação muito utilizada na hidrodinâmica, meteorologia e oceanografia: a aproximação hidrostática. Esta assume que a aceleração vertical pode ser omitida. A partir da equação de Navier-Stokes, a equação de momentum vertical pode ser escrita:

$$\frac{dw}{dt} + g + \frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = 0$$

onde:

w = velocidade vertical;

g = aceleração da gravidade;

ρ = densidade;

p = pressão da água;

t = tempo;

z = coordenada vertical.

A aproximação hidrostática omite o termo $\frac{dw}{dt}$ e leva à seguinte **equação hidrostática**:

$$\frac{1}{\rho} \frac{\partial p}{\partial z} = -g$$

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

A maioria dos modelos hidrodinâmicos 2D e 3D utiliza essa aproximação. Nesse caso, a equação do momentum na vertical é reduzida à equação hidrostática.

A aproximação hidrostática implica que os gradientes de pressão vertical variam apenas com a densidade. No entanto, quando a escala vertical de movimento se aproximar da escala horizontal, a aproximação hidrostática não é mais válida.

De acordo com Almeida (1997) a aproximação hidrostática não deverá ser utilizada na modelagem de escoamentos relativos a fenômenos cujas escalas espaciais sejam menores que vinte vezes a profundidade. Exemplos deste caso são os modelos de agitação por ondas de vento de curto período e modelos de escoamento de plumas emergentes no campo próximo de difusores de emissários.

1.5.3 Aproximação Quasi-3D

Uma alternativa para derivar um modelo 3D é tratar o sistema como uma série de camadas horizontais que interagem entre si. Esta aproximação permite eliminar a equação do momentum na vertical.

1.5.4 Modelos do Escoamento Médio via Técnicas de Filtragem

A dificuldade na utilização de simulações numéricas para a solução de escoamentos turbulentos ocorre devido à não linearidade da turbulência. Surge a partir do momento em que as equações de Navier-Stokes são decompostas, de forma a se expressar o comportamento médio do escoamento separadamente de suas flutuações.

As flutuações precisam, de alguma forma, ser expressas em termo de variáveis, para as quais existam equações. A este procedimento chama-se Modelagem da Turbulência.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Como a turbulência é caracterizada como sendo um fenômeno inerentemente tridimensional e variável no tempo, uma enorme quantidade de informações é necessária para uma completa descrição de um escoamento turbulento (Xavier, 2008).

Com técnicas de filtragem, busca-se reduzir drasticamente a magnitude do problema de simular escoamentos turbulentos, resolvendo apenas o escoamento de grande escala ou "médio", e tratando o escoamento dissipativo de pequena escala via modelos simplificados. Usualmente, as técnicas de filtragem aparecem associadas com a chamada *Large Eddy Simulation*, LES, Simulação de Grandes Vórtices (Wrobel, 1989).

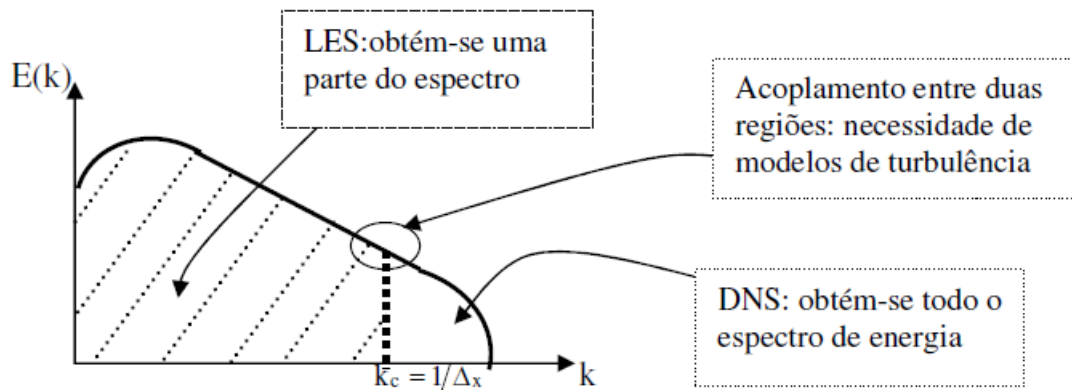
A Simulação de Grandes Vórtices consiste em resolver diretamente, as maiores estruturas turbulentas que contêm a maior parte da energia, e modelar apenas as menores estruturas.

