ERHA 7039
Princípios da Modelagem e Controle da Qualidade da Água Superficial

REGINA TIEMY KISHI

http://www.ufpr.br/~rtkishi.dhs/ERHA7039

10 – Sistema não misturado

Sistema não misturado

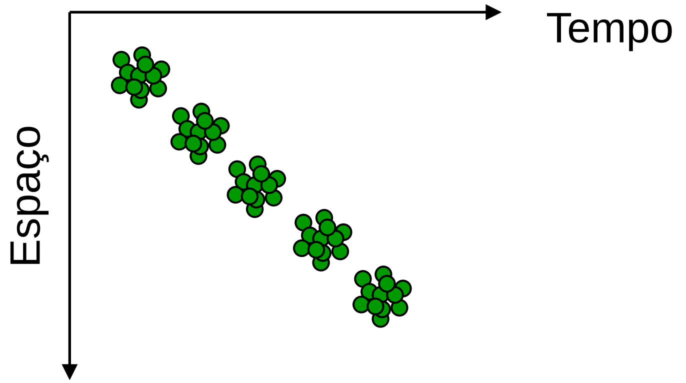
$$\boxed{\text{Acumulação} = F_{ext} \pm \text{Transporte} \pm \text{Reações}}$$

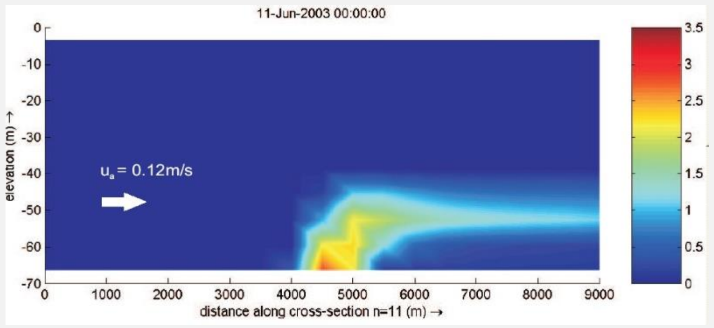
1. Transporte

Acumulação = F_{ext} ± **Transporte** ± Reações

Transporte advectivo:

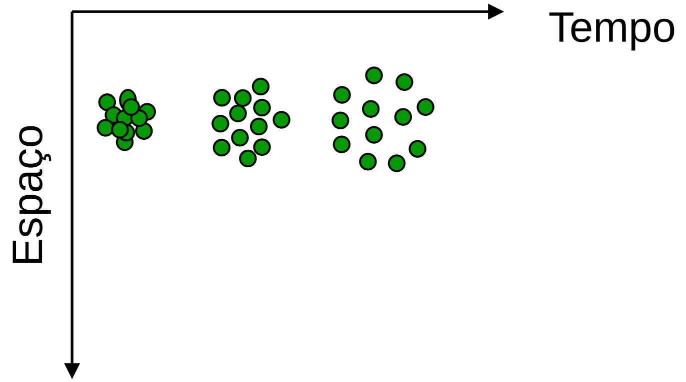
Devido ao movimento do fluxo de água, logo é determinado pela direção e magnitude de sua velocidade.

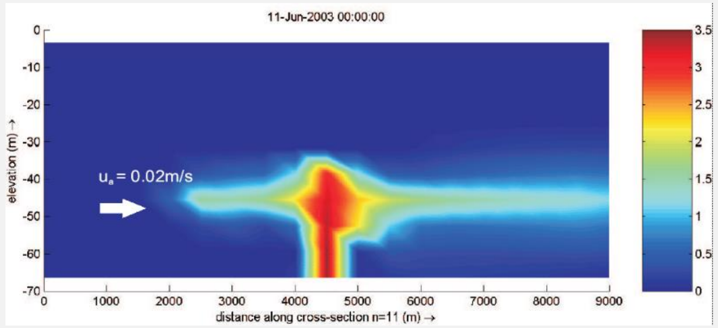




Transporte difusivo:

Movimento de massa de um local com maior concentração para outro com menor concentração.





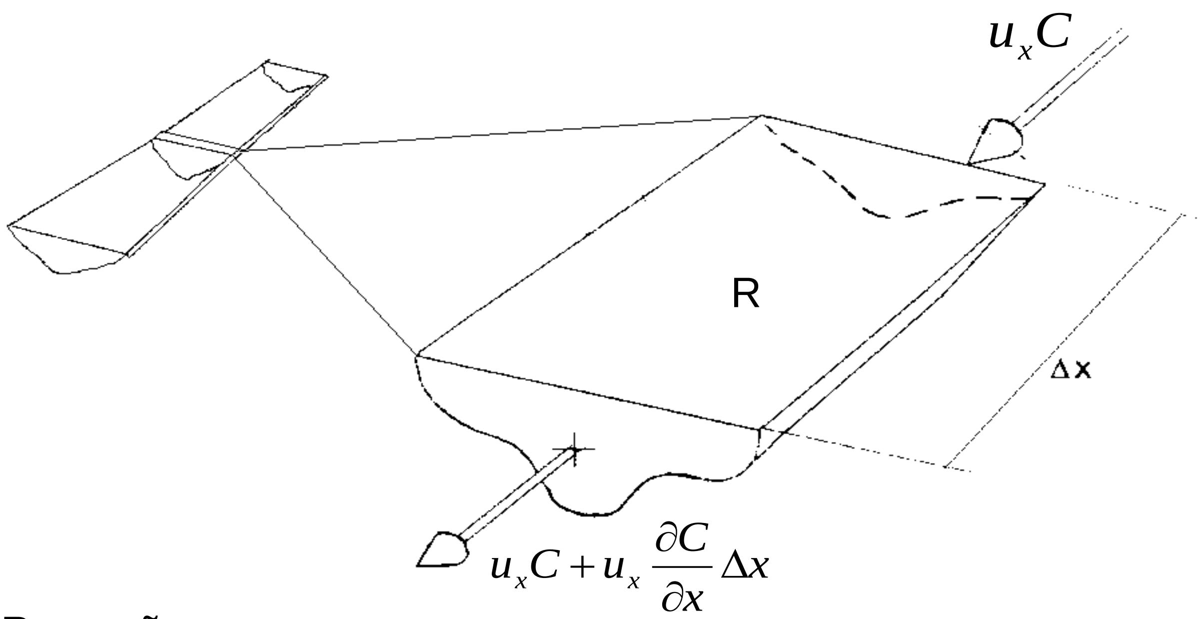
CORMIX: http://www.cormix.info/new.php

1.1 - Transporte advectivo

Movimento da substância de uma posição no espaço para outra, ocasionado pelo deslocamento efetivo da água, ou seja, pelo campo de velocidades do fluxo de água.

Dado um volume de controle:

<u>Fluxo de massa</u>:
taxa de movimento da massa
normalizado pela área



R: reações
u_x: velocidade instantânea
perpendicular a seção transversal

Balanço de massa:

$$\Delta V \frac{\partial C}{\partial t} = J_{entra}A - J_{sai}A \pm R$$

Considerando reações de primeira ordem:
R=k.ΔV.C

$$\cancel{\Delta V} \frac{\partial C}{\partial t} = \cancel{u_x C}A - (\cancel{u_x C} + u_x \frac{\partial C}{\partial x}\cancel{\Delta x})A - k\cancel{\Delta V}C$$

Considerando *ΔV=A. Δx* e *lim Δx* $\rightarrow$ *0*:

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = -u_x \frac{\partial C}{\partial x} - kC}$$

Uni-dimensional

Transporte advectivo (2)

Tri-dimensional

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = -u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z} - kC}$$

u_x, u_y, u_z componentes da velocidade instantânea nas direções x, y, z, respectivamente.

