

Universidade Federal Fluminense

ANNA LUISA SOARES CASTRO COIMBRA

Estimativa do Coeficiente de Dispersão  
Longitudinal e Velocidade em Rios Utilizando  
Problemas Inversos

VOLTA REDONDA

2023

ANNA LUISA SOARES CASTRO COIMBRA

# Estimativa do Coeficiente de Dispersão Longitudinal e Velocidade em Rios Utilizando Problemas Inversos

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem Computacional.

Orientador:

Dr. Wagner Rambaldi Telles

Coorientador:

Dr. Fabio Freitas Ferreira

UNIVERSIDADE FEDERAL FLUMINENSE

VOLTA REDONDA

2023

Ficha catalográfica automática - SDC/BEM  
Gerada com informações fornecidas pelo autor

C652e Coimbra, Anna Luisa Soares Castro  
Estimativa do coeficiente de dispersão longitudinal e  
velocidade em rios utilizando problemas inversos / Anna Luisa  
Soares Castro Coimbra. - 2023.  
112 f.: il.

Orientador: Wagner Rambaldi Telles.  
Coorientador: Fábio Freitas Ferreira.  
Dissertação (mestrado)-Universidade Federal Fluminense,  
Escola de Engenharia Industrial e Metalúrgica de Volta  
Redonda, Volta Redonda, 2023.

1. Poluição hídrica. 2. Transporte de contaminantes. 3.  
Método dos volumes finitos. 4. Problemas inversos. 5.  
Produção intelectual. I. Telles, Wagner Rambaldi,  
orientador. II. Ferreira, Fábio Freitas, coorientador. III.  
Universidade Federal Fluminense. Escola de Engenharia  
Industrial e Metalúrgica de Volta Redonda. IV. Título.


CDD - XXX

# Estimativa do Coeficiente de Dispersão Longitudinal e Velocidade em Rios Utilizando Problemas Inversos.

Anna Luisa Soares Castro Coimbra


Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia. Área de Concentração: Modelagem Computacional.

Aprovada por:

Documento assinado digitalmente  
 **WAGNER RAMBALDI TELLES**  
Data: 23/12/2023 15:01:38-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

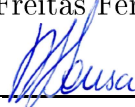
---

Prof. Wagner Rambaldi Telles, D.Sc. / MCCT-UFF  
(Presidente)

Documento assinado digitalmente  
 **FABIO FREITAS FERREIRA**  
Data: 22/12/2023 14:15:19-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>


---

Prof. Fábio Freitas Ferreira, D.Sc. / MCCT-UFF




---

Prof. Ricardo Silveira Sousa, D.Sc. / MCCT-UFF

Documento assinado digitalmente  
 **ANTONIO ESPOSITO JUNIOR**  
Data: 21/12/2023 10:53:17-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

Prof. Antônio Esposito Junior, D.Sc. / RCN-IHS-UFF

Documento assinado digitalmente  
 **GUSTAVO BASTOS LYRA**  
Data: 21/12/2023 18:06:17-0300  
Verifique em <https://validar.iti.gov.br>

---

Prof. Gustavo Bastos Lyra, D.Sc. / DCA-IF-UFRRJ

Volta Redonda, 14 de Dezembro de 2023.

*À Anna Luisa por não ter desistido  
e ter continuado em busca de seu sonho.*

# Agradecimentos

Agradeço primeiramente a Deus, pelo dom da minha vida e pelas oportunidades que me fizeram chegar até aqui.

Aos meus pais, Maria José e Luis Sergio, pelo carinho, atenção e apoio que me deram durante toda a minha vida.

Às pessoas que me apoiaram ao longo dessa caminhada, que incentivaram e me motivaram a continuar, em especial, Anna Leticia e Wallace.

Ao meu orientador, Wagner Rambaldi Telles, por sempre me encorajar a ser melhor, inclusive me incentivando a continuar estudando e realizar coisas das quais nunca pensei que conseguiria, como ser a primeira pessoa a cursar um mestrado na minha família. É uma honra poder aprender e trabalhar com você.

Ao Fábio Freitas Ferreira, por aceitar ser meu coorientador e trazer uma outra perspectiva para minha dissertação, pelas correções e ensinamentos que me permitiram apresentar um melhor desempenho.

A todo corpo docente Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Federal Fluminense que foi fundamental não só para minha formação no curso, mas para minha formação pessoal, sempre com muitos conselhos e lições de vida que me ajudaram a me tornar uma pessoa mais determinada.

Por fim, também registro meus agradecimentos a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e a Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) que contribuíram direta ou indiretamente para a realização dessa pesquisa.

# Resumo

A água é um dos recursos fundamentais para a qualidade de vida e existência das futuras gerações, sendo sua preservação ambiental dever de todo ser humano. Entretanto, é notável a existência de algum tipo de poluição na maioria dos rios no Brasil e, diante de situações como essa, o controle do comportamento de contaminantes em rios é extremamente útil para processos de tomada de decisão, como, por exemplo, para determinar o melhor local para descarte de resíduos domésticos e industriais, evitando, assim, uma contaminação do meio ambiente e contribuindo para um melhor monitoramento da qualidade da água. Neste trabalho é desenvolvido um modelo computacional para simular o transporte de contaminantes lançados em um trecho de rio, visando estimar os valores ótimos da velocidade média e do coeficiente de dispersão utilizando o método de otimização determinística Levenberg-Marquardt. Para isso, foi realizada a discretização do domínio espacial e solução numérica do modelo matemático por meio do Método dos Volumes Finitos (MVF), com atenção especial à investigação do termo advectivo, uma vez que, na literatura, encontram-se inúmeros esquemas para analisar o valor das concentrações nas faces do volume de controle. Para validação dos resultados, os valores numéricos obtidos por meio da simulação computacional foram comparados com os dados de um estudo de caso real, referente a um experimento realizado no rio São Pedro, localizado na cidade de Nova Friburgo-RJ. Os resultados encontrados mostraram-se satisfatórios no que se refere ao ajuste entre dados experimentais e numéricos.

# Abstract

As water is one of the fundamental resources for the quality of life and existence of future generations, environmental preservation becomes the duty of every human being. However, the existence of some type of pollution in most rivers in Brazil is notable and, in situations like this, controlling the behavior of contaminants in rivers is extremely useful for decision-making processes, such as, for example, to determine the best place to dispose of domestic and industrial waste, thus avoiding contamination of the environment and contributing to better monitoring of water quality. In this sense, in this work a computational model is developed to simulate the transport of contaminants released in a stretch of river, aiming to estimate the optimal values of the average velocity and the dispersion coefficient using the Levenberg-Marquardt deterministic optimization method. For this, the discretization of the spatial domain and numerical solution of the mathematical model were performed using the Finite Volume Method (FVM), with special attention to the investigation of the advective term, since, in the literature, there are numerous schemes to analyze the value of the concentrations on the faces of the control volume. To validate the results, numerical values obtained through computer simulation were compared with data from a real case study, referring to an experiment carried out on the São Pedro River, located in the city of Nova Friburgo-RJ. The results found were satisfactory with regard to the fit between experimental and numerical data.

# Palavras-chave

1. Poluição Hídrica
2. Transporte de Contaminantes
3. Modelagem Computacional
4. Método dos Volumes Finitos
5. Problemas Inversos
6. Método Levenberg-Marquardt

# Glossário

ADCP	: <i>Acoustic Doppler Current Profiler</i>
ANA	: Agência Nacional de Águas
APA	: Área de Proteção Ambiental
CDS	: Esquema de Diferenças Centrais
CECA	: Comissão Estadual de Controle Ambiental
CEDAE	: Companhia Estadual de Águas e Esgotos do Rio de Janeiro
CONAMA	: Conselho Nacional do Meio Ambiente
DNOS	: Departamento Nacional de Obras e Saneamento
FEEMA	: Fundação Estadual de Engenharia do Meio Ambiente
INEA	: Instituto Estadual de Ambiente
INFES	: Instituto do Noroeste Fluminense de Educação Superior
IQA	: Índice de Qualidade das Águas
MDF	: Método das Diferenças Finitas
MEF	: Método dos Elementos Finitos
MVF	: Método dos Volumes Finitos
NaCl	: Cloreto de Sódio
OMS	: Organização Mundial da Saúde
ONU	: Organização das Nações Unidas
PNRH	: Política Nacional de Recursos Hídricos
RAE	: Relatório de Acompanhamento de Efluentes Líquidos
SI	: Sistema Internacional
SINGREH	: Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos
SLAP	: Sistema de Licenciamento de Atividades Poluidoras
UDS	: Esquema UpWind
UFF	: Universidade Federal Fluminense
UTE	: Usina Termoelétrica
VC	: Volume de Controle
WUDS	: <i>Weighted Upstream Differencing Scheme</i>

# Sumário

<b>Lista de Figuras</b>	<b>xii</b>
<b>Lista de Tabelas</b>	<b>xiv</b>
<b>1 Introdução</b>	<b>15</b>
1.1 Justificativa . . . . .	19
1.2 Objetivos Geral e Específicos . . . . .	20
1.2.1 Objetivo Geral . . . . .	20
1.2.2 Objetivos Específicos . . . . .	20
1.3 Organização do Trabalho . . . . .	21
<b>2 Embasamento Teórico</b>	<b>23</b>
2.1 Exigências Legais que Envolvem a Qualidade da Água em Corpos Hídricos	23
2.2 O Transporte de Contaminantes em Corpos Hídricos . . . . .	30
2.3 Características dos Fenômenos de Transporte em Rios . . . . .	31
2.3.1 Advecção . . . . .	32
2.3.2 Difusão . . . . .	32
2.3.3 Dispersão . . . . .	34
2.3.4 Constituinte . . . . .	35
<b>3 Descrição do Problema de Transporte de Contaminantes Proposto</b>	<b>37</b>
3.1 Área de Estudo – Rio São Pedro . . . . .	37
3.2 Descrição do Experimento Realizado . . . . .	39

---

3.2.1	Materiais e Métodos . . . . .	40
3.2.2	Processo de Aquisição dos Dados Experimentais . . . . .	44
<b>4</b>	<b>Modelagem Matemática e Solução do Problema Proposto</b>	<b>46</b>
4.1	Modelagem Matemática . . . . .	47
4.1.1	Modelagem Matemática Referente ao Estudo de Caso . . . . .	49
4.2	Solução Numérica do Problema Proposto . . . . .	50
4.2.1	Malhas Computacionais . . . . .	51
4.2.1.1	Malhas Estruturadas . . . . .	52
4.2.1.2	Malhas Não-Estruturadas . . . . .	53
4.2.1.3	Malhas Híbridas . . . . .	54
4.2.2	Métodos de Discretização de Equações . . . . .	55
4.2.2.1	Método dos Volumes Finitos (MVF) . . . . .	56
4.3	Aplicação do MVF ao Problema Proposto . . . . .	57
4.4	Análise do Termo Dispersivo . . . . .	58
4.5	Análise do Termo Advectivo . . . . .	63
4.5.1	Esquema de Diferenças Centrais (CDS) . . . . .	64
4.5.2	Método de Montante (Upwind – UDS) . . . . .	67
4.5.3	Esquema Híbrido (Weighted Upstream Differencing Scheme – WUDS) . . . . .	69
4.5.4	Esquema Exponencial . . . . .	72
<b>5</b>	<b>Problema Inverso</b>	<b>76</b>
5.1	Método Levenberg-Marquardt . . . . .	79
<b>6</b>	<b>Resultados e Discussões</b>	<b>88</b>
6.1	Variação da Malha Espacial . . . . .	88
6.2	Resultados para a Estimativa dos Parâmetros de Interesse . . . . .	93
6.2.1	Estimativa do Velocidade ( $U$ ) . . . . .	93

---

6.2.2	Estimativa do Coeficiente de Dispersão Longitudinal ( $E_L$ ) . . . . .	94
6.2.3	Estimativa da Velocidade ( $U$ ) e do Coeficiente de Dispersão Longitudinal ( $E_L$ ) . . . . .	95
<b>7</b>	<b>Conclusões e Trabalhos Futuros</b>	<b>97</b>
7.1	Conclusões . . . . .	97
7.2	Trabalhos Futuros . . . . .	98
	<b>Referências Bibliográficas</b>	<b>100</b>

# Lista de Figuras

2.1	Requisitos de qualidade da água em função das classes de enquadramento e usos da água. . . . .	26
2.2	Classes de enquadramento dos corpos de águas doces. . . . .	27
2.3	Representação de um trecho do rio com efeito advectivo. . . . .	32
2.4	Representação de um trecho do rio com efeito difusivo. . . . .	34
2.5	Representação de um trecho do rio com efeito dispersivo. . . . .	35
3.1	Mapa ilustrativo da bacia hidrográfica do rio Macaé, contendo a região de interesse. . . . .	38
3.2	Localização do distrito de São Pedro da Serra. . . . .	40
3.3	Execução do método do químico. . . . .	41
3.4	Execução do método do flutuador. . . . .	42
3.5	Execução do método do molinete. . . . .	42
3.6	Execução do método acústico. . . . .	43
3.7	Vista parcial do trecho do rio São Pedro. . . . .	44
4.1	Fluxograma dos processos de modelagem e solução de um problema real. .	46
4.2	Equação de conservação na forma conservativa. . . . .	48
4.3	Malha estruturada em domínio unidimensional. . . . .	52
4.4	Malha estruturada em domínio bidimensional. . . . .	52
4.5	Malha estruturada em domínio tridimensional. . . . .	53
4.6	Malha não-estruturada em domínio bidimensional. . . . .	53
4.7	Malha não-estruturada em domínio tridimensional. . . . .	54
4.8	Malha híbrida aplicada em domínio tridimensional. . . . .	55

---

4.9	Representação do volume de controle baseado nas técnicas cell-center e verte-center. . . . .	56
4.10	Ilustração da malha espacial para o Método dos Volumes Finitos. . . . .	57
4.11	Ilustração da malha espacial. . . . .	61
4.12	Estratégia do volume fictício na malha unidimensional. . . . .	65
4.13	Ilustração do esquema upwind na malha 1D. . . . .	67
5.1	Representação esquemática do problema direto e do problema inverso. . . .	76
5.2	Classificação dos problemas inversos. . . . .	77
5.3	Pseudocódigo elaborado para a implementação do código computacional do método Levenberg-Marquardt. . . . .	87
6.1	Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema de diferenças centrais. . . . .	89
6.2	Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema upwind. .	90
6.3	Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema híbrido. .	91
6.4	Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema exponencial.	92
6.5	Perfis das concentrações obtidas com a estimativa do parâmetro $U$ pelo método Levenberg-Marquardt no melhor caso, pior caso, média e dados experimentais. . . . .	94
6.6	Perfis das concentrações obtidas com a estimativa do parâmetro $E_L$ pelo método Levenberg-Marquardt no melhor caso, pior caso, média e dados experimentais. . . . .	95
6.7	Perfis das concentrações obtidas com a estimativa dos parâmetros $U$ e $E_L$ pelo método Levenberg-Marquardt no melhor caso, pior caso, média e dados experimentais. . . . .	96

# Lista de Tabelas

3.1	Características do rio no ponto de lançamento do traçador. . . . .	45
6.1	Dados utilizados na simulação para a região de interesse. . . . .	88
6.2	Resultados obtidos para a velocidade ( $U$ ). . . . .	94
6.3	Resultados obtidos para coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ). . . . .	95
6.4	Resultados obtidos para a estimativa da velocidade ( $U$ ) e do coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ). . . . .	96

# Capítulo 1

## Introdução

A água é um recurso natural essencial para a sobrevivência humana, desde criança aprendemos que nosso corpo é 70% água, e que precisamos nos manter hidratados e beber água. Até mesmo uma pessoa que não teve acesso a um ensino educacional compreende a importância da água, a sensação de estar com muita sede e poder tomar água, o sentimento de tomar um banho depois de um dia longo e difícil. Contudo, a água não é necessária só para os exemplos citados acima, a mesma é importante para a construção ou fabricação de tudo ao nosso redor, inclusive, a energia pode ser produzida através da água. Segundo o projeto Brasil das Águas (2022):

A água é, provavelmente, o único recurso natural que tem a ver com todos os aspectos da civilização humana, seja como componente bioquímico de seres vivos, como meio de vida de várias espécies vegetais e animais, como elemento representativo de valores sociais e culturais e até como fator de produção de vários bens de consumo final e intermediário.

No entanto, por lidar diariamente com a água em abundância presente em mares, rios, lagos e represas, as pessoas continuam banalizando sua importância e usando-a como um bem descartável. Entretanto, nem toda essa água presente no mundo é um recurso hídrico, conforme a Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA), recurso hídrico é toda água proveniente da superfície ou subsuperfície da Terra, que pode ser empregada em um determinado uso ou atividade, podendo também passar a ser um bem econômico. Todo recurso hídrico é água, mas nem toda água é recurso hídrico. Logo, a água precisa possuir alguma finalidade de uso para a sociedade.

Assim, a poluição hídrica é causada por atividades humanas que geram algum impacto sobre esse recurso natural em qualidade e quantidade. A poluição se dá devido à alteração das características biológicas, físicas, químicas e sedimentar.

Tais tipos de poluição da água podem ser pontuados como:

- **Poluição biológica:** Gerada pela introdução de material orgânico na água, feita por proteínas, carboidratos, gorduras, bactérias, vírus, protozoários e vermes. Na maioria das vezes transmitidos através dos esgotos e do chorume gerado por lixo sem tratamento.
- **Poluição química:** Pode ser intencional ou acidental, esse tipo de poluição é causado por matérias que vão parar na água, como fertilizantes agrícolas, agrotóxicos, esgoto sem tratamento ou industriais, lixo descartado de forma indevida, petróleo e metais pesados.
- **Poluição sedimentar:** Esse tipo de poluição acontece quando existem partículas em suspensão, originárias do solo, por conta de atividades erosivas, extração de minérios e desmatamento. Como em casos de rompimentos de barragens e derramamento de rejeitos de minérios em rios, por exemplo, o mercúrio despejado nos corpos hídricos pelos garimpos.
- **Poluição física:** É causada pela quantidade de água aquecida lançada nos rios que foram usadas por indústrias, como centrais elétricas, siderúrgicas, refinarias, usinas nucleares e indústrias diversas. Logo, com o aumento da temperatura da água, o equilíbrio do ecossistema é quebrado e peixes e plantas são mortos.

Ainda, considerando que 97% da água do mundo é salgada, sendo apenas 3% água potável, ou seja, própria para consumo e, desse percentual, apenas 29% se encontra acessível, pois o resto está localizado nas calotas polares, a preservação ambiental torna-se dever de todo ser humano, o que impulsionou a Organização das Nações Unidas (ONU) a criar, em 2004, o Dia Mundial da Água (22 de março). Em particular, o tema para o ano de 2019 foi “Não deixar ninguém para trás”, onde foi apresentado em seu relatório, uma perspectiva regional referente a poluição hídrica, os quais são descritos resumidamente, a seguir:

- **Estados Árabes:** A escassez de água por pessoa nos Estados Árabes continuará a aumentar, devido ao crescimento populacional e à mudança climática.
- **Ásia-Pacífico:** Em 2016, 29 de 48 países desta região foram classificados como “hidricamente não seguros”, devido à baixa disponibilidade de água e à captação insustentável de águas subterrâneas. A escassez hídrica é agravada pelos efeitos da mudança climática.

- **Europa e América do Norte:** O acesso a serviços sanitários gerenciados de forma segura continua a ser um desafio em muitos países, especialmente em áreas rurais.
- **América Latina e Caribe:** Milhões de pessoas que vivem na região ainda não têm uma fonte adequada de água potável, enquanto um número ainda maior sofre pela ausência de instalações seguras e decentes para o descarte dos excrementos.
- **África Subsaariana:** A falta de infraestrutura para a gestão hídrica (escassez econômica de água), em termos de armazenamento e fornecimento, assim como para se ter melhores serviços de água potável e saneamento, desempenha um papel direto na persistência da pobreza na África Subsaariana.

No Brasil, a Constituição da República Federativa do Brasil de 1988, documento oficial de maior importância no país, prevê em seu art. nº 225 que todos têm direito ao meio ambiente ecologicamente equilibrado, bem de uso comum do povo e essencial à sadia qualidade de vida, impondo-se ao Poder Público e à coletividade o dever de defendê-lo e preservá-lo para as presentes e futuras gerações. Contudo, segundo o relatório da Fundação SOS Mata Atlântica divulgado em 2022, apenas 6,9% dos rios observados estão com qualidade da água em boa condição; 72,6% apresentaram qualidade da água regular; 17,8%, ruim; e 2,7%, péssima. O levantamento foi realizado em 146 pontos de coletas de 90 rios e corpos d'água de 65 municípios, em 16 estados do bioma Mata Atlântica, por 106 grupos de monitoramento da qualidade da água do Programa Observando os Rios (SOSMA, 2022).

Entretanto, a poluição dos rios brasileiros não é um assunto novo, em 2012 o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), apresentou em seu levantamento, “Indicadores de Desenvolvimento Sustentável”, os 10 rios mais poluídos do Brasil. São eles: rio Tietê (SP), rio Iguaçu (PR), rio Ipojuca (PE), rio dos Sinos (RS), rio Gravataí (RS), rio das Velhas (MG), rio Capibaribe (PE), rio Caí (RS), rio Paraíba do Sul (RJ), rio Doce (MG). Toda essa poluição traz grandes impactos para a vida do brasileiro, acarretando desde a falta de água potável até problemas de saúde por consumo de água imprópria, são as chamadas doenças de veiculação hídrica.

As doenças de veiculação hídrica são doenças em que a água é o principal veículo de transmissão. As principais são: amebíase, diarreia e gastroenterite, febre tifoide e paratifoide, esquistossomose, cólera, hepatite aguda B, leptospirose não especificada, doenças infecciosas e parasitárias. Em 2019 o Brasil teve um total de 273.403 internações por

doenças de veiculação hídrica, com uma incidência de internação para cada 10 mil habitantes de 13,01. O número de óbitos por doenças de veiculação hídrica ficou em 2.734 (Instituto Trata Brasil, 2019).

Além disso, estudos do Programa Conjunto de Monitoramento (JMP - sigla em inglês) da Organização Mundial de Saúde (OMS) e do Fundo das Nações Unidas para a Infância (UNICEF), realizados em 2019, mostram que, cerca de 2,2 bilhões de pessoas em todo o mundo não tem serviços de água tratada, 4,2 bilhões de pessoas não têm serviços de saneamento adequado, ainda por cima, estima-se que 1 em cada 10 pessoas (785 milhões) carecem de serviços básicos, incluindo os 144 milhões que bebem água não tratada. Por fim, todos os anos, 297 mil crianças menores de 5 anos morrem devido à diarreia associada a água, saneamento e higiene inadequados.

Sabendo que os impactos nos recursos hídricos encontram-se em processo acelerado e considerando a importância que os recursos hídricos têm para a existência e desenvolvimento das formas de vida na Terra, é necessário tomar medidas para conscientizar a sociedade e aumentar o monitoramento quanto aos contaminantes nos rios. Visto que, conforme Ribeiro (2019):

Os dados indicam que 74,5% dos pontos monitorados estão com qualidade precária, com índice regular, sendo o limite mínimo permitido na legislação e nos padrões internacionais de qualidade da água para usos múltiplos, ou seja, para abastecimento humano, irrigação, pesca e lazer. E, pior: 19% dos pontos analisados estão em rios poluídos, com qualidade ruim e péssima, o que significa que a água está imprópria para o uso. Apenas 6,5% dos pontos analisados têm qualidade boa. Essa condição agrava os riscos de escassez, potencializa conflitos por uso e gera insegurança hídrica.

Portanto, torna-se evidente a necessidade de ferramentas para auxiliar no monitoramento da qualidade das águas, uma vez que os órgãos gestores do meio ambiente esbarram em dificuldades logísticas, financeiras e operacionais: coletas e análises de água são caras, além de requererem material e pessoal especializado (Telles, 2009).

Diante desse cenário, a modelagem se destaca, ao aperfeiçoar cada vez mais modelos que auxiliem no processo de tomada de decisões e gestão de recursos hídricos, modelos esses gerados a partir de equações matemáticas, as quais possibilitam relacionar causa e efeito, bem como se adaptar a diferentes situações. Tais modelos em sua maioria são compostos por equações diferenciais ordinárias ou parciais cuja solução analítica é de difícil obtenção, ou até mesmo inexistente, surgindo a necessidade de métodos numéricos para resolução e análise.

Com o avanço dos recursos tecnológicos e necessidade de analisar uma maior quantidade de dados, surgem diversos métodos numéricos com a proposta de serem mais precisos e eficientes para inúmeros casos, das mais variadas áreas das ciências. Porém, o método numérico nem sempre deve ser considerado substituto dos demais métodos, visto que o método analítico representa melhor a matemática e, o método experimental, a realidade, ficando o método numérico entre ambos, aproximando-se da realidade, além de possibilitar uma melhor análise por meio de comparações, envolvendo diversos cenários.

## 1.1 Justificativa

A importância do presente trabalho se dá devido à grande mobilização mundial para um melhor controle da qualidade de água, em especial, a água enquanto recurso hídrico presente nos rios, lagos, lençóis freáticos superficiais e atmosfera, a qual vem sendo atingida cada vez mais pelos crescentes índices de poluição. Diante deste cenário, é importante buscar subsídios para monitorar a qualidade da água de cursos d'água naturais.

Nesse sentido, a modelagem matemática aplicada ao problema de transporte de contaminantes em rios se mostra uma opção mais viável financeira e logisticamente ao desenvolver e aprimorar modelos computacionais que auxiliem no controle da poluição dos rios, pois ajudam a prever o comportamento e estimar o nível de danos que podem ser causados pela poluição despejada na água.

Para este trabalho, foi utilizado como base, dados coletados no rio São Pedro, localizado na Região Serrana do Estado do Rio de Janeiro, afluente da bacia hidrográfica do rio Macaé. Tendo em vista que este último possui extração de petróleo e gás, expansão urbana desordenada, agropecuária e agroindústria, além do turismo sem planejamento, torna-se fundamental um melhor monitoramento do referido rio e afluentes, sendo essa uma pauta da prefeitura que demonstra sua preocupação, desenvolvendo projetos em conjunto com o Instituto Estadual de Ambiente (INEA) para recuperação de nascentes e revitalização do antigo leito do rio Macaé.

Ademais, este trabalho possibilita relacionar os conceitos trabalhados ao longo da Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, ofertada pela Escola de Engenharia Industrial Metalúrgica de Volta Redonda (EEMIMVR/UFF) em parceria com o Instituto do Noroeste Fluminense de Ensino Superior (INFES), campus regional da Universidade Federal Fluminense (UFF), localizado em Santo Antônio de Pádua, Estado do Rio Janeiro, com a solução de problemas reais.

Cabe ressaltar, também, que a aplicação de conteúdos matemáticos para resolver problemas reais por meio da modelagem, não só ajuda a compreender melhor a matemática como também humaniza a mesma, visto que trata-se de um problema real que afeta a vida de diversas pessoas no Brasil, e no Mundo.

Por fim, este trabalho demonstra interdisciplinaridade do ser humano ao abordar conceitos biológicos, físicos, matemáticos e (até) pedagógicos, ao buscar a forma mais didática de explicar os conteúdos, tudo isso para a resolução do problema proposto.

## 1.2 Objetivos Geral e Específicos

Nesta seção são explanados os objetivos geral e específicos que esta pesquisa visa alcançar.

### 1.2.1 Objetivo Geral

Tendo como pontos norteadores desenvolver um modelo computacional para simular o transporte de contaminantes lançados em um trecho de rio utilizando em sua solução numérica o emprego do Método dos Volumes Finitos, o principal objetivo deste trabalho é analisar estratégias de aproximação para o termo advectivo presente na equação de transporte unidimensional (1D) que modela o problema, visando encontrar qual a estratégia mais coerente para o problema, propondo, assim, ferramentas para contribuir no processo de decisão e análise relacionadas à gestão de recursos hídricos.

### 1.2.2 Objetivos Específicos

Tem-se como objetivos específicos para esta pesquisa:

- Realizar, por meio da revisão literária, uma melhor compreensão sobre corpos hídricos e a poluição presente nos mesmos.
- Apresentar os conceitos sobre transporte de contaminantes em corpos hídricos, para melhor entendimento do trabalho.
- Compreender e resolver numericamente o problema 1D, tendo como base o Método dos Volumes Finitos (MVF), com aplicação no rio São Pedro, localizado na cidade de Nova Friburgo-RJ.

- Compreender o emprego dos diferentes esquemas de aproximação para o termo advectivo, baseado no Método dos Volumes Finitos, para a solução de problemas de transporte de contaminantes.
- Implementar e utilizar modelos computacionais para simular o transporte de poluente em um trecho de rio utilizando o Método de Volumes Finitos com objetivo de investigar a influência do termo advectivo.
- Realizar a variação de parâmetros buscando avaliar os diferentes esquemas implementados no modelo matemático, assim como comparar os resultados obtidos por meio de simulações computacionais com dados experimentais.
- Estimar os valores ótimos para a velocidade média e coeficiente de dispersão longitudinal utilizando o método de otimização determinística Levenberg-Marquardt.
- Analisar os resultados obtidos de modo a ajudar em decisões futuras relacionadas à poluição hídrica.

