

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

**ESTUDO DA POLUIÇÃO DE RIOS POR DESCARGA DE EFLUENTES
LÍQUIDOS, UTILIZANDO O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS**

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA À UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA
CATARINA PARA OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM ENGENHARIA
QUÍMICA

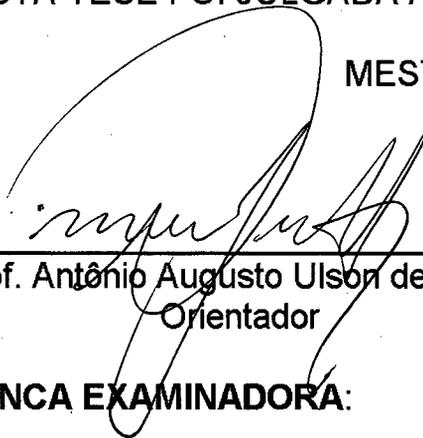
SANDRA HELENA WESTRUPP MEDEIROS

FLORIANÓPOLIS, AGOSTO DE 1995.

**ESTUDO DA POLUIÇÃO DE RIOS POR DESCARGA DE EFLUENTES
LÍQUIDOS, UTILIZANDO O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS**

SANDRA HELENA WESTRUPP MEDEIROS

**ESTA TESE FOI JULGADA ADEQUADA PARA OBTENÇÃO DO TÍTULO DE
MESTRE EM ENGENHARIA**

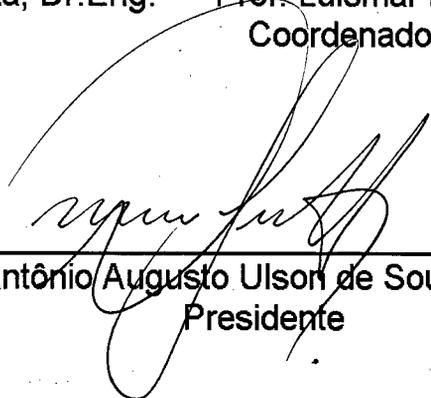


Prof. Antônio Augusto Ulson de Souza, Dr.Eng.
Orientador



Prof. Luismar M. Porto, Ph.D.
Coordenador de Curso

BANCA EXAMINADORA:



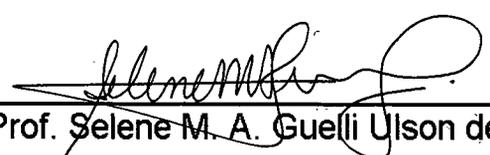
Prof. Antônio Augusto Ulson de Souza, Dr.Eng.
Presidente



Prof. João Alexandre F. R. Pereira, Ph.D.



Prof. Agenor Furigo Júnior, D.Sc.



Prof. Selene M. A. Guelli Ulson de Souza, Dr.Eng.

É SEMPRE BOM LEMBRAR

É sempre bom lembrar que há progressos que somente se alcançam quando voltamos atrás. Que há avanços que somente se conseguem quando retrocedemos, que há vitórias que unicamente se obtém quando nos derrotamos; que as grandes dores são mudas, mas aquelas que mais nitidamente ouvimos; que não pode haver maior “SIM” do que o “NÃO” ao “NÃO”; que adiar o bem pode antecipar o mal; que os dedos fora da mão, não apertam nem acariciam; que o menos importante do que o professor faz é só ensinar, que o menos importante que o aluno faz é aprender...

É sempre bom lembrar que nem sempre só é aquele que está sozinho, pois é realmente só aquele que é ninguém entre alguém...

É sempre bom lembrar que a vida é para sempre um dia; que os sábios não são obrigatoriamente os que mais sabem e que os ignorantes nem sempre são aqueles que desconhecem; que o castigo pode educar e corrigir, mas o perdão recupera; que não morre quem realmente viveu, que não desaparece de todo quem realmente “foi” e “existiu”...

É sempre bom lembrar que a contabilidade da verdadeira vida não é de números nem de sinais, mas de gestos e de pensamentos...

AGRADECIMENTOS

- Ao meu marido, Luiz Carlos R. Medeiros, pelo incentivo e compreensão.
- Ao Professor Antônio Augusto Ulson de Souza, pela orientação e conhecimentos transmitidos.
- Aos Professores Antônio Augusto Ulson de Souza e Selene M. A. Guelli Ulson de Souza, pelo apoio e amizade.
- Aos Professores do Curso de Pós-Graduação, pelos conhecimentos transmitidos.
- Ao Sr. Edevilson, secretário da Coordenadoria de Pós-Graduação, pelo apoio e solicitude durante a realização deste trabalho.
- Ao pessoal do SINMEC, pela colaboração na realização deste trabalho.
- Aos colegas do LABSIN, pela amizade e colaboração durante o desenvolvimento desta dissertação.
- Ao CNPq pelo apoio financeiro.
- Aos meus familiares, pelo incentivo e amizade.
- E a todos aqueles que, das mais variadas formas, colaboraram na realização deste trabalho.

ÍNDICE GERAL

LISTA DE TABELAS	vii
LISTA DE FIGURAS	viii
SIMBOLOGIA	xiii
RESUMO	xviii
ABSTRACT	xix
CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	1
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	8
2.1 O Método de Volumes Finitos	8
2.2 Poluição Ambiental por Descargas de Efluentes Líquidos	18
CAPÍTULO 3 - PROCEDIMENTO DE SOLUÇÃO	25
3.1 Equações Governantes	25
3.2 Transformação das Equações	30
3.3 Discretização das Equações Governantes	36
3.4 Tratamento do Acoplamento Pressão-Velocidade	46

3.5 Avaliação dos Fluxos Mássicos	55
3.6 Condições de Contorno	58
3.7 Especificação das Propriedades Físicas	63
3.8 Determinação da Taxa de Reação Microbiológica	65
3.9 Detalhes Numéricos	68
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS	69
4.1 Descrição do Problema da Descarga de Efluente Líquido em um Rio	69
4.2 Resultados Obtidos para os Casos 1, 2, 3 e 4	75
4.3 Resultados Obtidos para os Casos 5 e 6	83
4.4 Resultados Otidos para os Casos 7, 8, 9 e 10	89
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES	95
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	99

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 - Definição dos valores de ϕ , Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ para cada uma das equações governantes do problema	29
TABELA 2 - Expressões correspondentes para \hat{P}^ϕ e \hat{S}^ϕ	33
TABELA 3 - Valores correspondentes para o fator de associação do solvente .	64
TABELA 4 - Incrementos de volume para o cálculo do volume molar	66
TABELA 5 - Especificação dos casos estudados neste trabalho	74

LISTA DE FIGURAS

FIGURA 1 - Algoritmo esquemático da metodologia empregada para a solução do sistema de equações governantes do problema.....	10
FIGURA 2 - Arranjo de variáveis desencontradas	12
FIGURA 3 - Arranjo de variáveis co-localizadas	13
FIGURA 4 - Ilustração do esquema de interpolação “skew upwind”	16
FIGURA 5 - Representação do volume de controle no plano ξ - η	37
FIGURA 6 - Pontos da malha computacional envolvidos no cálculo do fluxo de massa na face leste do volume de controle	57
FIGURA 7 - Uso de volumes fictícios para a concentração e componentes cartesianas da velocidade	59

FIGURA 8 - Extrapolação linear para a pressão na fronteira leste	62
FIGURA 9a - Esquema do domínio físico com as condições de contorno	71
FIGURA 9b - Esquema do domínio físico com os parâmetros geométricos adotados	72
FIGURA 10 - Malha computacional 30x10	73
FIGURA 11 - Perfil da componente do vetor velocidade adimensionalizada, u/u_{in} , com $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 1	76
FIGURA 12 - Linhas de corrente do escoamento, para o Caso 1	77
FIGURA 13 - Linhas de corrente do escoamento, para o Caso 6, com a presença de uma região de recirculação, após a entrada de efluente	77
FIGURA 14 - Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 1	78
FIGURA 15 - Linhas de concentração referentes ao Caso 1	78

FIGURA 16 - Perfil de concentração do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =320m ³ /h, Caso 2	79
FIGURA 17 - Perfil de concentração do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =480m ³ /h, Caso3	80
FIGURA 18 - Perfil de concentração do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =800m ³ /h, Caso 4	81
FIGURA 19 - Perfil de vazão mássica do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =160m ³ /h, Caso 1	82
FIGURA 20 - Perfil de vazão mássica do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =320m ³ /h, Caso 2	83
FIGURA 21 - Perfil de vazão mássica do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =480m ³ /h, Caso 3	84
FIGURA 22 - Perfil de vazão mássica do poluente para L=100m, H=5m, Q ₁ =16.000m ³ /h e Q ₂ =800m ³ /h, Caso 4	85

- FIGURA 23 - Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H^*=50\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 5 86
- FIGURA 24 - Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H^*=50\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 5 - ampliação de escala ... 87
- FIGURA 25 - Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H^*=50\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=320\text{m}^3/\text{h}$, Caso 6 88
- FIGURA 26 - Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H^*=50\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=320\text{m}^3/\text{h}$, Caso 6 - ampliação de escala ... 89
- FIGURA 27 - Perfil de vazão mássica do poluente para $L^*=600\text{m}$, $H=5\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 7..... 90
- FIGURA 28 - Perfil de vazão mássica do poluente para $L^*=600\text{m}$, $H=5\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=800\text{m}^3/\text{h}$, Caso 8 91
- FIGURA 29 - Perfil de vazão mássica do poluente para $L^{**}=1000\text{m}$, $H=5\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 9 92

FIGURA 30 - Perfil de vazão mássica do poluente para $L^{**}=1000\text{m}$, $H=5\text{m}$,

$Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=800\text{m}^3/\text{h}$, Caso 10 93

SIMBOLOGIA

a_i - coeficientes da equação discretizada, onde $i=P, E, W, N, S$, etc.

B_P^ϕ - termo fonte da equação discretizada

B_x - termo fonte da equação de Navier-Stokes, na direção x

B_y - termo fonte da equação de Navier-Stokes, na direção y

C_1 - variável definida pela equação (19)

C_2 - variável definida pela equação (20)

C_3 - variável definida pela equação (21)

D_{AB} - difusividade mássica, $[L^2/t]$

D_1 - variável definida pela equação (56)

D_2 - variável definida pela equação (57)

D_3 - variável definida pela equação (58)

D_4 - variável definida pela equação (59)

d_P^ϕ - variável definida pela equação (71)

H, H^* - larguras admitidas do rio $[L]$

J - jacobiano da transformação

K_s - constante de saturação $[M/L^3]$

K_i - constante de inibição pelo substrato $[M/L^3]$

K_P - constante de inibição pelo produto $[M/L^3]$

$L[\]$ - aproximação numérica da expressão no interior do colchete

L, L^*, L^{**} - comprimentos admitidos do rio, $[L]$

\dot{M} - vazão mássica do fluido, $[M/t]$

M_B - peso molecular

\vec{n} - coordenada ao longo da direção normal à face do volume de controle, $[L]$

P - pressão nas equações de Navier-Stokes, $[M/(Lt^2)]$

P^ϕ - representa o gradiente de pressão na equação (15), $[M/(L^2 t^2)]$

\hat{P}^ϕ - variável definida na TABELA 2, $[M/(L^2 t^2)]$

P_e - número de Peclet

Q_1 - vazão de escoamento do rio, $[L^3/t]$

Q_2 - vazão de escoamento do efluente, $[L^3/t]$

r_A''' - taxa de reação bioquímica, por unidade de volume, definida pela equação(105)

S - concentração do substrato, $[M/L^3]$

S^ϕ - termo fonte das equações de Navier-Stokes, $[M_\phi/(L^3 t)]$

\hat{S}^ϕ - variável definida na TABELA 2, $[M_\phi/(L^3 t)]$

t - tempo, $[t]$

T - temperatura absoluta, $[\theta]$

u - componente da velocidade , na direção x , no sistema cartesiano, $[L/t]$

U - componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, $[L/t]$

- v - componente da velocidade, na direção y , no sistema cartesiano, [L/t]
- v_X - velocidade de crescimento microbiano definida pela equação (05)
- v_S - velocidade de consumo de substrato definida pela equação (09)
- v_P - velocidade de formação de produto definida pela equação (10)
- V - componente contravariante da velocidade, sem normalização métrica, [L/t]
- V_A - volume molar, [L³/M]
- x - coordenada do sistema cartesiano, [L]
- y - coordenada do sistema cartesiano, [L]
- w_A - fração mássica do poluente
- $Y_{X/S}$ - fator de conversão da biomassa
- $Y_{P/X}$ - fator de conversão do produto

LETRAS GREGAS

- α - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (22)
- β - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (23)
- γ - componente do tensor métrico da transformação, dada pela equação (24)
- $\bar{\alpha}$ - coeficiente dado pela equação (43)
- $\bar{\beta}$ - coeficiente dado pela equação (44)

Γ^ϕ - difusividade relativa à variável ϕ multiplicada pela massa específica do fluido

η - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]

μ - viscosidade dinâmica do fluido, [M/(Lt)]

μ - velocidade específica de crescimento definida pela equação (06)

μ_m - velocidade específica de crescimento máximo, dada pela equação (06)

ξ - coordenada do sistema generalizado, no plano transformado, [L]

ρ - massa específica do fluido, [M/t³]

ϕ - campo escalar geral

φ - fator de associação do solvente

ÍNDICES SUPERIORES

' - correção da variável

* - estimativa da variável

⁰ - valores da iteração prévia

P - valores relativos à equação da pressão

u - valores relativos à equação de conservação de quantidade de movimento na direção x

v - valores relativos à equação de conservação de quantidade de movimento na direção y

ÍNDICES INFERIORES

- e,n,s,w,se,sw,ne,nw - valores relativos às faces leste, norte, sul, oeste, sudeste, sudoeste, nordeste, noroeste, respectivamente, do volume de controle centrado em P
- E,N,S,W,SE,SW,NE,NW - valores relativos aos volumes de controle vizinhos ao volume de controle centrado em P
- nb - pontos vizinhos ao ponto P, como E,W,S,N,etc.