1.2 - Transporte difusivo

Movimento da substância de um local mais concentrado para outro menos concentrado $\Rightarrow$ minimizar gradiente de concentração.

Difusão molecular: em uma escala microscópica, devido movimento aleatório das moléculas de um fluido, promovendo o espalhamento das partículas.

Difusão turbulenta: em uma escala maior, movimento devido a turbilhões dos mais variados tamanhos e orientações.

Transporte difusivo (2)

Matematicamente representado pela lei de Fick:

Uni-dimensional

$$\boxed{J_x = -D_m \frac{\partial C}{\partial x}}$$

Fluxo de massa é proporcional ao gradiente da concentração.

Coeficiente de difusão molecular $[L^2T^{-1}]$

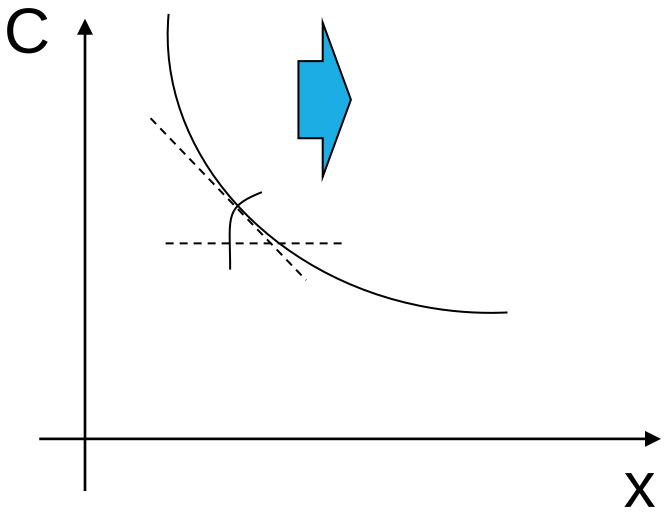
Fluxo de massa na direção x $[ML^{-2}T^{-1}]$

D_m quantifica a taxa do processo difusivo.

Primeira Lei de Fick (difusão)

Direção do fluxo de massa?

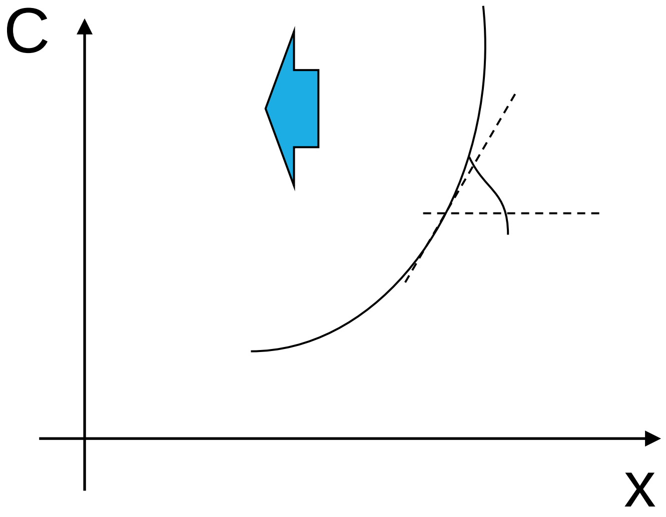
Caso 1



Fluxo de massa: Positivo

Gradiente: $\frac{dC}{dx} < 0$

Caso 2



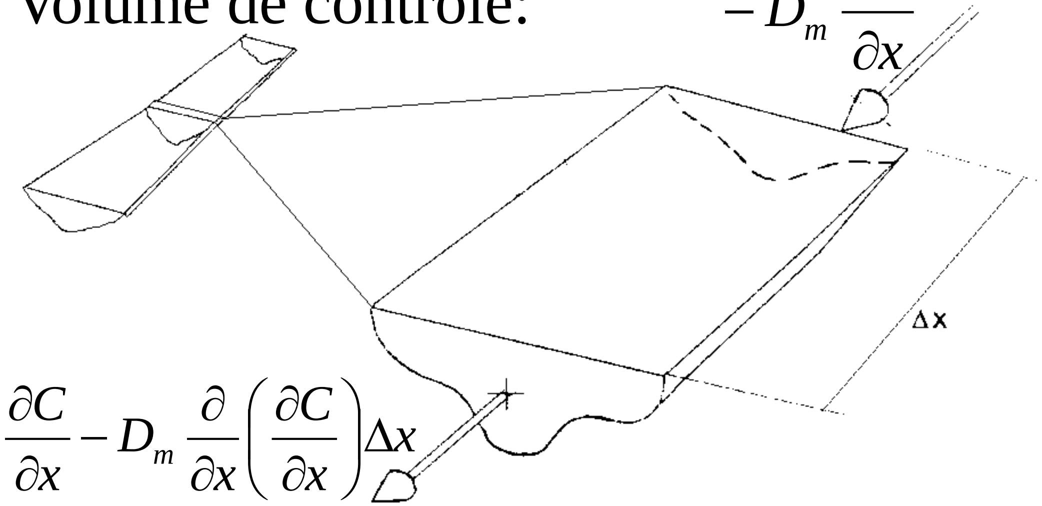
Fluxo de massa: Negativo

Gradiente: $\frac{dC}{dx} > 0$

Transporte difusivo (3)

Volume de controle:

$$-D_m\frac{\partial C}{\partial x}$$



$$-D_m\frac{\partial C}{\partial x} - D_m\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)\Delta x$$

Balanço de massas:

$$\Delta V\frac{\partial C}{\partial t} = J_{entra}A - J_{sai}A \pm R$$

Considerando reações de primeira ordem: *R=k.ΔV.C*

$$\cancel{\Delta V}\frac{\partial C}{\partial t} = \left(\cancel{-D_m\frac{\partial C}{\partial x}}\right)A - \left(\cancel{-D_m\frac{\partial C}{\partial x}} - D_m\frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial x}\right)\cancel{\Delta x}\right)A - k\cancel{\Delta V}C$$

Considerando $\Delta V = A.\ \Delta x$ e $\lim \Delta x \rightarrow 0$:

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = D_m\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC}$$

Uni-dimensional

1.3 - Transporte advectivo-difusivo

Quando advecção e difusão ocorrem, o efeito dos dois fenômenos são aditivos.