### 1.3 Organização do Trabalho

No Capítulo 1, é discutido sobre poluição em recursos hídricos, apresentando um panorama sobre a poluição hídrica nacional e mundial, além de ressaltar a escassez da água por conta da contaminação dos rios. Também se encontra a visão de alguns órgãos e Organizações não Governamentais (ONGs) responsáveis pela sua preservação, bem como uma explanação sobre como a modelagem pode auxiliar nesse problema. Por fim, são destacados a justificativa e os objetivos que impulsionaram este trabalho.

Em seguida, no Capítulo 2, é feito um embasamento teórico abordando conceitos sobre as exigências legais que envolvem a qualidade da água em corpos hídricos; as características dos processos físicos que ocorrem no corpo hídrico e o transporte de contaminantes nos mesmos.

No Capítulo 3, encontra-se a descrição da área de estudo com as características do município de Nova Friburgo (e distrito de São Pedro) e os relatos das atividades de campo realizadas para obtenção dos dados experimentais utilizados na pesquisa.

Posteriormente, no Capítulo 4, apresenta-se a modelagem matemática envolvendo problemas de transporte de contaminantes e as equações que governam o mesmo, referente ao estudo de caso 1D (modelo matemático). Logo após, é explicitado o Método dos

Volumes Finitos que, aplicado a problemas advectivos-dispersivos, gera a necessidade de se trabalhar com funções de interpolação para aproximação das derivadas presente na equação. Ainda, são salientadas as 5 funções de interpolação para o fluxo advectivo que são investigadas no trabalho. Logo após, é relatada a aplicação do MVF na resolução do problema proposto no presente trabalho.

No Capítulo 5, é descrito o problema inverso, métodos de otimização e, em especial, o Método Levenberg-Marquardt (método utilizado na pesquisa para a estimativa dos parâmetros de interesse).

Adiante, no Capítulo 6, são apresentados os resultados obtidos com aplicação do MVF após a variação das funções de interpolação para o fluxo advectivo, as simulações constam com variação dos parâmetros com algumas considerações entre as funções de interpolação. Em seguida, são mostrados os resultados para a estimativa dos parâmetros de interesse.

Por fim, o Capítulo 7 contém as conclusões obtidas a partir da modelagem 1D do rio São Pedro (Nova Friburgo-RJ), além de recomendações e análises para trabalhos futuros.

# Capítulo 2

## Embasamento Teórico

Para modelar o comportamento de um poluente dentro de um curso d'água após uma liberação acidental, se faz necessário o conhecimento de alguns conceitos fundamentais. Assim, neste capítulo, primeiramente, são apresentadas algumas exigências legais que envolvem a qualidade da água em corpos hídricos, caracterizando a água como própria para consumo ou não. Em seguida, é feita uma breve apresentação sobre as teorias dos diferentes fenômenos que regem o transporte de um produto em um curso d'água.

### 2.1 Exigências Legais que Envolvem a Qualidade da Água em Corpos Hídricos

A gestão de recursos hídricos no Brasil esteve por longo tempo reduzida à avaliação quantitativa das reservas hídricas, especialmente para fins de produção de energia, resultado do modelo de gestão centralizado então em vigor, basicamente voltado para as necessidades de planejamento estratégico do setor de hidroeletricidade (Muñoz, 2000). Nesse período, a crise econômica do fim do século XIX e início do século XX, centrada na troca do modelo econômico de agrário para industrial, exigiu uma maior utilização da energia elétrica para geração de riquezas. Portanto, com base no contexto socioeconômico, foi publicado o Decreto 24.643 em 10 de julho de 1934, que aprovou o Código de Águas Brasileiro.

Apesar de ter como objetivo priorizar a água para geração de energia elétrica, o código de águas foi de primordial importância para o surgimento de trabalhos e discursões relacionadas ao uso da água, uma vez que seu Art. 1 garante que "as águas públicas podem ser de uso comum ou dominicais", já que, segundo as observações do próprio decreto, o uso das águas no Brasil tem-se regido até então por uma legislação obsoleta, em desacordo

com as necessidades e interesse da coletividade nacional (Planalto, 1934).

Contudo, só na Constituição de 1988 é que os recursos hídricos passaram a ser de domínio das Unidades Federativas sendo designado, respectivamente, aos vários órgãos e agentes constitucionais com o propósito de praticar as tarefas que são constitucional ou legalmente incumbidos. Nela aparece pela primeira vez a ideia de educação ambiental, além de assegurar a ordem social que diz que todos têm direito ao meio ambiente ecologicamente equilibrado, bem de uso comum do povo e essencial à sadia qualidade de vida, impondo-se ao Poder Público e à coletividade, o dever de defendê-lo e preservá-lo para as presentes e futuras gerações (Constituição, 1988).

A Constituição de 1988 também previa a criação de um sistema de gerenciamento de recursos hídricos. Porém, o mesmo só foi criado em 8 de janeiro de 1997, Lei nº 9.433, mais conhecida como Lei das Águas, que surgiu a partir da ideia de que só há desenvolvimento real quando há equidade social, resultante de um processo distributivo de uma economia ativa, mas praticada com respeito à capacidade e suporte dos ecossistemas (Muñoz, 2000).

Diante disso, foi instituída a Política Nacional de Recursos Hídricos (PNRH) e elaborado o Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos (SINGREH), conjunto de órgãos e colegiados que concebe e implementa a Política Nacional das Águas, cujo principal papel é fazer a gestão dos usos da água de forma democrática e participativa. Com um caráter descentralizado, a Lei nº 9.433/97 tem como fundamento, o respeito aos usos múltiplos e, como prioridade, o abastecimento humano e dessedentação animal em casos de escassez.

A Política Nacional de Recursos Hídricos, conta com cinco ferramentas para auxiliar na gestão dos recursos do Brasil, são elas:

- Planos de Recursos Hídricos.
- Enquadramento dos corpos de água em classes.
- Outorga dos direitos de uso de recursos hídricos.
- Cobrança pelo uso de recursos hídricos.
- Sistema de Informações sobre Recursos Hídricos.

Os **Planos de Recursos Hídricos**, visam orientar e viabilizar a implementação da Política Nacional de Recursos Hídricos e o gerenciamento dos recursos hídricos. São

elaborados por bacia hidrográfica, por estado e para o país; são planos de longo prazo, com horizonte de planejamento compatível com o período de implementação de seus programas e projetos.

Cabe ao Comitê de Bacia Hidrográfica, em sua área de atuação, aprovar o Plano de Recursos Hídricos e acompanhar sua execução, assim como, sugerir providências necessárias ao cumprimento de suas metas. A partir de uma visão integrada dos diferentes usos da água, os planos são elaborados em três níveis: bacia hidrográfica, nacional e estadual. Contam também com o envolvimento de órgãos governamentais, da sociedade civil, dos usuários e de diversas instituições que participam do gerenciamento dos recursos hídricos (ANA, 2023a).

O **enquadramento dos corpos de água em classes**, estabelece o nível de qualidade a ser alcançado ou mantido ao longo do tempo nos corpos d'água. Porém, não é uma simples classificação, o enquadramento deve ser visto como um instrumento de planejamento, pois deve tomar como base os níveis de qualidade que deveriam possuir ou ser mantidos para atender às necessidades estabelecidas pela sociedade e não apenas a condição atual do corpo d'água em questão (ANA, 2023b). O enquadramento busca “assegurar às águas qualidade compatível com os usos mais exigentes a que forem destinadas” e a “diminuir os custos de combate à poluição das águas, mediante ações preventivas permanentes” (Constituição, 1988).

As classes para o enquadramento dos corpos de água superficiais, segundo os seus usos preponderantes, são estabelecidas pelo Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) por meio da Resolução nº 357, de 17 de março de 2005, uma classificação dos corpos de água e diretrizes ambientais para o seu enquadramento, assim como condições e padrões de lançamento de efluentes. Esta resolução apresenta diversos critérios estabelecidos para qualidade de água, os quais tem como base o Índice de Qualidade das Águas (IQA), desenvolvido para avaliar a qualidade da água para o abastecimento público, após o tratamento convencional.

Hierarquicamente, a classe especial é aquela que se destina aos usos que requerem o melhor nível de qualidade de água e é a mais restritiva a atividades humanas que possam interferir em sua qualidade, não sendo permitido o lançamento de efluentes, mesmo tratados. Assim, na Figura 2.1 são apresentados os requisitos de qualidade da água em função das classes de enquadramento e usos da água. Quanto maior o número da classe correspondente, menos exigente se torna o nível de qualidade da água necessário aos usos da mesma, diminuindo-se a restrição às atividades que possam impactar a qualidade dessas

águas. Ainda, a classe 4 (para águas doces) correspondem ao menor nível de qualidade de água para as classes de enquadramento (ANA, 2019).

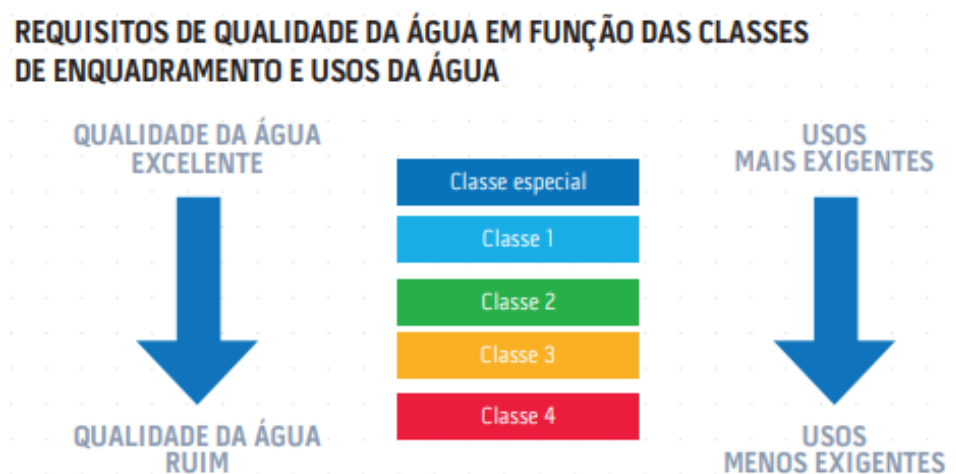


Figura 2.1: Requisitos de qualidade da água em função das classes de enquadramento e usos da água.

Fonte: ANA (2019).

Mesmo na classe mais inferior, há algumas condições e padrões de qualidade da água estabelecidos para conformidade à classe de enquadramento, como atendimento a limites mínimos para o oxigênio dissolvido, faixa de pH aceitável, além de restrições a odor, materiais flutuantes e óleos e graxas, entre outros. Alguns corpos hídricos, particularmente em áreas urbanizadas com elevada concentração populacional, possuem trechos tão poluídos que não apresentam conformidade sequer com a menor classe de enquadramento, podendo ser citadas as bacias hidrográficas dos rios dos Sinos e Gravataí, na região de Porto Alegre (Rio Grande do Sul), assim como a bacia do Tietê, incluindo as bacias Piracicaba, Capivari e Jundiaí (PCJ), nas regiões da capital paulista e Campinas. Contudo, existem outras bacias na mesma situação.

Para garantir a qualidade da água, é usado como base o enquadramento dos corpos de água em classe segundo seu uso, conforme a Figura 2.2, o qual visa definir metas de qualidade de água a partir da sua utilização. Tais classes partem das mais exigentes, que reúne as melhores condições possíveis que um corpo d'água pode ter, às menos exigentes, onde são admitidos os níveis mais elevados de poluição. A base para essa classificação são os níveis de qualidade que os corpos d'água deveriam possuir para atender às diferentes necessidades, estabelecidas pela sociedade.












USOS DAS ÁGUAS DOCES		CLASSES DE ENQUADRAMENTO DOS CORPOS D'ÁGUA				
		ESPECIAL	1	2	3	4
PRESERVAÇÃO DO EQUILÍBRIO NATURAL DAS COMUNIDADES AQUÁTICAS		Mandatório em UC de Proteção Integral				
PROTEÇÃO DAS COMUNIDADES AQUÁTICAS			Mandatório em Terras Indígenas			
RECREAÇÃO DE CONTATO PRIMÁRIO						
AQUICULTURA						
ABASTECIMENTO PARA CONSUMO HUMANO		Após desinfecção	Após tratamento simplificado	Após tratamento convencional	Após tratamento conv. ou avançado	
RECREAÇÃO DE CONTATO SECUNDÁRIO						
PESCA						
IRRIGAÇÃO			Hortalças consumidas cruas ou frutas ingeridas com película	Hortalças, frutíferas, parques, jardins e campos de esporte	Culturas arbóreas, cerealíferas e forrageiras	
DESSEDENTAÇÃO DE ANIMAIS						
NAVEGAÇÃO						
HARMONIA PAISAGÍSTICA						

Figura 2.2: Classes de enquadramento dos corpos de águas doces.  
Fonte: ANA (2019).

Por outro lado, a **outorga dos direitos de uso de recursos hídricos**, assegura o controle qualitativo e quantitativo dos usos da água e o efetivo exercício dos direitos de acesso a água associado a uma garantia. Para tanto deverá considerar o enquadramento em classes de uso e a vazão do corpo hídrico. A análise de concessão de outorga também deverá considerar o impacto do lançamento ou captação no corpo hídrico, diante do cenário real da bacia hidrográfica, e o atendimento às metas estabelecidas nos Planos de Recursos Hídricos, sobretudo, para as prioridades de uso estabelecidas pelo Comitê (Rodrigues, 2023).

Atualmente, a Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA) é a responsável por emitir outorgas para rios, reservatórios, lagos e lagoas sob o domínio da União, que são aqueles corpos de água que passam por mais de um estado brasileiro ou por território estrangeiro. Também são outorgadas pela ANA as águas armazenadas em reservatórios administrados por entidades federais, como, por exemplo, os açudes de responsabilidade do Departamento Nacional de Obras Contra as Secas (DNOCS) e da Companhia de Desenvolvimento dos Vales do São Francisco e do Parnaíba (CODEVASF).

Ainda no que se refere às ferramentas para auxiliar na gestão dos recursos do Brasil, a **cobrança pelo uso de recursos hídricos**, segundo a ANA (2021), a mesma tem como

objetivos, obter verba para a recuperação das bacias hidrográficas brasileiras, estimular o investimento em despoluição, dar ao usuário uma sugestão do real valor da água e incentivar a utilização de tecnologias limpas e poupadoras de recursos hídricos. Essa cobrança não é um imposto ou tarifa cobrados pelas distribuidoras de águas na cidade, mas sim uma remuneração pelo uso de um bem público. Todos e quaisquer usuários que captem, lancem efluentes ou realizem usos consuntivos diretamente em corpos de água necessitam cumprir com o valor estabelecido. Além disso, vale resaltar que, quem capta água com qualidade superior paga mais do que quem capta água com qualidade inferior, assim como, quem mais polui e prejudica os usuários do curso d'água, mais paga, tornando o sistema de gestão muito mais justo e racional.

Por fim, o **Sistema de Informações sobre Recursos Hídricos**, segundo o Art. 25, da Lei nº 9.433, é um sistema de coleta, tratamento, armazenamento e recuperação de informações sobre recursos hídricos e fatores intervenientes em sua gestão, cujo os objetivos são: reunir, dar consistência e divulgar os dados e informações sobre a situação qualitativa e quantitativa dos recursos hídricos no Brasil; atualizar permanentemente as informações sobre disponibilidade e demanda de recursos hídricos em todo o território nacional; fornecer subsídios para a elaboração dos Planos de Recursos Hídricos (Rodrigues, 2023).

A Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA), de acordo com a sua lei de criação, Lei nº 9.984, de 17 de julho de 2000, tem como dever organizar, implantar e gerir o SNIRH. Assim, a ANA atua na implementação do Sistema Nacional de Gerenciamento de Recursos Hídricos (SINGREH), elaborando planos de recursos hídricos em bacias hidrográficas de domínio da União (aquelas em que o curso d'água passa por mais de um estado ou país). Nas outras esferas, a ANA atua oferecendo apoio técnico na elaboração dos planos.

É importante ressaltar, também, que desde a sua criação, a ANA possui participação na execução da Política Nacional de Recursos Hídricos, apoiando os Conselhos Nacional e Estaduais de Recursos Hídricos, bem como os respectivos Comitês de Bacias Hidrográficas, no sentido de fornecer subsídio técnico na implantação desta política. Ela também estará implantando, em conjunto com os Estados, os Comitês de Bacias Hidrográficas, com suas respectivas Agências de Bacia.

O Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) e o Conselho Nacional de Recursos Hídricos (CNRH) exercem papel no disciplinamento de diretrizes e procedimentos relacionados ao instrumento de enquadramento dos corpos de água, criado pela Lei nº

9.433/97. As principais regulamentações para o enquadramento, no âmbito federal, são resoluções do CONAMA e do CNRH, citadas a seguir em conformidade com a (ANA, 2019):

- Resolução CONAMA nº 357, de 17/03/2005: dispõe sobre a classificação dos corpos de água e diretrizes para o seu enquadramento, assim como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes.
- Resolução CONAMA nº 396, de 03/04/2008: estabelece o enquadramento das águas subterrâneas.
- Resolução CNRH nº 91, de 05/11/2008: estabelece os procedimentos gerais para o enquadramento dos corpos d'água superficiais e subterrâneos.
- Resolução CNRH nº 141, de 14/07/2012: estabelece critérios e diretrizes para implementação dos instrumentos de outorga de direito de uso de recursos hídricos e de enquadramento dos corpos de água em classes, segundo os usos preponderantes da água, em rios intermitentes e efêmeros.

Outra importante norma é a NT-202.R-10, a qual estabelece critérios e padrões para lançamento de efluentes líquidos, aprovada pela Comissão Estadual de Controle Ambiental (CECA) nº 1.007, de 04 de dezembro de 1986, como parte integrante do Sistema de Licenciamento de Atividades Poluidoras (SLAP) (INEA, 1986).

Esta Norma Técnica aplica-se aos lançamentos diretos ou indiretos de efluentes líquidos, provenientes de atividades poluidoras, em águas interiores ou costeiras, superficiais ou subterrâneas do Estado do Rio de Janeiro, através de quaisquer meios de lançamento, inclusive da rede pública de esgotos. Como critérios, os efluentes líquidos, além de obedecerem aos padrões gerais, não deverão conferir ao corpo receptor, características em desacordo com os critérios e padrões de qualidade de água. No caso de existência ou previsão de tais características, a Fundação Estadual de Engenharia do Meio Ambiente (FEEMA) estabelecerá limites mais restritivos do que aqueles vigentes na lista de concentrações máximas desta Norma Técnica.

Ainda por meio da CECA, a Deliberação nº 1.995, de 10 de outubro de 1990, aprova a DZ-942.R-7, intitulada Diretriz do Autocontrole Programa de Efluentes Líquidos (PROCON ÁGUA), que estabelece as diretrizes nas quais os responsáveis pelas atividades poluidoras informam regularmente à Fundação Estadual de Engenharia do Meio Ambiente (FEEMA), por intermédio do Relatório de Acompanhamento de Efluentes Líquidos

(RAE), as características qualitativas e quantitativas de seus efluentes líquidos, como parte integrante do Sistema de Licenciamento de Atividades Poluidoras (SLAP).

## 2.2 O Transporte de Contaminantes em Corpos Hídricos

Os estudos pioneiros de transporte de matéria começaram com Joseph Fourier (1768-1830) e Henri Navier (1785-1836), os primeiros cientistas a entender que o transporte por difusão era proporcional à derivada da quantidade transportada. Quase simultaneamente, em 1822, eles propuseram associar essa propriedade à agitação molecular do fluido. De acordo com Moreau (2018):

Joseph Fourier foi um físico francês, que se tornou reitor de Grenoble, conhecido por ter proposto a lei análoga para transferência de calor em 1822, em sua Teoria Analítica do Calor, onde também introduziu a série trigonométrica agora conhecida como série de Fourier. Henri Navier era um engenheiro de pontes e estradas que dirigiu a construção de uma dúzia de pontes na França. Na Ecole Polytechnique, foi aluno de Joseph Fourier.

No caso dos fluidos viscosos submetidos ao cisalhamento, a lei que expressa o atrito entre as diversas camadas do fluido leva o nome de Isaac Newton (1643-1727), chamada de Lei de Newton da Viscosidade. Ele percebeu em seus estudos que, em muitos fluidos, a tensão de cisalhamento é proporcional ao gradiente de velocidade, ou seja, à variação de velocidades na direção de  $z$ . Os fluidos que obedecem a essa lei são chamados de Fluidos Newtonianos e, aqueles que não obedecem, de fluidos não-Newtonianos.

Já no caso do transporte de matéria, seus primeiros relatos surgiram em 1855 quando o fisiologista Adolphe Fick (1829-1901) publicou um artigo intitulado *Uber diffusion*, onde apresenta o processo de difusão molecular por analogia com o trabalho de Fourier sobre o fluxo de calor, publicado em 1822.

Vinte e dois anos depois, Joseph Boussinesq, nos anos de 1877, passou a se interessar pelo fenômeno da difusão turbulenta na água e estudar, em particular, as marés, ondulações e redemoinhos a partir de observações visuais na natureza. É também a ele que se deve a hipótese da proporcionalidade entre fluxos turbulentos e gradientes médios (Mansson, 1991). Em 1874, Osborne Reynolds (1842-1912) conhecido pelo parâmetro usado para distinguir os regimes de fluxo, demonstrou a existência de dois tipos de escoamentos, o escoamento laminar e o escoamento turbulento, além de demonstrar uma proporcionalidade

lidade entre a difusividade de um contaminante passivo e a viscosidade turbulenta ligada às flutuações de velocidade.

Contudo, o verdadeiro marco dos estudos modernos sobre a dispersão de partículas marcadas em um fluxo laminar, devem-se a Sir Geoffrey Taylor (1953-1954), em 1921, com uma análise intitulada *Diffusion by continuous movements* (Difusão por movimentos contínuos). Este trabalho é de suma importância, pois, ainda hoje, é uma referência e desde então sofreu apenas algumas modificações ou ampliações, em particular, no caso de escoamentos turbulentos uniformes. Esta última análise considera a obtenção de dois pontos essenciais:

- Um campo de turbulência estacionário e homogêneo.
- O observador segue as partículas marcadas em seu movimento ao longo do tempo.

Por fim, Elder (1959) e depois Fischer (1967-1969) retomaram a análise de Taylor aplicando-a, respectivamente, a escoamentos de superfície livre em canais de laboratório e nos rios. Fischer, entre outros, mostrou que a simulação de um campo de concentração em um plano horizontal  $C(x, y)$  é possível a partir de um modelo bidimensional, considerando, em particular, a taxa de transferência turbulenta média (às vezes chamada de coeficiente de difusão) na direção transversal ao fluxo. O conhecimento dessa taxa representa a maior dificuldade do problema, pois normalmente é uma incógnita que deve ser estimada experimentalmente.

## 2.3 Características dos Fenômenos de Transporte em Rios

Quando um poluente atinge um corpo hídrico, o mesmo sofre alterações devido as características biológicas, físicas e químicas existentes na natureza. Com isso, cada corpo d'água apresenta diferentes características que influencia no movimento da substância de um ponto de lançamento até outra região, onde sua concentração irá variar de acordo com o espaço e tempo. Nesse sentido, é importante ter conhecimento do chamado campo de fluxo.

Um campo de fluxo é melhor caracterizado pela distribuição de velocidade e, portanto, diz-se que um fluxo é unidimensional, bidimensional ou tridimensional se a velocidade do fluxo variar em uma, duas ou três dimensões, respectivamente (Çenzel e Cimballa, 2006).

Além disso, o curso do rio sofre influência da força/efeito de cisalhamento, ou seja, quanto mais próximo ao fundo do rio, maior o atrito entre as moléculas de água e menor será sua velocidade. Todavia, alguns rios apresentam uma variação de velocidade pequena, devido a sua pouca profundidade, podendo ser ignoradas, com erro desprezível e, assim, serem modelados utilizando formulações uni ou bidimensionais, o que facilita a análise.

### 2.3.1 Advecção

É o transporte de uma substância concentrada de um ponto a outro. Basicamente, o percurso que ela faz ao longo do corpo hídrico, de acordo com Oliveira (2013), é o resultado do movimento unidirecional do fluido, de uma posição no espaço para outra, não alterando as características da substância sendo transportada. Esse fenômeno é influenciado pelo vento, o que aumenta a translação na superfície da camada de poluição. Porém, esta ação é irrelevante se a velocidade da corrente for alta ou se o vento for fraco. É mostrado o efeito da advecção na Figura 2.3.

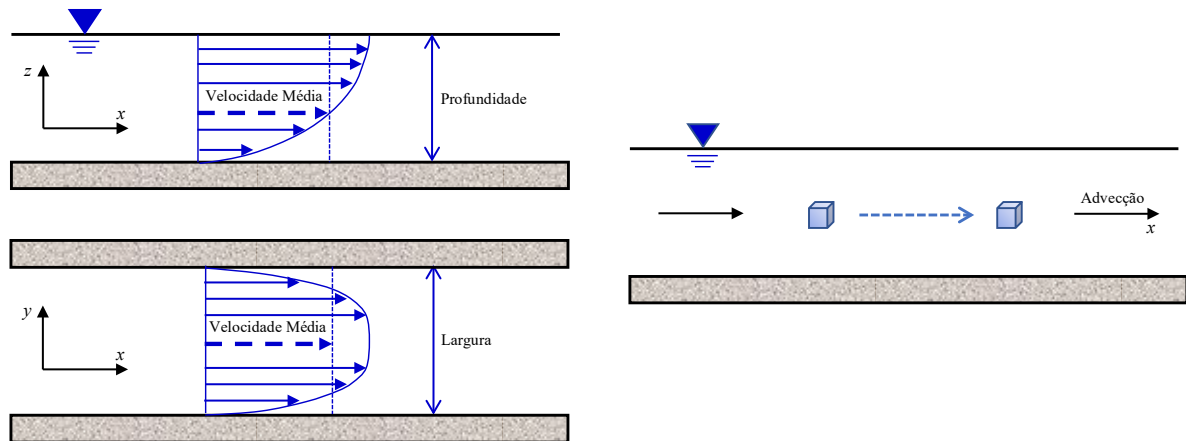


Figura 2.3: Representação de um trecho do rio com efeito advectivo.

Fonte: A Autora (2023).

### 2.3.2 Difusão

A difusão é uma vibração intramolecular característica de cada produto solúvel. Permite o movimento de moléculas de um meio onde o potencial químico é alto para um meio onde o potencial é menor. Em suma, a difusão se dá pelo espalhamento da substância no corpo d'água, o que também resulta passagem de um meio mais concentrado para um meio menos concentrado do constituinte. Ela pode ocorrer independentemente da existência ou não da velocidade, uma vez que há dois tipos de processos difusivos:

- **Difusão molecular:** É resultado da agitação térmica das moléculas, gerando sua expansão no rio. Nesse caso, o meio pode apresentar velocidade média nula. Segundo Vaz (2013), a difusão molecular resulta do movimento aleatório Browniano das moléculas de água. Um exemplo desse fenômeno se dá ao colocar gotas de tinta ou corante em um recipiente, a substância irá expandir até tomar toda a superfície. A difusão molecular é modelada pela lei de Fick, que afirma que o fluxo de difusão é proporcional ao gradiente de concentração (Taylor, 1954). Segundo a lei de Fick, a difusão molecular representa o fluxo ou taxa de transferência de massa de um soluto que se difunde através de uma seção de área unitária e que é proporcional ao gradiente da sua concentração, medido segundo a normal a esta seção. Em uma abordagem unidimensional, esse fluxo pode ser expresso por:

$$J_d = -D_m \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.1)$$

em que:

$J_d$  = Fluxo ou taxa de transporte difusivo.

$C$  = Concentração.

$D_m$  = Coeficiente de difusão molecular.

$x$  = Direção em que se desenvolve o processo.

O sinal negativo na Equação (2.1) indica que o fluxo ocorre na direção contrária à do gradiente de concentração, isto é, no sentido das concentrações altas para as concentrações baixas.

- **Difusão turbulenta:** A difusão turbulenta é causada por turbilhões dos mais variados tamanhos e orientações existentes no escoamento (Devens, 2006). A existência da turbulência no escoamento da água acelera o processo de mistura da substância, a qual acontece de uma forma muito mais intensa que na difusão molecular, sendo bastante eficiente para a redução da concentração de um poluente em meios fluidos. Ainda conforme Mackenzie (2023), o escoamento turbulento é aquele no qual as partículas apresentam movimento caótico macroscópico, isto é, a velocidade apresenta componentes transversais ao movimento geral do conjunto ao fluido. O escoamento turbulento apresenta também as seguintes características importantes:

- Irregularidade.
- Difusividade.

- Altos *números de Reynolds*.
- Flutuações tridimensionais (vorticidade).
- Dissipação de energia.