RESUMO

O presente trabalho apresenta a simulação da descarga de efluentes líquidos em um rio, através da solução numérica das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química, com a presença da taxa de reação bioquímica.

As equações governantes do problema, transformadas para o sistema de coordenadas generalizadas, são resolvidas utilizando-se o método de Volumes Finitos, com a adoção do arranjo de variáveis co-localizadas.

Os perfis de velocidade, concentração e vazão mássica foram obtidos para o problema bidimensional, isotérmico, em regime permanente. A taxa de reação bioquímica foi obtida baseando-se nos dados da DBO do efluente estudado, considerando-se uma reação de primeira ordem.

Foram estudados diversos casos, variando-se a velocidade do escoamento do rio, a vazão de efluente e o comprimento do rio. Para alguns casos estudados, foi verificada uma maior decomposição do poluente devido à ação da taxa de reação microbiológica, diminuindo o efeito da descarga poluidora, restaurando a qualidade da água do rio. Neste trabalho, o estudo do impacto ambiental de efluentes industriais foi realizado através da solução das equações fundamentais, sendo que muitas contribuições futuras ainda podem ser feitas no tratamento deste problema pelo relaxamento das hipóteses realizadas.

ABSTRACT

The present work shows the simulation of liquid effluents discharge on a stream, by the numerical solution of mass conservation, momentum conservation and chemical species conservation equations, with the presence of biochemical reaction rate.

The governing equations of problem, transformed to the generalized coordinates system, are solved using the Volume Finite method, with the adoption of arrangement of the co-located variables.

The profiles of velocity, concentration and mass flow were obtained for the two-dimensional, isothermal and steady-state problem. The rate of biochemical reaction was obtained from DBO data of the studied effluent, considering a first-order reaction.

Several cases were studied, by changing the velocity of stream flow, effluent flow and the length of the stream. For some studied cases, it was found out a higher decomposition of the effluent due to the action of microbiology reaction rate, reducing the effect of the pollutant discharge, restoring the quality of the stream water. In this work, the study of environmental impact was done by the solution of fundamental equations, and a lot of very further contributions can still be made in the treatment of this problem by the slackness of the assumptions done.

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A ação indiscriminada do homem sobre o meio ambiente, nas últimas décadas, tem gerado um dos mais graves problemas da atualidade: a poluição ambiental, a qual compreende a diminuição da qualidade do ar, água e solo.

Dentre essas modalidades, a poluição dos recursos de água doce é um dos mais sérios. Considerando-se que, de toda a água do planeta, apenas quatro milésimos estão disponíveis para consumo, evidencia-se claramente a gravidade do problema. Por isso, a necessidade de controlar e eliminar a poluição visa não somente a proteção do meio ambiente mas, fundamentalmente, a proteção e manutenção da qualidade de vida do ser humano.

A poluição dos mananciais hídricos, como rios e lagos, tem sua origem baseada, principalmente, na descarga de resíduos poluentes gerados nos processos industriais e nos esgotos domésticos. Estes, por sua vez, advêm do crescimento industrial e da concentração desordenada da população nos

grandes centros urbanos. Pode-se citar, ainda, como uma outra grande fonte geradora de problemas ao meio ambiente aquático a descarga térmica, uma vez que o aumento de temperatura do meio diminui a solubilidade do oxigênio presente, ao mesmo tempo em que multiplica a atividade bioquímica do mesmo, podendo levar à morte muitos organismos vivos presentes no meio, dependendo da temperatura da água residual lançada no ambiente aquático.

Uma descrição resumida de uma corrente de água poluída consiste em dizer que ela possui um elevado teor de matéria orgânica, que se deposita no fundo sob forma de lama anaeróbica, tornando a vida animal ou vegetal praticamente inexistente.

Cada rio possui uma capacidade própria de auto-purificação, termo definido pela restauração, via processos naturais, da qualidade da água após a descarga de matéria poluente. Desta forma, mesmo um rio muito poluído, a ponto de ter se tornado estéril, poderia se purificar naturalmente, depois de percorrer uma longa distância. Contudo, em muitos casos, novos despejos de efluentes são feitos no rio, abaixo do foco original de poluição, adicionando mais carga poluidora, antes que a primeira seja removida, de modo que o mesmo permanece estéril, até que, finalmente, suas águas entrem no oceano e sejam diluídas.

Esta realidade se torna ainda mais dura quando se depara com os altos custos financeiros necessários ao controle e combate da poluição, na maioria das vezes impraticável para nações menos desenvolvidas

economicamente, tornando o tratamento preventivo da poluição o caminho mais econômico e, acima de tudo, o mais racional.

Visando trazer uma contribuição neste contexto, a abordagem do problema da descarga de poluentes foi feita através das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química sendo, no presente trabalho, desenvolvido um procedimento numérico, a fim de se conhecer os campos de velocidade e concentração ao longo do comprimento do rio e determinar a distância, após o ponto de descarga do poluente, onde a concentração do mesmo estaria em conformidade com os índices permissíveis apresentados pela legislação em vigor.

Uma grande dificuldade a ser considerada no estudo de descargas de poluentes industriais é o grande número de componentes químicos contidos nos mesmos e que variam ainda com o tipo de processo industrial utilizado. A modelagem matemática do processo é extremamente complexa, considerando que se trata de um problema de transferência de massa multicomponente envolvendo a solução simultânea das equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química para cada um dos componentes e, considerando-se ainda o termo de reação microbiológica, muitos outros fatores inerentes à cinética da reação estariam envolvidos, aumentando ainda mais o número de equações, como por exemplo, a equação da taxa de crescimento microbiano. Será admitido, neste trabalho, que a poluição é causada pelo despejo de uma única fonte de matéria orgânica, composta por uma solução contendo um único poluente proveniente de efluente da industrial têxtil. Maiores

detalhes sobre os processos industriais, e características dos efluentes por eles gerados, podem ser encontrados em Klein [17], Longo [21] e Gray [11].

Para se determinar a carga poluidora de resíduos industriais e domésticos, um dos parâmetros mais utilizados é a demanda bioquímica de oxigênio, DBO. A DBO é definida como a quantidade de oxigênio requerida para a decomposição da matéria orgânica sob condições aeróbicas. O teste da DBO é um dos mais importantes nas atividades de controle da poluição dos rios, principalmente em relação aos estudos com vistas a avaliar a capacidade de purificação de corpos receptores de água. Um maior entendimento e a metodologia do teste da DBO podem ser encontrados em Klein [16], Sawyer e McCarty [42], Gray [11], Nemerow [27], entre outros. E é baseado no valor da DBO do efluente em estudo, que se determinou a constante da taxa de reação microbiológica, considerada, neste trabalho, como uma reação de primeira ordem.

A modelagem do fenômeno físico, considerando-se escoamento laminar, bidimensional, incompressível, isotérmico e em estado estacionário, consiste em se resolver um sistema de equações diferenciais parciais não lineares, acopladas entre si, sendo que este sistema é aqui representado pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química, com a presença da taxa de reação bioquímica, calculada como mencionada no parágrafo anterior.

Para a solução do conjunto de equações acima citado, há a necessidade de se utilizar métodos numéricos, através dos quais as equações

diferenciais são discretizadas, gerando um sistema de equações algébricas. Estas, entretanto, ainda mantêm as não linearidades e o forte acoplamento existente entre as equações diferenciais originais através dos coeficientes, que dependem da solução do problema.

Dentre os diversos métodos numéricos existentes, os mais utilizados são o método de diferenças finitas [30,41], o clássico método de elementos finitos de Galerkin [5,29,48] e o método de volumes finitos [22,30,41]. Estes métodos, como a maioria dos demais, têm sua origem no método dos resíduos ponderados, e diferem entre si somente na escolha da função peso.

Optou-se, neste trabalho, pelo emprego do método de volumes finitos, pois as equações discretas obtidas pelo mesmo satisfazem o balanço global de conservação. É a garantia de que os princípios de conservação das grandezas físicas serão preservadas, tanto a nível elementar como global, que torna este método atrativo.

Duas outras questões devem ser consideradas, antes que o sistema de equações seja discretizado. A primeira diz respeito ao sistema de coordenadas a ser empregado. No presente trabalho, foi escolhido o sistema de coordenadas generalizadas, cujas linhas se adaptam às fronteiras do domínio físico, facilitando a aplicação das condições de contorno. A segunda questão trata da disposição das variáveis na malha computacional. Neste caso, a opção foi pelo uso do arranjo de variáveis co-localizadas, no qual todas as propriedades são dispostas em um mesmo volume de controle elementar de

integração. Outras alternativas de localização das variáveis na malha podem ser encontradas em Maliska [22], Silva [46] e Ulson de Souza [53].

Após essas considerações, o método de volumes finitos é aplicado, obtendo-se, então, as equações discretizadas. Uma vez discretizadas, deve-se resolver os problemas devido à falta de uma metodologia para a avaliação das variáveis nas faces dos volumes de controle e ao forte acoplamento entre a pressão e a velocidade, a fim de se obter o sistema de equações algébricas, através do qual se obtém os resultados do problema em estudo.

A seguir, é apresentado um resumo dos capítulos que formam a presente dissertação.

CAPÍTULO 2 - Revisão Bibliográfica - Neste capítulo, uma discussão a respeito dos métodos numéricos existentes, das alternativas de disposição das variáveis na malha e das funções de interpolação, é realizada, evidenciando-se as vantagens e desvantagens dos mesmos. Além disso, é apresentada discussão de alguns trabalhos realizados na área de modelagem da poluição ambiental por descarga de efluentes líquidos.

CAPÍTULO 3 - Procedimento de Solução - Este capítulo apresenta as equações de conservação governantes do fenômeno físico em estudo, no sistema de coordenadas cartesianas e sua transformação para o sistema de coordenadas generalizadas. Também é descrita, nesta seção, toda a

metodologia numérica empregada para a obtenção das equações governantes discretizadas até a solução do sistema de equações algébricas lineares resultante. São discutidas, ainda, as condições de contorno para a pressão, concentração e componentes cartesianas da velocidade.

CAPÍTULO 4 - Resultados - É apresentada, neste capítulo, a geometria do problema físico, com a descrição das condições iniciais e de contorno prescritas para o mesmo, os resultados obtidos com a utilização da formulação proposta e a conseqüente análise desses resultados.

CAPÍTULO 5 - Conclusões e Sugestões - Este capítulo trata das principais conclusões obtidas pela análise dos resultados, assim como, são apresentadas sugestões para o desenvolvimento de trabalhos futuros relacionados com o assunto em estudo.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1 O Método de Volumes Finitos

É realizada, nesta seção, uma discussão mais detalhada sobre alguns aspectos da metodologia numérica empregada para a solução do sistema de equações diferenciais parciais que governam o problema em estudo, a qual já foi delineada no capítulo anterior. Um algoritmo esquemático dessa metodologia pode ser visto na FIGURA 1.

Um aspecto importante que deve ser considerado ao se desenvolver um esquema numérico que utiliza coordenadas generalizadas é o tipo de malha a ser empregada. A solução numérica de um dado problema envolve, basicamente, dois algoritmos principais: um para a geração da malha computacional e outro para a solução do problema físico propriamente dito, sendo que estes algoritmos podem ser completamente independentes entre si, no caso de malhas fixas, ou interdependentes, no caso das malhas adaptativas.

Uma discussão mais detalhada sobre o algoritmo para geração do sistema de coordenadas pode ser visto em Maliska [23], Maliska [24], Thompsom et al. [50].

Com relação às malhas fixas, estas podem ser divididas em estruturadas e não estruturadas. As malhas não estruturadas são aquelas cujos pontos discretos não seguem nenhuma regra de formação, sendo que a vantagem do seu uso está na facilidade de concentração dos pontos onde desejado. Esta malha é típica do método de elementos finitos. No caso de malhas estruturadas, seus pontos discretos seguem uma regra de formação, o que confere, como vantagem, a conexão entre os pontos estabelecidos facilitando, em muito, a implementação computacional. Esta última é mais adequada para esquemas iterativos de solução dos sistemas lineares sendo, portanto, empregada neste trabalho.

Entretanto, no caso onde a solução do problema que se deseja resolver apresenta altos gradientes das variáveis envolvidas, o uso de malhas fixas só é apropriado se forem conhecidas, a princípio, as regiões de altos gradientes. Quando essas regiões não forem conhecidas, uma alternativa atraente é fazer uso de malhas adaptativas, as quais podem mudar ao longo da obtenção da solução do problema, permitindo a concentração das linhas da malha nas regiões de gradientes elevados ou em outros locais de interesse. As principais vantagens trazidas pelo uso de malhas adaptativas são a melhoria na precisão da solução e a estabilidade de convergência.