Balanço de massas:

$$\Delta V \frac{\partial C}{\partial t} = J_{entra} A - J_{sai} A \pm R$$

Considerando reações de primeira ordem:
R=k.ΔV.C

$$\cancel{\Delta V} \frac{\partial C}{\partial t} = \left(\cancel{u_x C} - D_m \cancel{\frac{\partial C}{\partial x}} \right) A - \left(\cancel{u_x C} + u_x \frac{\partial C}{\partial x} \cancel{\Delta x} - D_m \cancel{\frac{\partial C}{\partial x}} - D_m \frac{\partial}{\partial x}\left(\frac{\partial C}{\partial x} \right) \cancel{\Delta x} \right) \cancel{A} - k \cancel{\Delta V} C$$

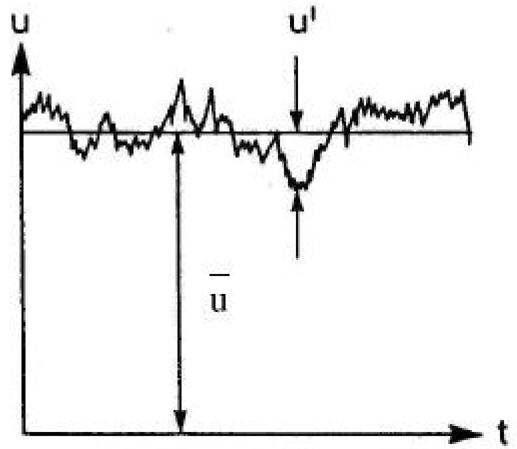
Considerando $\Delta V = A.\ \Delta x$ e $\lim \Delta x \rightarrow 0$:

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = -u_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_m \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC}$$

Uni-dimensional

1.3.1 - Turbulência

Nos casos de turbulência, pode-se substituir o termo de **velocidade instantânea** pela **velocidade média temporal** acrescida das flutuações de velocidade de turbulência:



$$u = \bar{u}_x + u_x'$$

Para o caso uni-dimensional:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -(\bar{u}_x + u_x')\frac{\partial C}{\partial x} + D_m \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$\bar{u}_x$: velocidade média temporal em x.

u_x' : flutuação da velocidade em x.

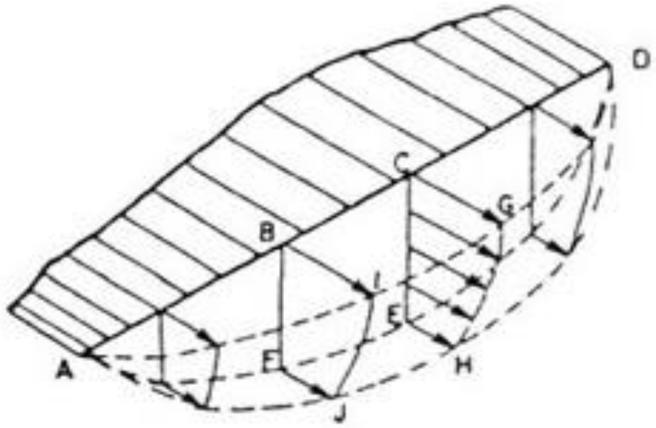
Difusão turbulenta

Usando-se somente a **velocidade média temporal** no termo advectivo, tem-se o efeito da turbulência transferido para o coeficiente de difusão, que é acrescido de um termo referente ao coeficiente de difusão turbulenta (ε).

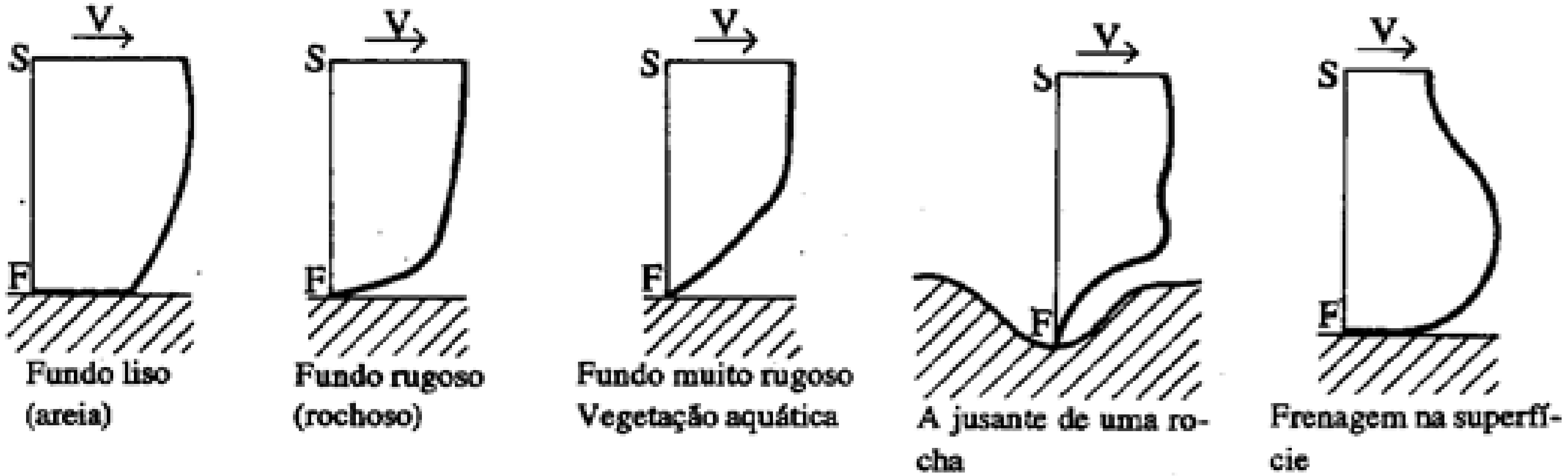
$$\frac{\partial C}{\partial t} = -\bar{u}\frac{\partial C}{\partial x} + \left(D_m + \varepsilon\right)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

$D_m \ll \varepsilon$

Velocidade na seção transversal



Hudson, 1983.



Fonte: Santos et al. Hidrometria Aplicada.

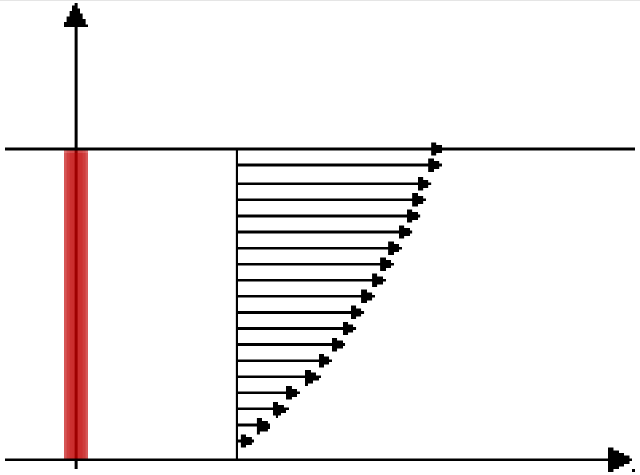
1.3.2 - Dispersão

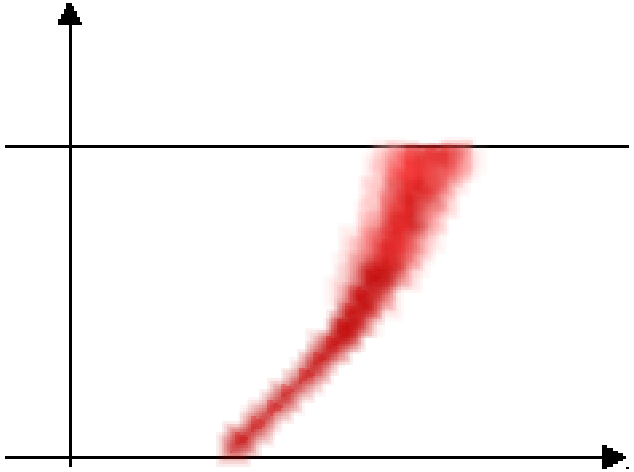
Adotando-se a **velocidade média da seção transversal** (U) no termo advectivo, os possíveis efeitos das variações do perfil de velocidades devem ser incluídos no termo de difusão, que agora passa a ser o coeficiente de dispersão longitudinal. Logo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + D_L\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