Contudo, o escoamento turbulento obedece aos mecanismos da mecânica dos meios contínuos e o fenômeno da turbulência não é uma característica dos fluidos mas do escoamento. A natureza de um escoamento, isto é, se laminar ou turbulento, e sua posição relativa numa escala de turbulência, é indicada pelo *número de Reynolds* ( $Re$ ). O número de Reynolds é a relação entre as forças de inércia ( $Fi$ ) e as forças viscosas ( $F\mu$ ):

$$Re = \frac{\sum Fi}{\sum F\mu} \quad (2.2)$$

Na Figura 2.4 é mostrado o efeito da difusão turbulenta.

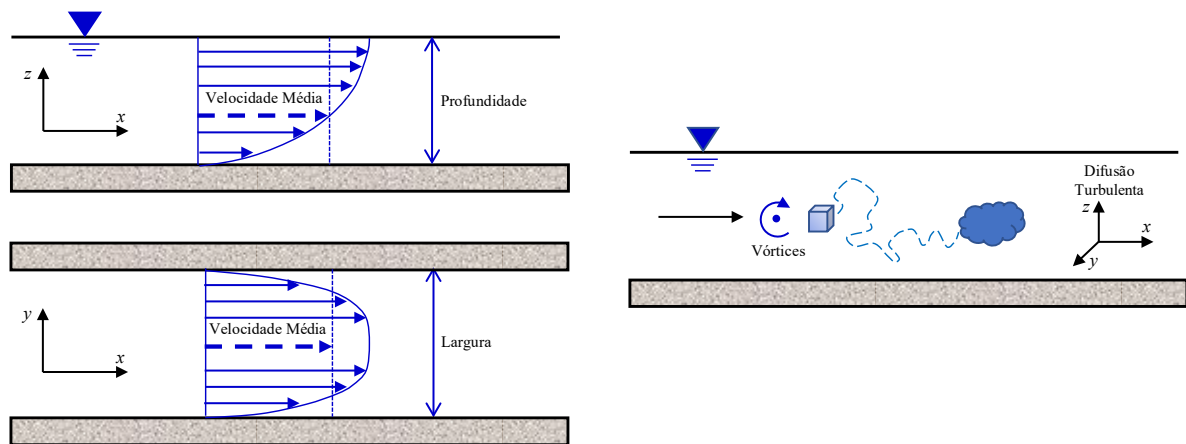


Figura 2.4: Representação de um trecho do rio com efeito difusivo.

Fonte: A Autora (2023).

Cabe ressaltar que os dois processos difusivos citados estão diretamente ligados, podendo ocorrer de forma simultânea, dependendo das características do curso da água analisado.

### 2.3.3 Dispersão

Ao lançar uma substância qualquer no meio aquático, ela tende a se dispersar devido ao processo chamado de diluição que é basicamente a mistura do despejo com a água e,

não necessariamente, o corpo hídrico precisa estar em movimento. Esse é, por exemplo, o processo que ocorre quando se coloca açúcar no café ou no suco. Para um melhor embasamento sobre o processo que ocorre com uma substância em um corpo hídrico, a seguir, são apresentados alguns fenômenos responsáveis pelo deslocamento de um constituinte.

Na Figura 2.5 é ilustrado o efeito dispersivo com a presença do perfil vertical do campo de velocidade.

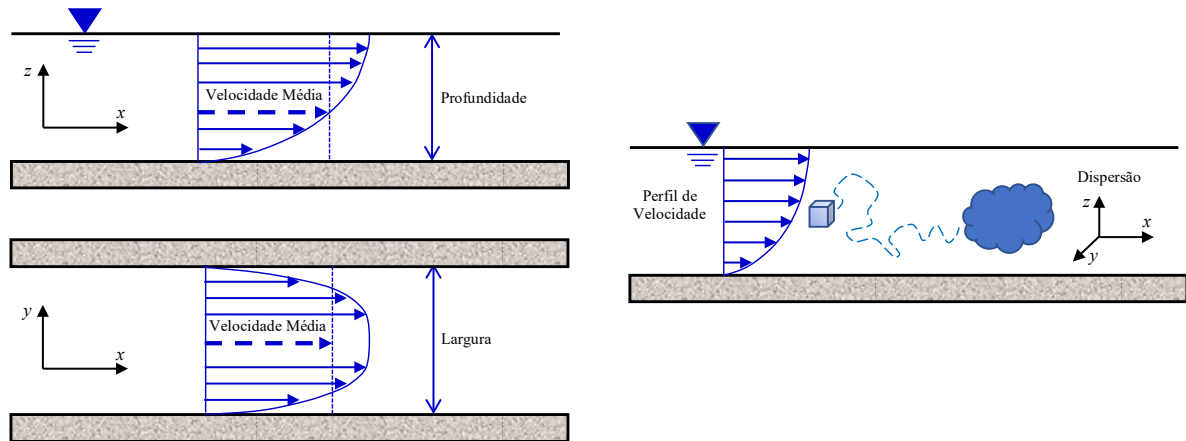


Figura 2.5: Representação de um trecho do rio com efeito dispersivo.  
Fonte: A Autora (2023).

Ademais, certas substâncias descarregadas em um curso de água também podem estar sujeitas a outros fenômenos, como adsorção, sedimentação, evaporação, degradação, etc., que causam uma certa perda de massa (Jabbour, 2006). Contudo, como aqui está sendo assumindo o princípio da conservação de massa durante o transporte do poluente, estes conceitos não serão discutidos no trabalho.

### 2.3.4 Constituinte

Entende-se como constituinte, a quantidade que pode ser representada por um poluente, substância ou traçador que é caracterizado por uma concentração correspondente. Pode ser classificado, segundo Telles (2009), como:

- **Conservativo:** é aquele cuja distribuição espacial e temporal não se afeta por reações com outros constituintes ou com o meio aquático receptor, sua distribuição é influenciada apenas pelas características físicas de transporte. Um exemplo de constituinte conservativo é o cloreto de sódio (sal de cozinha).

- **Não-conservativo:** a distribuição espacial e temporal é afetada pela interações com outros constituintes ou com o meio fluido envolvente. Exemplos típicos incluem o oxigênio dissolvido (OD) e a demanda bioquímica de oxigênio (DBO).
- **Ativo:** constituinte cuja presença afeta as características hidrodinâmicas do escoamento. Um exemplo típico é a temperatura, que pode alterar a distribuição espacial de densidade, afetando as características de turbulência e do próprio escoamento médio.
- **Passivo:** constituinte cuja presença não afeta as características hidrodinâmicas do escoamento. Como exemplo desse constituinte, pode ser citado o oxigênio dissolvido (OD).

De acordo com von Sperling (2007), as mudanças nas concentrações dos constituintes ao longo do percurso de um corpo d'água são devidas às características de transporte (advecção e difusão) e características de cinética de reações (conversão).

# Capítulo 3

## Descrição do Problema de Transporte de Contaminantes Proposto

Neste capítulo são apresentadas algumas informações sobre a região de estudos presente neste trabalho, ou seja, o rio São Pedro, localizado em Nova Friburgo, estado do Rio de Janeiro. Além disso, também é feita a descrição do experimento realizado no referido rio.

### 3.1 Área de Estudo – Rio São Pedro

A área de estudo para a qual se aplicou a simulação analisada neste trabalho está situada na região serrana do estado do Rio de Janeiro, dentro da bacia hidrográfica do rio Macaé, a qual possui uma área de drenagem de aproximadamente  $1.765 \text{ km}^2$  e engloba praticamente toda a área dos limites territoriais do município de Macaé, onde localiza-se sua foz, com cerca de  $1.448 \text{ km}^2$ , e ainda áreas dos municípios de Nova Friburgo ( $142 \text{ km}^2$ ), Casimiro de Abreu ( $83 \text{ km}^2$ ), Rio das Ostras ( $11 \text{ km}^2$ ), Conceição de Macabu ( $70 \text{ km}^2$ ) e Carapebus ( $11 \text{ km}^2$ ). É limitada ao norte, em parte, pela bacia do rio Macabu, afluente da lagoa Feia, ao sul pela bacia do rio São João, a oeste pela bacia do rio Macacu (integrante da bacia da baía de Guanabara) e a leste pelo Oceano Atlântico (Souza, 2009).

Os principais afluentes são os rios Bonito, Purgatório e Pedrinhas, os córregos Abacaxi e Carão, o rio Teimoso, os córregos Roça Velha e Belarmino e o rio Três Pontes e, os córregos Sana, Atalaia, São Domingos, Santa Bárbara, Ouro Macaé, São Pedro (região analisada no presente trabalho) e Jurumirim e os córregos Genipapo, Guanandirana e Sabiá (SEMADS, 2001). Na Figura 3.1 é mostrado um mapa ilustrativo da bacia do rio Macaé.



Figura 3.1: Mapa ilustrativo da bacia hidrográfica do rio Macaé, contendo a região de interesse.

Fonte: Freitas (2015).

O rio Macaé, antigo rio dos Bagre, que deu origem a cidade de Macaé a partir da ocupação da região por uma comunidade de pescadores, mesmo rico de tanta beleza natural, possui histórias compostas de várias intervenções do homem que alteraram profundamente o comportamento hidrológico e rede de drenagem. De acordo com Freitas (2015), esses rios, que eram sinuosos, foram transformados em canais retilíneos por obras realizadas pelo extinto Departamento Nacional de Obras e Saneamento (DNOS) e que tiveram início na década de 1940. É possível ter maiores informações, assim como as imagens dessa retificação no trabalho de Assumpção (2009).

Outras interferências prejudiciais ao rio se deram a partir de 1970 com a instalação da PETROBRAS que abastece suas plataformas com as águas do rio Macaé, a Usina Termelétrica (UTE) do Norte Fluminense que utiliza tais águas para resfriamento das caldeiras, a Companhia Estadual de Águas e Esgotos do Rio de Janeiro (CEDAE) responsável pelo abastecimento de água na região e os agricultores (Vilas Boas, 2008). Desde então, a demanda pela água cresce intensamente, já que a economia das cidades às margens desse rio também aumenta, tal qual a sua população, que tem um crescimento exponencial.

Em particular, a área de interesse nesse trabalho, a qual está inserida na bacia do rio Macaé, o rio São Pedro, localiza-se na região do alto curso da bacia do rio Macaé,

pertencente à Serra do Mar e caracteriza-se por possuir uma pequena profundidade e margens repletas de rochas, além de conter trechos sinuosos e grande biodiversidade. Tais características levou a criação da Área de Proteção Ambiental (APA) de Macaé de Cima.

Sendo o rio São Pedro afluente da bacia do rio Macaé, que tem importância econômica inquestionável para o país, justificada pelo abastecimento de toda a área próxima ao rio, assim como a exploração de petróleo e gás natural na região oceânica, torna-se evidente a necessidade de melhor avaliação desse corpo hídrico, visto que, segundo Freitas (2015):

Podemos afirmar que a qualidade e a quantidade de água que chega à foz do rio Macaé depende do que está acontecendo nas áreas mais altas da bacia. Todos os impactos ambientais que o rio sofrer ao longo do seu curso serão refletidos, de alguma forma, em sua foz, situada na cidade de Macaé.

## 3.2 Descrição do Experimento Realizado

O experimento realizado e descrito por Sousa (2009) buscou simular uma poluição acidental no curso d'água do rio São Pedro, por meio de injeções instantâneas ou contínuas de um traçador. Para isso, segundo Sousa (2009), é necessário escolher o traçador que representa o produto injetado e definir os meios de injeção, seção de amostragem e análise das amostras.

Deve-se, ainda, escolher o local a ser realizada a atividade de campo, a qual está situada em São Pedro da Serra, 7<sup>o</sup> Distrito de Nova Friburgo, estado do Rio de Janeiro, local que foi afetado por um rápido processo de transformação espacial, social e econômica, com fortes impactos ambientais (LimaVerde, 2005). Na Figura 3.2 é mostrada a região de interesse.

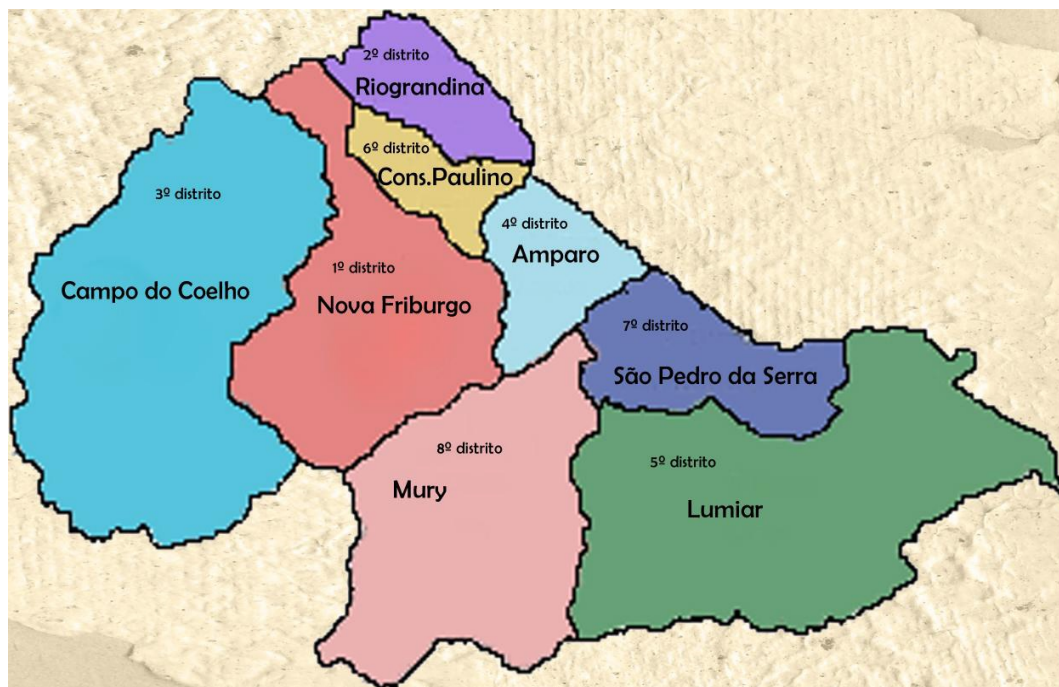


Figura 3.2: Localização do distrito de São Pedro da Serra.  
Fonte: Ribeiro (2016).

### 3.2.1 Materiais e Métodos

Para o desenvolvimento da modelagem matemática são necessários alguns parâmetros geométricos, físicos e hidrodinâmicos. Portanto, foi realizado um levantamento batimétrico e altimétrico, ao longo do trecho de estudo, para a obtenção da profundidade média  $H$  e da largura média  $B$ . O levantamento batimétrico foi executado utilizando-se trena e régua milimetrada.

Por outro lado, as vazões em sistemas fluviais é uma das mais difíceis variáveis a ser obtida, pois sua medição envolve procedimentos muitas vezes demorados, perigosos e de alto custo. Entende-se por vazão, o volume de água que passa por uma determinada seção do rio por unidade de tempo, expressa no Sistema Internacional (SI) de medidas em  $m^3/s$ . Para a obtenção dessas informações, os métodos que mais se destacam são: método por velocidade-área, método químico, método dos flutuadores, método das seções ou método do molinete e método acústico, os quais são descritos sucintamente a seguir:

- **Método por velocidade-área:** Consiste no cálculo de seções transversais  $A$  e na medição de velocidades médias  $U$  na seção. Assim, a vazão  $Q$  é encontrada a partir da multiplicação de ambas as variáveis. Expressando matematicamente o que foi dito anteriormente, tem-se:  $Q = A * U$ . De acordo a ANA (2009) este método é o

mais usual para cursos que tenham geometria estável e campo de velocidades bem comportado, o que não se verifica em rios encachoeirados com grandes turbulências.

- **Método químico:** Baseia-se na premissa essencial de que a vazão  $Q$  do rio avaliado não varia dentro do intervalo de tempo de determinação. Isso assumido, se uma descarga não transiente de substância conservativa,  $Q_E$ , for lançada no rio, como, por exemplo, vaso de mariotte demonstrado na Figura 3.3, após a zona advectiva, ocorrerá homogeneização em toda seção transversal, ou seja, em qualquer ponto da seção será observada a mesma concentração resultante,  $C$ . É um método muito utilizado em rios de montanhas que apresentam grande turbulência.



Figura 3.3: Execução do método do químico.  
Fonte: Silva (2009).

- **Método dos flutuadores:** A medição de vazão com flutuadores consiste em determinar a velocidade em que um objeto flutuante escoar, medindo-se o tempo necessário para que este se desloque em um trecho de curso d'água com comprimento conhecido, observe sua aplicação na Figura 3.4. Foi descrito pela primeira vez por Leonardo da Vinci (1452-1519) e, segundo Santo (2001), é uma metodologia recomendada para quando a vazão do rio é muito alta e coloca em risco a vida dos hidrometristas, ou quando não se tem disponível equipamento para uma medição de vazão líquida por processos mais exatos.

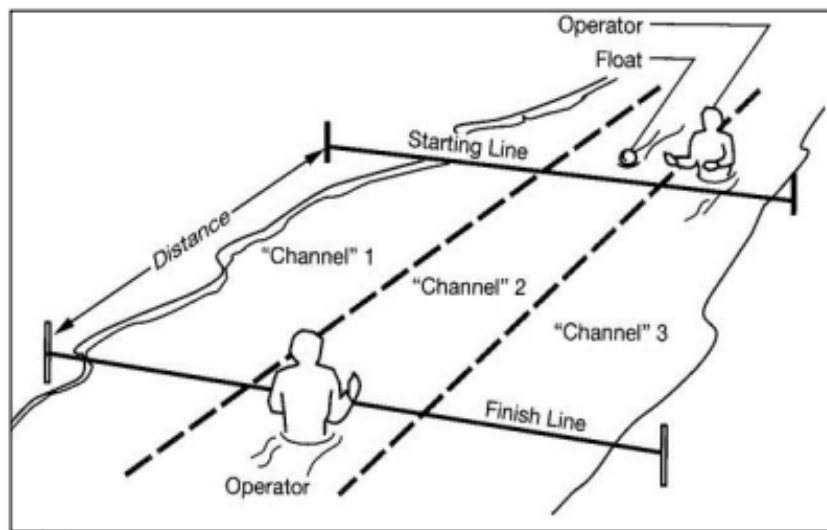


Figura 3.4: Execução do método do flutuador.  
Fonte: Coferri (2017).

- Método das seções ou método do molinete:** Consiste em calcular a velocidade de cada seção entre as verticais de medição, de uma margem a outra, conforme apresentado na Figura 3.5. Em cada perfil vertical dessa seção é medida a velocidade da água do rio com o molinete e a profundidade do local. Com isso, a seção transversal do rio estará dividida em inúmeras outras e, para cada subseção, calcula-se a área e a média das velocidades, a partir do molinete em cada vertical. Somando-se as vazões em cada subseção tem-se a vazão total do rio (Sousa, 2009).

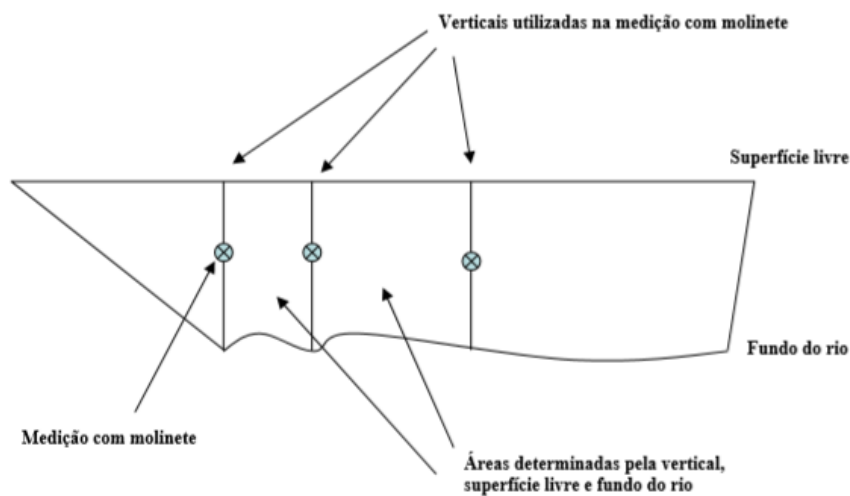


Figura 3.5: Execução do método do molinete.  
Fonte: Silva (2009).

- **Método acústico:** Muito usado na área da oceanografia. A tecnologia ADCP (do inglês *Acoustic Doppler Current Profiler*) consiste em um equipamento de medição ADCP transmitir ondas sonoras através da água, que ao retornar para o equipamento novamente, o mesmo reconheça as diferentes profundidades e velocidades das linhas de corrente através do efeito Doppler, conforme a Figura 3.6. Segundo Filho (1999), ele também pode ser utilizado para medir o seu movimento com relação ao fundo do rio e a distribuição dos sedimentos em suspensão na seção de medição.

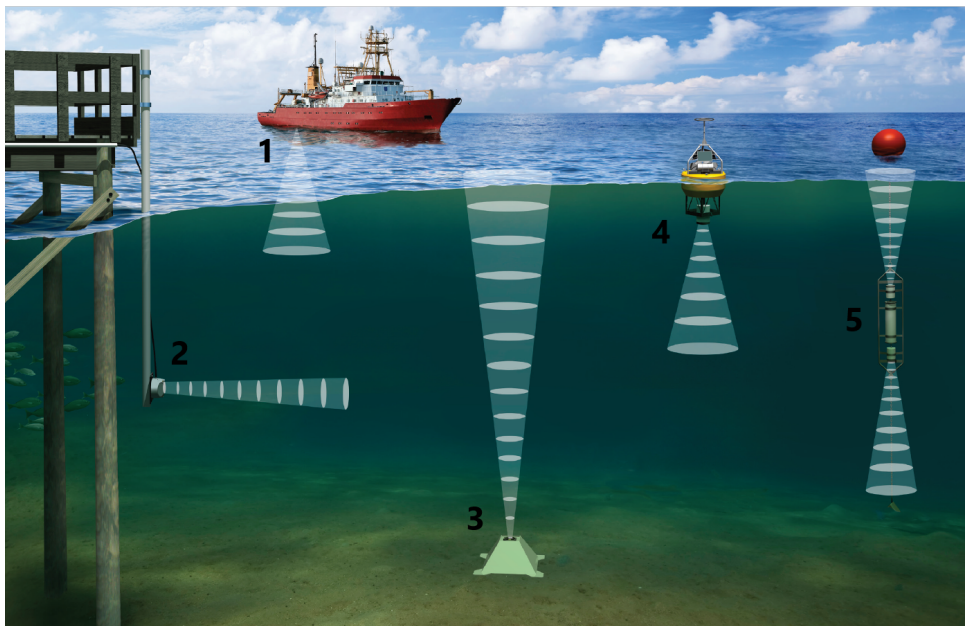


Figura 3.6: Execução do método acústico.  
Fonte: HIDROMARES (2019).

No trabalho de Sousa (2009), o método adotado para o cálculo da vazão na região de interesse, foi o método químico. Como o solvente é a água e o sal é o soluto, é possível formar uma mistura homogênea, onde o sal é dissolvido na água. Utiliza-se uma solução insaturada de sal, pois desse modo não haverá perda de massa devido à precipitação.

Para representar um poluente lançado no curso d'água da região de interesse, foi utilizado um traçador salino (NaCl). O traçador tem como objetivo analisar a forma como uma substância conservativa se dissolve ao longo do escoamento, podendo, assim, fazer considerações sobre o movimento do fluido. Se comparado com outros traçadores, o NaCl apresenta vantagens como, por exemplo, solubilidade em água, presença natural quase nula, não possui efeitos nocivos ao impacto ambiental, facilidade de armazenamento ou de quantificação, além de um custo muito baixo.

### 3.2.2 Processo de Aquisição dos Dados Experimentais

O experimento realizado por Sousa (2009) e descrito no presente trabalho, ocorreu no dia 26 de janeiro de 2009, com início às 10:50:28 *h*, e buscou simular um cenário de poluição acidental no curso de água em questão. Para isso, foi utilizada uma solução de cloreto de sódio (NaCl) como traçador e, nas operações de campo, contou-se com a participação de 5 pessoas, distribuídas nos pontos de injeção e amostragem.

As medições foram feitas em um trecho do rio localizado na saída da vila, em frente à estrada do cemitério (22°19.155'S, 42°19.897'W). Na Figura 3.7 é apresentada a vista parcial de interesse do trecho do rio São Pedro.



Figura 3.7: Vista parcial do trecho do rio São Pedro.  
Fonte: Sousa (2009).

Para a preparação da solução salina, foram utilizados 2000 *g* de cloreto de sódio, diluídos em, aproximadamente, 15 *l* de água em um balde, os quais foram liberados instantaneamente em um ponto da seção de injeção, sobre a linha de corrente central do escoamento. A primeira seção de medição foi escolhida a 50 *m* do ponto de injeção e, a segunda, a 100 *m*. Foram colhidas amostras de 200 *ml* da água a cada 15 *s*, totalizando 60 amostras, as quais, posteriormente, foram analisadas em laboratório.

Antes de dar início às injeções do sal, amostras foram colhidas no ponto de amostragem

para a referência de fundo "branco" do condutivímetro, obtendo um valor médio da concentração existente de  $15,5 \text{ mg/l}$ . Na Tabela 3.1 são mostradas as configurações do rio São Pedro no local onde foi realizado o experimento.

Tabela 3.1: Características do rio no ponto de lançamento do traçador.

<b>Parâmetros</b>	<b>Valores</b>
Área $A$	$1,05 \text{ m}^2$
Largura $B$	$2,40 \text{ m}$
Profundidade $H = A/B$	$0,43 \text{ m}$
Vazão $Q = A * U$	$0,43 \text{ m}^3/\text{s}$
Concentração inicial $C_0$	$15,50 \text{ mg/l}$
Velocidade $U$	$0,41 \text{ m/s}$

# Capítulo 4

## Modelagem Matemática e Solução do Problema Proposto

A modelagem matemática é a arte de transcrever um problema da vida real para uma linguagem matemática e resolvê-lo, traduzindo os resultados obtidos para a linguagem do problema real. Portanto, por tratar de problemas reais, a modelagem é interdisciplinar, visto que um ser humano precisa de diversos conhecimentos para sobreviver, seus problemas também envolvem diferentes conteúdos, voltados para as mais diversas áreas das ciências.

Neste contexto, para a modelagem e solução de um problema real, deve-se levar em consideração os processos ilustrados na Figura 4.1.

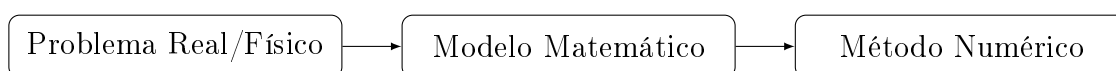


Figura 4.1: Fluxograma dos processos de modelagem e solução de um problema real.  
Fonte: A Autora (2023).

Em particular, no que diz respeito ao modelo matemático e ao método numérico, deve-se contemplar as seguintes etapas:

1. Definir as equações diferenciais ou integro-diferenciais e as condições de contorno que representam o problema sob análise (modelo matemático).
2. Determinar o sistema de coordenadas que as equações serão escritas:
  - cartesianas, cilíndricas, esféricas, curvilíneas, ortogonais, ou outros.
3. Definir a malha computacional a ser adotada (representação geométrica do domínio):

- malha estruturada e malha não-estruturada.
4. Aproximar as equações (modelo matemático) por um sistema de equações lineares, levando em consideração pontos discretos no espaço e no tempo. Selecionar as aproximações que serão utilizadas no processo de discretização:
    - Método das Diferenças Finitas: aproximação para as derivadas.
    - Método dos Volumes Finitos: aproximação para as integrais de volume e de superfícies.
    - Método dos Elementos Finitos: funções e pesos.
  5. Definir o método de solução do sistema de acordo com o problema (elíptico, parabólico, hiperbólico, misto).

## 4.1 Modelagem Matemática

A formulação matemática e computacional de um modelo de qualidade de água como principal instrumento para análise de corpos hídricos se faz por, com ela, ter uma noção do trajeto dos contaminantes, podendo calibrar e adaptar o modelo de acordo com a hipótese a ser investigada.

O primeiro passo na construção de um modelo dessa natureza consiste em delimitar a região do corpo hídrico que será estudada. Embora arbitrário, esse procedimento deve atender às necessidades do estudo para o qual se pretende implementar a simulação. Posteriormente, deve-se definir as equações que modelam o problema a ser analisado, assim como suas condições de contorno e inicial.

Usualmente, um modelo desenvolvido tem como base a lei da conservação da massa, proposta por Antoine Laurent Lavoisier por volta do ano de 1775, o qual afirma que “na natureza, nada se cria, nada se perde, tudo se transforma”. Ainda, conforme Martin e McCutcheon (1999), a massa não pode ser criada nem destruída, apenas transferida ou transformada. Esta lei forma a base para a maioria dos modelos de qualidade de água, que são comumente chamados de modelos de balanço de massa.

A lei de conservação da massa é aplicada à massa de água em modelos de transporte de água e à massa de materiais dissolvidos ou suspensos na água. Portanto, a equação de conservação na forma conservativa pode ser descrita conforme balanço mostrado na Figura 4.2.