Outra aproximação para modelagem de turbulência seria a *Direct Numerical Simulation*, DNS, Simulação Numérica Direta. Esta resolve todas as escalas, exigindo uma malha suficientemente fina e acarretando em um alto custo computacional. Por isso essa metodologia é usada apenas para baixos números de Reynolds (Xavier, 2008).

Na figura 2 ilustra-se o espectro de energia cinética turbulenta. Se todas as frequências forem consideradas tem-se a DNS, em contraste com a metodologia LES que resolve uma parte do espectro.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Figura 2 - Espectro de Energia Cinética Turbulenta.



Fonte: Silveira Neto (2002 apud Xavier, 2008).

A principal diferença entre as metodologias LES e DNS está no conceito de filtragem, onde se obtém a separação das escalas. Uma variável submetida à filtragem será composta de duas partes: a filtrada, referente às grandes escalas, resolvida diretamente durante a simulação, e a denominada sub malha, não resolvida pela malha, que precisa ser modelada.

1.5.5 Transporte de Constituintes

Um constituinte é um ente que descreve, de alguma forma, o estado da qualidade do meio em que ele se encontra. Outros nomes são por vezes utilizados como sinônimos: poluente, substância e traçador. Uma forma usualmente adotada para se expressar a distribuição de um constituinte é através da concentração, usualmente definida como a quantidade de massa de um constituinte existente por unidade de volume (Porto et al, 1991).

Quando uma carga de constituintes entra num corpo d'água, estará sujeita aos processos de transporte que poderão modificar a sua concentração (Porto et al, 1991):

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

- **Advecção:** nome dado ao transporte de um constituinte pelo campo de velocidades do meio fluido que o contém. É comum supor-se que a velocidade do constituinte seja igual à velocidade do fluido envolvente, embora isto não seja sempre correto (isto pode ser observado no caso de transporte de sedimentos que se precipitam ao longo da direção vertical com uma velocidade diferente da do fluido).
- **Difusão Molecular:** o movimento decorrente da agitação térmica das partículas de um fluido promove o espalhamento das partículas dos constituintes. Este processo faz com que exista um espalhamento do constituinte em um meio mesmo que este meio apresente velocidade média nula. Se ambos (o constituinte e o fluido receptor) possuírem a mesma densidade, existe a tendência de que o constituinte espalhe-se por todo o meio envolvente após um tempo suficientemente longo. Este processo denomina-se difusão molecular, sendo matematicamente representado pela Lei de Fick.
- **Difusão turbulenta:** conceito análogo ao de difusão molecular mas com origem no movimento turbulento dos fluidos. escoamentos turbulentos possuem um poder de espalhamento de constituintes muito mais intenso do que aqueles observados em escoamentos laminares análogos. A difusão turbulenta é causada por turbilhões dos mais variados tamanhos e orientações existentes no escoamento sendo, na verdade, um movimento advectivo com resultados de aparência difusiva.
- **Dispersão:** é o nome dado ao efeito resultante da ação conjunta da difusão molecular e turbulenta e da advecção diferenciada⁴.

De acordo com Almeida et al (1997) os movimentos e transportes resolvíveis são aqueles que podem ser observados e medidos na escala de interesse. Para ser

⁴ Relativa ao fenômeno de cisalhamento (quando camadas adjacentes de um fluido apresentam deslocamento relativo entre si)

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

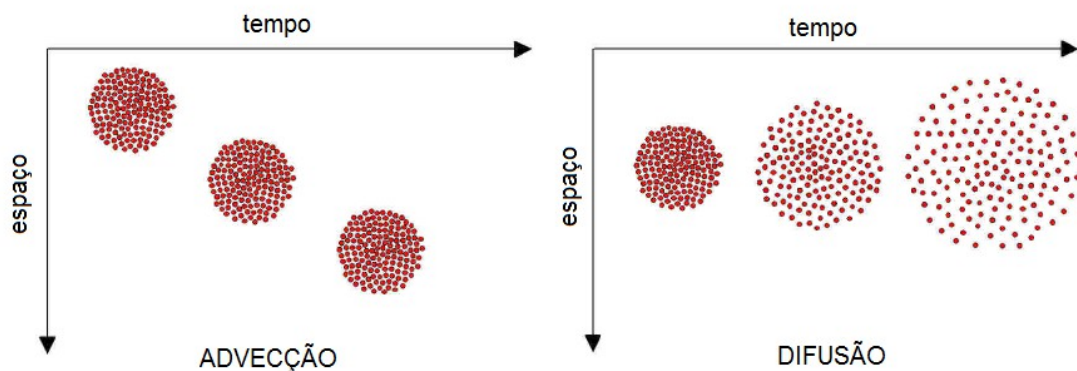
resolvível o fenômeno tem que ter dimensões pelo menos duas vezes maiores que as menores escalas de interesse.