C : concentração média na seção transversal [ML^{-3}]
U : velocidade média na seção transversal [LT^{-1}]
D_L: coeficiente de dispersão longitudinal [L^2T^{-1}]

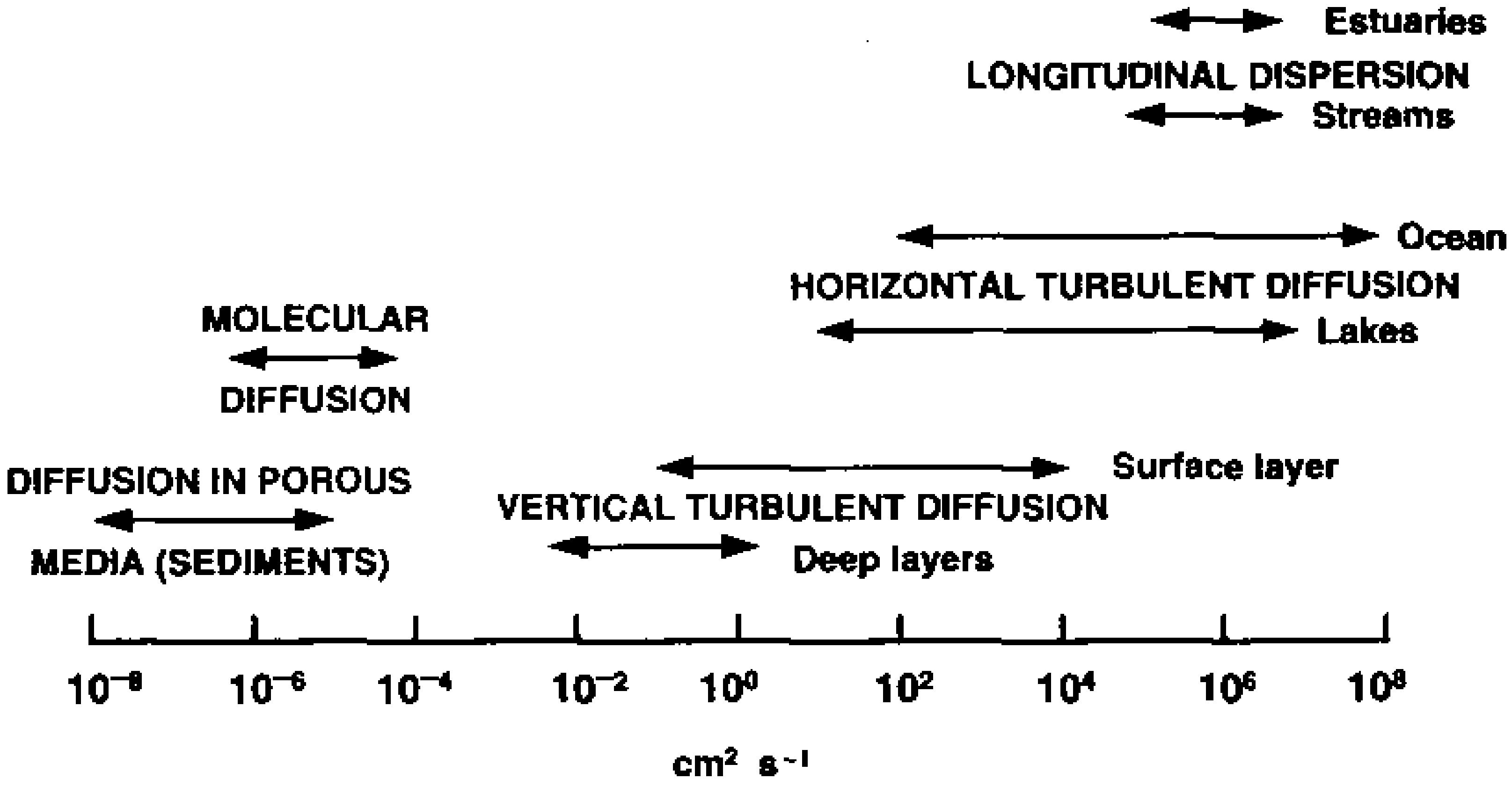
Dispersão





Deslocamento do poluente caracterizado pela tendência de uniformização de concentração e diferenças de velocidade.

Coeficiente de Difusão



Typical ranges of the diffusion coefficient in natural waters and sediments.

Resumo

Substância não-conservativa

Equação Geral do Transporte:

$$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = \underbrace{-u_x \frac{\partial C}{\partial x} - u_y \frac{\partial C}{\partial y} - u_z \frac{\partial C}{\partial z}}_{\text{Advecção}} + \underbrace{D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2}}_{\text{Difusão}} \underbrace{- kC}_{\text{Reação}}}$$

ou $$\boxed{\frac{\partial C}{\partial t} = -\nabla C u_i + \nabla (D_i \nabla C) - kC}$$

i: vetor direção em relação aos eixos x,y,z

u_i: velocidade

D: coeficiente de dispersão

C: concentração da substância

operador nabla:

$$\nabla = (I \frac{\partial}{\partial x} + J \frac{\partial}{\partial y} + K \frac{\partial}{\partial z})$$

2 – Análise adimensional da equação geral de transporte

Número de Péclet (P_e)
Número do estuário (η)

Número de Péclet (P_e)

Condição permanente:

Parâmetros adimensionais:

$$x^* = \frac{x}{L}$$

$$C^* = \frac{C}{C_{in}}$$

Substituindo

$$0 = -U\frac{dC}{dx} + D_x\frac{d^2C}{dx^2} - kC$$

$$0 = -\frac{dC^*}{dx^*} + \frac{D_x}{UL}\frac{d^2C^*}{dx^{*2}} - \frac{kL}{U}C^*$$

$1/P_e$

Magnitude de P_e *vai determinar se o termo da segunda derivada na equação é significativo em relação a outros termos.*

$$P_e = \frac{UL}{D_x}$$

Se Pe é alto (> 10) → predomina advecção

Se Pe é baixo (< 0,1) → predomina dispersão

Ver: Chapra, Box 9.1

Número do estuário (η)

Condição não permanente:

Importância relativa da advecção e difusão

Parâmetros adimensionais:

$$C^* = \frac{C}{C_0} \Rightarrow C = C^* C_0$$

$$x^* = \frac{kx}{u} \Rightarrow x = \frac{x^* u}{k}$$

$$t^* = kt \Rightarrow t = \frac{t^*}{k}$$

Substituindo

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$

$$\eta = \frac{kD_x}{U^2}$$

Resulta:

$$\frac{\partial C^*}{\partial t^*} = -\frac{\partial C^*}{\partial x^*} + \frac{kD_x}{U^2}\frac{\partial^2 C^*}{\partial x^{*2}} - C^*$$