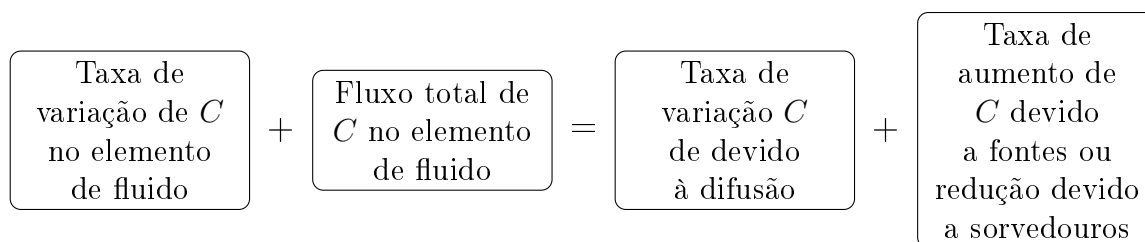


Figura 4.2: Equação de conservação na forma conservativa.

Fonte: A Autora (2023).

Matematicamente, as equações de conservação podem ser escritas na forma divergente da seguinte maneira:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \nabla(\vec{v}C) = \nabla(E\nabla C) + S \quad (4.1)$$

em que:

$x, y, z$  são as coordenadas espaciais ( $m$ ).

$t$  é o tempo ( $s$ ).

$C = C(x, y, z, t)$  é a concentração do poluente em análise ( $mg/l$ ).

$\vec{v} = (U, V, W)$  corresponde ao vetor de velocidade nas direções  $x, y, z$ , respectivamente ( $m/s$ ).

$E = E(x, y, z, t)$  representa o coeficiente de dispersão do poluente ( $m^2/s$ ).

$\frac{\partial C}{\partial t}$  representa a taxa de variação de  $C$  num elemento fluido ao longo do tempo.

$\nabla(\vec{v}C)$  é o termo advectivo.

$\nabla(E\nabla C)$  é o termo dispersivo.

$S$  é o termo fonte ou sumidouro relativo ao poluente.

Outros fatores importantes para a construção de um modelo dessa natureza são: a condição inicial, a qual é compreendida como a distribuição espacial da concentração do poluente no momento que antecede o início da simulação; e as condições de contorno, que são as concentrações definidas para as fronteiras que delimitam o espaço físico do problema. Assim, de acordo com Menezes (2019), as condições de contorno podem ser classificadas como:

- **C. C. de Dirichlet (1º tipo):** Especifica os valores que uma solução necessita tomar no contorno do domínio, ou seja, o valor da grandeza é conhecido.
- **C. C. de Neumann (2º tipo):** Especifica os valores que a derivada de uma solução deve tomar no contorno do domínio, ou seja, especifica a derivada normal à função no domínio. Está relacionada com o fluxo da grandeza analisada na fronteira.

- **C. C. de Robin ou Mista (3º tipo):** Envolve as condições de contorno de 1º e 2º tipos, ou seja, relaciona tanto o valor da grandeza quanto o fluxo da grandeza nas fronteiras.

### 4.1.1 Modelagem Matemática Referente ao Estudo de Caso

Além da correta escolha das condições inicial e de contorno, o modelo matemático para o problema proposto neste trabalho leva em consideração o fato de o trecho do rio estudado ser suficientemente estreito e raso, fazendo com que as variações nas direções transversal e vertical sejam desprezíveis em relação às variações longitudinais. Logo, um modelo unidimensional que leve em consideração apenas as variações na referida direção pode ser empregado, sendo expresso da seguinte forma:

- Equação de Advecção-Dispersão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + U \frac{\partial C}{\partial x} = E_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4.2)$$

- Condições inicial e de contorno:

$$C(x, 0) = C_0 + \frac{M}{A} \delta(x), \quad -\infty < x < \infty \quad (4.3a)$$

$$C(\pm\infty, t) = C_0, \quad t > 0 \quad (4.3b)$$

em que:

$C$  é a concentração ( $mg/l$ ).

$t$  é a variável temporal ( $s$ ).

$x$  é a variável espacial ( $m$ ).

$U$  é a velocidade do escoamento ( $m/s$ ).

$E_L$  é o coeficiente de dispersão longitudinal ( $m^2/s$ ).

$M$  é a massa do constituinte ( $mg$ ).

$A$  é a área da seção transversal do rio ( $m^2$ );

$\delta(x)$  é a função *Delta de Dirac*.

A função Delta de Dirac fisicamente representa uma unidade de massa de constituinte dentro de um espaço (uma região) infinitamente pequeno e que tem a propriedade de ser nula no tempo inicial em todos os lugares, exceto em  $x = 0$  (posição de injeção de massa  $M$  do constituinte), tal que:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(x) dx = 1. \quad (4.4)$$

A solução analítica para o modelo matemático descrito na Equação (4.2), com condições inicial e de contorno, dadas pelas Equações (4.3a) e (4.3b), é dada pela Equação (4.5) (Sousa, 2009).

$$C(x, t) = C_0 + \frac{M}{A\sqrt{4\pi E_L t}} \exp\left(-\frac{(x - Ut)^2}{4E_L t}\right) \quad (4.5)$$

A solução numérica do problema aqui descrito, foi obtida empregando o Método dos Volumes Finitos com formulação totalmente implícita, o qual é descrito na próxima seção.

## 4.2 Solução Numérica do Problema Proposto

Em primeiro lugar, um método de soluções numéricas para resolver um problema de forma adequada, deve atender às seguintes propriedades:

- **Consistência:** A solução encontrada deverá convergir para solução das equações, quando a distância entre os pontos da malha tendem para zero (intervalos de tempo  $\Delta t$  e as subdivisões da malha  $\Delta x, \Delta y$  e  $\Delta z$  escolhidos). A diferença entre a equação discretizada e a exata é chamada de erro de truncamento. Geralmente, é estimado substituindo todos os valores nodais na aproximação discreta por uma expansão da série Taylor sobre um único ponto (Ferziger, 2002).
- **Estabilidade:** Um método é dito estável quando ele não amplifica os erros que aparecem durante o processo de simulação numérica (erro de truncamento e/ou arredondamento). Em outras palavras, a solução numérica é a solução exata do sistema (resolve bem o sistema linear). Segundo Ferziger (2002), a abordagem mais amplamente usada para estudar a estabilidade de esquemas numéricos é o método de von Neumann.
- **Convergência:** Um método é dito convergente quando a solução das equações discretizadas tendem para a solução exata quando a distância entre pontos da malha tende a zero. Assim, para problemas lineares, basta atender ao teorema da equivalência de Lax: Consistência + Estabilidade = Convergência. Por Ferziger (2002), a convergência é geralmente verificada usando experimentos numéricos, isto é, repetindo o cálculo em uma série de malhas sucessivamente refinadas.
- **Conservação:** Uma vez que o objetivo é simular numericamente equações da conservação, estas equações devem ser respeitadas local e globalmente. O tratamento das fontes ou termos do coletor deve ser consistente, de modo que a fonte total ou

coletor no domínio seja igual ao fluxo líquido da quantidade conservada através dos limites (Ferziger, 2002).

- **Limitação:** As soluções numéricas devem estar dentro dos limites adequados. Quantidades fisicamente não-negativas (como densidade, energia cinética da turbulência) devem sempre ser positivas; outras quantidades, como concentração, devem situar-se entre 0% e 100% (Ferziger, 2002).
- **Factibilidade:** Modelos de fenômenos que são difíceis de serem tratados diretamente (turbulência, combustão, escoamento multifásico), devem ser desenvolvidos para garantir soluções físicas realistas. Para Ferziger (2002), esse não é um problema numérico, mas modelos que não são factíveis podem resultar em soluções não-físicas ou fazer com que os métodos numéricos diverjam.

### 4.2.1 Malhas Computacionais

Para a solução numérica de um problema é necessário fazer a discretização do domínio analisado, sendo essa discretização a divisão em subdomínios, elementos chamados de células ou volumes de controle delimitado por faces e nós. Sobre os pontos centrais de cada elemento, ou de cada nó, as equações calculadas são discretizadas, de forma que, quanto mais subdomínios, melhor será o resultado aproximado até um ponto de convergência. Porém, vale ressaltar que essa é uma ideia genérica, visto que, cada problema apresenta sua própria característica, sendo necessário um melhor refinamento ou não, como, por exemplo, em problemas com geometria complexa.

Uma forma de saber até que ponto deve-se refinar uma malha é analisar sua convergência, segundo Silva (2016), conforme a malha é refinada e aprimorada, a variação de resultados nestas regiões diminui, e assume comportamento assintótico, independente da malha. Se a simulação foi bem definida, a assíntota corresponde ao resultado real da aplicação estudada.

No entanto, mesmo com a convergência, a quantidade de nós para a análise de um problema geralmente é muito grande para ser feita por meio de cálculos manuais, logo, utiliza-se os computadores para a resolução numérica. Por conseguinte, ao modelar um problema busca-se a malha que se adeque melhor a sua geometria. A seguir são apresentados os tipos de malha e as geometrias para as quais são indicadas.

#### 4.2.1.1 Malhas Estruturadas

A principal característica das malhas estruturadas, ou regulares, notada logo no início, é seu padrão de organização. Como definição, a localização dos volumes vizinhos a cada volume é determinada por variação de índices em cada direção. Além disso, todos os seus elementos são posicionados segundo um sistema de coordenadas e todos eles (exceto os da fronteira) possuem a mesma quantidade de vizinhos, o que permite serem numerados facilmente, seguindo uma ordem simples.

Há vantagem em termos de memória no armazenamento das variáveis calculadas e de velocidade para acessar os vizinhos dos volumes durante o processamento (Castelli, 2012). Porém, esse tipo de malha tem dificuldades em ser aplicada a geometrias mais complexas, com quinas ou curvas. Nas Figuras 4.3 a 4.5 são mostradas malhas estruturadas em domínios uni, bi e tridimensional.



Figura 4.3: Malha estruturada em domínio unidimensional.  
Fonte: A Autora (2023).

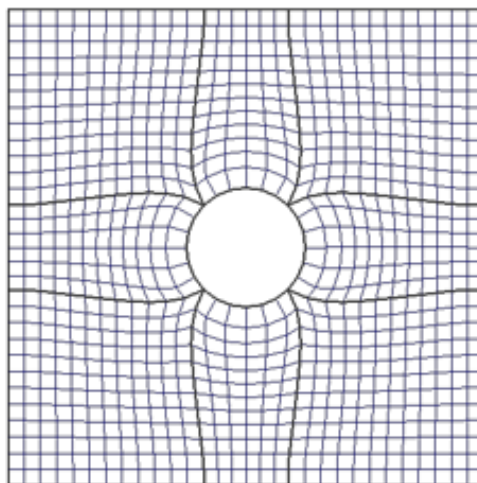


Figura 4.4: Malha estruturada em domínio bidimensional.  
Fonte: Pointwise (2012).

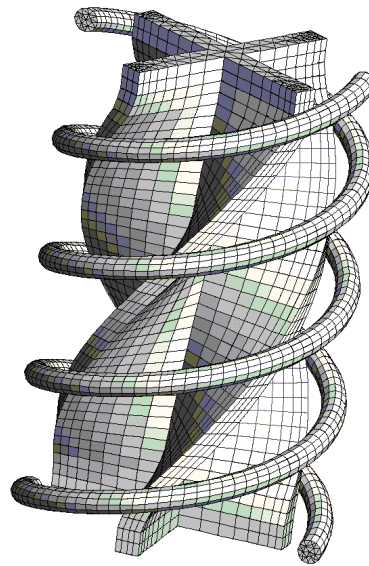


Figura 4.5: Malha estruturada em domínio tridimensional.  
Fonte: Sussman (2016).

#### 4.2.1.2 Malhas Não-Estruturadas

A ideia das malhas não-estruturadas é muito bem traduzida pela composição de triângulos e tetraedros sobre um domínio, conforme apresentado nas Figuras 4.6 e 4.7. Apesar disso, seus elementos podem assumir qualquer forma, com variados números de vértices, além de diferentes números de vizinhos, o que enfatiza o aspecto de irregularidade presente nesse tipo de malha.

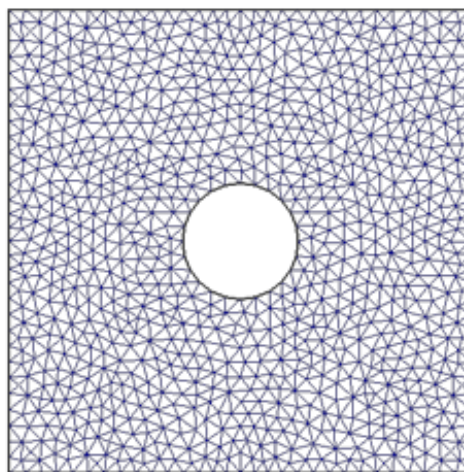


Figura 4.6: Malha não-estruturada em domínio bidimensional.  
Fonte: Pointwise (2012).

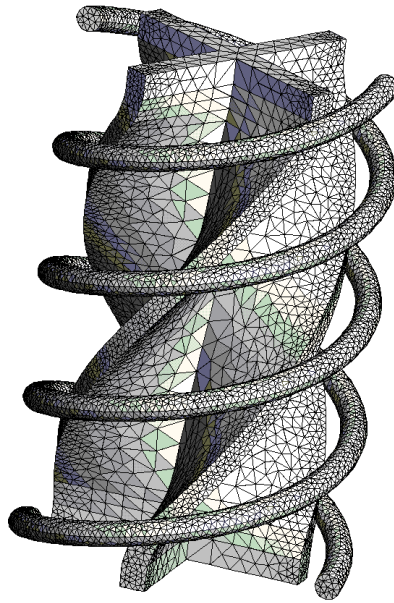


Figura 4.7: Malha não-estruturada em domínio tridimensional.  
Fonte: Sussman (2016).

Ao contrário da malha estruturada, ela não está disposta em coordenadas cartesianas, o que dificulta a estrutura dos dados, bem como a montagem de matrizes. Assim, se torna um processo mais trabalhoso e mais lento. Contudo, são mais flexíveis para tratamento de geometrias complexas (Castelli, 2012). Isso garante um problema genérico, podendo ser aplicado em qualquer tipo de domínio.

#### 4.2.1.3 Malhas Híbridas

Malha híbrida é a aplicação da malha estruturada em conjunto com a malha não-estruturada, observe a Figura 4.8, onde a malha é aplicada em uma peça de um motor de combustão interna.

Para Menezes (2019), dadas as vantagens e desvantagens das malhas estruturadas e não-estruturadas, nada impede que ambas sejam aplicadas ao mesmo problema, se isso for vantajoso. Portanto, em um domínio com variação de área regulares e sinuosas pode ser aplicada a malha estruturada para a parte do domínio regular e a malha não-estruturada para a parte com uma geometria mais complexa.

Assim, o tempo é a maior vantagem no uso da malha híbrida, já que o custo computacional destinado à malha estruturada na área que contém curvas sinuosas é economizado, e o custo necessário para a utilização de uma malha totalmente não-estruturada é reduzido.

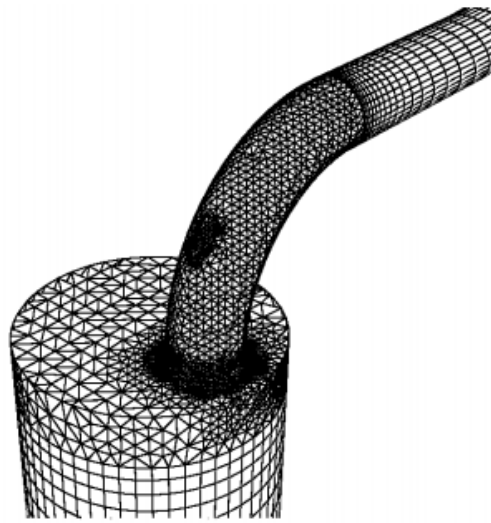


Figura 4.8: Malha híbrida aplicada em domínio tridimensional.  
Fonte: Kumar (2016).

## 4.2.2 Métodos de Discretização de Equações

Após a discretização do domínio, é preciso estabelecer um método de discretização das equações tratadas no problema, no caso do presente trabalho é adotado o Método dos Volumes Finitos (MVF). O objetivo desse processo é transformar a equação diferencial parcial que rege o problema em um conjunto de equações algébricas, que serão resolvidas em cada ponto da malha.

O objetivo de um método numérico aplicado no contexto das equações diferenciais é, em geral, substituir as derivadas existentes na equação, por expressões algébricas aproximadas que envolvem a função incógnita. Para isso, é necessário discretizar o domínio de interesse, e aplicar o método escolhido que, por sua vez, irá gerar um sistema de equações e espera-se que a solução seja a solução da equação diferencial. Por conseguinte, dentre as propostas de métodos numéricos para a resolução de equações diferenciais, as mais conhecidas são: Método das Diferenças Finitas (MDF), o Método dos Volumes Finitos (MVF) e Método dos Elementos Finitos (MEF).

Em meio aos métodos apresentados, o Método dos Volumes Finitos é mais utilizado para solução de problemas de transporte, pois é o único método numérico que, em sua essência, assume a conservação da massa, a qual é uma lei da natureza e sempre ocorre em mecânica dos fluidos. Diferentemente do Método dos Elementos Finitos, que trabalha em problemas de estrutura, onde naturalmente a conservação da massa ocorre, não necessitando que as equações dos elementos estejam na forma do balanço de massa. Ou seja, o

MVF assume localmente o balanço de massa para que essa característica seja globalmente satisfeita.

Além disso, o MVF tem sido um método muito utilizado pelos cientistas e engenheiros que trabalham com a mecânica dos fluídos. Autores como Gois (2005), Telles (2009), Silva (2016), Ferreira (2017), Coimbra (2020), entre tantas outras obras que podem ser encontradas na literatura, utilizaram o referido método na solução dessa classe de problemas.

#### 4.2.2.1 Método dos Volumes Finitos (MVF)

No Método dos Volumes Finitos (MVF), o domínio contínuo é discretizado, ou seja, dividido em subdomínios também contínuos, chamado de volume de controle (VC), sobre os quais as equações do problema serão aplicadas. A escolha do volume de controle é baseada em duas técnicas de armazenamento: **cell-center** e **verte-center**. Na primeira, ilustrada na Figura 4.9(a), as informações relativas ao volume de controle são armazenadas no centro dos elementos da malha e, na segunda, conforme a Figura 4.9(b), nos vértices dos elementos da malha, de forma que os limites do volume de controle são estabelecidos pela ligação entre os centroides dos elementos da malha e o ponto médio de suas faces.

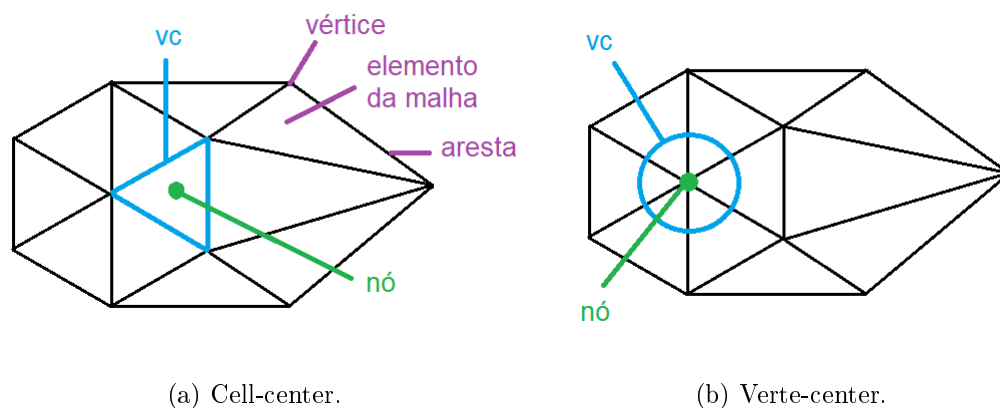


Figura 4.9: Representação do volume de controle baseado nas técnicas cell-center e verte-center.

Fonte: A Autora (2023).

A vantagem da primeira abordagem é que o valor nodal representa a média sobre o VC com maior precisão, além da técnica cell-center utilizar menos equações na construção dos sistemas matriciais de resolução e uma estrutura de dados mais simples, porém, resulta em um número grande de VC. Já na técnica verte-center, as derivadas nas faces VC são mais precisas quando a face está no meio do caminho entre dois nós, em contrapartida, ela

envolve maior complexidade no armazenamento e tem como resultado matrizes maiores, contudo, reduz significativamente o número de VC avaliados. A primeira técnica é usada com mais frequência e será usada nesse trabalho, juntamente com uma malha estruturada e retangular.

O MVF usa a forma integral da equação de conservação como ponto de partida. Para isso são utilizadas técnicas de aproximação necessárias para obter as equações discretizadas. Assim, tem-se as funções de interpolação para estimar o fluxo advectivo nas faces, bem como aproximar as derivadas do termo dispersivo.

### 4.3 Aplicação do MVF ao Problema Proposto

Para o trecho do rio São Pedro analisado neste trabalho foi realizada a discretização do domínio unidimensional, dando origem às malhas espaciais, para que possa ser aplicado o Método dos Volumes Finitos, cujos volumes de controle estão baseados na técnica de armazenamento cell-center. Na Figura 4.10 é apresentada uma representação ilustrativa da malha espacial para o MVF, onde as letras  $W$  e  $E$  representam as direções Oeste e Leste, respectivamente, as letras  $w$  e  $e$  representam suas faces, por fim, a letra  $P$  é o centro do volume de controle.

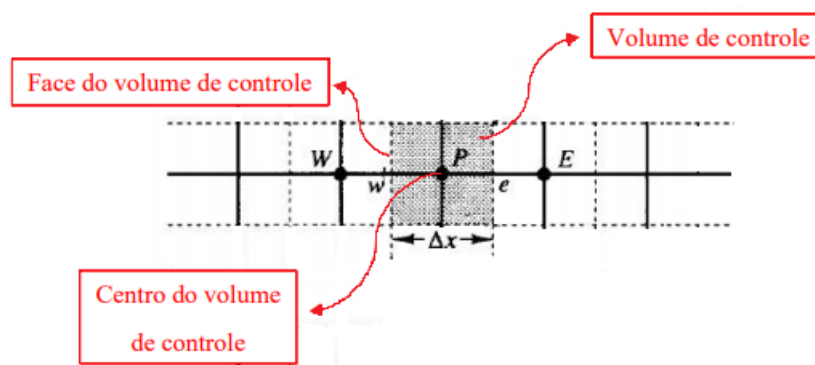


Figura 4.10: Ilustração da malha espacial para o Método dos Volumes Finitos.  
Fonte: Adaptado de Ferreira (2017).

A obtenção das equações aproximadas pelo MVF se dá por meio da integração da equação na forma conservativa, sobre cada elemento, no espaço e no tempo. Assim:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial C}{\partial t} dxdt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dxdt = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e E_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dxdt \quad (4.6)$$

Integrando o termo transiente (primeiro termo do lado esquerdo da Equação (4.6)), em relação ao tempo, em intervalos de tempo  $\Delta t$  (constantes), e no espaço, de  $w$  até  $e$  (aqui utiliza-se o teorema fundamental do cálculo aplicado no intervalo  $(t, t + \Delta t)$ ), tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \frac{\partial C}{\partial t} dx dt = \Delta x (C_P^{t+\Delta t} - C_P^t) \quad (4.7)$$

em que  $C_P^t$  e  $C_P^{t+\Delta t}$  denotam as concentrações médias avaliadas no ponto  $P$  nos instantes de tempo  $t$  e  $t + \Delta t$ , respectivamente.

A integração do termo advectivo (segundo termo do lado esquerdo da Equação (4.6)), em relação ao espaço e tempo, dá origem a seguinte equação:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_e^\theta - C_w^\theta) \quad (4.8)$$

Realizando a integração no espaço e tempo do termo dispersivo longitudinal (termo do lado direito da Equação (4.6)), tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e E_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx dt = E_L \Delta t \left( \left. \frac{\partial C^\theta}{\partial x} \right|_e - \left. \frac{\partial C^\theta}{\partial x} \right|_w \right) \quad (4.9)$$

Para as derivadas das concentrações nas faces do volume de controle, é necessário utilizar uma função de interpolação espacial para extrair novas informações.

Neste trabalho, a aproximação da derivada presente na Equação (4.9) é dada pela série de Taylor, conforme Seção 4.4. Para o termo advectivo descrito na Equação (4.8), são analisadas distintas formulações, as quais são apresentadas na Seção 4.5. Em todos os termos anteriores utilizou-se o teorema fundamental do cálculo.

## 4.4 Análise do Termo Dispersivo

Muitas funções têm suas expressões escritas como um "polinômio infinito", isto é, uma soma infinita de termos do tipo  $c_n(x - x_0)^n$ . Portanto, uma série (de funções) na forma  $\sum_{n=0}^{\infty} c_n(x - x_0)^n$  é chamada série de potência (em torno de  $x_0$ ), em que  $c_n$  é chamado coeficiente da série. Ademais, o desenvolvimento de funções em séries de potências é aplicado para diversas finalidades, sendo uma delas a resolução de equações diferenciais.

A seguir é apresentada uma descrição baseada em Guidorizzi (2001).

Suponha que a função  $f$  tem derivadas de todas as ordens e que possa ser representada por uma série de potências, com raio de convergência  $R$ , conforme Equação (4.10).

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} c_n(x - x_0)^n, \quad |x - x_0| < R$$

$$f(x) = c_0 + c_1(x - x_0) + c_2(x - x_0)^2 + \cdots + c_n(x - x_0)^n + \cdots \quad (4.10)$$

Calculando as derivadas da função  $f(x)$  e fazendo  $x = x_0$  em  $f(x), f'(x), f''(x), \dots, f^n(x)$ , tem-se:

$$c_0 = f(x_0) = \frac{f^{(0)}(x_0)}{0!}$$

$$c_1 = f'(x_0) = \frac{f^{(1)}(x_0)}{1!}$$

$$c_2 = f''(x_0) = \frac{f^{(2)}(x_0)}{2!}$$

$$\vdots$$

$$c_n = f^n(x_0) = \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!}$$

Logo, se  $f(x)$  tem expansão em série de potências centradas em  $x_0$ , então ela deve ser da forma:

$$f(x) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} (x - x_0)^n \quad (4.11)$$

A série da equação é chamada **série de Taylor** da função  $f(x)$  centrada em  $x_0$ .

Como consequência, é possível realizar a aproximação das derivadas usando a expansão de Taylor para funções de uma variável. Essa aproximação pode ser feita de três formas:

- Avançada.
- Atrasada.
- Centrada.

Realizando a expansão de Taylor para  $f(x)$  em torno do ponto  $x_0$ , e considerando

$h = x - x_0$ , o que implica em  $x = x_0 + h$ , tem-se:

$$f(x_0 + h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} \underbrace{(x - x_0)_h^n}_{h^n} = f(x_0) + f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)h^2}{2!} + \frac{f'''(x_0)h^3}{3!} + \dots \quad (4.12)$$

$$f(x_0 - h) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{f^{(n)}(x_0)}{n!} \underbrace{(x - x_0)_h^n}_{h^n} = f(x_0) - f'(x_0)h + \frac{f''(x_0)h^2}{2!} - \frac{f'''(x_0)h^3}{3!} + \dots \quad (4.13)$$

Tomando como base a Equação (4.12) e colocando  $f'(x_0)$  em evidência, obtem-se:

$$f'(x_0) = \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(x_0)h}{2!} - \frac{f'''(x_0)h^2}{3!} - \dots \quad (4.14)$$

Logo,

$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_0 + h) - f(x_0)}{h} \quad (4.15)$$

é uma aproximação para a derivada de primeira ordem de  $f(x)$  em  $x_0$  por **diferenças avançadas** com erro de truncamento de ordem  $h$ , dado por:

$$\varphi(h) = -\frac{f''(x_0)h}{2!} - \frac{f'''(x_0)h^2}{3!} - \dots \quad (4.16)$$

Agora, tomando como base a Equação (4.13) e colocando  $f'(x_0)$  em evidência, obtem-se:

$$\begin{aligned} -f'(x_0) &= \frac{f(x_0 - h) - f(x_0)}{h} - \frac{f''(x_0)h^2}{2!h} + \frac{f'''(x_0)h^3}{3!h} - \dots \\ f'(x_0) &= \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} + \frac{f''(x_0)h}{2!} - \frac{f'''(x_0)h^2}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (4.17)$$

Logo,

$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_0) - f(x_0 - h)}{h} \quad (4.18)$$

é uma aproximação para a derivada de primeira ordem de  $f(x)$  em  $x_0$  por **diferenças atrasadas** com erro de truncamento de ordem  $h$ , dado por:

$$\varphi(h) = +\frac{f''(x_0)h}{2!} - \frac{f'''(x_0)h^2}{3!} + \dots \quad (4.19)$$

Por fim, tomando como base as Equações (4.12) e (4.13), tem-se:

$$f(x_0 + h) - f(x_0 - h) = 2f'(x_0)h + \frac{2f'''(x_0)h^3}{3!} + \dots \quad (4.20)$$

Colocando  $f'(x_0)$  em evidência, obtém-se:

$$\begin{aligned} f'(x_0) &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{2f'''(x_0)h^3}{3!2h} + \dots \\ &= \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} - \frac{f'''(x_0)h^2}{3!} + \dots \end{aligned} \quad (4.21)$$

Logo,

$$f'(x_0) \cong \frac{f(x_0 + h) - f(x_0 - h)}{2h} \quad (4.22)$$

é uma aproximação para a derivada de primeira ordem de  $f(x)$  em  $x_0$  por **diferenças centradas** com erro de truncamento de ordem  $h^2$ , dado por:

$$\varphi(h^2) = -\frac{f'''(x_0)h^2}{3!} + \dots \quad (4.23)$$

Por fim, para o presente trabalho é utilizada a aproximação para a derivada de primeira ordem de  $f(x)$  em  $x_0$  por **diferenças centradas**.