A limitação das escalas de interesse impõe paradoxos, pois haverá movimentos e transportes em escalas menores e, portanto, não resolvíveis. Todos os fenômenos em escalas não resolvíveis tem que ser modelados através de variáveis nas escalas resolvíveis.

Todo movimento ou transporte resolvível é denominado **advectivo** e todo movimento ou transporte não resolvível é denominado **difusivo** (Almeida et al, 1997).

A figura 3 ilustra a evolução de uma nuvem de substância no espaço e no tempo, exemplificando os processos de advecção e difusão. A figura 4 apresenta um rio, com uma descarga de alguma substância, se espalhando lateralmente devido à advecção e difusão.

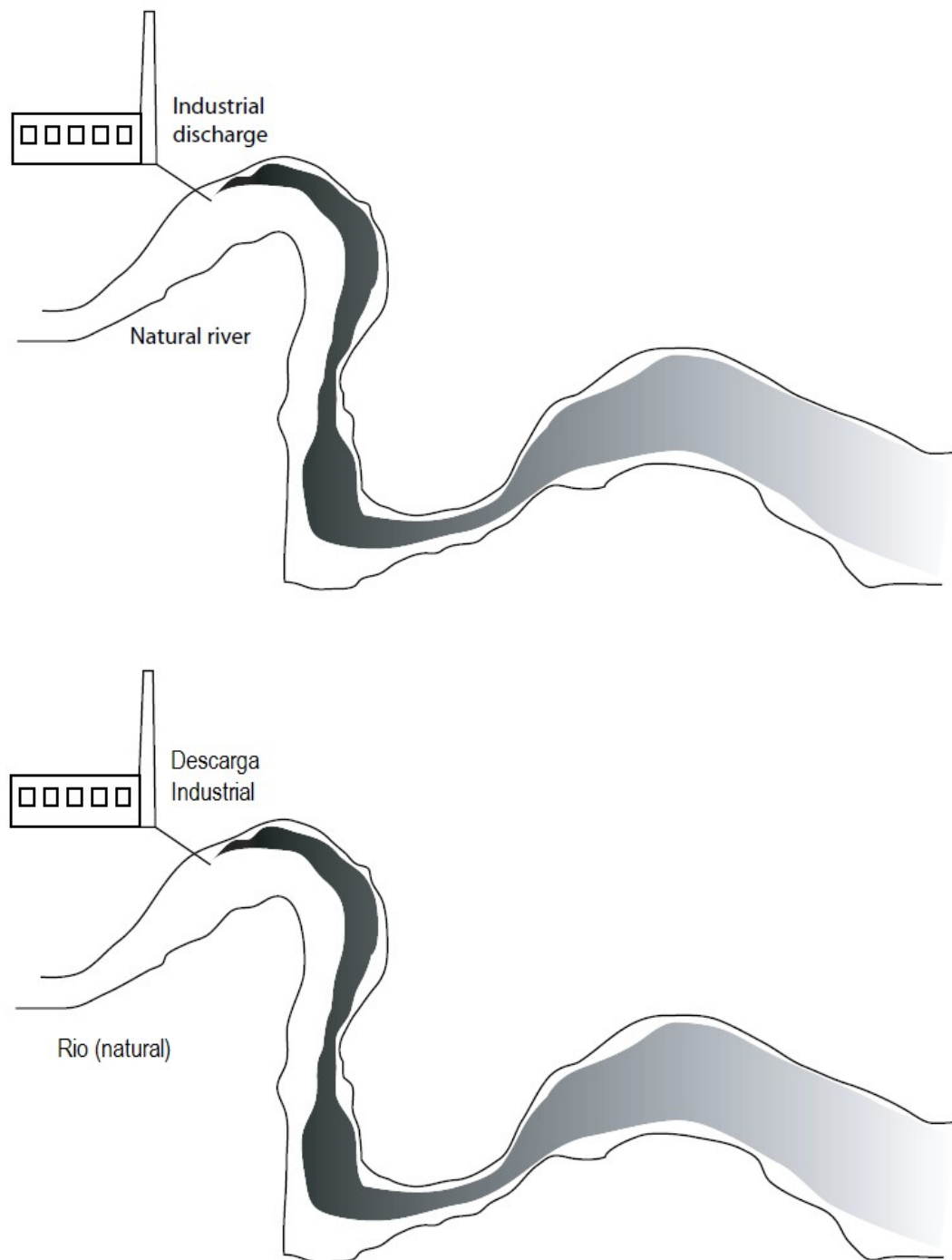
Figura 3 - Evolução (no espaço e no tempo) de uma nuvem de substância pelo efeito dos processos de advecção e difusão.