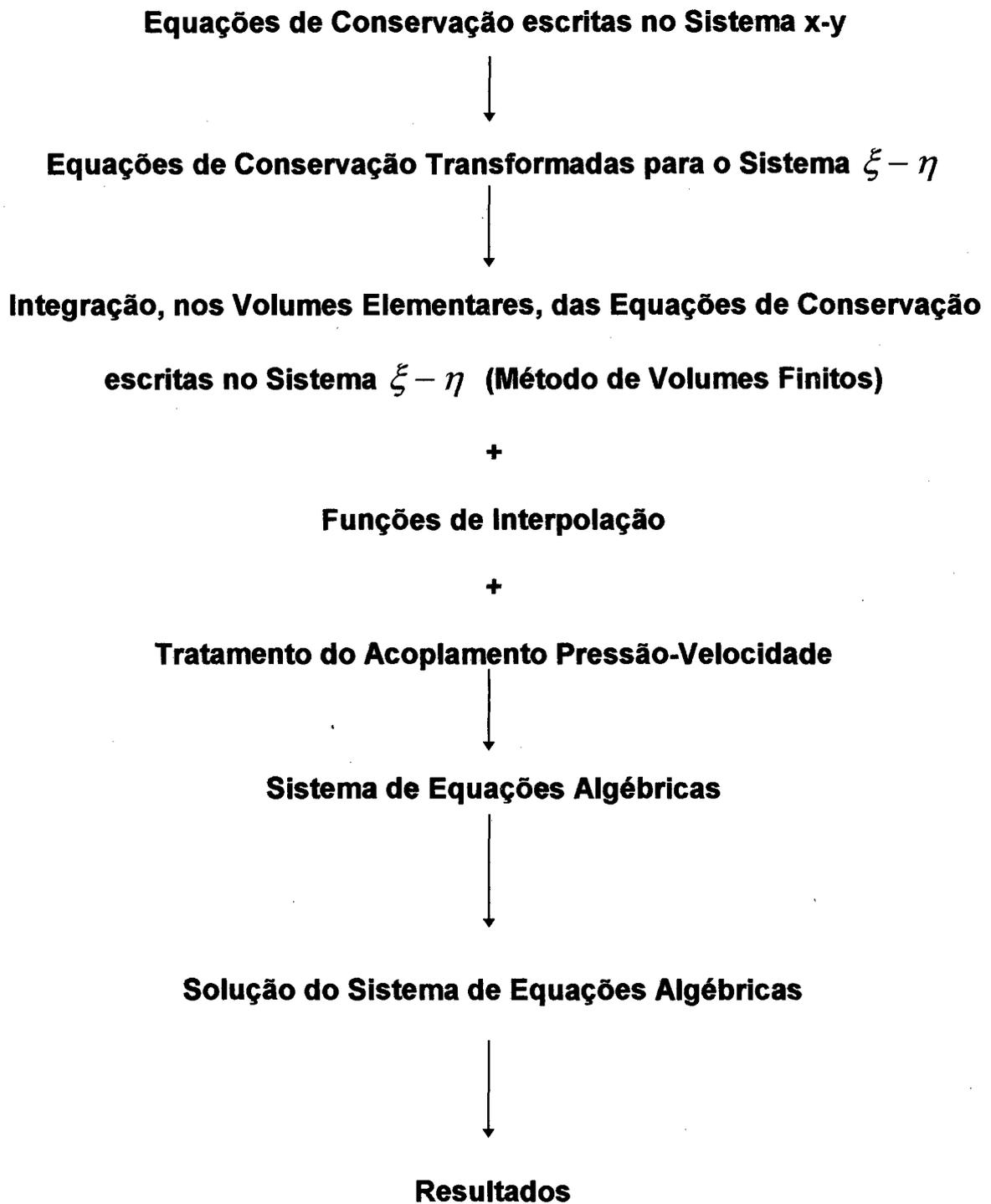


FIGURA 1. Algoritmo esquemático da metodologia empregada para a solução do sistema de equações governantes do problema.

No processo de adaptação da malha utiliza-se, em geral, a medida dos gradientes das variáveis na determinação da nova posição dos pontos coordenados. Portanto, deve-se tomar cuidado a fim de assegurar que todas as regiões de interesse sejam contempladas com um número suficiente de pontos, que a distribuição dos mesmos não gere malhas excessivamente distorcidas, e que a razão de variação do espaçamento entre as linhas não seja muito elevada.

O estudo de malhas adaptativas, juntamente com a geração de malhas bidimensionais associado ao uso de coordenadas generalizadas é, atualmente, um dos assuntos mais pesquisados, podendo-se citar como referências os trabalhos de Ghia et al. [9] e Ulson de Souza [52].

Uma vez definido o tipo de malha e o sistema de coordenadas a ser empregado, parte-se para a obtenção das equações aproximadas, utilizando-se o Método de Volumes Finitos. Um dos aspectos fundamentais para se garantir a estabilidade do método numérico diz respeito à disposição das variáveis na malha computacional.

Uma das formas de armazenamento das variáveis na malha, ilustrada pela FIGURA 2, é o arranjo desencontrado de variáveis. Este arranjo é o ideal para malhas ortogonais, como é o caso do sistema cartesiano, e promove o adequado acoplamento entre a pressão e a velocidade. Contudo, este arranjo apresenta como desvantagens a presença de uma complexidade adicional do ponto de vista de programação computacional, devido ao complexo controle de índice das variáveis, e o requerimento de maior memória computacional, uma

vez que os balanços de conservação devem ser feitos para volumes diferentes, ocasionando coeficientes diferentes para cada variável.

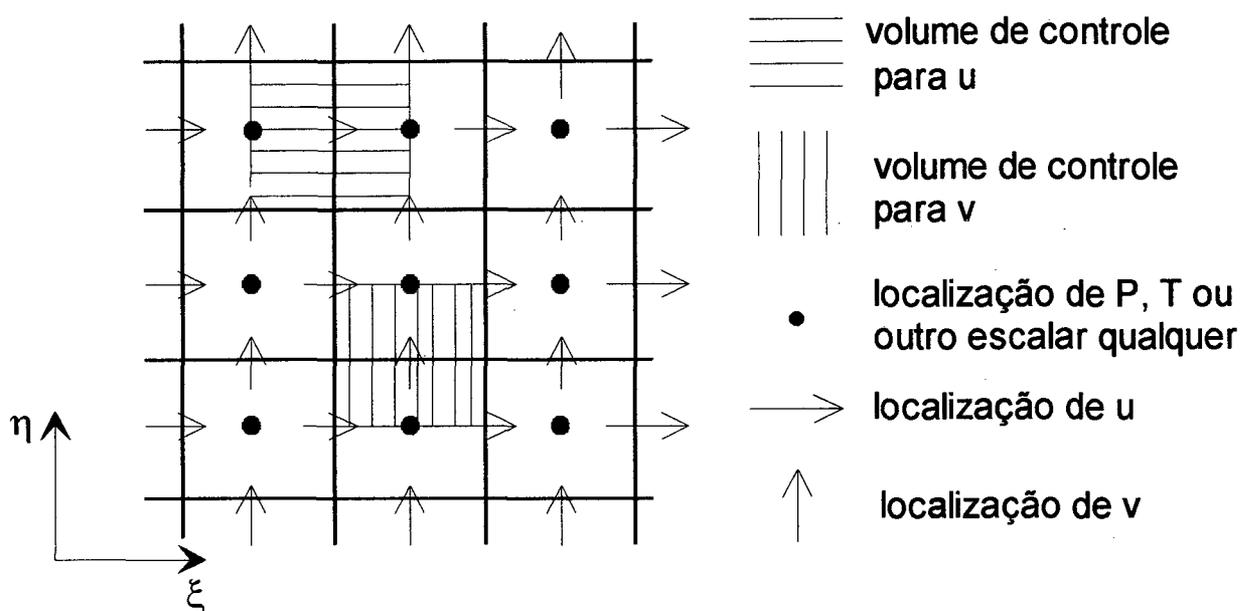


FIGURA 2. Arranjo de variáveis desencontradas.

Outra maneira de se dispôr as variáveis na malha é através de um arranjo co-localizado, como pode ser visto na FIGURA 3, onde todas as variáveis são localizadas no mesmo ponto do volume de controle. Esta forma de armazenamento evita a complexidade computacional prevista no arranjo anterior. Como já comentado, este arranjo é empregado nesta dissertação.

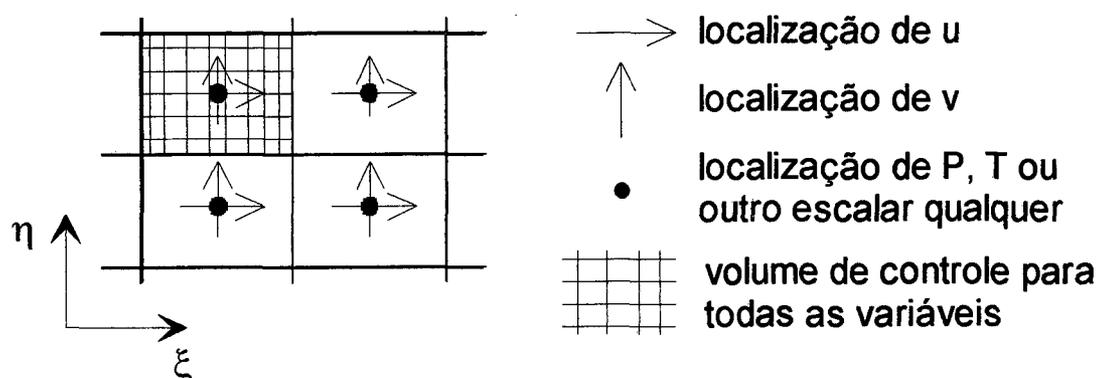


FIGURA 3. Arranjo de variáveis co-localizadas.

Outro aspecto relevante na obtenção das equações aproximadas é a necessidade de se especificar os valores das variáveis dependentes e de suas derivadas nas interfaces do volume de controle, uma vez que os mesmos são conhecidos nos centros dos volumes elementares. Esta especificação é realizada através da utilização de funções de interpolação, que nada mais são do que esquemas de aproximação. A qualidade da função de interpolação escolhida é determinante na obtenção de resultados numéricos precisos e, para tanto, é importante que ela tenha a capacidade de reproduzir todas as influências do fenômeno físico na avaliação das variáveis nas faces do volume de controle.

Os primeiros esquemas de interpolação baseavam-se em aproximações das derivadas espaciais das equações diferenciais por diferenças finitas. Tal esquema, denominado CDS, mostrou-se satisfatório somente em problemas de difusão pura ou para aqueles cujos números de Reynolds ou

Peclet eram baixos, pois do contrário, observam-se problemas de convergência devido à presença de coeficientes negativos.

Para superar este problema, surgiram os esquemas “upwind” (UDS), que utilizam informações somente a montante, gerando coeficientes positivos na equação discretizada e soluções livres de oscilações. Contudo, este método se mostrou ainda bastante impreciso, causando problemas de difusão numérica por não prever muitas informações relativas ao problema em questão, entre as quais a existência de termo fonte, a inclinação do vetor velocidade relativamente à malha, entre outras.

Com o objetivo de agrupar as vantagens dos esquemas CDS e UDS, melhorias foram introduzidas nestes esquemas, dando surgimento ao esquema híbrido, proposto por Spalding [47]. Baseado neste último, Raithby e Torrance [38] propuseram o esquema exponencial, bem como, Patankar [30] desenvolveu o esquema “power-law”. Contudo, ao se considerar a definição desses métodos, percebe-se que os problemas de difusão numérica ainda persistiram, estando relacionados ao fato do vetor velocidade não estar alinhado com a malha e pelo uso de aproximações unidimensionais em problemas multidimensionais.

Raithby [37] propôs, então, o esquema “skew upwind” (SUDS), onde considera a inclinação do vetor velocidade relativamente às linhas da malha, reduzindo substancialmente a falsa difusão. Através desse esquema, o valor de uma variável escalar ϕ qualquer na face w , conforme pode ser visto na FIGURA 4, é obtido fazendo-se o traçado do vetor velocidade para trás até sua

O método de interpolação utilizado neste trabalho é o WUDS, "Weighted Upstream Differencing Scheme" [36], cujas aproximações são originárias da solução do problema unidimensional de convecção/difusão, sendo um método largamente empregado.

Um outro problema a ser solucionado para que se obtenha a solução do conjunto de equações discretizadas é o do acoplamento pressão-velocidade.

Para uma compreensão melhor dessa questão, considere o problema em estudo, ou seja, o escoamento bidimensional com transferência de massa. Existem, portanto, quatro equações a serem resolvidas: a de conservação da massa, uma equação de conservação da quantidade de movimento para cada uma das duas direções e a equação de conservação da espécie química, mas com cinco incógnitas presentes, quais sejam: a massa específica (ρ), a pressão, a concentração e as duas componentes do vetor velocidade.

Se a massa específica varia consideravelmente no domínio, utiliza-se, então, a equação de estado para o cálculo da pressão, enquanto que ρ é calculada através da equação de conservação da massa, encerrando-se o problema.

Se, no entanto, ρ for constante ou somente função da temperatura, parece lógico que a equação de estado seja usada para o seu cálculo, introduzindo, como dificuldade, a falta de uma equação para o cálculo da pressão, pois a equação de conservação da massa passa a ser apenas uma restrição que deve ser obedecida pelo campo de velocidades. Surge, assim, o

implementação. Entretanto, apresenta a inconveniência de ser uma metodologia sem embasamento físico.

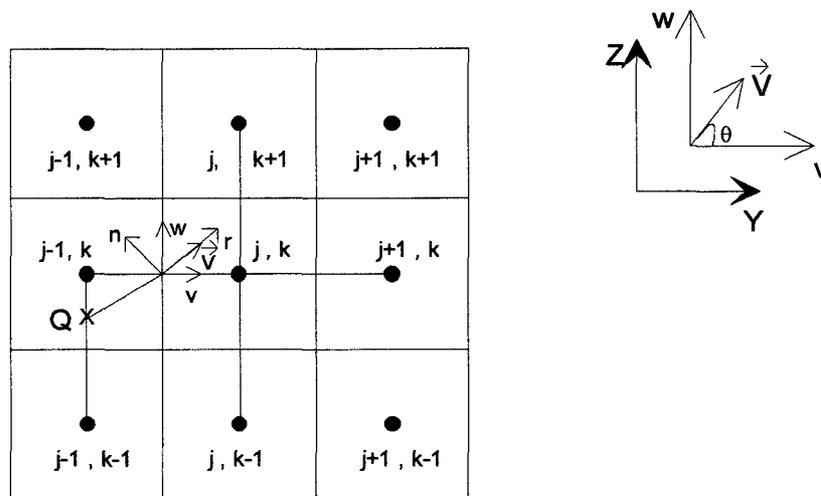


FIGURA 4. Ilustração do esquema de interpolação "skew upwind".