Assim, tomando como base a representação da malha na Figura 4.11, é feita uma aproximação para as derivadas de primeira ordem utilizando a série de Taylor em torno dos pontos  $w$  e  $e$ , conforme Equações (4.24a)-(4.24b).

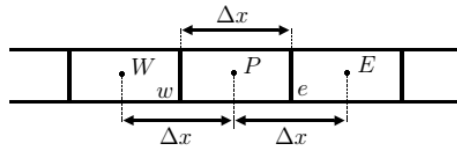


Figura 4.11: Ilustração da malha espacial.  
Fonte: A Autora (2023).

- Face  $w$

Realizando uma expansão em série de Taylor em torno de  $w$ , tem-se:

$$C_{w-\frac{\Delta x}{2}}^{\theta} = C_W^{\theta} = C_w^{\theta} - C_w^{\theta'} \frac{\Delta x}{2} + C_w^{\theta''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^2}{2!} - C_w^{\theta'''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^3}{3!} + \dots \quad (4.24a)$$

$$C_{w+\frac{\Delta x}{2}}^{\theta} = C_P^{\theta} = C_w^{\theta} + C_w^{\theta'} \frac{\Delta x}{2} + C_w^{\theta''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^2}{2!} + C_w^{\theta'''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^3}{3!} + \dots \quad (4.24b)$$

Fazendo a subtração da Equação (4.24b) pela Equação (4.24a), obtem-se:

$$C_P^{\theta} - C_W^{\theta} = 2C_w^{\theta'} \frac{\Delta x}{2} + 2C_w^{\theta'''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^3}{3!} + \dots$$

$$C_w^{\theta'} = \left. \frac{\partial C^{\theta}}{\partial x} \right|_w = \frac{C_P^{\theta} - C_W^{\theta}}{\Delta x} + \varphi(\Delta x^2) \quad (4.25)$$

Os termos desprezados, de ordem  $\Delta x^2$ , ou seja  $\varphi(\Delta x^2)$ , constituem o erro de truncamento devido a impossibilidade de considerar um número infinito de termos.

- Face  $e$

Realizando uma expansão em série de Taylor em torno de  $e$ , tem-se:

$$C_{e-\frac{\Delta x}{2}}^{\theta} = C_P^{\theta} = C_e^{\theta} - C_e^{\theta'} \frac{\Delta x}{2} + C_e^{\theta''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^2}{2!} - C_e^{\theta'''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^3}{3!} + \dots \quad (4.26a)$$

$$C_{e+\frac{\Delta x}{2}}^{\theta} = C_E^{\theta} = C_e^{\theta} + C_e^{\theta'} \frac{\Delta x}{2} + C_e^{\theta''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^2}{2!} + C_e^{\theta'''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^3}{3!} + \dots \quad (4.26b)$$

Fazendo a subtração da Equação (4.26b) pela Equação (4.26a), obtem-se:

$$C_E^{\theta} - C_P^{\theta} = 2C_e^{\theta'} \frac{\Delta x}{2} + 2C_e^{\theta'''} \frac{(\frac{\Delta x}{2})^3}{3!} + \dots$$

$$C_e^{\theta'} = \left. \frac{\partial C^{\theta}}{\partial x} \right|_e = \frac{C_E^{\theta} - C_P^{\theta}}{\Delta x} + \varphi(\Delta x^2) \quad (4.27)$$

onde,  $\varphi(\Delta x^2)$  constitui o erro de truncamento.

Substituindo as Equações (4.25) e (4.27) na Equação (4.9), tem-se:

$$E_L \Delta t \left( \left. \frac{\partial C^{\theta}}{\partial x} \right|_e - \left. \frac{\partial C^{\theta}}{\partial x} \right|_w \right) = E_L \Delta t \left( \frac{C_E^{\theta} - C_P^{\theta}}{\Delta x} - \frac{C_P^{\theta} - C_W^{\theta}}{\Delta x} \right)$$

$$= E_L \Delta t \left( \frac{C_E^\theta - 2C_P^\theta + C_W^\theta}{\Delta x} \right) \quad (4.28)$$

Observe que o termo transiente, expresso na Equação (4.7), possui as concentrações avaliadas nos instantes de tempo  $t$  e  $t + \Delta t$ , enquanto os termos advectivo (que será discutido na próxima seção) e dispersivo (Equação (4.9)) apresentam concentrações em função de  $\theta$ . Portanto, esses termos devem ser manipulados por meio de uma função de interpolação, dada pela Equação (4.29), de forma a poder avaliar as concentrações nos mesmos instantes de tempo presentes no termo transiente, gerando assim, as formulações explícita e implícita.

$$C^\theta = \theta C^{t+\Delta t} + (1 - \theta) C^t \quad (4.29)$$

Essa expressão é uma combinação linear convexa de  $C^{t+\Delta t}$  e  $C^t$ . Quando  $\theta = 1$  tem-se que  $C$  é dado em função de  $t + \Delta t$  e quando  $\theta = 0$ , tem-se que  $C$  é dado em função de  $t$ . Para  $0 < \theta < 1$ , tem-se uma média ponderada com pesos  $\theta$  e  $1 - \theta$ .

Na presente pesquisa, é adotada a formulação implícita, ou seja,  $\theta = 1$ . Manipulando o termo dispersivo e tomando como base a formulação implícita, obtém-se a seguinte equação (Equação (4.30)):

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e E_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} dx dt = E_L \Delta t \left( \frac{\partial C^\theta}{\Delta x} \Big|_e - \frac{\partial C^\theta}{\Delta x} \Big|_w \right) \\ & = E_L \Delta t \left( \frac{\partial C^{t+\Delta t}}{\Delta x} \Big|_e - \frac{\partial C^{t+\Delta t}}{\Delta x} \Big|_w \right) = E_L \Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - 2C_P^{t+\Delta t} + C_W^{t+\Delta t}}{\Delta x} \right) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Falta, ainda, a análise do termo advectivo, a qual é feita na próxima seção.

## 4.5 Análise do Termo Advectivo

Na literatura, encontram-se vários esquemas para analisar o valor das concentrações nas faces do volume de controle, referente ao termo advectivo. Dentre os mais conhecidos, destacam-se:

- Esquema de Diferenças Centrais (CDS).
- Esquema Upwind (UDS).

- Esquema Híbrido *Weighted Upstream Differencing Scheme* (WUDS).
- Esquema Exponencial.
- Dentre outros.

A seguir, é feita uma investigação para alguns esquemas de análise para o termo advectivo.

#### 4.5.1 Esquema de Diferenças Centrais (CDS)

O Esquema de Diferenças Centrais (do inglês *Central Difference Scheme - CDS*), é utilizado de forma muito positiva para os termos difusivos, porém, pode trazer erros consideráveis quando aplicado aos termos advectivos. Este erro aumenta à medida que tem-se um aumento no número de Peclet (ou Reynolds) para problemas de transferência de quantidade de movimento, ou seja, quando for maior do que 2. Tomando uma interpolação linear e considerando que as faces do volume de controle estejam situadas no meio da distância entre os pontos nodais, tem-se:

$$C_w^\theta = \frac{C_W^\theta - C_P^\theta}{2} \quad (4.31a)$$

$$C_e^\theta = \frac{C_P^\theta - C_E^\theta}{2} \quad (4.31b)$$

Aplicando o esquema de diferenças centrais na Equação (4.8), onde  $C_w^\theta = \frac{(C_W^\theta + C_P^\theta)}{2}$  e  $C_e^\theta = \frac{(C_P^\theta + C_E^\theta)}{2}$ , obtém-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_e^\theta - C_w^\theta) = U \Delta t \left[ \frac{(C_P^\theta + C_E^\theta)}{2} - \frac{(C_W^\theta + C_P^\theta)}{2} \right] \quad (4.32)$$

Adotando a formulação implícita, ou seja,  $\theta = 1$ , o termo advectivo, Equação (4.32), resulta em:

$$U \Delta t \left[ \frac{(C_P^\theta + C_E^\theta)}{2} - \frac{(C_W^\theta + C_P^\theta)}{2} \right] = U \Delta t \left( \frac{C_E^\theta - C_W^\theta}{2} \right) = U \Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - C_W^{t+\Delta t}}{2} \right) \quad (4.33)$$

Substituindo o resultado das Equações (4.7), (4.33) e (4.9) na Equação (4.6), obtém-se:

$$\Delta x(C_P^{t+\Delta t} - C_P^t) + U\Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - C_W^{t+\Delta t}}{2} \right) = E_L\Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - 2C_P^{t+\Delta t} + C_W^{t+\Delta t}}{\Delta x} \right)$$

$$\left( -\frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( \frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \quad (4.34)$$

A Equação (4.34) é válida para todos os volumes internos do domínio, ou seja,  $C_2, C_3, \dots, C_{N-2}, C_{N-1}$ .

Para os demais volumes em que a Equação (4.34) deve conter as informações sobre as condições de contorno, é necessário determinar uma equação particular para cada um dos mesmos. Existem diversas formas para a construção dessa equação, sendo adotada aqui, a estratégia do volume fictício, conforme mostrado na Figura 4.12.

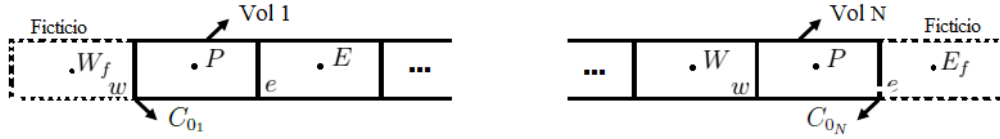


Figura 4.12: Estratégia do volume fictício na malha unidimensional.

Fonte: A Autora (2023).

Assim, aplicando a Equação (4.34) no primeiro volume do domínio e, considerando o valor da concentração na fronteira como a média entre as concentrações dos volumes adjacentes, ou seja,  $C_{0_1} = \frac{C_{Wf} + C_P}{2} \Rightarrow C_{Wf} = 2C_{0_1} - C_P$ , tem-se:

$$\left( -\frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{C_{Wf}^{t+\Delta t}}^{2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}} + \left( 1 + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( \frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t$$

$$\left( -\frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}) + \left( 1 + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( \frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t$$

$$\left( 1 + \frac{U\Delta t}{2\Delta x} + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( \frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t - \left( -\frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{0_1} \quad (4.35)$$

De forma similar, aplicando a Equação (4.34) no último volume do domínio, ou seja,

$C_{0N} = \frac{C_P + C_{Ef}}{2} \Rightarrow C_{Ef} = 2C_{0N} - C_P$ , obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left( -\frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{C_{Ef}^{t+\Delta t}}^{2C_{0N} - C_P^{t+\Delta t}} = C_P^t \\ & \left( -\frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0N} - C_P^{t+\Delta t}) = C_P^t \\ & \left( -\frac{U\Delta t}{2\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} = C_P^t - \left( -\frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{0N} \quad (4.36) \end{aligned}$$

Com isso, dada uma condição inicial  $C(x, 0) = C(x)$ ,  $0 \leq x \leq L$  e  $t = 0$ , basta fazer uma marcha no tempo, resolvendo as equações para cada volume de controle:

Equação (4.35)  $\Rightarrow$  Volume 1;

Equação (4.34)  $\Rightarrow$  Volume 2 a  $N - 1$ ;

Equação (4.36)  $\Rightarrow$  Volume  $N$ .

Que, na forma matricial, pode ser reescrita conforme segue:

$$\begin{bmatrix} A_P & A_E & & & \\ A_W & A_P & A_E & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & A_W & A_P & A_E \\ & & & A_W & A_P \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_1^{t+\Delta t} \\ C_2^{t+\Delta t} \\ \vdots \\ C_{N-1}^{t+\Delta t} \\ C_N^{t+\Delta t} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} C_1^t \\ C_2^t \\ \vdots \\ C_{N-1}^t \\ C_N^t \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_1 \\ b_2 \\ \vdots \\ b_{N-1} \\ b_N \end{bmatrix} \quad (4.37)$$

Este sistema de equações, é resolvido pelo método de Gauss-Seidel.

Para simular o lançamento instantâneo do traçador, considera-se como condição inicial a concentração presente no rio em todos os volumes de controle, exceto no volume que contém a posição de lançamento do traçador, onde é levado em conta a massa do mesmo. Cabe ressaltar que este procedimento é adotado para todos os demais esquemas de aproximação do termo advectivo expostos nessa seção.

### 4.5.2 Método de Montante (Upwind – UDS)

Conhecido como *Upstream Difference Scheme*, ou Upwind, é o mais simples e estável de todos, possui precisão de 1<sup>o</sup> ordem. Esta é a única aproximação que satisfaz incondicionalmente o *boundedness condition* (critério de limitação), ou seja, não produzirá soluções oscilatórias, no entanto, ele consegue isso por ser numericamente difusivo. Além disso, a aproximação depende da direção do fluxo, podendo ser para trás ou para frente. Sua relação é dada pelas seguintes equações:

$$C_w^\theta = C_W^\theta \text{ e } C_e^\theta = C_P^\theta \quad U > 0 \quad (4.38a)$$

$$C_w^\theta = C_P^\theta \text{ e } C_e^\theta = C_E^\theta \quad U < 0 \quad (4.38b)$$

O esquema upwind, ilustrado na Figura 4.13, consiste na substituição do valor da função nas interfaces  $w$  e  $e$  de cada volume de controle pelo valor da mesma no ponto a montante, o qual varia de acordo com o sentido da velocidade do escoamento (Versteeg e Malalasekera, 1995). Esse volume de controle também pode mudar de acordo com a direção do vento.

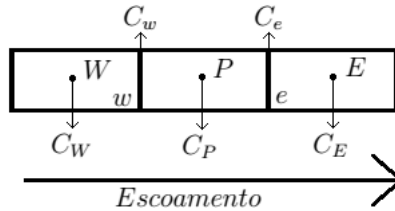


Figura 4.13: Ilustração do esquema upwind na malha 1D.  
Fonte: A Autora (2023).

Aplicando o esquema upwind na Equação (4.8), onde  $C_w^\theta = C_W^\theta$  e  $C_e^\theta = C_P^\theta$ , obtem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_e^\theta - C_w^\theta) = U \Delta t (C_P^\theta - C_W^\theta) \quad (4.39)$$

Adotando a formulação implícita, ou seja,  $\theta = 1$ , o termo advectivo na Equação (4.39) resulta em:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_P^\theta - C_W^\theta) = U \Delta t (C_P^{t+\Delta t} - C_W^{t+\Delta t}) \quad (4.40)$$

Substituindo o resultado das Equações (4.7), (4.40) e (4.9) na Equação (4.6), obtem-se:

$$\Delta x (C_P^{t+\Delta t} - C_P^t) + U \Delta t (C_P^{t+\Delta t} - C_W^{t+\Delta t}) = E_L \Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - 2C_P^{t+\Delta t} + C_W^{t+\Delta t}}{\Delta x} \right)$$

$$\left( -\frac{U \Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{U \Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \quad (4.41)$$

A Equação (4.41) é válida para todos os volumes internos do domínio, ou seja,  $C_2, C_3, \dots, C_{N-2}, C_{N-1}$ .

De maneira análoga a aplicação no esquema de diferenças centrais, novamente é utilizada a estratégia do volume fictício, conforme Figura 4.12. Assim, aplicando a Equação (4.41) no primeiro volume do domínio, ou seja,  $C_{0_1} = \frac{C_{Wf} + C_P}{2} \Rightarrow C_{Wf} = 2C_{0_1} - C_P$ , tem-se:

$$\begin{aligned} \left( -\frac{U \Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{C_{Wf}^{t+\Delta t}}^{2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}} + \left( 1 + \frac{U \Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} &= C_P^t \\ \left( -\frac{U \Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}) + \left( 1 + \frac{U \Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} &= C_P^t \\ \left( 1 + \frac{2U \Delta t}{\Delta x} + \frac{3E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\frac{E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} &= C_P^t - \left( -\frac{2U \Delta t}{\Delta x} - \frac{2E_L \Delta t}{\Delta x^2} \right) C_{0_1} \end{aligned} \quad (4.42)$$

De forma similar, aplicando a Equação (4.42) no último volume do domínio, ou seja,  $C_{0_N} = \frac{C_P + C_{Ef}}{2} \Rightarrow C_{Ef} = 2C_{0_N} - C_P$ , obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_W^{t+\Delta t} + \left(1 + \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_P^{t+\Delta t} + \left(-\frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) \overbrace{C_{Ef}^{t+\Delta t}}^{2C_{0N}-C_P^{t+\Delta t}} = C_P^t \\
& \left(-\frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_W^{t+\Delta t} + \left(1 + \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_P^{t+\Delta t} + \left(-\frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) (2C_{0N}-C_P^{t+\Delta t}) = C_P^t \\
& \left(-\frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_W^{t+\Delta t} + \left(1 + \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_P^{t+\Delta t} = C_P^t - \left(-\frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2}\right) C_{0N}
\end{aligned} \tag{4.43}$$

Assim, dada uma condição inicial  $C(x, 0) = C(x)$ ,  $0 \leq x \leq L$  e  $t = 0$ , basta fazer uma marcha no tempo, resolvendo as equações para cada volume de controle:

Equação (4.42)  $\Rightarrow$  Volume 1;

Equação (4.41)  $\Rightarrow$  Volume 2 a  $N - 1$ ;

Equação (4.43)  $\Rightarrow$  Volume  $N$ .

Na forma matricial, este sistema pode ser reescrito conforme expresso para o esquema de diferenças centrais (Equação (4.37)), o qual também é resolvido pelo método de Gauss-Seidel.

### 4.5.3 Esquema Híbrido (Weighted Upstream Differencing Scheme – WUDS)

O Esquema de Diferenciação Híbrido de Spalding (1972) é baseado em uma combinação de esquemas de diferenciação central e upwind. O esquema de diferenciação central, que é preciso de segunda ordem, é empregado para números Peclet pequenos ( $Pe < 2$ ) e o esquema upwind, que é preciso de primeira ordem, mas leva em conta a transportabilidade, é empregado para números Peclet grandes ( $Pe \geq 2$ ). Esta equação pode ser interpretada como uma equação de balanço de fluxo. Este esquema de diferenciação híbrida usa fórmulas por partes baseadas no número de Peclet local para avaliar o fluxo líquido através de cada face do volume de controle. O número de Peclet é avaliado na face do volume de controle, cujos valores de sua derivada na interface são escritos:

$$C_w^\theta = \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_W^\theta + \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_P^\theta \right] \quad \text{para } -2 < P_{e_w} < 2 \quad (4.44a)$$

$$C_w^\theta = C_W^\theta \quad \text{para } P_{e_w} \geq 2 \quad (4.44b)$$

$$C_w^\theta = C_P^\theta \quad \text{para } P_{e_w} \leq -2 \quad (4.44c)$$

onde:

$$P_e = U/(D/L).$$

$U$  = velocidade do fluxo ( $m/s$ ).

$L$  = dimensão linear característica (comprimento percorrido do fluido) ( $m$ ).

$D$  = difusividade da massa ( $m^2/s$ ).

Aplicando o esquema híbrido na Equação (4.8), tomando como base a Equação (4.44a), obtem-se:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_e^\theta - C_w^\theta) \\ & = U \Delta t \left[ \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_e}} \right) C_P^\theta + \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_e}} \right) C_E^\theta \right] - \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_W^\theta + \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_P^\theta \right] \right] \\ & = U \Delta t \left[ \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_e}} \right) C_P^\theta + \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_e}} \right) C_E^\theta - \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_W^\theta - \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_P^\theta \right] \\ & = U \Delta t \left[ - \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_W^\theta + \frac{2}{P_{e_e}} C_P^\theta + \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_e}} \right) C_E^\theta \right] \quad (4.45) \end{aligned}$$

Adotando a formulação implícita, ou seja,  $\theta = 1$ , o termo advectivo, Equação (4.45), resulta em:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_e^\theta - C_w^\theta) \\ & = U \Delta t \left[ - \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{e_w}} \right) C_W^{t+\Delta t} + \frac{2}{P_{e_e}} C_P^{t+\Delta t} + \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{e_e}} \right) C_E^{t+\Delta t} \right] \quad (4.46) \end{aligned}$$

Substituindo o resultado das Equações (4.7), (4.46) e (4.9) na Equação (4.6), tem-se:

$$\begin{aligned} \Delta x(C_P^{t+\Delta t} - C_P^t) + U\Delta t \left[ -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}}\right) C_W^{t+\Delta t} + \frac{2}{P_{ee}} C_P^{t+\Delta t} + \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}}\right) C_E^{t+\Delta t} \right] \\ = E_L\Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - 2C_P^{t+\Delta t} + C_W^{t+\Delta t}}{\Delta x} \right) \\ \left( -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{2}{P_{ee}} \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\ + \left( \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \end{aligned} \quad (4.47)$$

A Equação (4.47) é válida para todos os volumes internos do domínio, ou seja,  $C_2, C_3, \dots, C_{N-2}, C_{N-1}$ .

Analogamente à aplicação no esquema de diferenças centrais, novamente é utilizada a estratégia do volume fictício, conforme Figura 4.12. Assim, aplicando a Equação (4.47) no primeiro volume do domínio, ou seja,  $C_{0_1} = \frac{C_{Wf} + C_P}{2} \Rightarrow C_{Wf} = 2C_{0_1} - C_P$ , tem-se:

$$\begin{aligned} \left( -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{C_{Wf}^{t+\Delta t}}^{2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}} + \left( 1 + \frac{2}{P_{ee}} \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \\ \left( \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \\ \left( -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}) + \left( 1 + \frac{2}{P_{ee}} \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \\ \left( \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \\ \left( 1 + \left(\frac{1}{2} + \frac{3}{P_{ew}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( \left(\frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} \\ = C_P^t - \left( -\left(\frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}}\right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) 2C_{0_1} \end{aligned} \quad (4.48)$$

De forma similar, aplicando a Equação (4.47) no último volume do domínio, ou seja,  $C_{0_N} = \frac{C_P + C_{Ef}}{2} \Rightarrow C_{Ef} = 2C_{0_N} - C_P$ , obtém-se:

$$\begin{aligned} & \left( - \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{2}{P_{ee}} \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\ & \quad + \left( \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{C_{Ef}^{t+\Delta t}}^{2C_{0_N} - C_P^{t+\Delta t}} = C_P^t \\ & \left( - \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \frac{2}{P_{ee}} \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\ & \quad + \left( \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0_N} - C_P^{t+\Delta t}) = C_P^t \\ & \left( - \left( \frac{1}{2} + \frac{1}{P_{ew}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + \left( \frac{1}{2} - \frac{3}{P_{ee}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\ & \quad = C_P^t - \left( \left( \frac{1}{2} - \frac{1}{P_{ee}} \right) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) 2C_{0_N} \end{aligned} \quad (4.49)$$

Assim, dada uma condição inicial  $C(x, 0) = C(x)$ ,  $0 \leq x \leq L$  e  $t = 0$ , basta fazer uma marcha no tempo, resolvendo as equações para cada volume de controle:

Equação (4.48)  $\Rightarrow$  Volume 1;

Equação (4.47)  $\Rightarrow$  Volume 2 a  $N - 1$ ;

Equação (4.49)  $\Rightarrow$  Volume  $N$ .

Na forma matricial, este sistema pode ser reescrito conforme expresso para o esquema de diferenças centrais (Equação (4.37)), o qual também é resolvido pelo método de Gauss-Seidel.

#### 4.5.4 Esquema Exponencial

O Esquema de Diferenciação por Lei de Potência de Patankar (1980) é uma aproximação mais precisa da solução exata unidimensional e produz melhores resultados do que o esquema híbrido. Neste esquema, a difusão é definida como zero quando, na célula,  $Pe$  excede 10. Se  $0 < Pe < 10$ , o fluxo é avaliado usando uma expressão polinomial.

Por exemplo, o fluxo líquido por unidade de área na face oeste do volume de controle é avaliado usando os seguintes critérios:

- Para  $0 < Pe < 10$ :

$$C_w = [C_W^\theta - \beta_w(C_P^\theta - C_W^\theta)] \quad (4.50)$$

onde:

$$\beta_w = \frac{(1-0,1Pe)^5}{Pe}.$$

- Para  $Pe > 10$ :

$$C_w = C_W^\theta \quad (4.51)$$

Os coeficientes da equação discretizada unidimensional utilizando o esquema de lei de potência para convecção-difusão unidimensional constante são dados por:

$$a_p = a_w + a_e \quad (4.52)$$

As propriedades do esquema de diferenciação por lei de potência são semelhantes às do esquema híbrido. O esquema de diferenciação por lei de potência é mais preciso para problemas unidimensionais, pois tenta representar a solução exata mais de perto. Na literatura, o esquema provou ser útil em cálculos práticos de vazão e pode ser usado como uma alternativa ao esquema híbrido.

Aplicando o esquema exponencial na Equação (4.8), e usando a Equação (4.50), obtem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t (C_e^\theta - C_w^\theta) = U \Delta t [(C_P^\theta - \beta_e(C_E^\theta - C_P^\theta)) - (C_W^\theta - \beta_w(C_P^\theta - C_W^\theta))] \quad (4.53)$$

Adotando a formulação implícita, ou seja,  $\theta = 1$ , o termo advectivo, Equação (4.53), resulta em:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e U \frac{\partial C}{\partial x} dx dt = U \Delta t [(C_P^{t+\Delta t} - \beta_e(C_E^{t+\Delta t} - C_P^{t+\Delta t})) - (C_W^{t+\Delta t} - \beta_w(C_P^{t+\Delta t} - C_W^{t+\Delta t}))] \quad (4.54)$$

Substituindo o resultado das Equações (4.7), (4.54) e (4.9) na Equação (4.6), tem-se:

$$\begin{aligned}
\Delta x(C_P^{t+\Delta t} - C_P^t) + U\Delta t [(C_P^{t+\Delta t} - \beta_e(C_E^{t+\Delta t} - C_P^{t+\Delta t})) - (C_W^{t+\Delta t} - \beta_w(C_P^{t+\Delta t} - C_W^{t+\Delta t}))] \\
= E_L\Delta t \left( \frac{C_E^{t+\Delta t} - 2C_P^{t+\Delta t} + C_W^{t+\Delta t}}{\Delta x} \right) \\
\left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( 1 + (1 + \beta_e + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\
+ \left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \tag{4.55}
\end{aligned}$$

A Equação (4.55) é válida para todos os volumes internos do domínio, ou seja,  $C_2, C_3, \dots, C_{N-2}, C_{N-1}$ .

Analogamente à aplicação no esquema de diferenças centrais, novamente é utilizada a estratégia do volume fictício, conforme Figura 4.12. Assim, aplicando a Equação (4.55) no primeiro volume do domínio, ou seja,  $C_{0_1} = \frac{C_{Wf} + C_P}{2} \Rightarrow C_{Wf} = 2C_{0_1} - C_P$ , tem-se:

$$\begin{aligned}
\left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{C_{Wf}^{t+\Delta t}}^{2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}} + \left( 1 + (1 + \beta_e + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \\
\left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \\
\left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0_1} - C_P^{t+\Delta t}) + \left( 1 + (1 + \beta_e + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \\
\left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} = C_P^t \\
\left( 1 + (2 + \beta_e + 2\beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} + \left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_E^{t+\Delta t} \\
= C_P^t - \left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) 2C_{0_1} \tag{4.56}
\end{aligned}$$

De forma similar, aplicando a Equação (4.55) no último volume do domínio, ou seja,  $C_{0_N} = \frac{C_P + C_{Ef}}{2} \Rightarrow C_{Ef} = 2C_{0_N} - C_P$ , obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( (1 + \beta_e + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\
& \quad + \left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) \overbrace{2C_{0_N} - C_P^{t+\Delta t}}^{C_{Ef}^{t+\Delta t}} = C_P^t \\
& \left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( (1 + \beta_e + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{2E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\
& \quad + \left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) (2C_{0_N} - C_P^{t+\Delta t}) = C_P^t \\
& \left( -(1 + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_W^{t+\Delta t} + \left( (1 + 2\beta_e + \beta_w) \frac{U\Delta t}{\Delta x} + \frac{3E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) C_P^{t+\Delta t} \\
& \quad = C_P^t - \left( -\beta_e \frac{U\Delta t}{\Delta x} - \frac{E_L\Delta t}{\Delta x^2} \right) 2C_{0_N} \tag{4.57}
\end{aligned}$$

Assim, dada uma condição inicial  $C(x, 0) = C(x)$ ,  $0 \leq x \leq L$  e  $t = 0$ , basta fazer uma marcha no tempo, resolvendo as equações para cada volume de controle:

Equação (4.56)  $\Rightarrow$  Volume 1;

Equação (4.55)  $\Rightarrow$  Volume 2 a  $N - 1$ ;

Equação (4.57)  $\Rightarrow$  Volume  $N$ .