Fonte:Nota do Autor

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Figura 4 - Ponto de descarga industrial em um sistema natural. Como a fonte se move rio abaixo, se espalha lateralmente devido à difusão e advecção.



Fonte: Disponível em
://ceprofs.civil.tamu.edu/ssocolofsky/ocen678/Downloads/Lectures/EFM_Eqns.pdf. Acesso em: 30/jul/2012.

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Conforme a água flui ao longo de um rio, por exemplo, transporta material dissolvido via **advecção**. Isso leva a um transporte de materiais dissolvidos de áreas de alta concentração para áreas de baixa concentração via **difusão**.

A seguir, apresenta-se uma descrição detalhada dos processos de advecção e difusão, adaptada de Ji (2008).

Ambos os fluxos são definidos como a concentração de massa cruzando uma unidade área por unidade de tempo. O movimento do poluente devido ao fluxo advectivo ocorre na mesma direção para a qual o fluido flui, enquanto que o fluxo difusivo move a massa de poluente de áreas de alta concentração para áreas de baixa concentração. A densidade de fluxo advectivo (\vec{J}_a) depende da concentração (C) e da velocidade do fluxo (\vec{v}):

$$\vec{J}_a = C \cdot \vec{v}$$

A Lei de Fick descreve que a taxa de movimento da massa, que resulta da difusão molecular, é inversamente proporcional ao gradiente de concentração de massa:

$$J = -D \frac{dC}{dx}$$

onde:

J = densidade de fluxo difusivo;

C = concentração da massa na água;

D = coeficiente de difusão;

x = distância.

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

O sinal negativo indica que a massa difusiva flui na direção de concentração decrescente. A equação descreve que a massa irá se mover naturalmente de áreas com alta concentração para áreas de baixa concentração, e que a taxa de movimentação é maior quando ocorre grande variação de concentração em uma curta distância, e quanto maior o gradiente de concentração, maior a densidade de fluxo de massa.

Tabela 2 - Coeficientes de difusão molecular para substâncias típicas.

Substância	Coeficiente de Difusão	Coeficiente de Difusão
	$10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ (água 20°C e salinidade de 0,5)	$10^{-4} \text{ cm}^2/\text{s}$ (água 10°C e salinidade de 0,5)
H ⁺	0,85	0,70
OH ⁻	0,48	0,37
O ₂	0,20	0,15
CO ₂	0,17	0,12
CH ₄	0,16	0,12
NH ₃	0,20	0,15

Fonte: Disponível em

http://ceprofs.civil.tamu.edu/ssocolofsky/ocen678/Downloads/Lectures/EFM_Eqns.pdf.

A difusão turbulenta resulta da dispersão aleatória das partículas pelo fluxo turbulento e pode ser considerada análoga à difusão molecular. Assume-se que a difusão turbulenta também segue a Lei de Fick, no entanto o que difere é a magnitude do coeficiente de difusão. O transporte resultante da difusão turbulenta geralmente resulta em taxas muito maiores do que as geradas pela difusão molecular.

O fluxo total de massa ao longo de uma borda pode ser calculado como:

$$\frac{dm}{dt} = (J_a + J)A$$

onde:

m = massa;

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

J_a = magnitude do fluxo advectivo \vec{J}_a ;

J = magnitude do fluxo difusivo;

A = área da borda perpendicular à direção do fluxo.

Na maioria dos corpos d'água, o J_a é maior que o J (fluxo advectivo > fluxo difusivo). Quando a velocidade do fluxo é muito baixa, o fluxo advectivo se torna muito pequeno e pode ser negligenciado. Assim, a equação de conservação de massa vista anteriormente pode ser reduzida a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial J}{\partial x}$$

Combinando as equações $J = -D \frac{dC}{dx} \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial J}{\partial x}$, obtêm-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Esta é a equação de difusão clássica da Lei de Fick. Para sua solução é necessário que se tenha uma condição inicial e duas condições de contorno (borda). As duas soluções simples para a lei de Fick são descritas abaixo.