Além das apresentadas, existem diversas alternativas de funções de interpolação, as quais podem ser encontradas em Lillington [20], Huget [13], Ulson de Souza [51], Nieckele [28], Peric et al. [35], Raw [39], Ulson de Souza [53], entre outros, cujos objetivos são sempre o de minimizar os problemas de difusão numérica e instabilidade do método numérico empregado.

intersecção com a linha a montante dos nós, ponto Q. Dependendo do ângulo θ do escoamento, o valor de ϕ na face w será aproximado levando-se em consideração os seis nós vizinhos, ou seja,

$$\phi_w = f(\phi_{j,k}, \phi_{j,k+1}, \phi_{j,k-1}, \phi_{j-1,k}, \phi_{j-1,k-1}, \phi_{j-1,k+1}) \quad (1)$$

enquanto que em esquemas “upwind” convencionais

$$\phi_w = f(\phi_{j,k}, \phi_{j-1,k}) \quad (2)$$

Esta formulação, contudo, pode apresentar coeficientes com valores negativos, ocasionando oscilações espaciais, também denominadas de problemas de “overshoot” ou “undershoot”.

A fim de se evitar os problemas de estabilidade do esquema SUDS, Hassan et al. [12] propuseram uma nova aproximação, baseada no esquema “skew upwind”, onde é garantida a positividade de todos os coeficientes através do uso de um fator peso incorporado ao cálculo do fluxo de massa da face. A atração deste tratamento reside no fato desta formulação ser de fácil

desafio de se determinar um campo de pressões que, quando inserido na equação de conservação da quantidade de movimento origine um campo de velocidades que satisfaça a equação de conservação da massa. O fato de ρ não variar com a pressão é que introduz um forte acoplamento entre a pressão e a velocidade, dificultando a solução do sistema de equações.

Existem diversos métodos, atualmente, que tratam desse acoplamento, sendo o objetivo de todos criar um algoritmo para avançar os valores da pressão.

Um dos métodos mais utilizados é o método SIMPLE [32], do qual originaram-se, posteriormente, os métodos SIMPLER [30] e SIMPLEC [54], sendo o último empregado neste trabalho. Pode-se citar, ainda, o método PRIME [22], que é um melhoramento do método SIMPLER.

2.2 Poluição Ambiental por Descargas de Efluentes Líquidos

Nesta seção será apresentada uma discussão de alguns trabalhos encontrados na literatura sobre a poluição ambiental por descargas de efluentes líquidos.

Perez [33] desenvolveu um modelo numérico para a resolução de problemas hidrodinâmicos relativos à descarga térmica em um lago de geometria e profundidade variáveis, onde as equações governantes do problema

são transformadas do sistema cartesiano para o sistema generalizado de coordenadas, sendo então discretizadas pelo método de volumes finitos. Três testes hidrodinâmicos foram realizados, quais sejam: o problema de um canal com expansão suave; o de um canal onde são incorporadas as profundidades constantes e variável do domínio, a fim de se verificar a correção do programa com relação à variável profundidade, através da equação de conservação da massa; e, por último, o problema da descarga de um jato quente em um lago com profundidade variável, onde a solução é comparada a uma obtida com um modelo tridimensional.

No trabalho de Kahlig [15], é apresentado um novo procedimento para a predição da poluição em rios, através do uso de uma solução exata da equação de dispersão de Taylor, considerando-se o problema da difusão unidimensional, transiente e turbulento. O método proposto foi comparado com o método de H.B. Fischer [8], mostrando similaridade entre os resultados de ambos. Através desta metodologia, é demonstrada a existência da interação entre os processos de dispersão e remoção da poluição, e que os efeitos dessa interação podem ser negligenciados em problemas de dispersão de rios.

James [14] também trata da dispersão de efluente em um rio, empregando, entretanto, uma equação diferencial unidimensional e em estado estacionário, para a análise da concentração de matéria orgânica em um rio. Neste problema, são considerados três fatores que afetam a concentração: a dispersão, a convecção e a reação química (assumida como sendo uma equação de decomposição de primeira ordem). Neste modelo, a questão chave

é a determinação das condições de contorno, para a obtenção da solução do problema. Para tanto, quatro métodos foram investigados: dois numéricos (Runge-Kutta de quarta ordem e o método do valor do contorno) e dois matemáticos (o método da solução por séries e aproximação por tentativa e erro). Pelos resultados obtidos através das aproximações utilizadas, a modelagem do problema, apesar da sua simplicidade, pode ser considerada como uma representação satisfatória do sistema real, segundo James [14].

Nassehi e Bikangaga [26] apresentam um modelo numérico para predição do comportamento hidrodinâmico e da dispersão de um poluente quimicamente reativo em um sistema de estuário, baseado no método de elementos finitos de Taylor-Galerkin. A validação do modelo empregado é feita através do estudo de duas situações, quais sejam: a dinâmica da maré em Upper Milford Haven (Wales,UK) e a dispersão de metal pesado no estuário de Fal (Cornwall,UK). Em ambos os casos, os resultados obtidos estavam em concordância com os dados reais do problema considerado.

Serão descritos a seguir alguns modelos de cinética microbiana, os quais servirão de sugestão para o desenvolvimento futuro de novos caminhos para o trabalho aqui apresentado.

A velocidade de crescimento microbiano, representada em função da concentração de microorganismos, é expressa por

$$v_x = \mu X \quad (3)$$

onde X é a concentração de microorganismos (mg/l), μ é a velocidade específica de crescimento (d^{-1}) e t é o tempo em dias.

Contudo, Monod [11] observou que a velocidade específica de crescimento é influenciada pela concentração de nutriente ou substrato limitante, fato que resultou no modelo cinético mais comumente utilizado e que leva seu nome. O modelo de Monod, que descreve a relação entre a concentração residual do substrato ou nutriente limitante do crescimento e a velocidade específica de crescimento da biomassa (μ), é expresso por

$$\mu = \mu_m \frac{S}{K_S + S} \quad (4)$$

onde μ_m é a velocidade específica de crescimento máximo na concentração de saturação do substrato limitante do crescimento (d^{-1}), S é a concentração de substrato (mg/l) e K_S é a constante de saturação (mg/l).

Desta forma, substituindo-se a equação (4) na equação (3), a velocidade específica de crescimento (v_X) pode ser expressa, também, por

$$v_X = \mu_m \frac{S}{K_S + S} X \quad (5)$$

onde a velocidade de crescimento é diretamente proporcional à concentração de substrato.

Observou-se, posteriormente que, em muitos sistemas microbianos, uma alta concentração de substrato afetava negativamente o crescimento das células. Edwards [7] apresenta diversas propostas diferentes para representar esta inibição, sendo uma delas a seguinte:

$$\mu = \mu_m \frac{S}{(K_s + S) \left(1 + \frac{S}{K_i} \right)} \quad (6)$$

onde K_i é a constante de inibição pelo substrato (mg/l).

A inibição do crescimento pode ainda ocorrer devido à concentração do produto formado. Esse efeito, segundo Aiba et al. [1], pode ser representado pela seguinte expressão, entre outras,

$$\mu = \mu_m \frac{SK_p}{(K_s + S)(K_p + P)} \quad (7)$$

onde K_P é a constante de inibição por produto (mg/l) e P é a concentração de produto.

Lee et al. [19] usa o seguinte modelo, onde inclui tanto o efeito de inibição pelo substrato como pelo produto:

$$\mu = \mu_m \frac{SK_P K_i}{(K_S + S)(K_P + P)(K_i + S)} \quad (8)$$

Uma análise estreita das equações (6), (7) e (8) permite concluir que esses modelos nada mais são do que modificações do modelo de Monod.

Expressões análogas às equações (6), (7) e (8) acima apresentadas podem ser escritas para representar a velocidade de consumo de substrato e a velocidade de formação de produtos, empregando-se as seguintes relações:

$$v_S = -\frac{1}{Y_{X/S}} v_X \quad (9)$$

no caso do substrato, onde v_S representa a velocidade de consumo de substrato, $Y_{X/S}$ é o fator de conversão, e

$$v_P = \frac{1}{Y_{P/X}} v_X \quad (10)$$

onde, no caso do produto, v_P é a velocidade de formação do produto e $Y_{P/X}$ é o fator de conversão.

Maiores detalhes sobre os modelos cinéticos microbianos apresentados acima podem ser encontrados em [2], [4] e [10].

CAPÍTULO 3

Procedimento de Solução

Neste capítulo são apresentadas as equações de conservação governantes do problema, expressas em coordenadas cartesianas, a transformação das equações para o sistema de coordenadas generalizadas, a obtenção das equações discretizadas através do método de Volumes Finitos.

3.1 Equações Governantes

As equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química, escritas no sistema de coordenadas cartesianas, admitindo-se regime permanente, escoamento laminar, bidimensional e isotérmico de um fluido newtoniano, incompressível, com forças de campo nulas em ambas as direções x e y e propriedades físicas do fluido constantes, tais como, massa específica, viscosidade, difusividade mássica, são expressas por

a) Equação de Conservação da Massa

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad (11)$$

b) Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na direção x

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v u) + \frac{\partial P}{\partial x} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) + B_x \end{aligned} \quad (12)$$

c) Equação da Conservação da Quantidade de Movimento na direção y

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u v) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v v) + \frac{\partial P}{\partial y} = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\mu \frac{\partial v}{\partial y} \right) + B_y \end{aligned} \quad (13)$$

d) Equação de Conservação da Espécie Química A

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho w_A) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u w_A) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v w_A) = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho D_{AB} \frac{\partial w_A}{\partial y} \right) + r_A''' \end{aligned} \quad (14)$$

onde w_A é a fração mássica do componente A, D_{AB} é a difusividade do componente A no componente B, r_A''' é a taxa de reação química por unidade de volume, B_x e B_y são as componentes da força gravitacional por unidade de volume, na direção x e y, respectivamente.

Os termos transientes das equações de conservação serão mantidos, embora o problema seja considerado em regime permanente, para efeito dos avanços iterativos da solução.

As equações (11), (12), (13) e (14) podem ser expressas para uma variável genérica ϕ da seguinte forma

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}(\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial x}(\rho u \phi) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v \phi) + P^\phi = \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial y} \right) + S^\phi \end{aligned} \quad (15)$$

onde a variável ϕ é a grandeza considerada, Γ^ϕ é o coeficiente de difusão, P^ϕ é o termo do gradiente de pressão e S^ϕ o termo fonte. Na TABELA 1 são apresentados os valores de ϕ , Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ correspondentes às equações de conservação consideradas neste trabalho.

TABELA 1. Definição dos valores de ϕ , Γ^ϕ , P^ϕ e S^ϕ para cada uma das equações governantes do problema.

Equações Governantes	ϕ	Γ^ϕ	P^ϕ	S^ϕ
Massa	1	0	0	0
Quantidade de movimento em x	u	μ	$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x}$	B_x
Quantidade de movimento em y	v	μ	$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial y}$	B_y
Espécie Química	w_A	ρD_{AB}	0	r_A'''

3.2 Transformação das Equações

O uso de sistemas de coordenadas cartesianas, na modelagem de problemas de escoamento de fluidos, apresentam grandes limitações, pois são adequados somente à geometria cujas fronteiras coincidam com o sistema coordenado. Este fato pode acarretar sérios problemas quando da aplicação das condições de contorno, uma vez que as fronteiras podem não ser coincidentes com a fronteira do problema físico em questão.

É escolhida, portanto, a utilização do sistema de coordenadas generalizadas (ξ, η) , a fim de garantir que as fronteiras da região de solução coincidam com as linhas (no caso bidimensional) de ξ ou η constantes. A adoção deste sistema de coordenadas resulta em uma maior precisão quando da aplicação das condições de contorno.

Fazendo-se uso da regra da cadeia e de algumas manipulações matemáticas, conforme descrito por Maliska [22], a equação (15) é transformada para o sistema de coordenadas generalizadas (ξ, η) , sendo expressa como

$$\begin{aligned} & \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho \phi) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U \phi) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V \phi) + \hat{P} \phi = \hat{S} \phi + \\ & = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} + C_4 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} \right] \end{aligned} \quad (16)$$

onde U e V são as componentes contravariantes do vetor velocidade, sem normalização métrica, representadas em função das componentes do vetor velocidade na direção x e y , por

$$U = uy_{\eta} - vx_{\eta} \quad (17)$$

$$V = vx_{\xi} - uy_{\xi} \quad (18)$$

Os coeficientes C_1 , C_2 e C_3 são os coeficientes de transporte transformados, expressos por

$$C_1 = \alpha J \Gamma^{\phi} \quad (19)$$

$$C_2 = -\beta J \Gamma^{\phi} \quad (20)$$

$$C_3 = \gamma J \Gamma^{\phi} \quad (21)$$

sendo que α , β e γ são as componentes do tensor métrico, definidas como

$$\alpha = x_{\eta}^2 + y_{\eta}^2 \quad (22)$$

$$\beta = x_{\xi}y_{\eta} + y_{\xi}x_{\eta} \quad (23)$$

$$\gamma = x_{\xi}^2 + y_{\xi}^2 \quad (24)$$

e J é o jacobiano da transformação dado por

$$J = [x_{\xi}y_{\eta} - x_{\eta}y_{\xi}]^{-1} \quad (25)$$

Os termos \hat{P}^{ϕ} e \hat{S}^{ϕ} são os termos transformados de pressão e fonte, respectivamente, cujas expressões, para $\phi = 1, u, v$ ou w_A , são apresentadas na TABELA 2.