Na forma matricial, este sistema pode ser reescrito conforme expresso para o esquema de diferenças centrais (Equação (4.37)), o qual também é resolvido pelo método de Gauss-Seidel.

# Capítulo 5

## Problema Inverso

A modelagem computacional tem grande importância nas diversas áreas da ciências, por meio da aplicação de modelos matemáticos e técnicas computacionais para análise e compreensão em estudo de fenômenos relacionados a áreas muito complexas, utilizados principalmente em pesquisas científicas, simulações e previsões temporais e espaciais de fenômenos físicos, meio ambiente, ciências exatas, humanas, engenharias, biologia, economia, entre outros. Nessas aplicações, os problemas inversos fornecem ferramentas eficazes para obter informações de tais áreas.

Segundo Oleg Mikailivitch Alifanov, um importante pesquisador russo na área de problemas inversos, *"a solução de um problema inverso implica determinar causas desconhecidas com base na observação de seus efeitos. Isso contrasta com o correspondente problema direto, cuja solução envolve encontrar efeitos baseados em uma descrição completa de suas causas"*. Em resumo o que difere um problema inverso de um direto é que ele busca a causa, enquanto o problema direto busca o efeito. Assim, observe a Figura 5.1 que ilustra os dois processos.

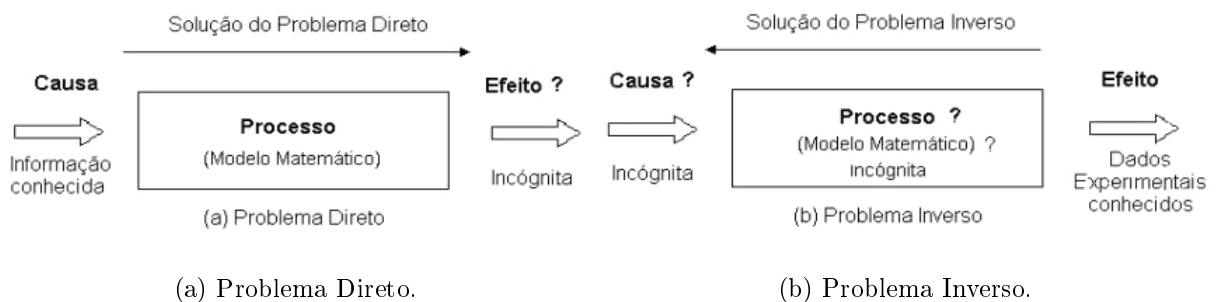


Figura 5.1: Representação esquemática do problema direto e do problema inverso.  
Fonte: Silva Neto (2012).

Alguns exemplos comuns de uso de um problema inverso são: a caracterização térmica de materiais, a identificação de fontes poluentes em rios ou fontes de CO<sub>2</sub> e até a determinação do coeficiente de convecção forçada em vários processos térmicos.

Matematicamente, problemas inversos pertencem a classe de problemas mal-postos. No início do século XX, o matemático francês Jacques Hadamard definiu um problema bem-posto, como sendo aquele que cumpre as três condições abaixo:

1. **Existência:** o problema deverá possuir solução.
2. **Unicidade:** a solução deverá ser única.
3. **Estabilidade:** a solução tem uma dependência contínua (suave) com os dados de entrada.

Quando alguma das condições anteriores não é satisfeita diz-se que o problema é mal-posto. Em geral, das condições de Hadamard, pelo menos uma não é satisfeita num problema inverso.

Os problemas inversos possuem uma classificação que varia de acordo com alguns critérios, onde é possível organizar os objetos de interesse da modelagem inversa segundo a sua natureza, conforme mostrado na Figura 5.2.

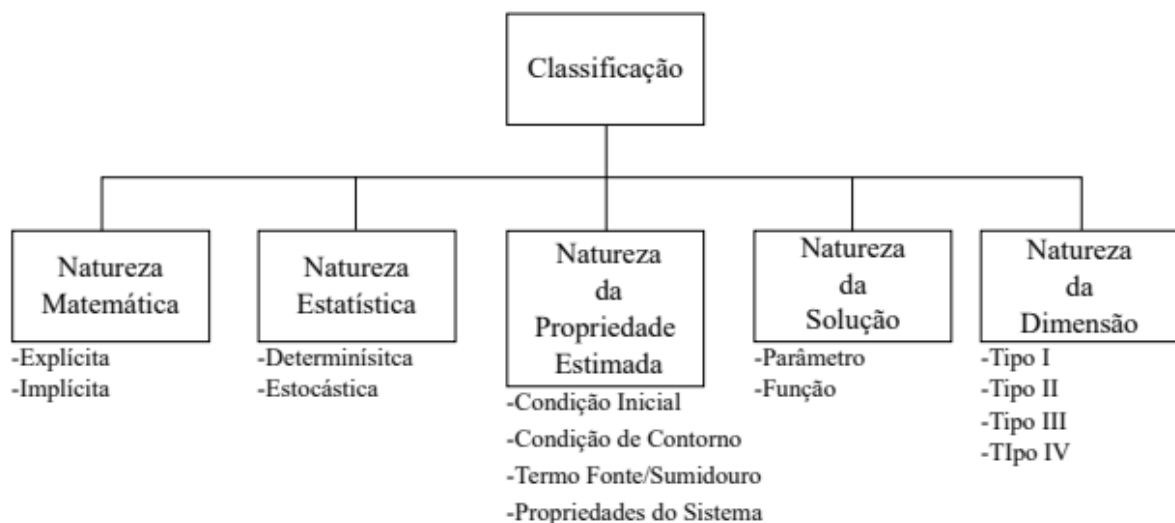


Figura 5.2: Classificação dos problemas inversos.  
Fonte: Lugão (2022).

Na sequência, é feita uma breve explanação sobre essa classificação.

- **Natureza Matemática:** é referente a como o problema inverso é estruturado, o que gera duas classificações possíveis. Formulação **explícita**, quando a manipulação do modelo é feita de forma direta de modo que os coeficientes a estimar apareçam explicitamente. E formulação **implícita**, onde, devido a complexidade das equações envolvidas, essas não podem ser rearrumadas de forma a isolar os coeficientes de interesse.
- **Natureza Estatística:** indica qual metodologia de solução empregar no problema inverso, podendo ser caracterizado como **determinístico** ou **estocástico**. No primeiro, quando aplicada à minimização de problemas não-lineares, estabelece, em boa base matemática, um processo iterativo, que após um certo número de iterações, espera-se convergir para o mínimo da função objetivo. No entanto, no segundo, em comparação com o primeiro, não é preciso uma base matemática tão forte e não utiliza o gradiente da função objetivo como direção de descida. Assim, tendem a buscar uma analogia na natureza em ordem de descobrir o mínimo da função objetivo por meio da escolha de um ponto no qual a função será computada de forma sistemática. Ainda, conforme Irilan (2022), nessa classificação, atualmente já se pode pensar em realizar uma nova divisão: a do problema dito **híbrido**. Em tal, faz-se uso de uma metodologia de solução que busque utilizar os pontos positivos de cada modelo.
- **Natureza da Propriedade Estimada:** é baseada em qual propriedade desejar-se calcular. Dentro disso, pode-se considerar o problema inverso como o problema de **condição inicial** (também chamado de problema retrospectivo), problema de **termo fonte**, problema de **condição de contorno**, problema de **propriedades físicas do sistema** ou problema de **características geométricas do meio** (esses três últimos também podem ser chamados de problemas de identificação). Entende-se, nessa divisão, que o problema pode se enquadrar em uma ou mais dessas categorias, de acordo com a quantidade e o tipo de incógnitas a serem encontradas.
- **Natureza da Solução:** classificação se baseia na dimensão do objeto matemático estimado, ou seja, uma constante (dimensão finita) ou uma função (dimensão infinita).
- **Natureza da Dimensão:** é uma extensão da classificação anterior proposta por Silva Neto e Moura Neto (2005), onde os problemas inversos são classificados considerando a dimensão do modelo matemático e a dimensão dos objetos a serem estimados. São categorizados da seguinte forma:

- **Tipo I** → Estimativa de um número finito de parâmetros em modelos de dimensão finita.
- **Tipo II** → Estimativa de um número infinito de parâmetros ou uma função em modelos de dimensão finita.
- **Tipo III** → Estimativa de um número finito de parâmetros em modelos de dimensão infinita.
- **Tipo IV** → Estimativa de um número infinito de parâmetros ou uma função em modelos de dimensão infinita.

Desse modo, a estimativa de parâmetros proposta por Beck e Arnold (1977) corresponde a problemas do Tipo I e do Tipo III, enquanto que a estimativa de funções corresponde a problemas do Tipo II e do Tipo IV. Essa nova divisão é justificada devido ao aumento da complexidade em ir de um modelo de dimensão finita para outro de dimensão infinita (Silva Neto e Moura Neto, 2013).

O problema inverso aqui considerado consiste na estimação dos parâmetros da solução da equação de advecção-dispersão unidimensional, a partir de medidas experimentais das concentrações da solução salina colhidas no curso d'água em função do tempo. Para a estimativa dos parâmetros de interesse, é utilizado o método Levenberg-Marquardt, o qual é descrito na próxima seção.

## 5.1 Método Levenberg-Marquardt

O método Levenberg-Marquardt é um método de otimização determinístico, pertencente a classe dos métodos de mínimos quadrados não lineares, o qual constitui-se em um aperfeiçoamento do método Gauss-Newton que, no que lhe diz respeito, é uma variação do método de Newton (Benatti e Ribeiro, 2017).

Portanto, como o método Levenberg-Marquardt é um método iterativo, é necessário um ponto inicial  $\vec{Z}^0$ , para que o mesmo possa gerar uma sequência  $(\vec{Z}^k)$   $k \in \mathbb{N}$  de vetores  $\vec{Z}^1, \vec{Z}^2, \dots, \vec{Z}^k$ , os quais espera-se convergir para  $\vec{Z}^*$ , o mínimo relativo para a função de entrada a ser ajustada, tal que:

- I. Se  $\vec{Z}^k$  for a própria solução  $\vec{Z}^*$  para algum  $k \in \mathbb{N}$ , o método para e fornece  $\vec{Z}^k$  como solução.

II. Caso o contrário, o método gera uma sequência infinita de aproximações para  $\vec{Z}^*$ , onde  $\lim_{k \rightarrow +\infty} \vec{Z}^k = \vec{Z}^*$ .

Para tornar o método finito adota-se um raio de convergência  $\varepsilon$ , tal que:

$$\|\vec{Z}^{k+1} - \vec{Z}^k\| < \varepsilon \quad (5.1)$$

Esse método busca minimizar a soma dos resíduos ao quadrado, o qual é definido como a diferença entre os dados experimentais de uma determinada grandeza a ser analisada e os respectivos resultados numéricos obtidos por meio da solução de um modelo matemático.

De forma geral, considerando o problema da variação de uma determinada grandeza ao longo do tempo, na qual os dados experimentais obtidos no ponto de observação são representados por  $(t_1, y_1), (t_2, y_2), \dots, (t_i, y_i), \dots, (t_{nd}, y_{nd})$ , cujo modelo matemático é dado por uma função  $f(t, \vec{Z})$ , onde  $t$  é o instante de tempo e  $\vec{Z} = (z_1, z_2, \dots, z_j, \dots, z_{np})$  é o vetor de incógnitas (informações desconhecidas), é possível calcular o resíduo a que se refere o parágrafo anterior conforme mostrado na Equação (5.2).

$$\vec{R} = \begin{bmatrix} f(t_1, \vec{Z}) - y_1 \\ f(t_i, \vec{Z}) - y_i \\ \vdots \\ f(t_{nd}, \vec{Z}) - y_{nd} \end{bmatrix} \quad (5.2)$$

Com isso, a soma dos resíduos (erros entre dados experimentais e os obtidos por meio do modelo matemático) ao quadrado é expresso conforme Equação (5.3), onde  $S(\vec{Z})$  é chamada de função objetivo do problema a ser minimizada.

$$S(\vec{Z}) = \frac{1}{2} \vec{R}^T \vec{R} = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{nd} [f(t_i, \vec{Z}) - y_i]^2 \quad (5.3)$$

Como o objetivo é encontrar o valor mínimo da Equação (5.3), busca-se o ponto crítico de  $S(\vec{Z})$ , ou seja, o vetor  $\vec{Z} = \vec{Z}^*$ , onde:

$$\frac{\partial S(\vec{Z})}{\partial \vec{Z}} = 0 \quad (5.4)$$

Reescrevendo a Equação (5.4) com base na Equação (5.3), obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial \vec{Z}} \left( \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{nd} [f(t_i, \vec{Z}) - y_i]^2 \right) = 0 \quad (5.5)$$

Aplicando a regra da cadeia na Equação (5.5), obtém-se:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{nd} [f(t_i, \vec{Z}) - y_i] \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_1} &= 0 \\ &\vdots \\ \sum_{i=1}^{nd} [f(t_i, \vec{Z}) - y_i] \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_j} &= 0 \\ &\vdots \\ \sum_{i=1}^{nd} [f(t_i, \vec{Z}) - y_i] \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_{np}} &= 0 \end{aligned} \quad (5.6)$$

Para simplificar o desenvolvimento aqui apresentado, foi realizada uma mudança de notação, conforme Equação (5.7).

$$\begin{aligned} f(t_1, \vec{Z}) &= f_1 \\ &\vdots \\ f(t_i, \vec{Z}) &= f_i \\ &\vdots \\ f(t_{nd}, \vec{Z}) &= f_{nd} \end{aligned} \quad (5.7)$$

Desse modo, a Equação (5.6) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} (f_1 - y_1) \frac{\partial f_1}{\partial z_1} + \dots + (f_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial z_1} + \dots + (f_{nd} - y_{nd}) \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_1} &= 0 \\ &\vdots \\ (f_1 - y_1) \frac{\partial f_1}{\partial z_j} + \dots + (f_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial z_j} + \dots + (f_{nd} - y_{nd}) \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_j} &= 0 \\ &\vdots \\ (f_1 - y_1) \frac{\partial f_1}{\partial z_{nd}} + \dots + (f_i - y_i) \frac{\partial f_i}{\partial z_{nd}} + \dots + (f_{nd} - y_{nd}) \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_{nd}} &= 0 \end{aligned} \quad (5.8)$$

Ao fazer outra mudança na notação, assume-se:

$$\begin{aligned}
(f_1 - y_1) &= r_1 \\
&\vdots \\
(f_i - y_i) &= r_i \\
&\vdots \\
(f_{nd} - y_{nd}) &= r_{nd}
\end{aligned} \tag{5.9}$$

Com isso, reescrevendo a Equação (5.8) na forma matricial, tem-se:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_j} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial z_{np}} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_{np}} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_{np}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_i \\ \vdots \\ r_{nd} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}. \tag{5.10}$$

Sabe-se que, ao derivar uma função escalar de uma variável, obtém-se outra função de uma variável, porém, ao derivar uma função vetorial, encontra-se uma matriz, denominada matriz jacobiana, definida como  $J_F$ , que é a matriz obtida por meio das derivadas parciais de primeira ordem de uma função vetorial.

Assim, considerando  $F(z_1, \dots, z_j, \dots, z_{np}) = (f_1, \dots, f_i, \dots, f_{nd})$ , tem-se a seguinte matriz jacobiana relacionada ao problema apresentado nessa seção:

$$J_F(\vec{Z}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial z_{np}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_i}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_{np}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_{np}} \end{bmatrix} \tag{5.11}$$

Como resultado, a matriz jacobina transposta, denotada como  $J_F^T$ , é obtida trocando as colunas da matriz  $J_F$ , que se tornam as linhas da matriz  $J_F^T$ . Portanto, os termos matriciais da Equação (5.10), podem ser representados por:

$$J_F^T(\vec{Z}) = \begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_1} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_j} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_1}{\partial z_{np}} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_{np}} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_{np}} \end{bmatrix} \quad (5.12)$$

$$\vec{R} = \begin{bmatrix} r_1 \\ \vdots \\ r_i \\ \vdots \\ r_{nd} \end{bmatrix} \quad (5.13)$$

$$\vec{0} = \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \quad (5.14)$$

Em seguida, fazendo uma expansão de Taylor em torno do vetor  $\vec{Z}$ , dado por  $\vec{Z} + \Delta\vec{Z}$ , para o vetor de resíduos  $\vec{R}$  e, considerando um erro de truncamento  $\varphi(\Delta\vec{Z})^2$ , obtém-se:

$$\begin{aligned} r_1(t_1, \vec{Z} + \Delta\vec{Z}) &\approx r_1(t_1, \vec{Z}) + \frac{\partial r_1(t_1, \vec{Z})}{\partial z_1} \Delta z_1 + \dots + \frac{\partial r_1(t_1, \vec{Z})}{\partial z_{np}} \Delta z_{np} \\ &\vdots \\ r_i(t_i, \vec{Z} + \Delta\vec{Z}) &\approx r_i(t_i, \vec{Z}) + \frac{\partial r_i(t_i, \vec{Z})}{\partial z_1} \Delta z_1 + \dots + \frac{\partial r_i(t_i, \vec{Z})}{\partial z_{np}} \Delta z_{np} \\ &\vdots \\ r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z} + \Delta\vec{Z}) &\approx r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z}) + \frac{\partial r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z})}{\partial z_1} \Delta z_1 + \dots + \frac{\partial r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z})}{\partial z_{np}} \Delta z_{np} \end{aligned} \quad (5.15)$$

Como:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial r_i(t_i, \vec{Z})}{\partial z_1} &= \frac{\partial}{\partial z_1}(f(t_i, \vec{Z}) - y_i) = \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_1} = \frac{\partial f_i}{\partial z_1}, i = 1, \dots, nd. \\
&\vdots \\
\frac{\partial r_i(t_i, \vec{Z})}{\partial z_j} &= \frac{\partial}{\partial z_j}(f(t_i, \vec{Z}) - y_i) = \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_j} = \frac{\partial f_i}{\partial z_j}, i = 1, \dots, nd. \\
&\vdots \\
\frac{\partial r_i(t_i, \vec{Z})}{\partial z_{np}} &= \frac{\partial}{\partial z_{np}}(f(t_i, \vec{Z}) - y_i) = \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_{np}} = \frac{\partial f_i}{\partial z_{np}}, i = 1, \dots, nd.
\end{aligned} \tag{5.16}$$

Então a Equação (5.15) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned}
r_1(t_1, \vec{Z} + \Delta \vec{Z}) &\approx r_1(t_1, \vec{Z}) + \frac{\partial f(t_1, \vec{Z})}{\partial z_1} \Delta z_1 + \dots + \frac{\partial f(t_1, \vec{Z})}{\partial z_{np}} \Delta z_{np} \\
&\vdots \\
r_i(t_i, \vec{Z} + \Delta \vec{Z}) &\approx r_i(t_i, \vec{Z}) + \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_1} \Delta z_1 + \dots + \frac{\partial f(t_i, \vec{Z})}{\partial z_{np}} \Delta z_{np} \\
&\vdots \\
r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z} + \Delta \vec{Z}) &\approx r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z}) + \frac{\partial f(t_{nd}, \vec{Z})}{\partial z_1} \Delta z_1 + \dots + \frac{\partial f(t_{nd}, \vec{Z})}{\partial z_{np}} \Delta z_{np}
\end{aligned} \tag{5.17}$$

Reescrevendo a Equação (5.17) na forma de matriz, obtém-se:

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial f_1}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_1}{\partial z_{np}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_i}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_i}{\partial z_{np}} \\ \vdots & \ddots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_1} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_j} & \dots & \frac{\partial f_{nd}}{\partial z_{np}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Delta z_1 \\ \vdots \\ \Delta z_j \\ \vdots \\ \Delta z_{np} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} r_1(t_1, \vec{Z}) \\ \vdots \\ r_i(t_i, \vec{Z}) \\ \vdots \\ r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z}) \end{bmatrix} \approx \begin{bmatrix} r_1(t_1, \vec{Z} + \Delta \vec{Z}) \\ \vdots \\ r_i(t_i, \vec{Z} + \Delta \vec{Z}) \\ \vdots \\ r_{nd}(t_{nd}, \vec{Z} + \Delta \vec{Z}) \end{bmatrix}. \tag{5.18}$$

Assim, tem-se a representação para o conjunto de equações dispostas em (5.18):

$$J_F(\vec{Z})\Delta\vec{Z} + \vec{R}(\vec{Z}) \approx \vec{R}(\vec{Z} + \Delta\vec{Z}) \quad (5.19)$$

Derivando novamente a Equação (5.19), obtém-se:

$$J_F^T(\vec{Z})J_F(\vec{Z})\Delta\vec{Z} + J_F^T\vec{R}(\vec{Z}) \approx J_F^T(\vec{Z} + \Delta\vec{Z})\vec{R}(\vec{Z} + \Delta\vec{Z}) \quad (5.20)$$

Sabendo que,

$$S(\vec{Z}^*) = \frac{1}{2}R^T(\vec{Z}^*)\vec{R}(\vec{Z}^*) \quad (5.21)$$

e que

$$\frac{\partial S}{\partial \vec{Z}}(\vec{Z}^*) = J_F^T(\vec{Z}^*)\vec{R}(\vec{Z}^*) = 0 \quad (5.22)$$

Pode-se encontrar o valor  $\Delta\vec{Z}$ , tal que  $\vec{Z}^* = \vec{Z} + \Delta\vec{Z}$ , isto é, uma direção de busca de maneira que a Equação (5.20) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} J_F^T(\vec{Z})J_F(\vec{Z})\Delta\vec{Z} + J_F^T\vec{R}(\vec{Z}) &= 0 \\ J_F^T(\vec{Z})J_F(\vec{Z})\Delta\vec{Z} &= -J_F^T\vec{R}(\vec{Z}) \end{aligned} \quad (5.23)$$

onde  $J_F^T(\vec{Z})J_F(\vec{Z})$  é a matriz Hessiana de  $F$ .

Esse procedimento é conhecido como método de Gauss-Newton. Segundo Benatti e Ribeiro (2017, p. 59) "o método de Gauss-Newton pode não estar bem definido quando  $J_F^T J_F$  não for definida positiva" (condição que garante a existência de um mínimo). Logo, para agilizar a convergência, livrar-se de inconsistências numéricas e corrigir esse problema, Levenberg (1944), sugeriu a adição de um termo de regularização na diagonal principal da matriz  $J_F^T J_F$ , de acordo com a Equação (5.24):

$$[J_F^T J_F + \lambda I]\Delta\vec{Z} = -J_F^T\vec{R}(\vec{Z}) \quad (5.24)$$

em que  $I$  é a matriz identidade e  $\lambda$  é o fator de regularização.

Em seguida e, de forma independente, Marquardt (1963), em um processo similar ao de Levenberg (1944), propôs a introdução da matriz  $diag(J_F^T J_F)$  no sistema exposto na Equação (5.24), por meio da seguinte regularização:

$$[J_F^T J_F + \text{diag}(J_F^T J_F)\lambda]\Delta\vec{Z} = -J_F^T \vec{R}(\vec{Z}) \quad (5.25)$$

na qual  $\text{diag}(J_F^T J_F)$  denomina-se matriz diagonal, onde todos os elementos que não pertencem à diagonal principal são nulos.

Com isso, partindo de uma estimativa inicial  $\vec{Z}^0$ , um processo iterativo pode ser construído de modo a gerar novas estimativas para o vetor  $\vec{Z}^{k+1}$ , ou seja:

$$\vec{Z}^{k+1} = \vec{Z}^k + \Delta\vec{Z}^k, \quad k = 0, 1, 2, \dots \quad (5.26)$$

em que  $\vec{Z}^k$  é dado pela solução do sistema anterior (Equação (5.25)).

Alguns autores, como Telles (2009) e Benatti e Ribeiro (2017), assumem o valor de  $\lambda = 10^{-3}$  ou  $\lambda = 10^{-4}$  e, durante o processo iterativo, se  $S(\vec{Z}^{k+1}) < S(\vec{Z}^k)$ ,  $\lambda$  é dividido por um fator  $b$ , senão,  $\lambda$  é multiplicado por um fator  $c$ , sendo comum na literatura atribuir-se  $b = c = 2$  ou  $b = c = 10$ .

O procedimento para encontrar os valores do vetor de incógnitas ( $\vec{Z}$ ), descrito pela Equação (5.26), é conhecido como método Levenberg-Marquardt.

Cabe ressaltar, ainda, que este procedimento é dependente da estimativa inicial  $\vec{Z}^0$ , ou seja, dependendo da estimativa inicial utilizada no método Levenberg-Marquardt, o resultado poderá ser diferente, ou até mesmo não convergir para a solução desejada.

Na Figura 5.3 é mostrado o pseudocódigo do método Levenberg-Marquardt utilizado para implementação do código computacional desenvolvido nesse trabalho.

---

**Pseudocódigo – Método Levenberg-Marquardt**

---

Obtenha dados experimentais  $y_i, i = 1, \dots, nd$ ;

Informe o valor de  $b, c$  e faça  $k = 0$ ;

Forneça uma estimativa inicial para  $\vec{Z}^k$  e  $\lambda^k$ ;

Defina um critério de parada.

**enquanto** o critério de parada não for satisfeito **faça**

    Calcule  $J_F(\vec{Z}^k)$  e  $\vec{R}(\vec{Z}^k)$ ;

$S(\vec{Z}^k) \leftarrow \frac{1}{2} \vec{R}(\vec{Z}^k)^T \vec{R}(\vec{Z}^k)$

$resp \leftarrow falso$

**enquanto**  $resp \leftarrow falso$  **faça**

        Resolva  $[J_F^T(\vec{Z}^k)J_F(\vec{Z}^k) + diag(J_F^T(\vec{Z}^k)J_F(\vec{Z}^k))\lambda^k]\Delta\vec{Z}^k = -J_F^T(\vec{Z}^k)\vec{R}(\vec{Z}^k)$  e obtenha  $\Delta\vec{Z}^k$ ;

$\vec{Z}^{k+1} \leftarrow \vec{Z}^k + \Delta\vec{Z}^k$ ;

        Calcule  $\vec{R}(\vec{Z}^{k+1})$  e  $S(\vec{Z}^{k+1})$ ;

**se**  $S(\vec{Z}^{k+1}) < S(\vec{Z}^k)$  **então**

$resp \leftarrow verdadeiro$ ;

$\lambda^{k+1} \leftarrow \lambda^k / b$ ;

**senão**

$\lambda^k \leftarrow \lambda^k * c$ ;

**fim-se**

**fim-enquanto**

$k \leftarrow k + 1$ ;

**fim-enquanto**

---

Figura 5.3: Pseudocódigo elaborado para a implementação do código computacional do método Levenberg-Marquardt.

Fonte: A Autora (2023).

# Capítulo 6

## Resultados e Discussões

Com o intuito de validar e calibrar o modelo matemático resolvido pelo Método dos Volumes Finitos, foram realizadas diversas simulações, com a variação da malha computacional, além de serem comparados os resultados numéricos obtidos, com a solução analítica e os dados experimentais relativos ao trabalho de campo descrito em Sousa (2009), cujos parâmetros são mostrados na Tabela 6.1. Estes dados também são utilizados como base ao longo de todas as simulações.

Tabela 6.1: Dados utilizados na simulação para a região de interesse.

<b>Parâmetros</b>	<b>Valores</b>
Concentração inicial do rio	15,50 <i>mg/l</i>
Largura média do rio no local do experimento	2,40 <i>m</i>
Profundidade média do rio no local do experimento	0,43 <i>m</i>
Comprimento do trecho do rio sob análise	500 <i>m</i>
Tempo do experimento (tempo final)	550 <i>s</i>
Posição de lançamento do poluente no domínio	100 <i>m</i>
Posição de coleta do poluente no domínio	200 <i>m</i>

Os resultados apresentados neste trabalho foram gerados em um computador Intel Core i5 com 8 GB de memória RAM, sendo a implementação computacional realizada no software Scilab.

### 6.1 Variação da Malha Espacial

Conforme apresentado no Capítulo 4, a solução numérica das equações diferenciais possui erros de aproximação chamados de erros de truncamento gerados pelas aproximações das derivadas em série de Taylor (Maliska, 2004). Assim, a fim de diminuir esse erro de discretização espacial, buscou-se uma representação mais fiel aos dados experimentais.

Inicialmente, foi feita a variação da malha espacial buscando um melhor ajuste da solução numérica, tomando como referência os parâmetros descritos na Tabela 6.1, bem como fixando a velocidade em  $0,59 \text{ m/s}$  e o coeficiente de dispersão longitudinal  $1,82 \text{ m}^2/\text{s}$ , ambos retirados de Sousa (2009). O intervalo de tempo adotado para malha temporal foi com relação à duração do experimento, ou seja, 550 nós ( $\Delta t = 1 \text{ s}$ ).