η

Magnitude de *η* *vai determinar se o termo da segunda derivada na equação é significativo em relação a outros termos.*

Faixa sugerida

η » 1	Predomina dispersão	*η > 10*
η ≈ 1	Advecção e dispersão são importantes	0,1< *η <10*
η « 1	Predomina advecção	*η < 0,1*

Condição permanente – constante no tempo

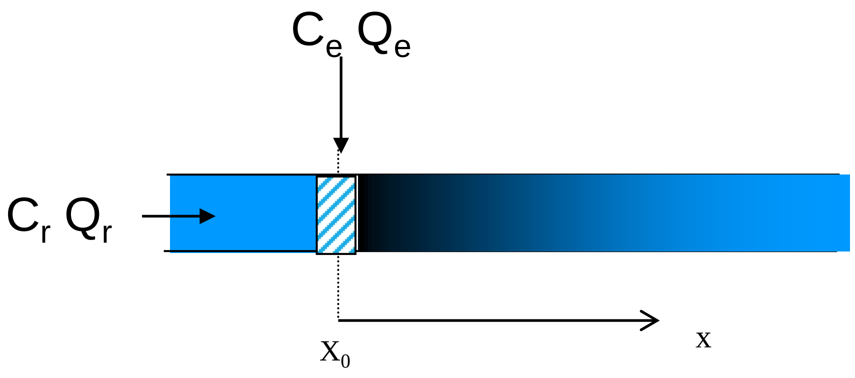
3 Condições steady-state

3.1 – Sistemas predominando a **advecção**

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

a) Cargas pontuais

Considerando mistura instantânea completa no ponto x_0



$$C_0 = \frac{C_{rio}Q_{rio} + C_e Q_e}{Q_{rio} + Qe}$$

$$0 = -U_x \frac{\partial C}{\partial x} - kC$$

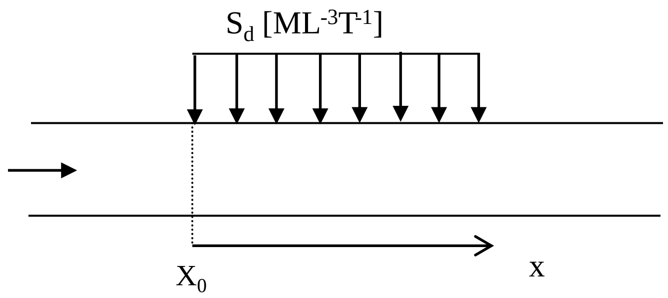
Integrando:

Para $x=x_0$, tem-se $C=C_0$

$$C = C_0 e^{-\frac{k}{U}(x - x_0)}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

b) Cargas distribuídas uniformemente



$$0 = -U_x \frac{\partial C}{\partial x} - kC + S_d$$

Integrando:

Para $x_0=0$, tem-se $C=C_0$

$$C = C_0 e^{\frac{-k}{U}x} + \frac{S_d}{k}\left(1 - e^{\frac{-k}{U}x}\right)$$

C_0 – conc. do rio no início da carga distribuída

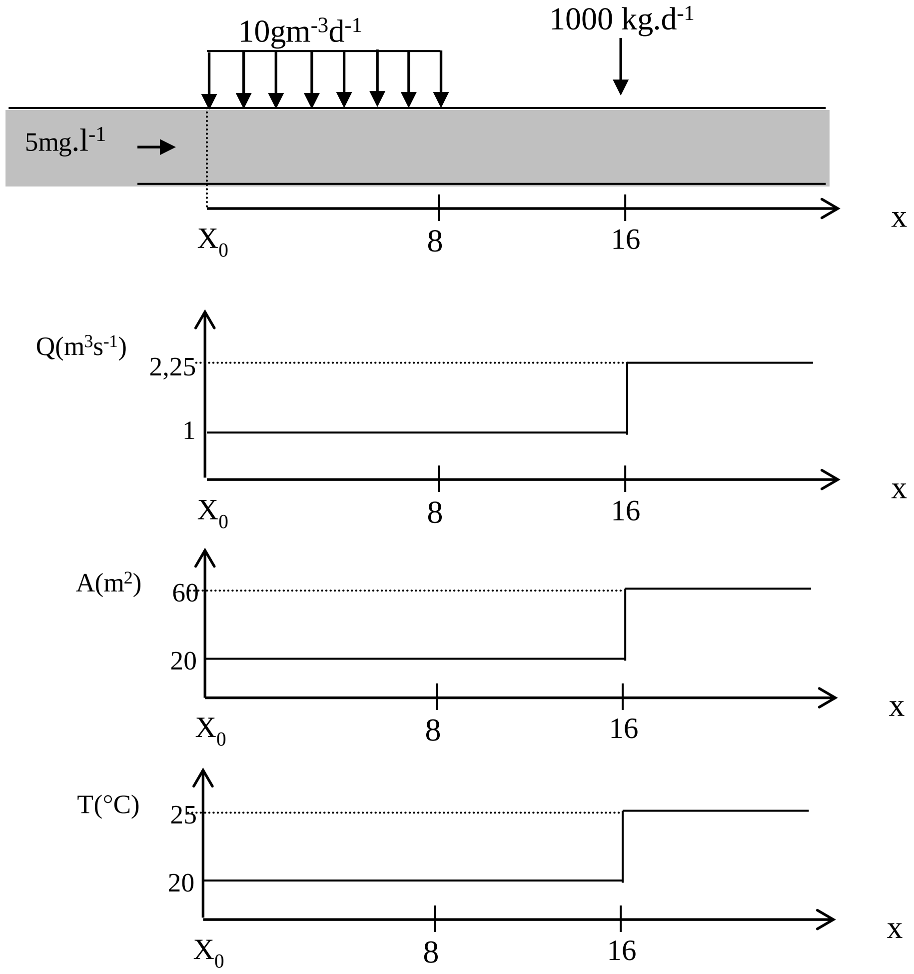
Exercício

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

Determine a distribuição do poluente ao longo do rio, com as cargas pontuais e distribuída conforme a figura. Condição steady-state.

Determine em que ponto a concentração do rio volta à concentração igual ao ponto x_0.

A taxa de decaimento do poluente é $k=0{,}1\ d^{-1}$ a 20°C ($\theta=1{,}05$).