- **Fonte constante**

Condição inicial: $C(x,0) = 0$

Condição de contorno: $C(0,t) = C_0$

$C(\infty,t) = 0$

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

Este é um caso de uma fonte com uma concentração constante sendo adicionada a um rio C_0 e $x=0$, começando no $t=0$. A solução da Lei de Fick sob estas condições é:

$$C(x,t) = C_0 \operatorname{erfc} \left[\frac{x}{2\sqrt{Dt}} \right]$$

onde a função de erro complementar, $\operatorname{erfc}(x)$, é igual a 1 menos a função de erro, $\operatorname{erf}(x)$:

$$\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int e^{-u^2} du$$

A função de erro complementar, $\operatorname{erfc}(x)$, tem as seguintes propriedades:

$$\operatorname{erfc}(0) = 1$$

$$\operatorname{erfc}(\infty) = 0$$

$\operatorname{erfc}(r)$ decresce com o x

- **Fonte instantânea**

Se algo for despejado em um rio no $t=0$ e $x=0$, a condição inicial e a condição de contorno serão

Condição inicial: $C(x,0) = 0$

Condição de contorno: $\int C(x,t) dx = M$

$$C(x,\infty) = 0$$

onde:

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

M = massa inicialmente depositada no $x=0$.

A equação $\int C(x,t) dx = M$ não especifica um valor de contorno, mas diz que a massa total em qualquer instante de tempo t deve ser igual à massa inicialmente derramada no $t=0$. Neste caso a solução para a equação de difusão de Fick é:

$$C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}}$$

1.6 Equação de Balanço de Massa

Adaptada de Ji (2008)

Baseada no princípio de conservação de massa, a mudança na concentração de um reagente pode ser calculada utilizando a equação de balanço de massa (

$\frac{dm}{dt} = \frac{\partial m}{\partial t} + \nabla \cdot (m\vec{v}) = m_{in} - m_{out} + m_r$). Sua forma 1D pode ser simplificada para:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U \frac{\partial C}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C}{\partial x} \right) + S + R + Q$$

onde:

C = concentração do reagente;

t = tempo;

x = distância;

U = velocidade de advecção na direção x ;

D = coeficiente de mistura e dispersão;

S = fontes e sumidouros devido à sedimentação e ressuspensão;

O conteúdo deste material pode ser reproduzido desde que citada a fonte.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

R = reatividade de processos químicos e biológicos;

Q = fontes pontuais e não pontuais de cargas externas ao ambiente aquático.

- O termo de adveção, $-U \frac{\partial c}{\partial x}$, considera as entradas e saídas de água e especifica o movimento do poluente com a água
- O termo $\frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial c}{\partial x} \right)$ descreve o espalhamento do poluente devido à difusão turbulenta e difusão molecular.

O termo S , representa a partícula sedimentando e ressuspendendo do fundo.

Modelagem da Qualidade de Água em Reservatórios

REFERÊNCIA

LOUREIRO, E. **Introdução à Mecânica dos Fluidos**. Disponível em: http://eduloureiro.com.br/index_arquivos/mfaula1.pdf. Acesso em: 30/jul/2012.

LUCAS, A. A. T. 2010. et al. **Calibração do modelo hidrodinâmico MIKE 11 para a sub-bacia hidrográfica do rio Piauitinga, Sergipe, Brasil**. *Amby-Agua*. Taubaté, v. 5, n.3, p. 195-207, 2010.

Mecânica dos Fluidos: Conceitos Fundamentais. Disponível em: <http://pt.scribd.com/doc/28659826/Mecanica-Dos-Fluidos>. Acesso em: 20/jul/2012.

PRICE, J. F. 2006. **Lagrangian and Eulerian Representations of Fluid Flow: Kinematics and Equations of Motion**. Woods Hole Oceanographic Institution. 91 p. Disponível em: <http://www.whoi.edu/science/PO/people/jprice/class/ELreps.pdf>. Acesso em: 29/jul/2012.

SCHULTZ, G. A. 1994. **Meso-scale modelling of runoff and water balances using remote sensing and other GIS data**. *Hydrological Sciences - Journal - des Sciences Hydrologiques*. 39, 2, April 1994. p. 121 - 142.

YANNOPOULOS, S.; KALOYANNIS, H. 2008. **Water Quality Modelling of the Pamvotis Lake (Greece) using the WASP Mathematical Model**. 8 p.