TABELA 2. Expressões correspondentes para \hat{P}^ϕ e \hat{S}^ϕ .

ϕ	\hat{P}^ϕ	\hat{S}^ϕ
1	0	0
u	$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \xi} y_\eta - \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \eta} y_\xi$	$\frac{S^u}{J}$
v	$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \eta} x_\xi - \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \xi} x_\eta$	$\frac{S^v}{J}$
w_A	0	$\frac{r_A'''}{J}$

Portanto, o conjunto formado pelas equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química, transformadas para o novo sistema de coordenadas (ξ, η) , pode ser escrito como:

a) Equação de Conservação da Massa

$$\frac{1}{J} \frac{\partial \rho}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V) = 0 \quad (26)$$

b) Equação de Conservação da Quantidade de Movimento na direção x

$$\begin{aligned} \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t} (\rho u) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V u) + \hat{P}^u = \\ = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial u}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial u}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial u}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial u}{\partial \xi} \right] + \hat{S}^u \end{aligned} \quad (27)$$

c) Equação da Conservação da Quantidade de Movimento na direção y

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho v) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho U v) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V v) + \hat{P}^v = \\
& = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[C_1 \frac{\partial v}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial v}{\partial \eta} \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[C_3 \frac{\partial v}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial v}{\partial \xi} \right] + \hat{S}^v
\end{aligned} \tag{28}$$

d) Equação de Conservação da Espécie Química A

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial t}(\rho w_A) + \frac{\partial}{\partial \xi}(\rho U w_A) + \frac{\partial}{\partial \eta}(\rho V w_A) = \hat{S}^{w_A} + \\
& + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(C_1 \frac{\partial w_A}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial w_A}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(C_3 \frac{\partial w_A}{\partial \eta} + C_2 \frac{\partial w_A}{\partial \xi} \right)
\end{aligned} \tag{29}$$

Nas referências [22] e [46] podem ser encontrados maiores detalhes sobre o desenvolvimento matemático, envolvendo a transformação de

coordenadas, e interpretações físicas para as componentes contravariantes da velocidade e métricas da transformação.

3.3 Discretização das Equações Governantes

A aproximação numérica das equações governantes, que modelam o fenômeno físico em estudo, pode ser obtida de diversas formas. Neste trabalho será utilizado o método de Volumes Finitos, por garantir os princípios de conservação das grandezas físicas tanto a nível elementar como global. Uma discussão mais detalhada do método é apresentada por Patankar [30].

Para se obter a solução numérica do problema em estudo há a necessidade de se definir, primeiro, a disposição das variáveis na malha computacional. Optou-se, neste caso, pelo arranjo de variáveis co-localizadas, onde todas as variáveis possuem o mesmo volume elementar de integração, como mostra a Figura 3 apresentada no capítulo anterior. Um estudo comparativo entre diversas possibilidades de configurações para as variáveis, na malha computacional, pode ser encontrado em Silva [46], Ulson de Souza [53], Shih et al [45].

Deste modo, a equação (16) é discretizada através de uma integração espacial e temporal de seus termos em um volume de controle

delimitado por duas linhas de ξ constante e duas linhas de η constante, como mostra a Figura 5.

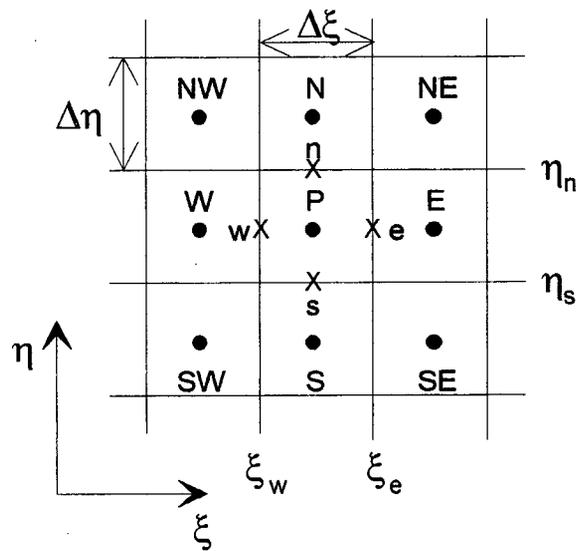


FIGURA 5. Representação do volume de controle no plano $\xi - \eta$.

A equação (16), integrada no tempo e no espaço para o volume de controle mostrado na Figura 5, segundo as seguintes hipóteses de integração:

- a) ϕ e $\rho\phi$ são constantes no volume de controle.
- b) todos os termos, exceto $\rho\phi$, são constantes ao longo de Δt e são avaliados em $t+\Delta t$, o que implica em uma formulação totalmente implícita.
- c) os fluxos de massa, nas faces e, w, n e s, são uniformes ao longo de cada face.
- d) ϕ na face e sua derivada normal à face, as métricas, Γ^ϕ e a pressão na face são uniformes ao longo de cada face.

resulta em

$$\begin{aligned} & \frac{M_P \phi_P - [M_P \phi_P]^0}{\Delta t} + [\dot{M}_e \phi_e - \dot{M}_w \phi_w + \dot{M}_n \phi_n - \dot{M}_s \phi_s] = \\ & = \left\{ \left[C_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_e - \left[C_1 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_w \right\} \Delta \eta + \left\{ \left[C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_n + \right. \\ & \left. - \left[C_2 \frac{\partial \phi}{\partial \xi} + C_3 \frac{\partial \phi}{\partial \eta} \right]_s \right\} \Delta \xi + L[\hat{S}^\phi]_P \Delta \xi \Delta \eta - L[\hat{P}^\phi]_P \Delta \xi \Delta \eta \end{aligned} \quad (30)$$

Nesta equação M_P denota a massa no interior do volume de controle centrado no ponto P, o superscrito (0) indica valores da iteração anterior, os subscritos e, w, n e s indicam, respectivamente, as faces leste, oeste, norte e sul do volume de controle e \dot{M}_i indica o fluxo de massa através da face i do volume de controle. O operador $L[]$ representa a aproximação numérica do termo no interior dos colchetes.

A equação (30) completa o processo de discretização. Contudo, o fato de os fluxos de massa dependerem do valor de ϕ , a equação (30) ainda mantém as não linearidades presentes nas equações originais. Além disso, há a necessidade de se avaliar os valores de ϕ e suas derivadas nas faces dos volumes de controle em função dos valores de ϕ nos centros dos mesmos, que serão as incógnitas dos sistemas de equações lineares. Essa avaliação é realizada por intermédio de funções de interpolação, que possuem importância decisiva no desempenho do método numérico.

Neste trabalho, é empregado o esquema WUDS [36], o qual representa uma ponderação da propriedade na face do volume de controle segundo a importância da difusão e convecção no problema, obtendo-se, para

os valores de ϕ e $\frac{\partial \phi}{\partial \vec{n}}$, as seguintes expressões:

$$\phi_w = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \phi_W + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_w \right) \phi_P \quad (31)$$

$$\phi_n = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_n\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n\right)\phi_N \quad (32)$$

$$\phi_s = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s\right)\phi_S + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_s\right)\phi_P \quad (33)$$

$$\phi_e = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_e\right)\phi_P + \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e\right)\phi_E \quad (34)$$

$$\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi_e} \Big| \cong \Gamma^\phi \bar{\beta}_e \frac{\phi_E - \phi_P}{\Delta \xi} \quad (35)$$

$$\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \xi_w} \Big| \cong \Gamma^\phi \bar{\beta}_w \frac{\phi_P - \phi_W}{\Delta \xi} \quad (36)$$

$$\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta_n} \Big| \cong \Gamma^\phi \bar{\beta}_n \frac{\phi_N - \phi_P}{\Delta \eta} \quad (37)$$

$$\Gamma^\phi \frac{\partial \phi}{\partial \eta_s} \Big| \cong \Gamma^\phi \bar{\beta}_s \frac{\phi_P - \phi_S}{\Delta \eta} \quad (38)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi_n} \Big| \cong \frac{\phi_{NE} + \phi_E - \phi_{NW} - \phi_W}{4\Delta \xi} \quad (39)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \xi_s} \Big| \cong \frac{\phi_{SE} + \phi_E - \phi_{SW} - \phi_W}{4\Delta \xi} \quad (40)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta_e} \Big| \cong \frac{\phi_{NE} + \phi_N - \phi_{SE} - \phi_S}{4\Delta \eta} \quad (41)$$

$$\frac{\partial \phi}{\partial \eta_w} \Big| \cong \frac{\phi_{NW} + \phi_N - \phi_{SW} - \phi_S}{4\Delta \eta} \quad (42)$$

onde os termos $\bar{\alpha}$ e $\bar{\beta}$ são expressos, conforme [36],

$$\overline{\alpha} = \frac{P_e^2}{10 + 2 P_e^2} \quad (43)$$

$$\overline{\beta} = \frac{1 + 0.005 P_e^2}{1 + 0.05 P_e^2} \quad (44)$$

onde P_e é o número de Peclet da malha.

Observa-se que as derivadas cruzadas não estão recebendo nenhum tipo de ponderação e são tratadas pelo esquema de diferenças centrais.

Uma extensão da formulação WUDS é proposta por Ulson de Souza [51]. Além disso, outras funções de interpolação podem ser empregadas, como mostram as referências [43,53], entre outras.

Substituindo-se as equações (31) a (42) na equação (30) e usando a equação de conservação da massa discretizada, obtém-se

$$\begin{aligned}
a_p^\phi \phi_P = & a_e^\phi \phi_E + a_w^\phi \phi_W + a_n^\phi \phi_N + a_s^\phi \phi_S + a_{ne}^\phi \phi_{NE} + a_{se}^\phi \phi_{SE} + \\
& + a_{nw}^\phi \phi_{NW} + a_{sw}^\phi \phi_{SW} + B_P^\phi
\end{aligned} \tag{45}$$

onde

$$a_p^\phi = \frac{M_P^0}{\Delta t} + a_e^\phi + a_w^\phi + a_n^\phi + a_s^\phi \tag{46}$$

$$a_w^\phi = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_w \right) \dot{M}_w + D_1 \frac{\bar{\beta}_w}{\Delta \xi} - \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_n + \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_s \tag{47}$$

$$a_e^\phi = - \left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_e \right) \dot{M}_e + D_1 \frac{\bar{\beta}_e}{\Delta \xi} + \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_n - \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_s \tag{48}$$

$$a_n^\phi = -\left(\frac{1}{2} - \bar{\alpha}_n\right) \dot{M}_n + D_3 \frac{\bar{\beta}_n}{\Delta \eta} + \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e - \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w \quad (49)$$

$$a_s^\phi = \left(\frac{1}{2} + \bar{\alpha}_s\right) \dot{M}_s + D_3 \frac{\bar{\beta}_s}{\Delta \eta} - \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e + \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w \quad (50)$$

$$a_{ne}^\phi = \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e + \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_n \quad (51)$$

$$a_{nw}^\phi = -\frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w - \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_n \quad (52)$$

$$a_{se}^\phi = -\frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_e - \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_s \quad (53)$$

$$a_{sw}^\phi = \frac{D_2}{4 \Delta \eta} \Big|_w + \frac{D_4}{4 \Delta \xi} \Big|_s \quad (54)$$

$$B_P^\phi = L[\hat{S}^\phi]_P - L[\hat{P}^\phi]_P \quad (55)$$

sendo que

$$D_1 = C_1 \Delta \eta \Delta t \quad (56)$$

$$D_2 = C_2 \Delta \eta \Delta t \quad (57)$$

$$D_3 = C_3 \Delta \xi \Delta t \quad (58)$$

$$D_4 = C_2 \Delta \xi \Delta t \quad (59)$$

A equação para o termo $L[\hat{P}^\nu]_P$ é dada por

$$L[\hat{P}^u]_P = \frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} y_\eta|_P - \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} y_\xi|_P \quad (60)$$

Da mesma forma é obtida a equação aproximada para o termo

$L[\hat{P}^v]_P$ dada por

$$L[\hat{P}^v]_P = \frac{P_N - P_S}{2\Delta\eta} x_\xi|_P - \frac{P_E - P_W}{2\Delta\xi} x_\eta|_P \quad (61)$$

3.4 Tratamento do Acoplamento Pressão-Velocidade

Como discutido no Capítulo 2, a formulação incompressível traz a necessidade de se obter uma equação para a correção da pressão.

Existem vários métodos que tratam do acoplamento pressão-velocidade, entre os quais podem-se citar os métodos SIMPLE [32], SIMPLER [30], SIMPLEC [54], PRIME [22], entre outros.

Será empregado neste trabalho o método SIMPLEC para a obtenção da equação para a correção da pressão, descrito a seguir, aplicado ao arranjo de variáveis co-localizadas.