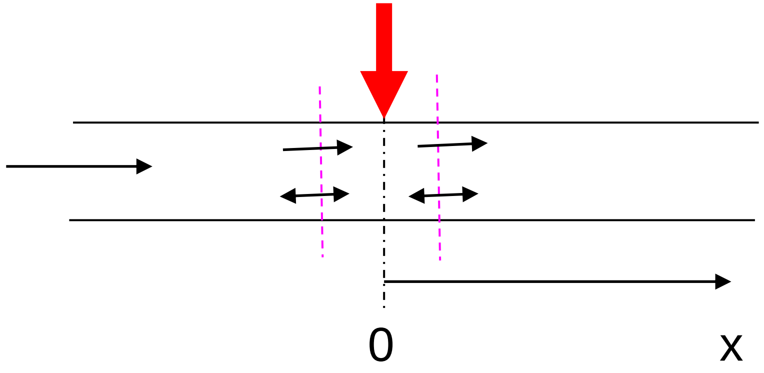
3 - Condições steady-state

3.2 – Sistemas onde a **advecção** e **difusão** são importantes

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

$$0 = -U_x \frac{\partial C}{\partial x} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$

a) Carga pontual



Sendo:

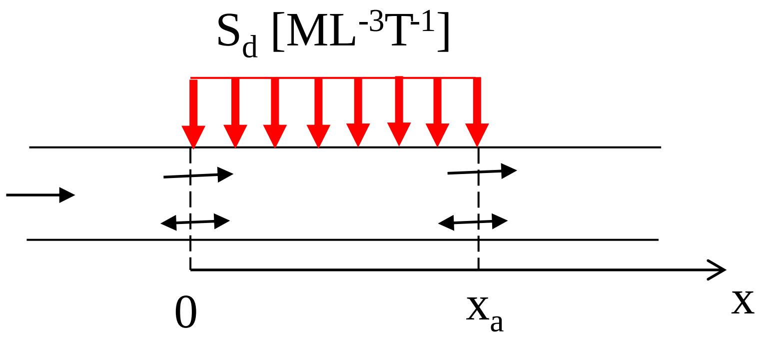
$$m = \sqrt{1 + 4\frac{kD_x}{U_x^2}}$$

η

Para $x \leq 0$	Para $x \geq 0$
$C = \dfrac{W}{AU_x m} e^{\left[\frac{U_x}{2D_x}(1+m)x\right]}$	$C = \dfrac{W}{AU_x m} e^{\left[\frac{U_x}{2D_x}(1-m)x\right]}$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = 0$$

b) Cargas distribuídas uniformemente

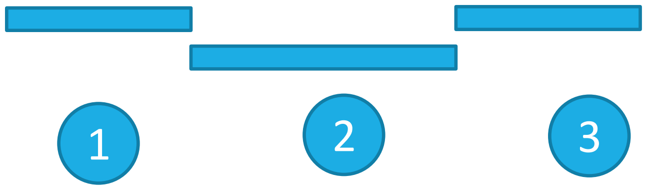


Para $x \leq 0$:

1 $$C = \frac{S_d}{k}\left(\frac{m-1}{2m}\right)\left(1 - e^{-\frac{U_x}{2D_x}(1+m)x_a}\right) e^{\frac{U_x}{2D_x}(1+m)x}$$

Para $0 \leq x \leq x_a$:

2 $$C = \frac{S_d}{k}\left(1 - \frac{m-1}{2m} e^{\frac{U_x}{2D_x}(1+m)(x-x_a)} - \frac{m+1}{2m} e^{\frac{U_x}{2D_x}(1-m)x}\right)$$



Para $x \geq x_a$:

3 $$C = \frac{S_d}{k}\left(\frac{m+1}{2m}\right)\left(1 - e^{\frac{U_x}{2D_x}(1-m)x_a}\right) e^{\frac{U_x}{2D_x}(1-m)(x-x_a)}$$

Condição não permanente – variável no tempo

4 – Condição não permanente – variável no tempo

Carga pontual instantânea: acidentes, derramamento $\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$

4.1 – Sistemas predominando a **advecção**
4.2 – Sistemas predominando a **difusão/dispersão**
4.3 – Sistemas predominando a **advecção e dispersão**
4.4 – Sistemas ocorrendo **advecção, dispersão e reações**

Estudos com traçadores

4.5 –Traçadores

É feita análise discreta no tempo.

4 – Condição não permanente
4.1 – Sistemas predominando a **advecção**

$$\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + D_x \cancel{\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}} - kC$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U_x \frac{\partial C}{\partial x} - kC$$

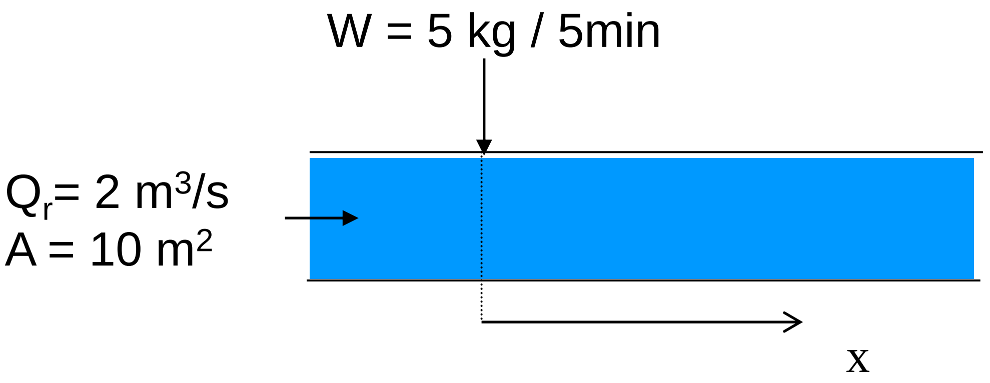
Se um vazamento ocorre e causa:
uma concentração C_0 em t=0 e x=0
a solução pode ser:

Para t=x/U : $C = C_0 e^{-kt}$

Outro : C=0

Exercício

Carga acidental: Substância conservativa



Pergunta-se:

a) Qual a extensão e concentração do vazamento?

b) Em quanto tempo a pluma alcançará 10 km?

c) Responder os itens acima se substância fosse não conservativa, com $k = 0{,}1\ d^{-1}$

4 – Condição não permanente
4.2 – Sistemas predominando a difusão/dispersão

$$\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \cancel{-U\frac{\partial C}{\partial x}} + D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \cancel{-kC}$$

Substância conservativa → k = 0
U ~ 0 → advecção negligenciável

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

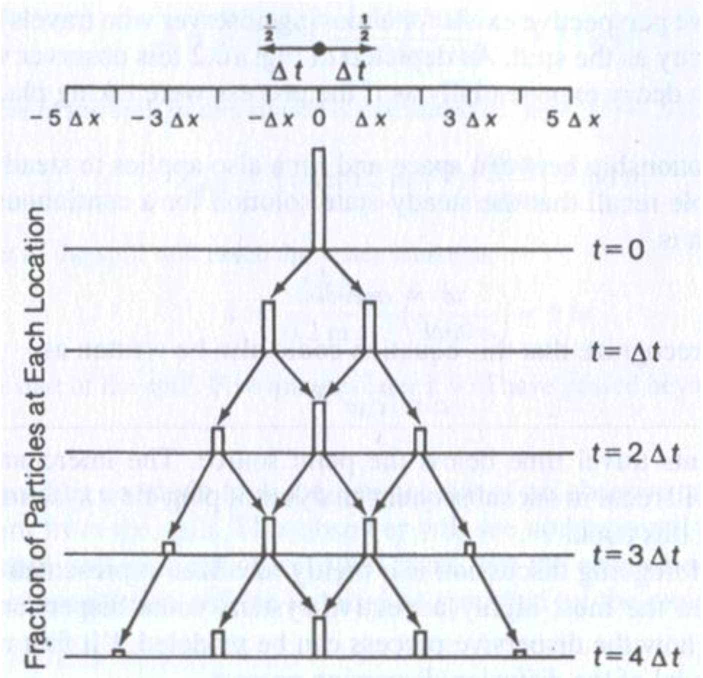
Solução com carga pontual instantânea em x=0:

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

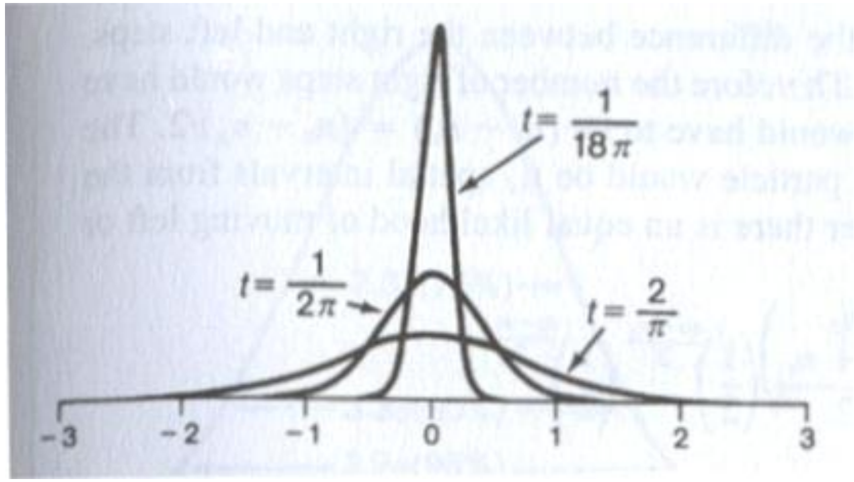
m_p = massa total ponderada pela seção transversal

Solução idêntica ao movimento aleatório da partícula → Distribuição normal

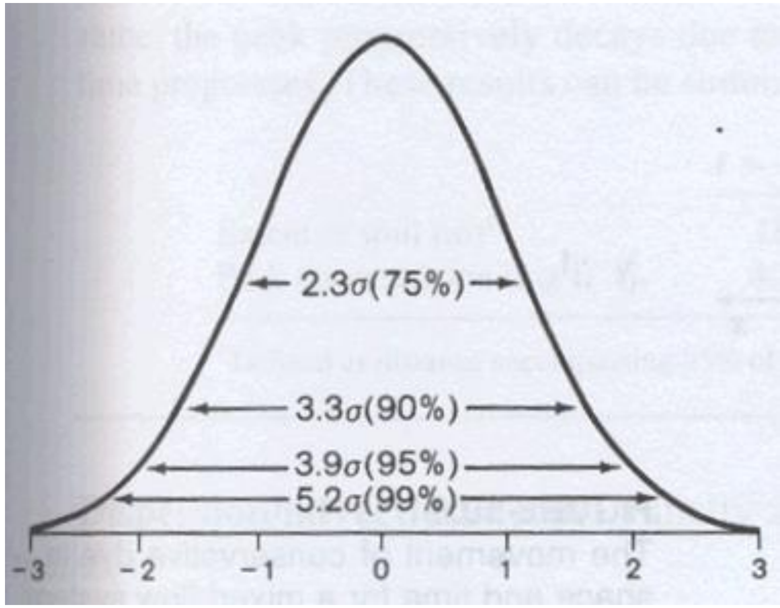
Movimento aleatório da partícula → Probabilidade da partícula estar a uma distância x no tempo t pode ser formulada como uma distribuição normal



Representação do movimento aleatório/randômico
~ distribuição normal
(mesma forma)



Assim, tem-se uma distribuição normal padronizada mostrando a probabilidade (expressa em %) e abrangendo vários múltiplos do desvio padrão:



Curva com média = 0 e variância = $2D_x t$

$$\sigma = \sqrt{2D_x t}$$

<u>Por exemplo</u>

Para 3,9 σ:

→Compreende 95% da área sob a curva

→Distância que compreende 95% da massa

→Considerando 95% da extensão do vazamento

Exercício

Substância conservativa → $k = 0$
Carga acidental no centro de um canal com águas paradas, sem fluxo.
Se coeficiente de dispersão = 10^5 m^2/d
a) Onde estará o espalhamento do poluente em um dia?
Considere que uma faixa de 95% aproxima adequadamente da extensão do vazamento.
b) Se a carga acidental for de 5kg e seção transversal de 10 m^2, quais as concentrações em $x=0$ e $x=500m$ após 1 dia?
c) Responder itens a e b para após 2 dias

4 – Condição não permanente
4.3 – Sistemas predominando a advecção e dispersão

$$\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \cancel{kC}$$

Substância conservativa → k = 0

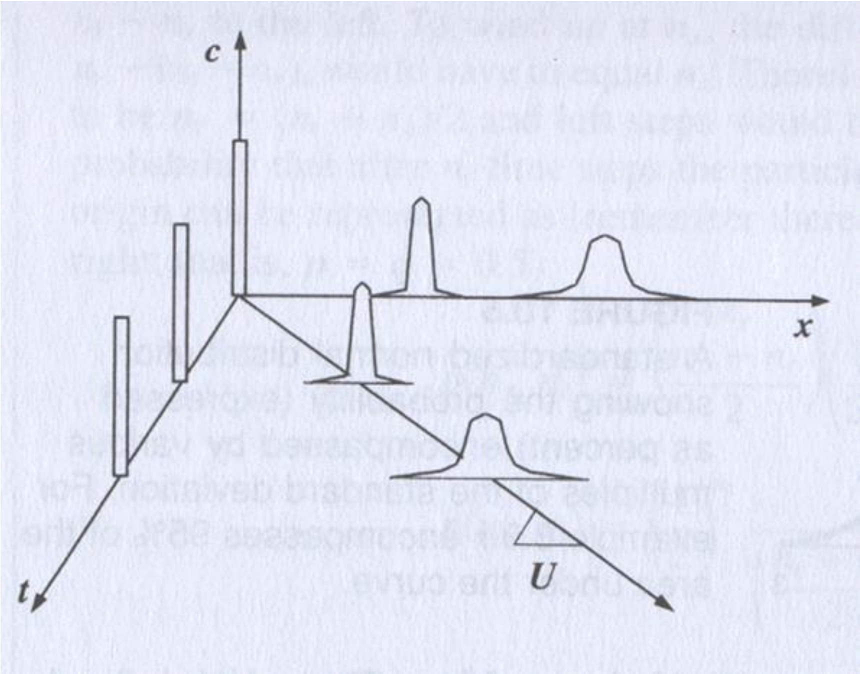
$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

Carga acidental em x=0:

$$C(x,t) = \frac{m_p}{2\sqrt{\pi D_x t}}\, e^{\frac{-(x-Ut)^2}{4D_x t}}$$

Carga acidental em x=0:

Se comparar com o item 4.2, nota-se que o efeito da advecção é “mover” a solução da dispersão intacta a jusante com velocidade U.



Predominando difusão:

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

Predominando advecção+difusão:

$$C(x,t) = \frac{m_p}{2\sqrt{\pi D_x t}} e^{\frac{-(x-Ut)^2}{4D_x t}}$$

Concentração de pico:
$e^0 = 1$

Exercício

Vazamento de 5 kg de substância conservativa.