Deste modo, primeiramente foi realizada a investigação de parâmetros para o esquema de diferenças centrais utilizando a formulação implícita do MVF, com a variação de malha espacial em 250, 500, 750 e 1000 volumes, conforme a Figura 6.1, na qual é mostrado o perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando essas diferentes discretizações.

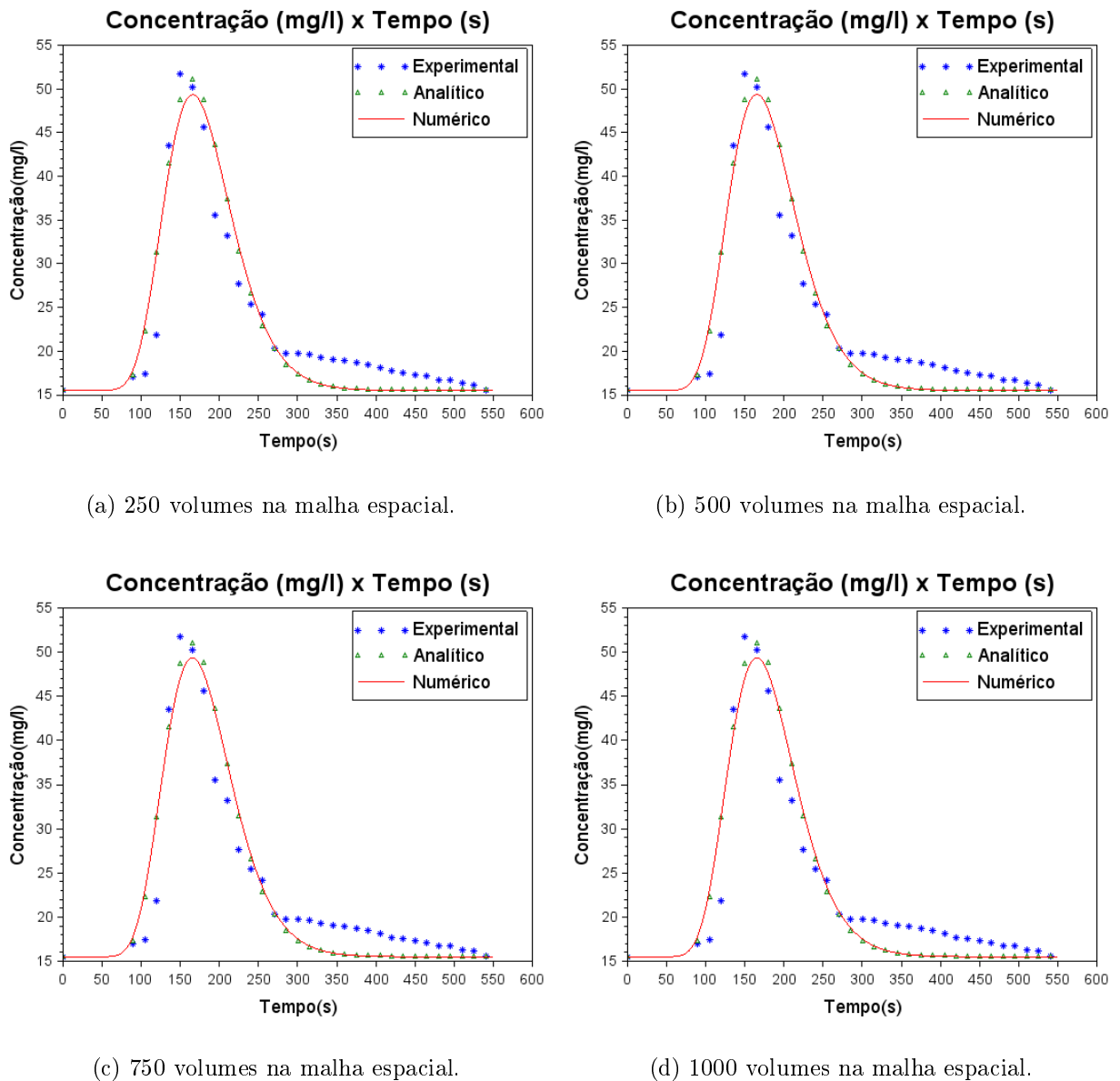


Figura 6.1: Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema de diferenças centrais.

Verifica-se que o esquema de diferenças centrais obteve um resultado satisfatório, uma vez que para a simulação com 250 volumes na malha espacial, Figura (6.1(a)), é possível observar que o perfil de concentração apresenta um pico da pluma de contaminante próximo aos dados experimentais e solução analítica.

Em seguida, foi feita a variação da malha espacial para o esquema upwind com formulação implícita, conforme Figura 6.2. Para se obter uma comparação, foi feita a mesma divisão de malha, ou seja, 250, 500, 750 e 1000 volumes na malha espacial.

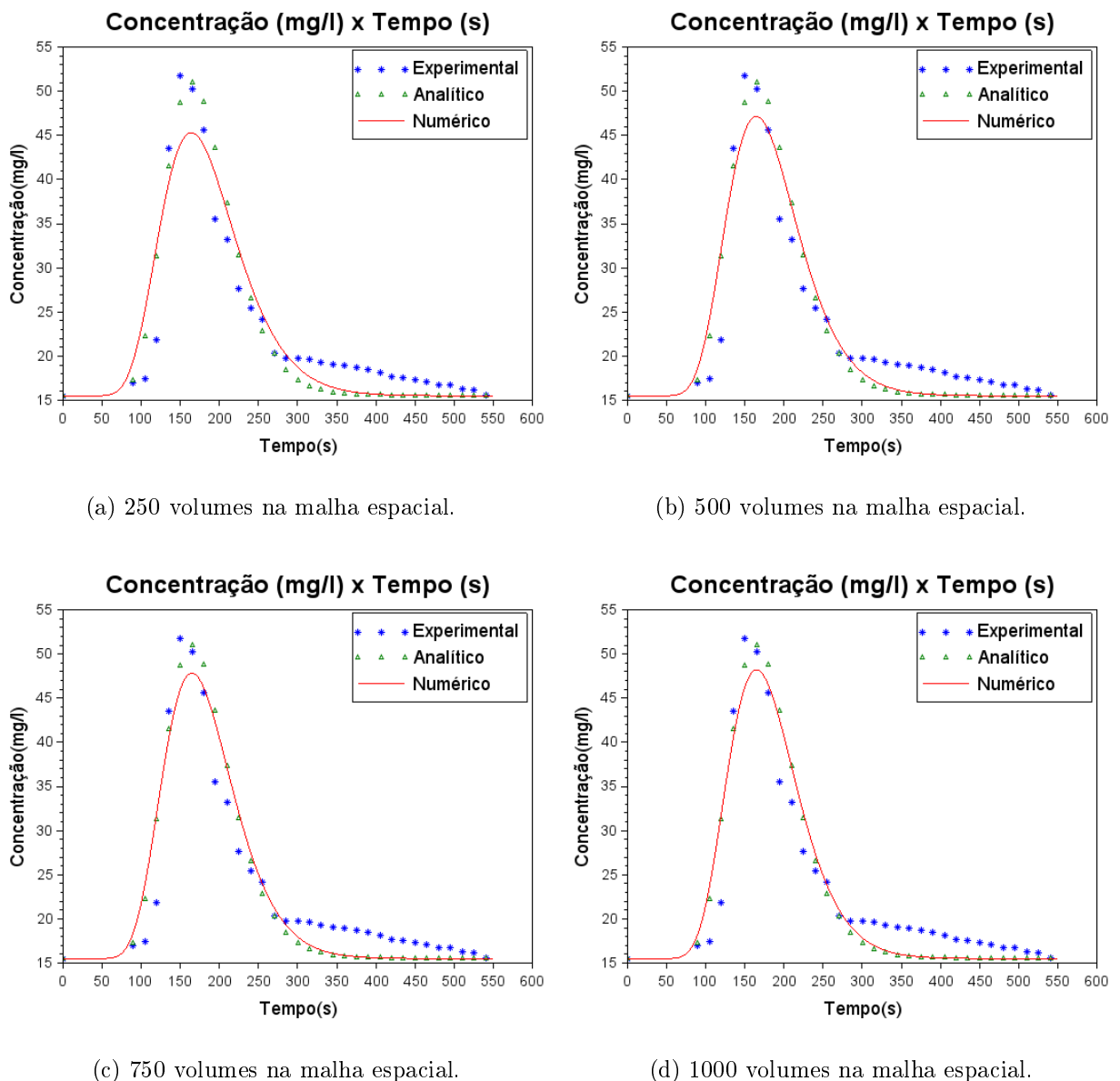


Figura 6.2: Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema upwind.

Diferentemente do esquema anterior, o esquema upwind só apresenta uma simulação mais representativa, ou seja, próxima aos dados experimentais e solução analítica, a partir

de 500 volumes na malha espacial, conforme Figura 6.2(b). Além disso, este resultado também reforça o caráter difusivo do esquema upwind, conforme exposto na Seção 4.5.2.

Posteriormente, foi feita a variação da malha espacial para o esquema híbrido, com variação de malha em 250, 500, 750 e 1000 volumes. Observe a Figura 6.3.

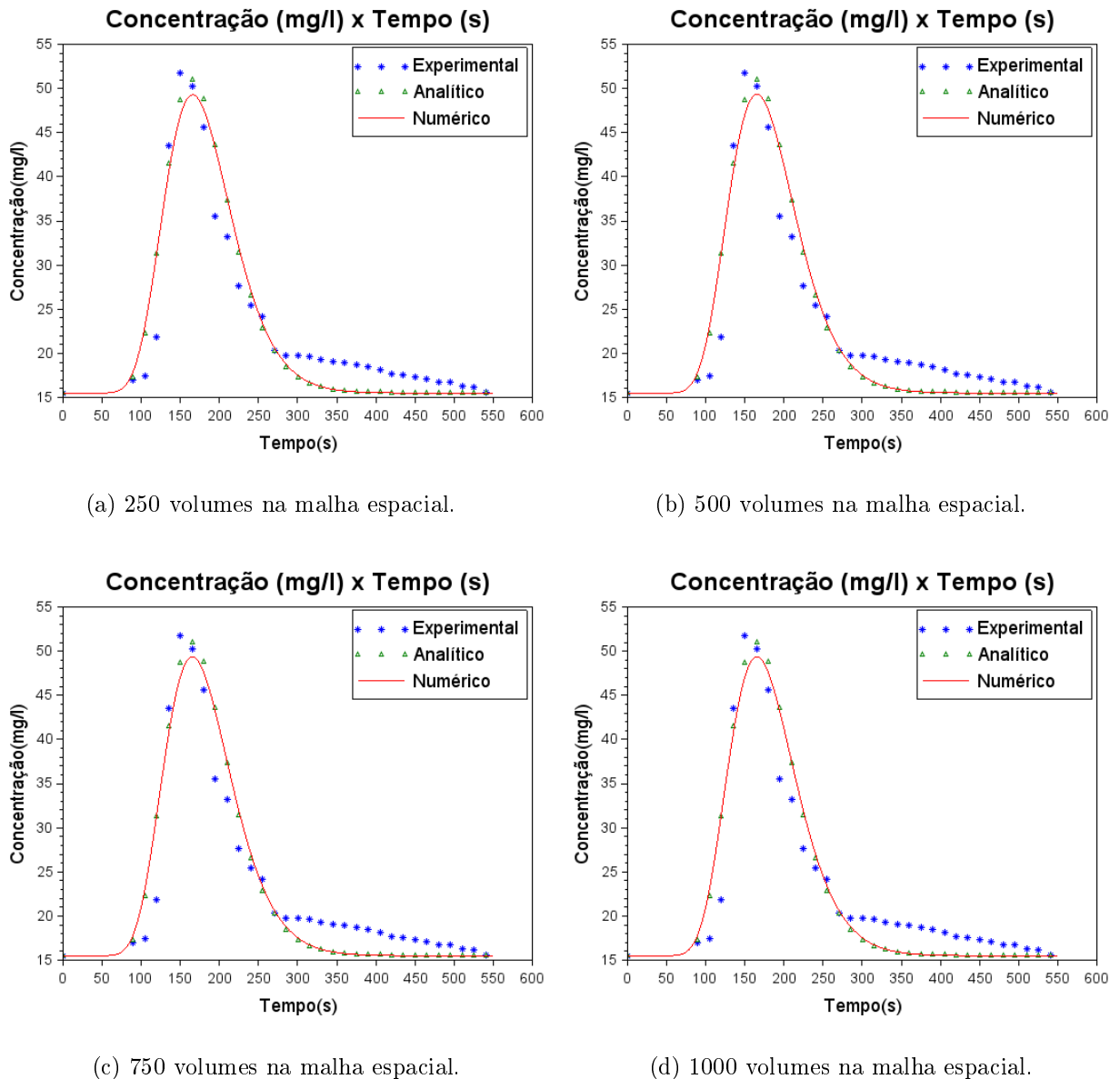
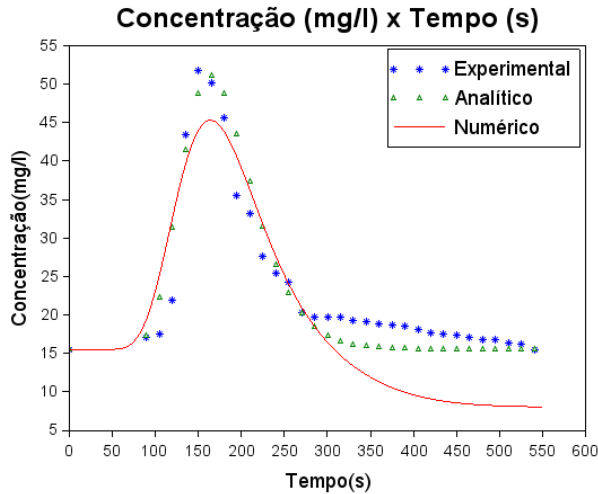


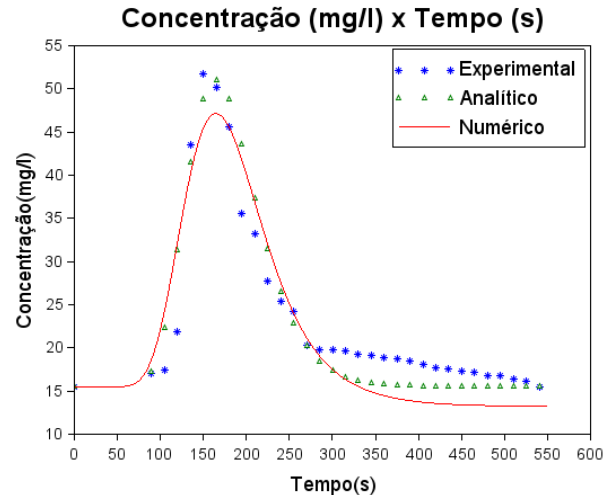
Figura 6.3: Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema híbrido.

Novamente, assim como ocorrido com o esquema de diferenças centrais, o esquema híbrido apresenta bom resultado com 250 volumes na malha espacial. Verifica-se, ainda, que o modelo tende a convergir, apresentando pouca diferença na elevação do pico de concentração nas simulações para 500, 750 e 1000 volumes, assim como constata-se boa proximidade com os dados experimentais e solução analítica.

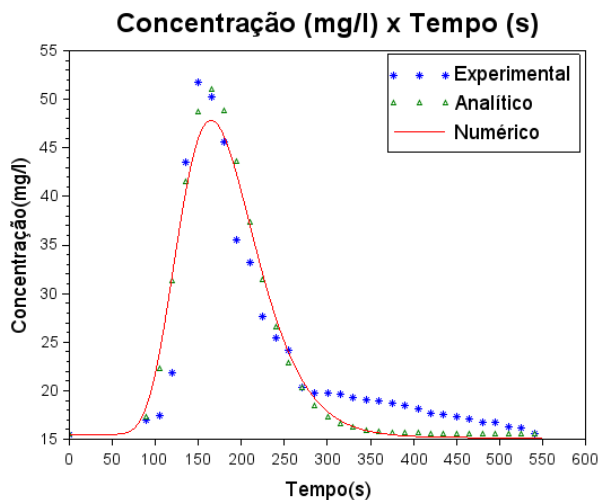
Na sequência, utilizando o esquema exponencial, foi realizada a variação da malha espacial em 250, 500, 750 e 1000 volumes, conforme mostrado na Figura 6.4.



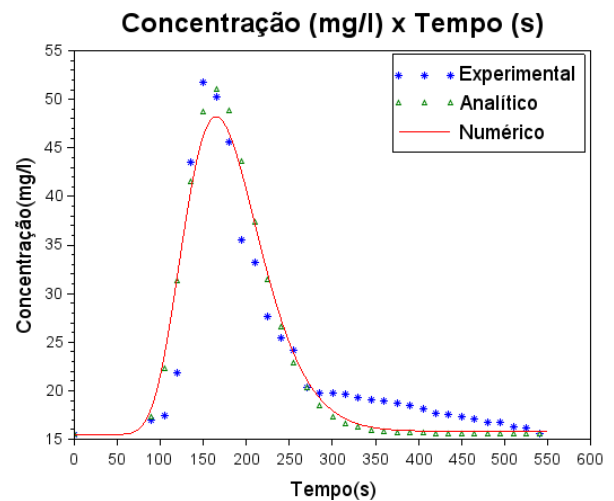
(a) 250 volumes na malha espacial.



(b) 500 volumes na malha espacial.



(c) 750 volumes na malha espacial.



(d) 1000 volumes na malha espacial.

Figura 6.4: Perfil das concentrações no ponto de coleta utilizando o esquema exponencial.

Diante das simulações realizadas, o esquema exponencial não apresentou uma simulação representativa para as malhas com 250 e 500 volumes, sendo necessário um maior refinamento da malha espacial. Todavia as simulações com 750 e 1000 volumes apresentaram um resultado onde o pico das concentrações numéricas está alinhado aos mesmos instantes de tempo em relação aos dados experimentais e solução analítica.

## 6.2 Resultados para a Estimativa dos Parâmetros de Interesse

Os resultados apresentados nesta seção foram obtidos usando o método Levenberg-Marquardt, com a configuração de 100 execuções com o intuito de estimar e analisar a velocidade ( $U$ ) e o coeficiente de dispersão ( $E_L$ ) presentes no problema. Em cada uma dessas execuções, foi calculado o número de avaliações da função objetivo ( $S(\vec{Z})$ ), imprescindível para que o algoritmo encontre os parâmetros de interesse, tomando como referência  $\lambda = 10^{-3}$ ,  $b = c = 2$  e critério de parada dado pelo erro relativo entre duas iterações consecutivas expresso por  $\max|z_i^{k+1} - z_i^k| < 10^{-1}$ . Para as estimativas iniciais  $\vec{Z}^0$  referentes a cada uma das 100 execuções, utilizou-se um valor tomado aleatoriamente nos intervalos  $0,1 \leq U \leq 1,0$  e  $1,0 \leq E_L \leq 2,0$ . Já para a aproximação do termo advectivo foi adotado o esquema de diferenças centrais, uma vez que este apresentou bons resultados, conforme Seção 6.1.

Para uma análise estatística dos resultados obtidos pelo método Levenberg-Marquardt, foram calculados alguns indicadores estatísticos, levando em conta o total de execuções, sendo esses: melhor resultado (menor  $S(\vec{Z})$ ), pior resultado (maior  $S(\vec{Z})$ ), média aritmética simples e desvio padrão da velocidade ( $U$ ) e do coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ), assim como do valor e do número de avaliações da função objetivo ( $S(\vec{Z})$ ).

### 6.2.1 Estimativa do Velocidade ( $U$ )

Nesta subseção, são salientados os resultados para a estimativa da velocidade ( $U$ ) usando o método Levenberg-Marquardt. Na Figura 6.5, é apresentado o gráfico das curvas obtidas computacionalmente para o perfil de concentração ao longo do tempo, levando em consideração o melhor, pior e média dos valores estimados para  $U$  após as 100 execuções do algoritmo e, na Tabela 6.2, é mostrado o resumo de algumas informações estatísticas para o parâmetro de interesse. O coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ) foi mantido fixo e igual a  $1,82 \text{ m}^2/\text{s}$ , da mesma maneira que os demais parâmetros citados nessa seção.

Ao analisar os resultados apresentados na Figura 6.5 e Tabela 6.2, verifica-se que há uma oscilação nos valores obtidos para a velocidade média. Apesar do valor estimado no melhor resultado estar próximo ao valor de referência ( $0,59 \text{ m/s}$ ), a média e, em especial, o pior resultado, produzem um perfil de concentração que destoa dos dados experimentais.

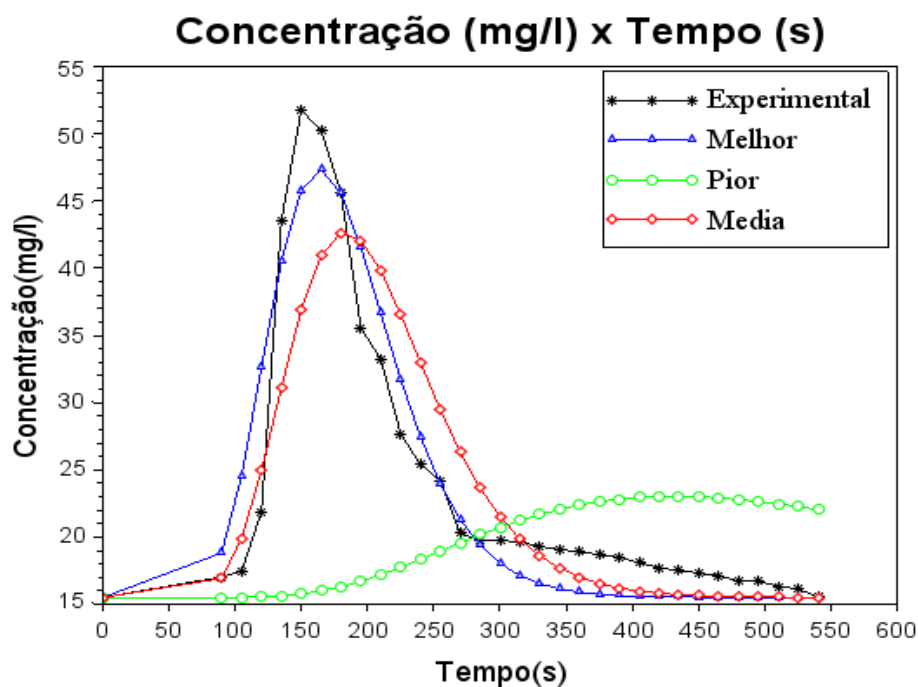


Figura 6.5: Perfis das concentrações obtidas com a estimativa do parâmetro  $U$  pelo método Levenberg-Marquardt no melhor caso, pior caso, média e dados experimentais.

Tabela 6.2: Resultados obtidos para a velocidade ( $U$ ).

Parâmetros	$U(m/s)$	$S(\vec{Z})$
<b>Melhor</b>	0,592850	367,548546
<b>Pior</b>	0,212535	5340,529717
<b>Média</b>	0,52746	1157,716165
<b>Desvio Padrão</b>	0,147614	1818,367425

### 6.2.2 Estimativa do Coeficiente de Dispersão Longitudinal ( $E_L$ )

Já nesta subseção, são evidenciados os resultados para a estimativa do coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ). Assim, na Figura 6.6 encontram-se as curvas para o perfil da concentração numérica ao longo do tempo feitas com o melhor, pior e média dos valores obtidos após as 100 execuções do algoritmo, tal como na Tabela 6.3, onde são mostrados os resultados obtidos pelo método Levenberg-Marquardt. A velocidade ( $U$ ) permaneceu fixa e igual a  $0,59m/s$ , do mesmo modo que os demais parâmetros abordados nesta seção.

Diferentemente do ocorrido nas estimativas para a velocidade média na seção anterior, agora, é observado um baixo desvio padrão (0,020001), obtido no decorrer das 100 execuções para o valor do coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ), o que evidencia o bom desempenho do método de otimização Levenberg-Marquardt para este tipo de problemática. Além disso, é possível verificar a pouca variação no perfil das concentrações

para os três valores obtidos (melhor e pior caso, bem como a média).

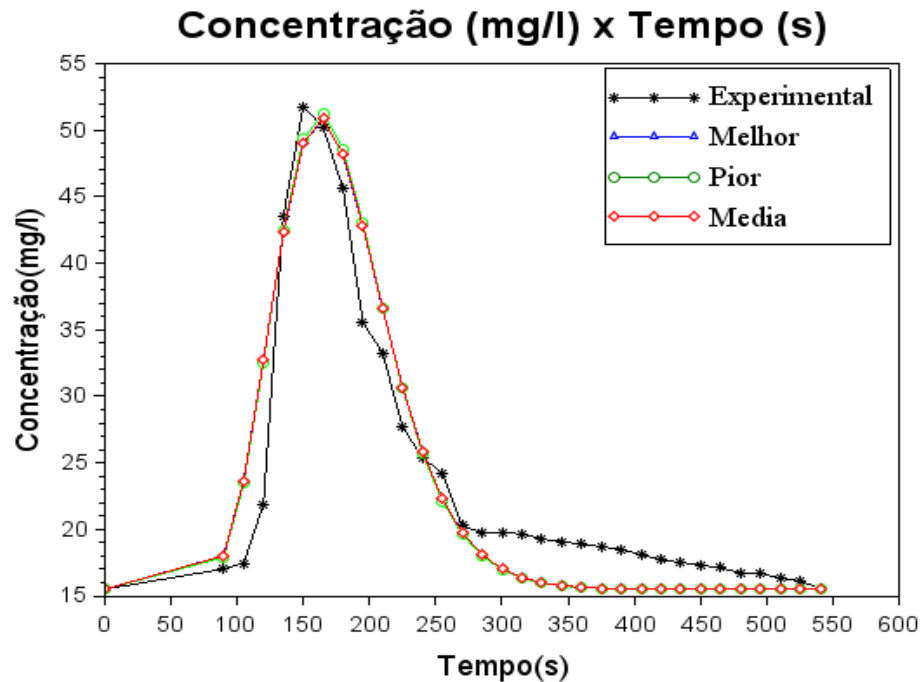


Figura 6.6: Perfis das concentrações obtidas com a estimativa do parâmetro  $E_L$  pelo método Levenberg-Marquardt no melhor caso, pior caso, média e dados experimentais.

Tabela 6.3: Resultados obtidos para coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ).

Parâmetros	$E_L(m^2/s)$	$S(\bar{Z})$
Melhor	1,442518	346,611504
Pior	1,395394	347,147714
Média	1,438420	346,710338
Desvio Padrão	0,020001	0,114033

### 6.2.3 Estimativa da Velocidade ( $U$ ) e do Coeficiente de Dispersão Longitudinal ( $E_L$ )

Por fim, nesta subseção, os parâmetros foram estimados simultaneamente. Dessa forma, são mostrados os resultados obtidos pelo método Levenberg-Marquardt para a estimativa da velocidade ( $U$ ) e do coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ).

O gráfico apresentado na Figura 6.7, exhibe as curvas para o perfil da concentração ao longo do tempo feitas com o melhor, pior e média dos valores obtidos após as 100 execuções do algoritmo. Já as informações estatísticas envolvendo as estimativas dos parâmetros de interesse são descritas na Tabela 6.4. Os outros parâmetros abordados no início desta seção foram mantidos constantes.

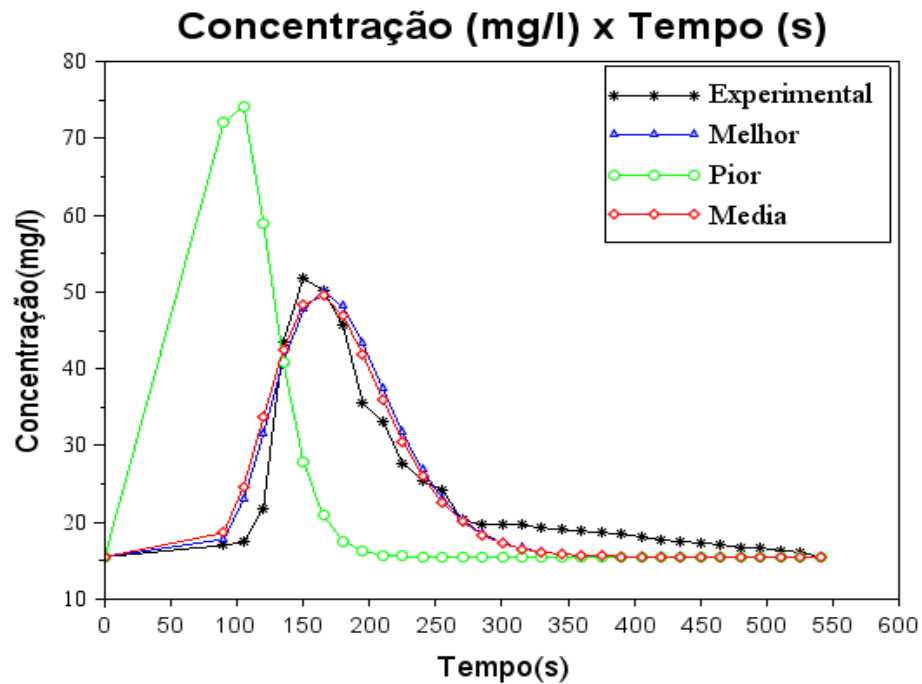


Figura 6.7: Perfis das concentrações obtidas com a estimativa dos parâmetros  $U$  e  $E_L$  pelo método Levenberg-Marquardt no melhor caso, pior caso, média e dados experimentais.