A partir da equação de conservação da quantidade de movimento, pode-se escrever que

$$a_P u_P = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} - L[\hat{P}_P]^u + B_P^u \quad (62)$$

O avanço das variáveis é feito escrevendo-se estas em função de uma correção sobre o valor estimado da propriedade, como apresentado abaixo

$$u = u^* + u' \quad (63)$$

$$v = v^* + v' \quad (64)$$

$$P = P^* + P' \quad (65)$$

$$\rho = \rho^* + \rho' \quad (66)$$

Desta forma, para o valor estimado, a equação da conservação da quantidade de movimento pode ser escrita como

$$a_P u_P^* = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB}^* - L[\hat{P}_P^*]^u + B_P^u \quad (67)$$

Ao se subtrair a equação (67) da equação (62), obtém-se a expressão para o campo de u'

$$a_P u_P' = \sum_{nb} a_{nb} u_{NB}' - L[\hat{P}_P']^u \quad (68)$$

Fazendo-se uma nova subtração, desta vez do termo $\sum_{nb} a_{nb} u_P'$, de ambos os lados da equação (68), obtém-se

$$\left(a_P - \sum_{nb} a_{nb} \right) u_P' = \sum_{nb} a_{nb} (u_{NB}' - u_P') - L[\hat{P}_P']^u \quad (69)$$

No método SIMPLEC, o termo $\sum_{nb} a_{nb} (\dot{u}_{NB} - \dot{u}_P)$ da equação (69) é

desprezado, o que resulta na seguinte expressão:

$$\dot{u}_P = -d_P^u L[\hat{P}_P]^u \quad (70)$$

onde

$$d_P^u = \frac{1}{\left(a_P - \sum_{nb} a_{nb} \right)} \quad (71)$$

Expressão análoga à equação (70) pode ser escrita para a correção da componente da velocidade na face leste do volume de controle, \dot{u}_e ,

$$\dot{u}_e = -d_e^u L[\hat{P}_e]^u \quad (72)$$

onde

$$d_e^u = \frac{d_P^u + d_E^u}{2} \quad (73)$$

Substituindo-se u_e' , por $u_e - u_e^*$, na equação (72), chega-se a

$$u_e = u_e^* - d_e^u L[\hat{P}_e']^u \quad (74)$$

Analogamente, pode-se escrever, para a componente de velocidade

v_e ,

$$v_e = v_e^* - d_e^v L[\hat{P}_e']^v \quad (75)$$

A componente contravariante da velocidade, U_e , pode ser escrita da seguinte forma:

$$U_e = U_e^* - d_e^u \left\{ L[\hat{P}'_e]^u y_{\eta}|_e - L[\hat{P}'_e]^v x_{\eta}|_e \right\} \quad (76)$$

onde

$$U_e^* = u_e^* y_{\eta}|_e - v_e^* x_{\eta}|_e \quad (77)$$

De forma análoga às equações (74), (75), (76) e (77) podem ser escritas expressões para as componentes contravariantes e cartesianas da velocidade, nas demais faces do volume de controle.

A equação da conservação da massa pode ser expressa como:

$$(\rho U)_e - (\rho U)_w + (\rho V)_n - (\rho V)_s = 0 \quad (78)$$

Assim, substituindo-se a equação (76), e as expressões análogas para as outras faces, na equação (78), chega-se à seguinte equação para a correção da pressão:

$$\begin{aligned} a_P^P P_P' = & a_E^P P_E' + a_W^P P_W' + a_N^P P_N' + a_S^P P_S' + a_{NE}^P P_{NE}' + a_{SE}^P P_{SE}' + \\ & + a_{NW}^P P_{NW}' + a_{SW}^P P_{SW}' + b^P \end{aligned} \quad (79)$$

onde os coeficientes a_P^P , a_E^P , a_W^P , a_N^P , a_S^P , a_{NE}^P , a_{SE}^P , a_{NW}^P , a_{SW}^P e b^P são definidos como:

$$a_E^P = \rho_e \alpha_e d_e^u - \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} + \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (80)$$

$$a_W^P = \rho_w \alpha_w d_w^u + \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} - \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (81)$$

$$a_N^P = \rho_n \gamma_n d_n^v - \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} + \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} \quad (82)$$

$$a_S^P = \rho_s \gamma_s d_s^v + \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} - \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} \quad (83)$$

$$a_{NE}^P = -\frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} - \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} \quad (84)$$

$$a_{NW}^P = \frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} + \frac{\rho_n \beta_n d_n^v}{4} \quad (85)$$

$$a_{SE}^P = \frac{\rho_e \beta_e d_e^u}{4} + \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (86)$$

$$a_{SW}^P = -\frac{\rho_w \beta_w d_w^u}{4} - \frac{\rho_s \beta_s d_s^v}{4} \quad (87)$$

$$b^P = -\rho_e U_e^* + \rho_w U_w^* - \rho_n V_n^* + \rho_s V_s^* \quad (88)$$

$$a_P^P = a_E^P + a_W^P + a_N^P + a_S^P + a_{NE}^P + a_{NW}^P + a_{SE}^P + a_{SW}^P \quad (89)$$

Os coeficientes d_e^u , d_w^u , d_n^v e d_s^v podem ser expressos por

$$d_e^u = \frac{d_P^u + d_E^u}{2} \quad (90)$$

$$d_w^u = \frac{d_P^u + d_W^u}{2} \quad (91)$$

$$d_n^v = \frac{d_P^v + d_N^v}{2} \quad (92)$$

$$d_s^v = \frac{d_P^v + d_S^v}{2} \quad (93)$$

O valor estimado das componentes contravariantes do vetor velocidade nas faces do volume de controle, U_e^* , U_w^* , V_n^* e V_s^* , é determinado através da metodologia descrita na seção 3.5 a seguir.

Para a solução do sistema de equações lineares, obtido através da equação (79), é utilizado o método MSI modificado, proposto por Schneider e Zedan [44].

3.5 Avaliação dos Fluxos Mássicos

No arranjo de variáveis co-localizadas, as componentes de velocidade nas faces do volume de controle, necessárias na equação de conservação da massa, precisam ser interpoladas a partir dos valores de pontos vizinhos, já que as velocidades resultantes das equações de conservação da quantidade do movimento estarão armazenadas nos centros dos volumes. Esta interpolação é fundamental para o sucesso do método utilizando variáveis co-localizadas.

Uma discussão sobre diversas alternativas de esquemas de interpolação existentes pode ser encontrada em Ulson de Souza [53].

A metodologia proposta por Marchi et al. [25], para a avaliação dos fluxos mássicos nas faces do volume em coordenadas generalizadas, é utilizada neste trabalho, sendo descrita para a face leste do volume de controle como

$$u_e = \frac{1}{2a_{P_e}} \left[\sum_{nb} a_{nb} u_{NB} \Big|_P + \sum_{nb} a_{nb} u_{NB} \Big|_E + \hat{b}^u \Big|_P + \hat{b}^u \Big|_E \right] - \frac{1}{a_{P_e}} \hat{P}^u \Big|_e \quad (94)$$

De forma análoga, pode ser obtida uma expressão para v na mesma face

$$v_e = \frac{1}{2a_{P_e}} \left[\sum_{nb} a_{nb} v_{NB} \Big|_P + \sum_{nb} a_{nb} v_{NB} \Big|_E + \hat{b}^v \Big|_P + \hat{b}^v \Big|_E \right] - \frac{1}{a_{P_e}} \hat{P}^v \Big|_e \quad (95)$$

onde

$$a_{P_e} = \frac{a_{PP} + a_{PE}}{2} \quad (96)$$

O termo a_{PP} é o coeficiente central a_p do volume de controle P e o termo a_{PE} é o coeficiente central a_p do volume de controle E.

Na Figura 6 podem ser observados os pontos vizinhos aos pontos P e E, envolvidos na obtenção das componentes do vetor velocidade na face leste do volume de controle e representadas pelas equações (94) e (95).

Os coeficientes para u e v são iguais, de forma que os mesmos serão calculados apenas uma vez em cada intervalo de tempo utilizado.

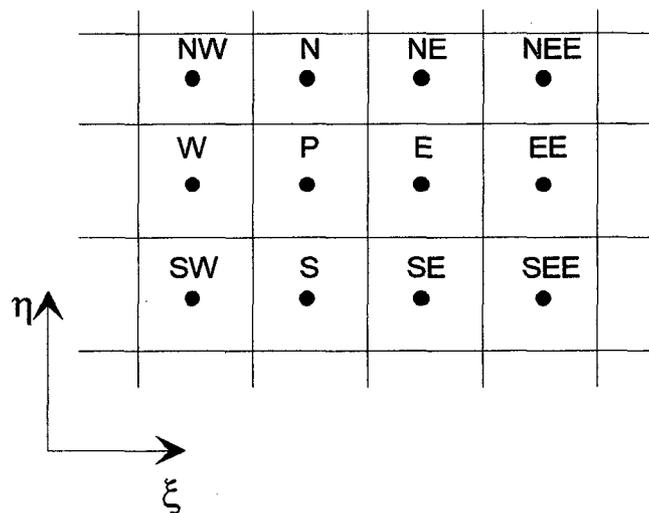


FIGURA 6. Pontos da malha computacional envolvidos no cálculo do fluxo de massa na face leste do volume de controle.

A partir das equações (94) e (95) podem ser calculadas as componentes contravariantes do vetor velocidade na face do volume de controle, que é a velocidade necessária para o balanço de massa.

$$U_e = uy_\eta|_e - vx_\eta|_e \quad (97)$$

$$V_n = vx_\xi|_n - uy_\xi|_n \quad (98)$$

De forma semelhante são determinadas as componentes contravariantes da velocidade nas outras faces do volume de controle.

3.6 Condições de Contorno

Para completar a formulação do problema, é necessário especificar as condições de contorno e implementá-las de forma discretizada no plano transformado. A implementação destas condições é, talvez, a tarefa mais importante a ser realizada, pois por seu intermédio é que se avança a solução

em um processo iterativo. Além disso, o processo de aplicação das condições de contorno está intimamente ligado à localização das variáveis na malha, uma vez que as variáveis podem estar localizadas sobre a fronteira do domínio de cálculo ou não, conforme o arranjo escolhido.

Com o objetivo de tratar todos os volumes do domínio através das mesmas equações, optou-se pelo uso de volumes fictícios para a aplicação das condições de contorno para as componentes cartesianas da velocidade e para a concentração.

A Figura 7 mostra a fronteira oeste do domínio de cálculo e os volumes fictícios em linhas tracejadas, como uma forma de ilustrar o fato exposto acima.

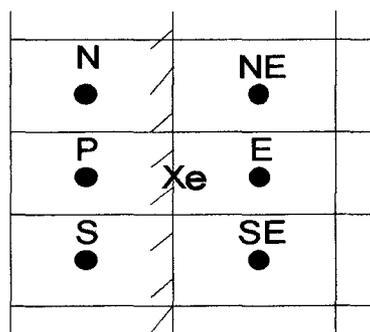


FIGURA 7. Uso de volumes fictícios para a concentração e componentes cartesianas da velocidade.

As condições de contorno produzem, para o caso da propriedade prescrita no contorno oeste do volume de controle, a seguinte equação:

$$\phi_e = \frac{\phi_P + \phi_E}{2} \quad (99)$$

onde o subscrito E refere-se ao primeiro ponto do domínio depois da fronteira oeste e o subscrito P refere-se ao ponto fictício fora do domínio.

A equação (99) discretizada pode ser escrita como

$$\phi_P = 2\phi_e - \phi_E \quad (100)$$

Se o gradiente da componente da velocidade, na direção normal for nulo, ou no caso da concentração, houver condição de impermeabilidade, pode-se escrever que

$$\frac{\partial \phi}{\partial \bar{n}} = 0 \quad (101)$$

onde \vec{n} representa a direção normal à face do volume de controle.

Utilizando-se o esquema de diferenças centrais, obtém-se

$$\phi_P = \phi_E \quad (102)$$

A avaliação da pressão nas fronteiras é realizada pelo uso da extrapolação linear, que é uma forma simples de se aproximar um termo, pois consiste em se obter termos sobre uma reta cuja equação é conhecida através dos pontos vizinhos. A precisão desta extrapolação é tanto melhor quanto mais refinada for a malha.

Desta forma, utilizando-se este método para o cálculo da pressão na face do volume de controle da fronteira leste em função do valor da pressão nos pontos P e W , conforme ilustra a Figura 8, obtém-se

$$P_e = \frac{1}{2}(3P_P - P_W) \quad (103)$$

Existem outras formas, além da extrapolação linear, para se avaliar a pressão nas fronteiras, dentre as quais pode-se citar o uso de pontos fictícios, extrapolação quadrática, etc.

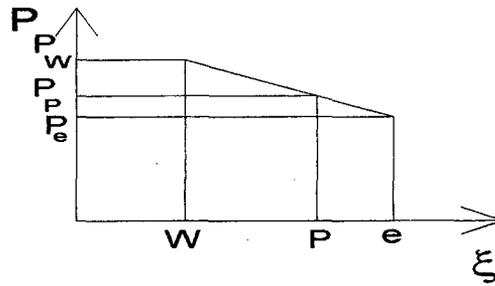
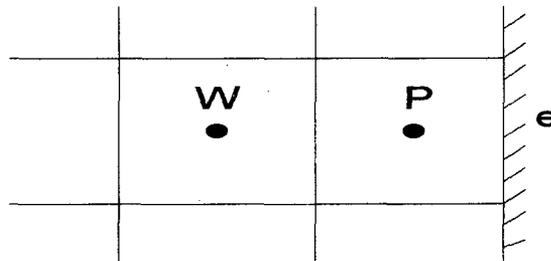


FIGURA 8. Extrapolação linear para a pressão na fronteira leste.

3.7 Especificação das Propriedades Físicas

As propriedades físicas utilizadas neste trabalho foram a massa específica (ρ), viscosidade (μ) da água e a difusividade mássica (D_{AB}) da maltose na água. Em virtude da baixa concentração da maltose e de células, as propriedades ρ e μ da maltose não alteram significativamente as propriedades da mistura.

Os valores correspondentes a essas propriedades físicas, tomadas à temperatura de 293K, foram obtidos em [18], [34], [49] e [55], com exceção do valor da difusividade mássica da mistura, D_{AB} , calculado por uma equação empírica, encontrada em [34] ou [40].