Corpo de água: $Q = 2\ m^3/s$

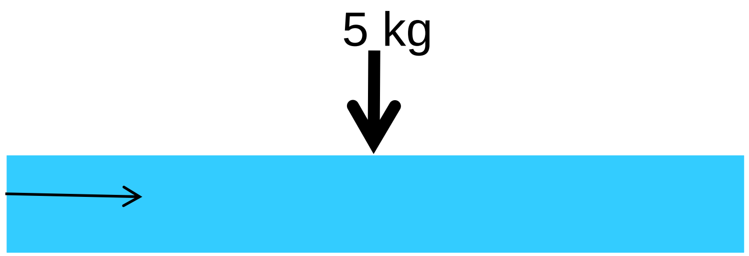
$A = 10\ m^2$

$D_x = 0,1\ m^2/s$

Considere que uma faixa de 95% aproxima adequadamente da extensão do vazamento.

Calcule extensão da pluma e concentração de pico para t=3h, 6h e 9h.

Faça esquema de C versus x com os valores encontrados.



4 – Condição não permanente
4.4 – Sistemas ocorrendo **advecção, dispersão e reações**

$$\frac{\partial C}{\partial t} \neq 0$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -U\frac{\partial C}{\partial x} + D_x\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC$$

Carga acidental em x=0:

$$C(x,t) = \frac{m_p}{2\sqrt{\pi D_x t}}\, e^{\frac{-(x-Ut)^2}{4D_x t} - kt}$$

Se comparar com o item 4.3, o efeito do decaimento reduz a área sob a curva ao mover para jusante.

Predominando difusão:

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

Predominando advecção+difusão:

$$C(x,t) = \frac{m_p}{2\sqrt{\pi D_x t}}\, e^{\frac{-(x-Ut)^2}{4D_x t}}$$

Exercício

Vazamento de 5 kg de substância não conservativa, $k = 0{,}1\ d^{-1}$

Corpo de água: $Q = 2\ m^3/s$

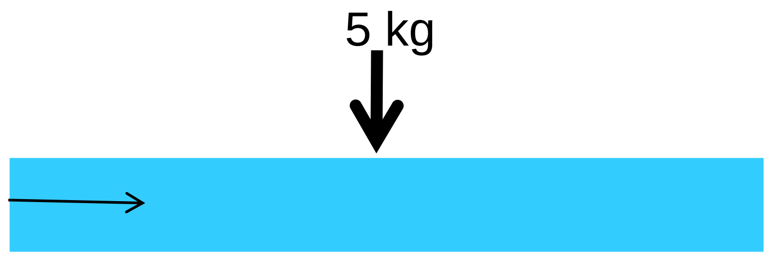
$A = 10\ m^2$

$D_x = 0{,}1\ m^2/s$

Considere que uma faixa de 95% aproxima adequadamente da extensão do vazamento.

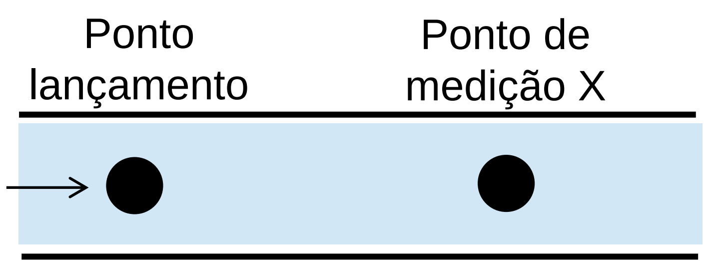
Calcule extensão da pluma e concentração de pico para t=3h, 6h e 9h.

Faça esquema de C versus x com os valores encontrados.



4.5 - Estudos com traçadores

Estimar certas características:
- Velocidade
- Coeficiente de dispersão
- Taxa de decaimento

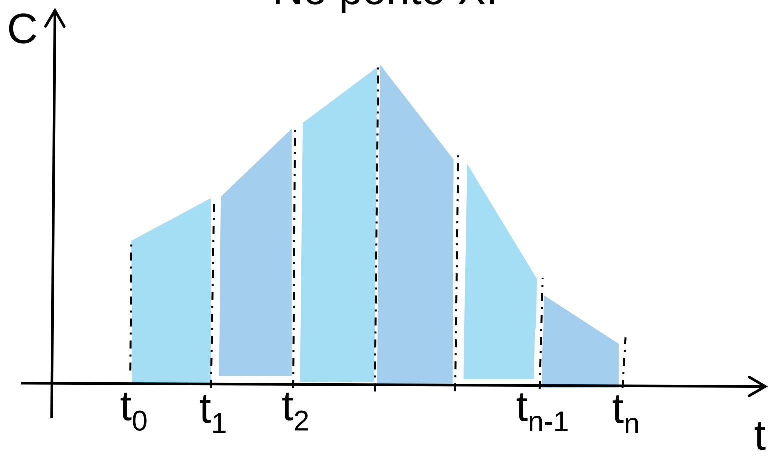


É feita análise discreta no tempo.

a) Concentração média

$$\overline{C} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1}(C_i + C_{i+1})(t_{i+1} - t_i)}{2(t_n - t_0)}$$

No ponto X:



b) Massa

$$M = Q\overline{C}(t_n - t_0)$$

c) Tempo de percurso

$$\bar{t} = \frac{\sum_{i=0}^{n-1}(C_i t_i + C_{i+1} t_{i+1})(t_{i+1} - t_i)}{\sum_{i=0}^{n-1}(C_i + C_{i+1})(t_{i+1} - t_i)}$$

d) Variância temporal

$$S_t^2 = \frac{\sum_{i=0}^{n-1}(C_i t_i^2 + C_{i+1} t_{i+1}^2)(t_{i+1} - t_i)}{\sum_{i=0}^{n-1}(C_i + C_{i+1})(t_{i+1} - t_i)} - (\bar{t})^2$$

e) Velocidade média

Se são conhecidos dados de 2 estações, localizadas em x1 e x2:

$$U = \frac{x_2 - x_1}{\bar{t}_{x2} - \bar{t}_{x1}}$$

f) Coeficiente de dispersão

Se são conhecidos dados de 2 estações, localizadas em x1 e x2:

$$E = \frac{U^2 (S^2_{t,x2} - S^2_{t,x1})}{2(\bar{t}_{x2} - \bar{t}_{x1})}$$

g) Coeficiente da taxa de reação de primeira ordem

Se são conhecidos dados de 2 estações, localizadas em x1 e x2:

$$k = \frac{1}{\bar{t}_{x2} - \bar{t}_{x1}} \ln \frac{M_{x1}}{M_{x2}}$$

Exercício

Um estudo com traçadores é conduzido para se determinar a velocidade no rio e o coeficiente de dispersão.

No tempo t=0 e x=0 foi injetado instantaneamente 5kg de uma substância conservativa. As concentrações medidas em dois pontos a jusante são:

x = 1 km

t(min)	60	80	100	120	140	160	180	200	220	240	260
C(µg/L)	0	2	24	78	108	89	52	23	9	3	0

x = 5 km

t(min)	550	600	650	700	750	800	850	900	950
C(µg/L)	0	7	26	47	43	23	8	2	0

5 – Fonte bibliográfica:

Chapra, S. 1997. *Surface water-quality modeling*. Boston: McGraw-Hill. 844p.