Tabela 6.4: Resultados obtidos para a estimativa da velocidade ( $U$ ) e do coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ ).

Parâmetros	$U(m/s)$	$E_L(m^2/s)$	$S(\vec{Z})$
Melhor	0,591571	1,461806	341,333164
Pior	0,998897	2,000000	11008,187395
Média	0,603188	1,612968	1153,495480
Desvio Padrão	0,126304	0,213767	2416,609361

Para essa última simulação envolvendo a estimativa simultânea da velocidade e do coeficiente de dispersão, verifica-se, com base na Figura 6.7 e na Tabela 6.4, que há uma boa proximidade no perfil da concentração numérica em relação aos dados experimentais quando se analisa o melhor e a média dos valores estimados. No entanto, para o pior caso, o perfil das concentrações numéricas difere de maneira significativa dos dados experimentais. Em especial, para este pior caso, constata-se, também, que os valores encontrados para a velocidade, bem como para o coeficiente de dispersão, apresentam-se próximos (ou igual) ao limite superior dos intervalos de busca, ou seja, 1 e 2, respectivamente.

# Capítulo 7

## Conclusões e Trabalhos Futuros

Nessa seção são apresentadas as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros oriundos dessa pesquisa.

### 7.1 Conclusões

O presente trabalho buscou simular e investigar o transporte de contaminantes em um trecho específico do rio São Pedro, afluente do rio Macaé, com seu ponto de lançamento localizado a 100 *m* e a sua posição de coleta a 200 *m* no domínio de interesse. A solução numérica do modelo foi obtida através do Método dos Volumes Finitos com formulação implícita e, para sua validação, foram realizadas diversas variações da malha espacial, gerando cenários hipotéticos para a injeção acidental da carga de poluentes em rios. Os resultados foram comparados, ainda, com dados experimentais obtidos por Sousa (2009).

A primeira análise realizada foi a variação de malha espacial, com os diferentes esquemas de interpolação para o termo advectivo, onde, para cada termo, foi realizada simulações com 250, 500, 750 e 1000 volumes. Nelas, foi possível observar um modelo incondicionalmente estável, independente da quantidade de volumes utilizados para a malha espacial e do tipo de esquema de interpolação usado. Além disso, também verificou-se que os esquemas de diferenças centrais e híbrido, foram os que apresentaram uma estabilidade mais rapidamente, ou seja, a partir de 250 volumes os perfis de concentrações não sofreram alterações significativas com o aumento do número de volumes.

Posteriormente, foram realizadas a estimativa dos parâmetros de interesse (velocidade ( $U$ ) e coeficiente de dispersão longitudinal ( $E_L$ )), usando o método de otimização Levenberg-Marquardt. Verificou-se que, tanto de forma individual, quanto simultânea,

ao utilizar o método de otimização Levenberg-Marquardt com o objetivo de investigar o comportamento de uma pluma de contaminante em corpos hídricos ao longo do tempo, a partir de um ponto de interesse, foi possível representar o perfil numérico da concentração ao longo do tempo de maneira próxima aos dados experimentais quando se analisa o melhor caso nos três cenários (estimativa isolada da velocidade e do coeficiente de dispersão, bem como estimativa simultânea de ambos).

Por outro lado, quando se investiga o pior caso, apenas a estimativa do coeficiente de dispersão obteve bons resultados. No que se refere à média dos valores estimados, apenas a estimativa da velocidade média de forma isolada apresentou perfis discrepantes em relação aos dados experimentais.

Cabe ressaltar, ainda, que em todos os resultados obtidos nesse trabalho, seja para a variação da malha espacial ou para a estimativa dos parâmetros de interesse (velocidade e coeficiente de dispersão) feita de forma isolada ou simultânea, há uma discrepância entre os dados experimentais e as soluções analítica e numérica no que diz respeito ao perfil da concentração após o pico de concentração, mais precisamente, a partir de 270 segundos. Fato esse que carece de maior investigação futura. No entanto, alguns motivos que podem ter desencadeado a referida discrepância são as rochas presentes no leito do rio, bem como diferenças de profundidade da lâmina d'água e mudança brusca no perfil da velocidade em algum ponto do rio, uma vez que tudo isso pode influenciar na completa homogeneização da concentração salina no corpo hídrico.

Finalizando, verificou-se, ainda, que após as variações da malha, bem como a estimativa dos parâmetros e comparação dos resultados numéricos, obtidos na resolução do modelo matemático utilizando o Método dos Volumes Finitos, com a solução analítica e os dados experimentais, foi possível configurar o modelo para que as simulações por ele realizadas se comportassem de maneira satisfatória na região de interesse, sendo uma alternativa para o diagnóstico e monitoramento das águas de maneira a assemelhar-se à realidade.

## 7.2 Trabalhos Futuros

No que se refere a futuros desdobramentos, o modelo em questão pode ser aplicado em corpos hídricos com características similares ou, até mesmo, ser adaptado para regiões que possuam a geometria parecida com a que foi analisada, podendo alterar seus parâmetros a fim de calibrá-lo de acordo com cada caso específico.

---

Também pode ser feita uma abordagem bidimensional, onde, além dos parâmetros analisados, também constar uma investigação do coeficiente de dispersão transversal, dada a largura do rio.

Além disso, espera-se utilizar o método Levenberg-Marquardt em problemas com um contexto diferente deste trabalho, visto que, a modelagem matemática e computacional surge como alternativa mais viável logística e financeiramente para inúmeras abordagens.

# Referências Bibliográficas

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Cadernos de Recursos Hídricos**. Rio de Janeiro, agência nacional de águas, 14/03/2019. Disponível em:<<https://www.ana.gov.br/noticias-antigas/ana-publica-a-sa-c-rie-acadernos-de-recursos.2019-03-14.1329568974>>. Acesso em: 10 Jan. 2020.

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Planos e estudos sobre recursos hídricos**. Rio de Janeiro, 2023a. Disponível em:<<https://www.gov.br/ana/pt-br/assuntos/gestao-das-aguas/planos-e-estudos-sobre-rec-hidricos>>. Acesso em: 10 Mai. 2023.

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Enquadramento dos corpos de água em classes**. Rio de Janeiro, 2023b. Disponível em:<<https://www.gov.br/ana/pt-br/assuntos/gestao-das-aguas/politica-nacional-de-recursos-hidricos/enquadramento-dos-corpos-de-agua-em-classes>>. Acesso em: 10 Mai. 2023.

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Sistema Nacional de Informações sobre Recursos Hídricos (SNIRH)**. Rio de Janeiro, 2022. Disponível em:<<https://www.gov.br/ana/pt-br/assuntos/gestao-das-aguas/politica-nacional-de-recursos-hidricos/sistema-de-informacoes-sobre-recursos-hidricos>>. Acesso em: 10 Mai. 2023.

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Medição de descarga líquida em grandes rios: manual técnico**. Brasília: ANA; SGH, 2009. 88 p : ll. Disponível em:<<http://arquivos.ana.gov.br/institucional/sge/CEDOC/Catalogo/2014/MedicaoDeDescargaLiquidaEmGrandesRiosManualTecnico2ed.pdf>> Acesso em: 15 Jan. 2023.

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Planejamento dos recursos**

**hídricos.** Agência Nacional de Águas, 2021. Disponível em:<[https://www.ana.gov.br/aguas-no-brasil/planos-e-estudos-1/copy\\_of\\_planejamento-dos-recursos-hidricos](https://www.ana.gov.br/aguas-no-brasil/planos-e-estudos-1/copy_of_planejamento-dos-recursos-hidricos)>. Acesso em: 09 Fev. 2023.

Agência Nacional de Águas e Saneamento Básico (ANA). **Plano de recursos hídricos e enquadramento dos corpos de água.** Cadernos de capacitação em recursos hídricos. Volume 5. 2013. Disponível em:<<http://arquivos.ana.gov.br/institucional/sge/CEDOC/Catalogo/2013/planoDeRecursosHidricosEnquadramento.pdf>>. Acesso em: 10 Fev. 2023.

ARENALES, S. H. V.; SALVADOR J. A. **Cálculo Numérico: Uma Abordagem para o Ensino a Distância.** São Carlos : EdUFSCar, 2010. (Coleção UAB-UFSCar). Disponível em:<[http://livresaber.sead.ufscar.br:8080/jspui/bitstream/123456789/2672/1/TS\\_Selma\\_CalculoNumerico.pdf](http://livresaber.sead.ufscar.br:8080/jspui/bitstream/123456789/2672/1/TS_Selma_CalculoNumerico.pdf)>. Acesso em: 31 Mar. 2023.

ASSUMPÇÃO, A. P. **Retificação de canais fluviais no baixo curso da bacia do rio Macaé (RJ)–Uma abordagem geomorfológica.** Universidade Federal do Rio de Janeiro. Rio de Janeiro, 2009. Disponível em: <<http://objdig.ufrj.br/16/teses/745848.pdf>>. Acesso em: 08 Jan. 2023.

BACCI, D. C.; PATACA; E. M. **Educação para a água.** Estudos avançados, v. 22, n. 63, p. 211-226, 2008. Disponível em: <<http://www.periodicos.usp.br/eav/article/view/10302/11957>>. Acesso em: 08 Jan. 2023.

BARBOSA, J. C. **Modelagem Matemática na sala de aula.** Faculdades Jorge Amado, Salvador, 2004. Disponível em: <<http://www.sbem.com.br/files/viii/pdf/10/MC86136755572.pdf>> Acesso em: 28 Jan. 2023.

BRASIL DAS AGUAS. **A Importância da Água.** 2023. Disponível em:<<https://brasildasaguas.com.br/educacional/a-importancia-da-agua/>>. Acesso em: 17 Fev. 2023.

BOULOS, P.; ABUD, Z. I. **Cálculo diferencial e integral: Volume 2.** São Paulo, Pearson Education do Brasil, 2002.

BURDEN R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical Analysis**. 9th ed., 2010. Disponível em: <[https://fac.ksu.edu.sa/sites/default/files/numerical\\_analysis\\_9th.pdf](https://fac.ksu.edu.sa/sites/default/files/numerical_analysis_9th.pdf)> Acesso em: 31 Mar. 2023.

CAMPOS, L. E. S. **Um estudo sobre fatorações de matrizes e a resolução de sistemas lineares**. Dissertação (Mestrado Profissional), Universidade Estadual de Campinas, Instituto de Matemática, Estatística e Computação Científica, Campinas, SP. 2008. Disponível em: <<http://www.repositorio.unicamp.br/handle/REPOSIP/306088>>. Acesso em: 10 Fev. 2023.

CASTELLI, F. A. **Mecânica dos fluidos computacional integrada com modelo térmico do corpo humana para análise de ambientes térmicos**. Dissertação (Mestrado), Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, Departamento de Engenharia Mecânica, São Paulo, 2012.

CENGEL, Y.; CIMBALA, J. **Mecânica de Fluidos**. Fundamentos y aplicaciones. 1ra Edición. Editorial Mc. Graw-Hill, 2006. Disponível em: <[https://www.academia.edu/35477658/Mec%C3%A1nica\\_de\\_Flu%C3%ADdos\\_-\\_Cengel\\_Cimbala\\_-\\_1ra\\_Edici%C3%B3n](https://www.academia.edu/35477658/Mec%C3%A1nica_de_Flu%C3%ADdos_-_Cengel_Cimbala_-_1ra_Edici%C3%B3n)> Acesso em: 16 Jan. 2023.

COIMBRA, A. L. S. C.; TELLES, W. R. **Modelagem e Solução de um Problema de Transporte de Contaminantes Utilizando o Método dos Volumes Finitos**. In: SIMPÓSIO DE PESQUISA OPERACIONAL E LOGÍSTICA DA MARINHA, 19., 2019, Rio de Janeiro, RJ. Anais. Rio de Janeiro: Centro de Análises de Sistemas Navais, 2019.

COFFERRI, M. **Determinação de vazão em cursos d'água através de diferentes metodologias**. 2017. Disponível em: <<http://200.132.148.32/bitstream/rii/2115/1/M%C3%B4nica%20Cofferri%20-%202017.pdf>> Acesso em: 15 Jan. 2023.

Conselho Nacional do Meio Ambiente. **Resolução CONAMA N 430, de 13 de maio de 2011**. Disponível em: <<http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=646>>. Acesso em: 12 Jan. 2023.

Conselho Nacional do Meio Ambiente. **Resolução CONAMA N 467, de 16 de junho de 2015**. Disponível em: <[http://www.icmbio.gov.br/cepsul/images/stories/legislacao/Resolucao/2015/res\\_conama\\_467\\_2015\\_disp%C3%B5e\\_crit%C3%A9rios\\_autoriza%C3%A7%C3%A3o\\_uso\\_produtos\\_agentes\\_processos\\_f%C3%ADsicos\\_qu%C3%ADmicos\\_biol%C3%B3gicos\\_controle\\_organismos\\_contaminantes\\_corpos\\_h%C3%ADricos\\_superficiais.pdf](http://www.icmbio.gov.br/cepsul/images/stories/legislacao/Resolucao/2015/res_conama_467_2015_disp%C3%B5e_crit%C3%A9rios_autoriza%C3%A7%C3%A3o_uso_produtos_agentes_processos_f%C3%ADsicos_qu%C3%ADmicos_biol%C3%B3gicos_controle_organismos_contaminantes_corpos_h%C3%ADricos_superficiais.pdf)>. Acesso em: 12 Jan. 2023.

Constituição Federal de 1988. **DISPOSITIVOS SOBRE RECURSOS HÍDRICOS**. 1988. Disponível em: <[http://www.aesa.pb.gov.br/aesa-website/wp-content/uploads/2016/11/lei\\_F\\_05.pdf](http://www.aesa.pb.gov.br/aesa-website/wp-content/uploads/2016/11/lei_F_05.pdf)>. Acesso em: 09 Fev. 2023.

DEVENS, J. A. **Quantificação do coeficiente de dispersão longitudinal em pequenos cursos d'água naturais com o uso de traçador ambientalmente neutro**. 2006. 145 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental), Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2006. Disponível em: <[http://www.tede.ufop.br/tde\\_arquivos/10/TDE-2006-06-28T08:13:26Z-69/Publico/UNIFICADO\\_JULIMARA.pdf](http://www.tede.ufop.br/tde_arquivos/10/TDE-2006-06-28T08:13:26Z-69/Publico/UNIFICADO_JULIMARA.pdf)> Acesso em: 16 Jan. 2023.

Empresa Brasileira de Pesquisa Agropecuária (EMBRAPA). **Manejo de recursos hídricos**. Educação e ensino de ciências e matemática: Pesquisa, Aplicação e Novas Tendências - Volume 2, v. 2, n. 1, 2022. Disponível em: <<https://www.embrapa.br/tema-manejo-de-recursos-hidricos/perguntas-e-respostas#:~:text=Recurso%20h%C3%ADrico%2C%20por%20sua%20vez,toda%20%C3%A1gua%20%C3%A9%20recurso%20h%C3%ADrico.>>. Acesso em: 17 Fev. 2023.

ESSS. **Método numérico, analítico e experimental: concorrentes ou complementares na engenharia?** Equipe ESSH, 25/10/2017. Disponível em: <<https://www.esss.co/blog/metodo-numerico-analitico-e-experimental-concorrentes-ou-complementares-na-engenharia/>>. Acesso em: 10 Jan. 2023.

FERREIRA, T. R. N. **O uso da Matemática na modelagem e solução de problemas reais em recursos hídricos**. Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em

Licenciatura em Matemática), Universidade Federal Fluminense, Instituto do Noroeste Fluminense de Educação Superior, 2017.

FERZIGER, J. H., PERIC, M., STREET, R. L. **Computational methods for fluid dynamics**. Berlin: springer. 2002.

FILHO, T. G. L.; VIANNA, A. N. C.; CAETANENO, G. T.; SANTO, R. M. **O uso do ADCP em pequenos e médios cursos d'água**. Grupo de Trabajo Sobre Hidromecânica, 5a Reunión, 1999. Disponível em: <<https://docplayer.com.br/39103485-O-uso-do-adcp-em-pequenos-e-medios-cursos-d-agua.html>> Acesso em: 15 Jan. 2023.

FLEMMING, D. M.; GONÇALVES, M. B. **Cálculo A: funções, limite, derivação, integração** . São Paulo: Person Prentica Hall, 2006.

FRANCISCO, L. V. "**Tales de Mileto: Tudo Começa na Água.**" Brasil Escola. Disponível em: <<https://brasilecola.uol.com.br/filosofia/tales-mileto.htm>.> Acesso em: 28 Jan. 2023.

FREITAS, L. E.; NUNES, F. S. B.; CRUZ, J. C.H. O.; VILELA, C.; MENDES, S., SILVA, A. C. S.; BORGES, G. **Atlas Ambiental da Bacia Hidrográfica do Rio Macaé**. 1<sup>o</sup> ed. Rio de Janeiro: Editora Nova Tríade do Brasil Ltda, 2015.

GOIS, J. P.; ESTÁCIO, K. C.; OISHI, C. M.; BERTTONI, V.; BOTTA, V. A.; NAGAMINE, A.; ... FEDERSON, F. **Aplicação de Volumes Finitos na Simulação Numérica de Contaminação em Lençóis Freáticos**. ICMC USP, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Departamento de Computação e Estatística, SP, Brasil, 2005.

GUIDORIZZI, H. L. **Um curso de cálculo: volume 4**. 5.ed. Rio de Janeiro: LTC, 2001.

IEZZI, G.; HAZZAN, S. **Fundamentos de matemática elementar 4: sequências, matrizes, determinantes, sistemas**. Atual: 2014.



2016.

LUGÃO, B. C. **Modelagem computacional e estimativa de cargas poluentes pontuais despejadas às margens de cursos fluviais**. 2022. Disponível em:<<https://www.bdtd.uerj.br>>. Acesso em: 15 Maio 2023.

MENEZES; J. B. **Resolução de equações diferenciais parciais em malhas não-estruturadas via método dos volumes finitos utilizando um método de alta ordem**. Universidade Federal de Uberlândia, 2019. Disponível em:< <https://repositorio.ufu.br/bitstream/123456789/24428/1/ResolucaoEquacoesDiferencias.pdf>> Acesso em: 10 Fev. 2023.

MOREAU, R. **Les pères du concept de diffusion**. Encyclopédie de l'environnement. 2018. Disponível em:<<https://www.encyclopedie-environnement.org/zoom/peres-concept-diffusion/>>. Acesso em: 03 Jun. 2023.

MUÑOZ, H. R. **Interfaces da Gestão de Recursos Hídricos: Desafios da Lei de Águas em 1997**. 2.ed. Brasília: Secretaria de Recursos Hídricos do Ministério do Meio Ambiente. Disponível em:<[https://issuu.com/fernandodecarvalho4/docs/interfaces\\_da\\_gest\\_o\\_de\\_recursos\\_h](https://issuu.com/fernandodecarvalho4/docs/interfaces_da_gest_o_de_recursos_h)>. Acesso em: 09 Fev. 2023.

Nações Unidas (ONU). **A ONU e a água**. 2010. Disponível em:<<https://nacoesunidas.org/acao/agua/>>. Acesso em: 10 Fev. 2023.

Nações Unidas (ONU). **Em Dia Mundial da Água, ONU defende soluções para problemas hídricos baseadas na natureza**. Rio de Janeiro ONU, Publicado em 26/02/2018. Disponível em:<<https://nacoesunidas.org/em-dia-mundial-da-agua-onu-defende-solucoes-para-problemas-hidricos-baseadas-na-natureza/>> Acesso em: 08 Jan. 2023.

OLIVEIRA, V. V. **Quantificação e avaliação do coeficiente de dispersão longitudinal em cursos d'água**. 2013. Tese de Doutorado. Universidade de São Paulo. Disponível em:<[https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/18/18138/tde-27082014-144417/publico/Vanessa\\_Vaz.pdf](https://www.teses.usp.br/teses/disponiveis/18/18138/tde-27082014-144417/publico/Vanessa_Vaz.pdf)>. Acesso em: 16 Jan. 2023.

Organização Mundial da Saúde (OMS). **Guidelines for drinking-water quality**. 4th edition. Editora: WHO. World Health Organization. 2011. Disponível em:<[https://www.who.int/water\\_sanitation\\_health/publications/2011/dw\\_guidelines/en/](https://www.who.int/water_sanitation_health/publications/2011/dw_guidelines/en/)>. Acesso em: 10 Fev. 2023.

PLANALTO. Constituição da República Federativa do Brasil de 1988. **Art. 9, Lei n 9.433, de 1997 da Política Nacional de Recursos Hídricos**. Brasília, DF: Presidente da República. Disponível em:<[https://www.planalto.gov.br/ccivil\\_03/leis/19433.htm](https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/leis/19433.htm)>. Acesso em: 10 Maio 2023.

PLANALTO. **Constituição da República Federativa do Brasil de 1988**. 1988. Disponível em:<[https://www.planalto.gov.br/ccivil\\_03/constituicao/constituicao.htm](https://www.planalto.gov.br/ccivil_03/constituicao/constituicao.htm)>. Acesso em: 17 Fev. 2023.

PLANALTO. **Decreta o Código de Águas**. Rio de Janeiro, Presidência da República Casa Civil Subchefia para Assuntos Jurídicos, 1934. Disponível em:<[http://www.planalto.gov.br/ccivil\\_03/decreto/D24643.htm](http://www.planalto.gov.br/ccivil_03/decreto/D24643.htm)>. Acesso em: 09 Fev. 2023.

POINTWISE, Inc. The Choice For CFD Meshing. **Easy Meshing with Structured Accuracy: Overset Grids in Pointwise**. The Connector, Pointwise. May/June 2012. Disponível em: <<https://www.pointwise.com/theconnector/2012-May/Meshing-Structured-Accuracy-Overset-Grids-Pointwise.html>>. Acesso em: 07 Fev. 2023.

RODRIGUES, R. B. **Instrumentos da Política Nacional de Recursos Hídricos e Ferramenta de Gestão (SSD RB)**. IPEN/CIETEC – Cidade Universitária, Butantã. 2023. Disponível em:<[http://ecologia.ib.usp.br/portal/index.php?option=com\\_content&view=article&id=144&Itemid=423](http://ecologia.ib.usp.br/portal/index.php?option=com_content&view=article&id=144&Itemid=423)>. Acesso em: 12 Mai. 2023.

RUGGIERO, M. A. G.; LOPES, V. L. D. R. **Cálculo numérico: aspectos teóricos e computacionais**. Makron Books do Brasil. 1997. Disponível em:<[https://www.academia.edu/38754570/M%C3%A1rcia\\_Ruggiero\\_e\\_Vera\\_Lopes\\_C%C3%A1lculo\\_Num%C3%A9rico\\_Aspostos\\_Te%C3%B3ricos\\_e\\_Computacionais\\_2\\_Edi%C3%A7%C3%A3o](https://www.academia.edu/38754570/M%C3%A1rcia_Ruggiero_e_Vera_Lopes_C%C3%A1lculo_Num%C3%A9rico_Aspostos_Te%C3%B3ricos_e_Computacionais_2_Edi%C3%A7%C3%A3o)>.

Acesso em: 31 Mar. 2023.

SANTOS, I. et al. **Hidrometria aplicada**. Curitiba: ITD, 2001. 372 p. Disponível em: <<https://www.passeidireto.com/arquivo/17549556/livro-hidrometria-aplicada-irani-dos-santos-luiz-fernando-lautert>> Acesso em: 15 Jan. 2023.

SEMADS. **Bacias hidrográficas e rios fluminenses**. Síntese Informativa por Macrorregião Ambiental Rio de Janeiro: SEMADS 2001. Disponível em: <[http://www.ciflorestas.com.br/arquivos/doc\\_bacias\\_ambiental\\_18875.pdf](http://www.ciflorestas.com.br/arquivos/doc_bacias_ambiental_18875.pdf)>. Acesso em: 08 Jan. 2023.

SILVA, A. B. **Utilização de Fluidodinâmica Computacional (CFD) na Simulação de Vazamentos em Dutos** 2016. Dissertação (mestrado) - UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Mecânica, 2016. Disponível em: <[http://w2.files.scire.net.br/atrio/ufrj-pem\\_upl/THESIS/1825/pemufrj2016mscamandabriggsdasilva\\_20161108123218348.pdf](http://w2.files.scire.net.br/atrio/ufrj-pem_upl/THESIS/1825/pemufrj2016mscamandabriggsdasilva_20161108123218348.pdf)>. Acesso em: 10 Jan. 2023.

SILVA, A. L. **Modelagem e simulação numérica do transporte de poluentes em meios porosos com reação química**, 2016. Disponível em: <<http://tede.bc.uepb.edu.br/jspui/bitstream/tede/2462/2/PDF%20-%20Andr%c3%a9%20Luiz%20da%20Silva.pdf>>. Acesso em: 10 Jan. 2023.

SILVA, E. R. **O curso da água na história: simbologia, moralidade e a gestão de recursos hídricos**. Tese de Doutorado, Escola Nacional de Saúde Pública, 1998.

SILVA, N. R.; ALBUQUERQUE, T. N. **Enquadramento de corpos de água: um instrumento da política nacional de recursos hídricos**. Geoambiente On-Line, n. 32, 2018. Disponível em: <<https://www.revistas.ufg.br/geoambiente/article/view/54654/27021>>. Acesso em: 08 Jan. 2023.

SOUSA, E. P. **Avaliação de Mecanismos Dispersivos em Rios Através de Problemas Inversos**. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional), Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, RJ, 2009.

SOUZA, P. A.; OLIVEIRA, D.; HINGEL, R. L.; CUNHA, A.; MARCAL, M. S. **Caracterização do Uso da Terra na bacia do rio Macaé (RJ)**. In: XIII Simpósio Brasileiro de Geografia Física Aplicada, Viçosa. 2009. Disponível em:<[http://www.geomorfologia.ufv.br/simposio/simposio/trabalhos/trabalhos\\_completos/eixo3/080.pdf](http://www.geomorfologia.ufv.br/simposio/simposio/trabalhos/trabalhos_completos/eixo3/080.pdf)> Acesso em: 08 Jan. 2023.

SOUZA, V. C. **A origem do cálculo diferencial e integral**. rio de janeiro: Monografia para obtenção do grau de mestre em Orientação Educacional apresentada à Universidade Candido Mendes. 2001.

SOS Mata Atlântica (SOSMA). **Observando os Rios - O retrato da qualidade da água nas bacias hidrográficas da Mata Atlântica**. Março 2022. Disponível em:<[https://cms.sosma.org.br/wp-content/uploads/2022/03/SOSMA\\_Observando-os-Rios\\_2022.pdf](https://cms.sosma.org.br/wp-content/uploads/2022/03/SOSMA_Observando-os-Rios_2022.pdf)>. Acesso em: 17 Fev. 2023.

STEINBRUCH, A.; WINTERLE, P. **Álgebra Linear**. 2.ed. São Paulo: McGraw-Hill, 1987.

Sussman, M. **Two-dimensional Hermite interpolation and mesh generation**. MATH 2070: LAB 8: Higher Order Interpolation, agosto 10, 2016.

TRATA BRASIL. **Saneamento e Doenças De Veiculação Hídrica DATASUS E SNIS 2019**. São Paulo, setembro de 2021. Disponível em:<[https://tratabrasil.org.br/wp-content/uploads/2022/09/Sumario\\_Executivo\\_ \\_Saneamento\\_e\\_Saude\\_2021\\_\\_2.pdf](https://tratabrasil.org.br/wp-content/uploads/2022/09/Sumario_Executivo_ _Saneamento_e_Saude_2021__2.pdf)>. Acesso em: 18 Fev. 2023.

TELLES, W. R. **Simulação do transporte horizontal bidimensional de substância conservativa**. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional), Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, RJ, 2009.

Universidade Presbiteriana Mackenzie. **Experimento de Reynolds (1883)**. 2023. Disponível em:<[http://meusite.mackenzie.com.br/eangelo/Exp\\_Reynolds.pdf](http://meusite.mackenzie.com.br/eangelo/Exp_Reynolds.pdf)>. Acesso em: 03 Jun. 2023.

VILLAS BOAS, G. H.; MIRANDA, T. X. G.; MARCAL, M. S.; OLIVEIRA, A. F. **Caracterização Morfométrica da Bacia do rio Macaé (RJ)**. Anais do VII Simpósio Nacional de Geomorfologia SINAGEO/ II Encontro Latino-Americano de Geomorfologia, Belo Horizonte, 2008.

ZOBY, J. L. G. **Panorama da qualidade das águas subterrâneas no Brasil**. Águas Subterrâneas, 2008. Disponível em:<<https://aguassubterraneas.abas.org/asubterraneas/article/download/23802/15867>> Acesso em: 10 Jan. 2023.