A equação de Wilke e Chang [40] para o cálculo do D_{AB} é a seguinte:

$$D_{AB} = 7,4 \times 10^{-8} \frac{(\varphi M_B)^{\frac{1}{2}} T}{\mu V_A^{0,6}} \quad (104)$$

onde

M_B = peso molecular do solvente B

T = temperatura absoluta [K]

μ = viscosidade do solvente B [cP]

V_A = volume molar do soluto A na sua temperatura de ebulição [cm^3/gmol]

D_{AB} = difusividade mássica da mistura binária [cm^2/s]

ϕ = fator de associação do solvente B, adimensional, cujos valores podem ser observados na TABELA 3.

O valor de V_A , quando não encontrado na literatura para a substância em estudo, pode ser calculado empíricamente através de métodos de estimativa, em particular a tabela de volume aditiva de Schroeder ou a de Le Bas [40], as quais podem ser observadas na TABELA 4.

TABELA 3. Valores correspondentes para o fator de associação do solvente.

solvente	ϕ
água	2,6
metanol	1,9
etanol	1,5
solventes não associados	1,0

3.8 Determinação da Taxa de Reação Microbiológica

O efluente considerado neste trabalho é o proveniente de uma indústria têxtil. A composição química do efluente têxtil é determinada pelo tipo de matéria-prima empregada e pelos diferentes processos de industrialização utilizados. Entre esses processos, pode-se citar o de engomagem, que produz resíduos ricos em material orgânico provenientes das gomas, constituídas basicamente de amido. Longo [21] apresenta um resumo das características médias de águas residuais têxteis, coletadas entre sessenta indústrias têxteis, entre as quais pode-se citar a presença de corantes de difícil remoção, detergentes, material orgânico biodegradável, entre outros.

No presente trabalho foi escolhida, como fonte de matéria orgânica poluidora, a molécula base do amido, a maltose, como representante das substâncias orgânicas presentes no efluente têxtil.

A forma mais comum de se determinar o grau de poluição de um efluente, seja industrial ou doméstico, é através do valor da DBO (demanda bioquímica de oxigênio). O valor da DBO, especificamente para o caso de efluentes têxteis, varia entre 130 a 1200 mgO₂/l, numa média de 665 mgO₂/l, segundo Longo [21].

A reação microbiológica é aqui tratada como uma reação de primeira ordem. Dessa forma, a equação que representa a taxa de uma reação de primeira ordem, expressa em termos de fração mássica, é a seguinte:

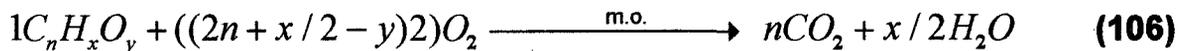
$$r_A''' = -k \rho w_A \quad (105)$$

onde k é a constante da taxa (s^{-1}), ρ é a massa específica da solução (kg/m^3) e w_A é a fração mássica do poluente. O sinal negativo indica consumo do poluente.

TABELA 4. Incrementos de volume para o cálculo do volume molar.

Elementos	Incrementos, cm^3/mol	
	Schroeder	Le Bas
carbono	7,0	14,8
hidrogênio	7,0	3,7
oxigênio	7,0	7,4
em metil ésteres e éters	-	9,1
em etil ésteres e éters	-	9,9
em altos ésteres e éters	-	11,0
em ácidos	-	12,0
ligado a S, P e N	-	8,3
nitrogênio	7,0	-
ligação dupla	-	15,6
aminas primárias	-	10,5
aminas secundárias	-	12,0
bromo	31,5	27,0
cloro	24,5	24,6
flúor	10,5	8,7
iodo	38,5	37,0
enxofre	21,0	25,6
anel, três membros	-7,0	-6,0
quatro membros	-7,0	-8,5
cinco membros	-7,0	-11,5
seis membros	-7,0	-15,0
naftaleno	-7,0	-30,0
antraceno	-7,0	-47,5
ligação dupla entre dois C	7,0	-
ligação tripla entre três C	14,0	-

O mecanismo que rege o consumo do poluente pode ser expresso segundo a equação estequiométrica abaixo:



Pela equação (106), observa-se que a degradação de matéria orgânica é proporcional ao consumo de oxigênio do meio. Neste trabalho é admitido que o meio se encontra suficientemente aerado, propiciando o completo processo de oxidação do poluente. A constante da taxa, k , indica este consumo na equação (106), e sua determinação é experimental, sendo dependente de alguns fatores ambientais, tais como: temperatura e oxigênio dissolvido. O valor da DBO foi determinado experimentalmente na unidade de tratamento de efluentes da Cia. Têxtil Hering [6], de Blumenau, bem como, foram fornecidos os valores da vazão e da carga orgânica poluidora do efluente industrial. Desta forma, para uma temperatura de 293K e DBO igual a 271,27 mgO₂/l, obteve-se o valor de k igual a $2,174 \times 10^{-06} \text{ s}^{-1}$.

3.9 Detalhes Numéricos

Com relação à obtenção da solução numérica do problema físico, esta deve ser feita segundo um critério de convergência. O critério adotado neste trabalho, utilizado por Maliska [22] e Ulson de Souza [53], é expresso por

$$\left| \frac{\phi^{n+1} - \phi^n}{\phi^{max} - \phi^{min}} \right| \leq 10^{-5} \quad (107)$$

e aplicado para as componentes cartesianas do vetor velocidade.

As soluções, que serão apresentadas na seção subsequente, foram obtidas a partir da utilização do computador IBM 3278/2 e da estação de trabalho SUN-SPARC station LX.

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

4.1 Descrição do Problema da Descarga de Efluente Líquido em um Rio

O problema físico de interesse, neste trabalho, trata da descarga de efluente industrial líquido em um rio, em regime permanente, considerando-se a profundidade constante, igual à unidade. A FIGURA 9a apresenta o esquema do domínio do problema físico em estudo, destacando-se as condições de contorno.

As condições de contorno adotadas na solução deste problema, na entrada do escoamento principal são: componente do vetor velocidade, u , relativa ao escoamento longitudinal do rio, prescrita constante, cujos valores são obtidos a partir da vazão imposta e dos parâmetros da área de seção reta do mesmo; componente do vetor velocidade, v , e fração mássica prescritas nulas. À saída do escoamento principal, é prescrita a condição de saída (derivadas nulas). À margem esquerda, as componentes do vetor velocidade são prescritas nulas e é admitida a condição de parede impermeável. Nas seções 1 e 2, à margem direita, as componentes do vetor velocidade são prescritas nulas, sendo admitida a condição de parede impermeável. No canal de entrada do efluente, a

componente do vetor velocidade, u , é prescrita nula, a componente do vetor velocidade, v , é prescrita constante e obtida a partir dos dados de vazão imposta para o efluente e dos parâmetros geométricos do canal lateral; a fração mássica inicial do poluente, w_{Ain} , é prescrita igual a $2,71 \times 10^{-4}$. Para a temperatura de 293K e pressão atmosférica, o valor da difusividade mássica, D_{AB} , é de $4,52 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$. Os dados relativos ao efluente (vazão, fração mássica e DBO) foram fornecidos pela Cia. Têxtil Hering[6].

São apresentadas, na FIGURA 9b, as dimensões escolhidas para a obtenção dos resultados numéricos do problema, onde $L=100\text{m}$, $L^*=600\text{m}$ e $L^{**}=1000\text{m}$, representam três referências de comprimento ao longo do rio; $H=5\text{m}$ e $H^*=50\text{m}$ representam dois comprimentos diferentes para o vão do rio; L_1 é a distância mostrada na FIGURA 9b sendo igual a $38,975\text{m}$, e L_v é a largura do canal de efluente, igual a $0,5\text{m}$. A dimensão básica do rio é representada por L e H , a partir da qual derivam os parâmetros representados por L^* , L^{**} e H^* . As condições de contorno para a saída permanecem as mesmas em todos os casos estudados.

Na FIGURA 10 é apresentada a malha computacional utilizada para a discretização do domínio físico do problema, L e H . Esta malha de 30×10 é diferentemente espaçada tanto na direção x como na direção y . O diferente espaçamento da malha computacional teve como objetivo refinar a região próxima à entrada do efluente no escoamento principal, onde os maiores gradientes do fenômeno em estudo estão envolvidos. O segmento da malha computacional 30×10 , ilustrado na FIGURA 10, foi mantido inalterado em todos

os casos estudados onde o comprimento ou largura do rio foram alterados, para efeitos comparativos dos resultados. Desta forma, foram construídas as malhas 55x10 para L*, 63x10 para L** e 30x30 para H*, sempre tendo a malha 30x10 como base destas.

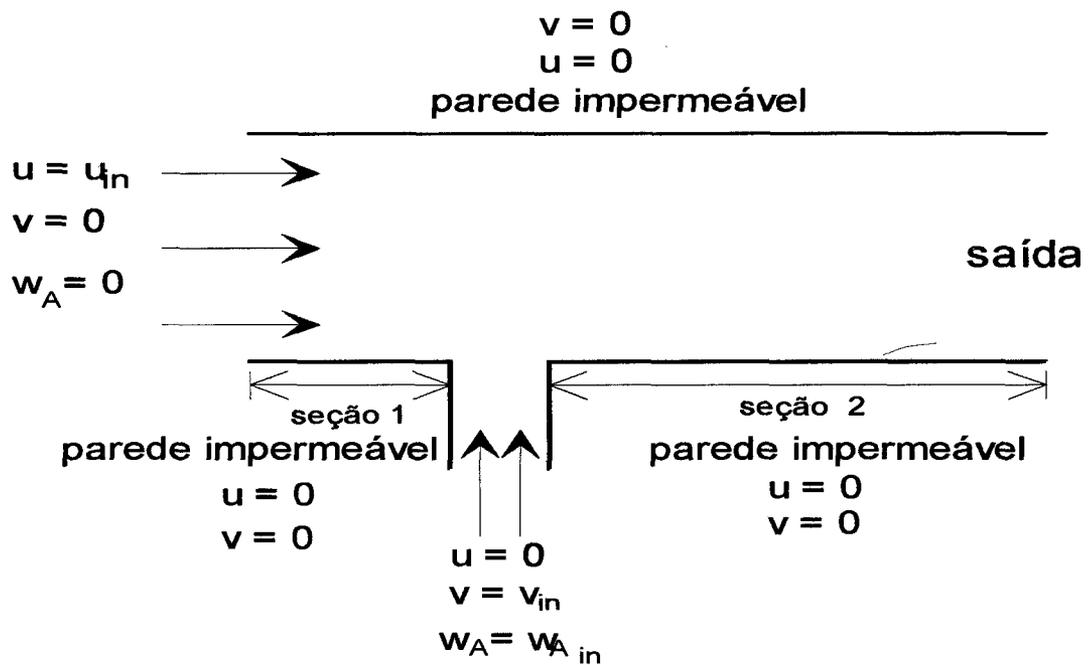


FIGURA 9a. Esquema do domínio físico com as condições de contorno.

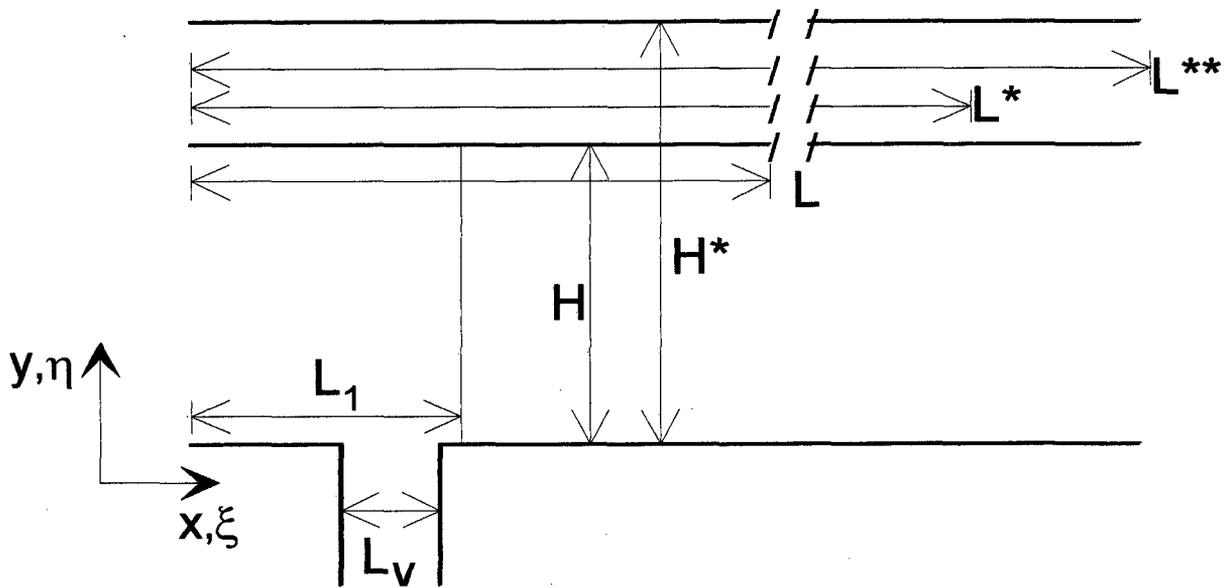


FIGURA 9b. Esquema do domínio físico com os parâmetros geométricos adotados.

Foram estudadas, no presente trabalho, as diferentes condições de escoamento do problema proposto, quais sejam:

- Caso 1: vazão do rio de $16.000\text{m}^3/\text{h}$, vazão do efluente de $160\text{m}^3/\text{h}$, comprimento do rio de 100m e largura de 5m .
- Casos 2, 3 e 4: para as mesmas condições do Caso 1, é variada a vazão do efluente para $320\text{m}^3/\text{h}$, $480\text{m}^3/\text{h}$ e $800\text{m}^3/\text{h}$, respectivamente.
- Caso 5: para as mesmas condições do Caso 1, a largura do rio é aumentada para 50m , mantendo-se a mesma vazão inicial de $16.000\text{m}^3/\text{h}$.

- Caso 6: igual ao Caso 5, variando-se a vazão do efluente para $320 \text{ m}^3/\text{h}$.
- caso 7: igual ao Caso 1, variando-se o comprimento do rio para 600m.
- caso 8: igual ao Caso 7, variando-se a vazão do efluente para $800 \text{ m}^3/\text{h}$.
- casos 9 e 10: mesmas condições dos Casos 7 e 8, respectivamente, variando-se o comprimento do rio para 1000m.

Estes casos são ilustrados na TABELA 5.

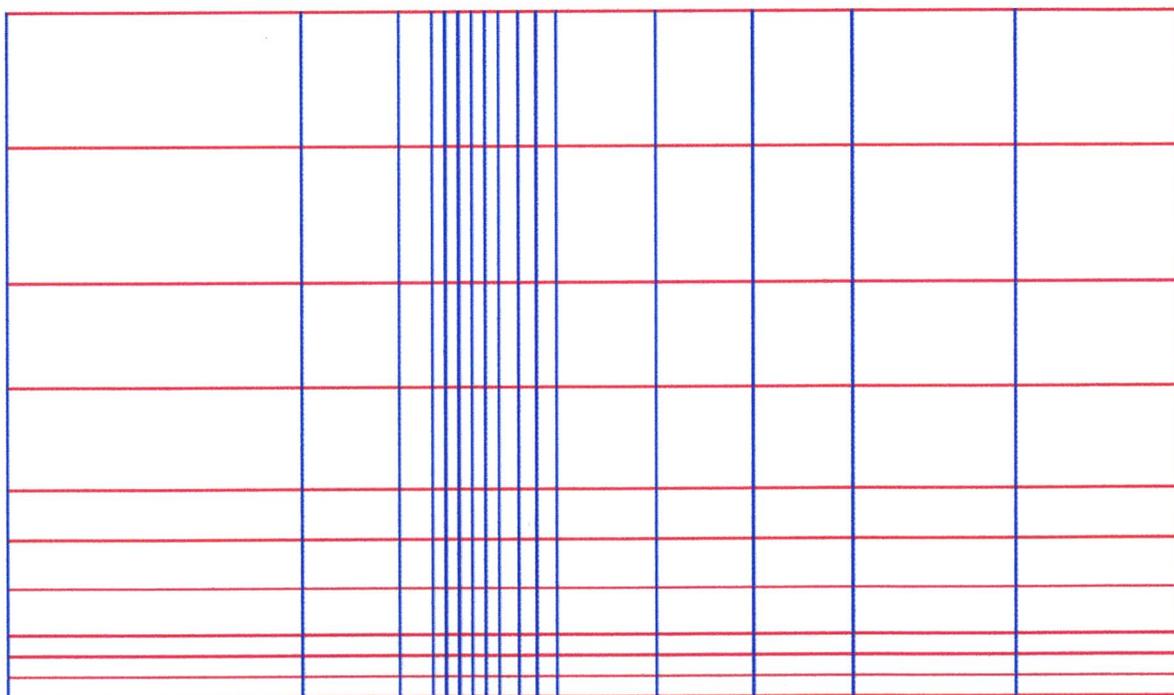


FIGURA 10. Malha computacional 30x10.

TABELA 5. Especificação dos casos estudados neste trabalho.

	L 100m	L* 600m	L** 1000m	H 5m	H* 50m	Q ₁ (m ³ /h)	Q ₂ (m ³ /h)
CASO 1	□			□		16.000	160
CASO 2	□			□		16.000	320
CASO 3	□			□		16.000	480
CASO 4	□			□		16.000	800
CASO 5	◆				◆	16.000	160
CASO 6	◆				◆	16.000	320
CASO 7		*		*		16.000	160
CASO 8		*		*		16.000	800
CASO 9			■	■		16.000	160
CASO 10			■	■		16.000	800

4.2 Resultados Obtidos para os Casos 1, 2, 3 e 4

A FIGURA 11 apresenta o perfil da componente do vetor velocidade u , adimensionalizada, u/u_{in} , ao longo do eixo y , para o Caso 1, onde a vazão do escoamento principal, Q_1 , é igual a $16.000\text{m}^3/\text{h}$, com a vazão de escoamento do efluente, Q_2 , igual a $160\text{m}^3/\text{h}$. A velocidade u_{in} , para este caso, é de $0,889\text{m/s}$ e a velocidade v_{in} é igual a $0,0889\text{m/s}$. Os valores foram tomados em $x=L_1$ e na saída do escoamento principal, em $x=L$.

Na FIGURA 12 podem ser observadas as linhas de corrente referentes ao perfil da velocidade apresentado na FIGURA 11, na região próxima à entrada do efluente. Neste caso, como a vazão do escoamento do efluente é baixa, sua influência sobre as linhas do escoamento principal é suave. Um aumento na vazão do efluente aumenta a influência da mesma sobre a velocidade de escoamento do rio, provocando regiões de recirculação próximas à região de entrada do efluente. Este fato é ilustrado na FIGURA 13, onde são apresentadas as linhas de corrente do escoamento principal, para o Caso 6, em uma região próxima à descarga do efluente.

A FIGURA 14 apresenta o perfil da concentração do poluente ao longo do eixo y , com os valores tomados em $x=L_1$ e em $x=L$. Nesta figura, pode-se notar que a concentração do poluente, no ponto de saída do escoamento, $x=L$, diminui em relação ao ponto logo após a descarga de efluente, $x=L_1$, em torno de 11%. Na FIGURA 15, pode-se observar as linhas de concentração constante para o Caso 1, na região próxima à entrada do eluente.

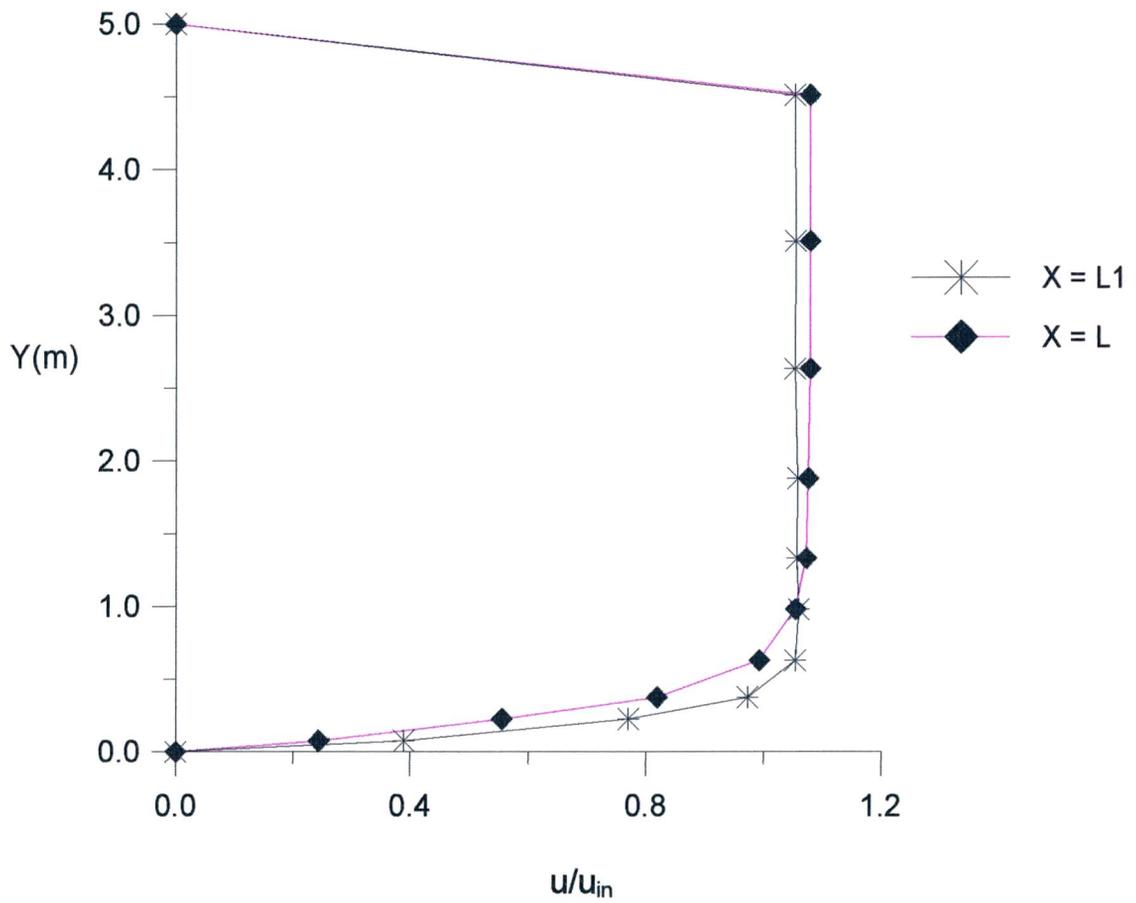


FIGURA 11. Perfil da componente do vetor velocidade adimensionalizada, u/u_{in} , para $Q_1 = 16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 1.

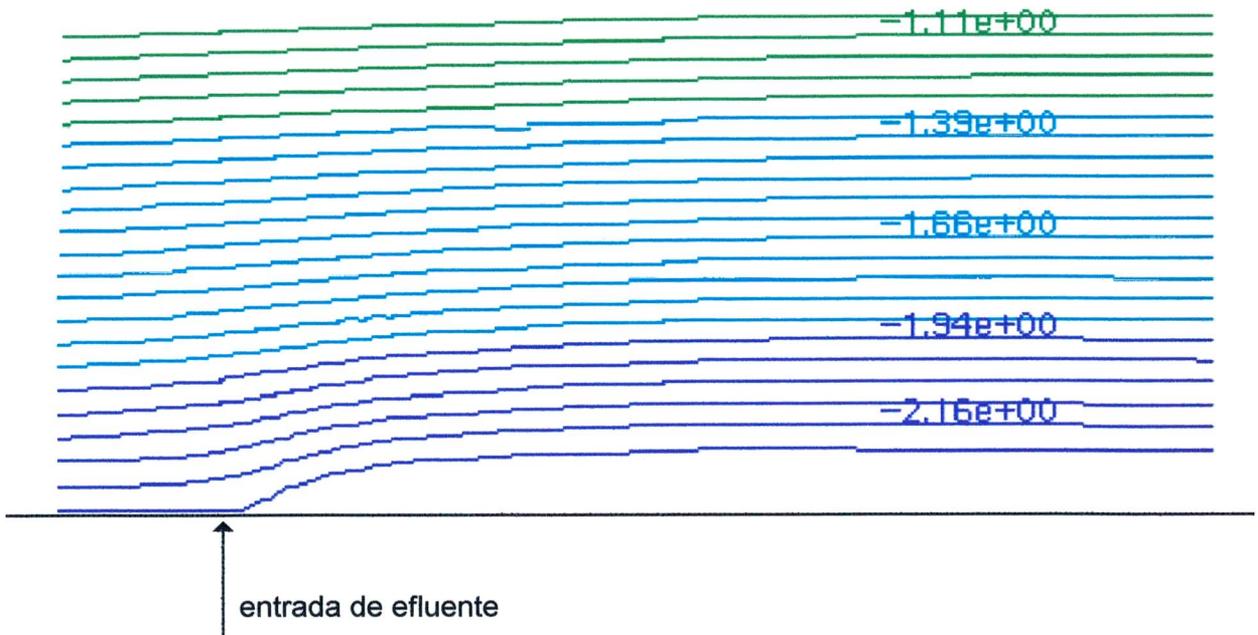


FIGURA 12. Linhas de corrente do escoamento, para o Caso 1.

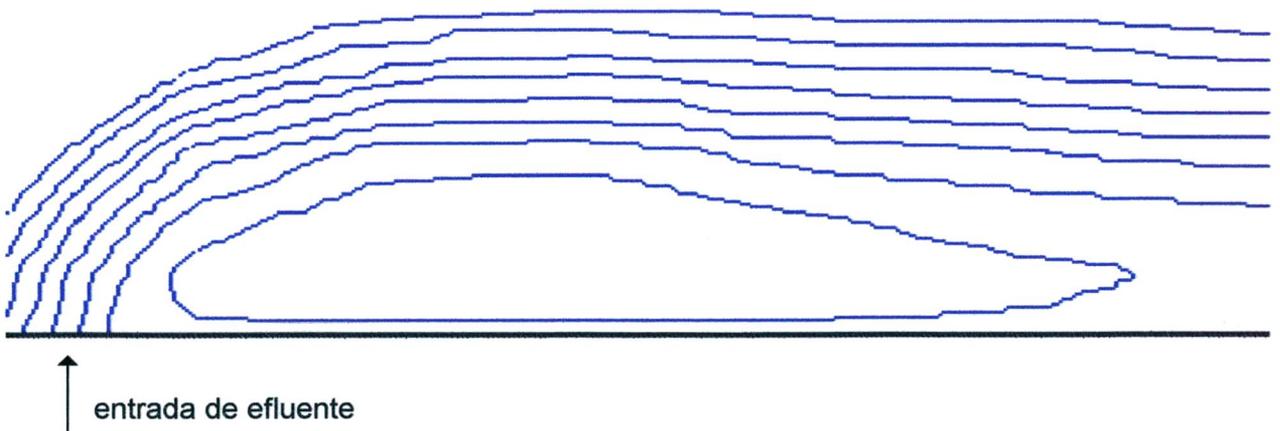


FIGURA 13. Linhas de corrente do escoamento, para o Caso 6, com a presença de uma região de recirculação, após a entrada de efluente.

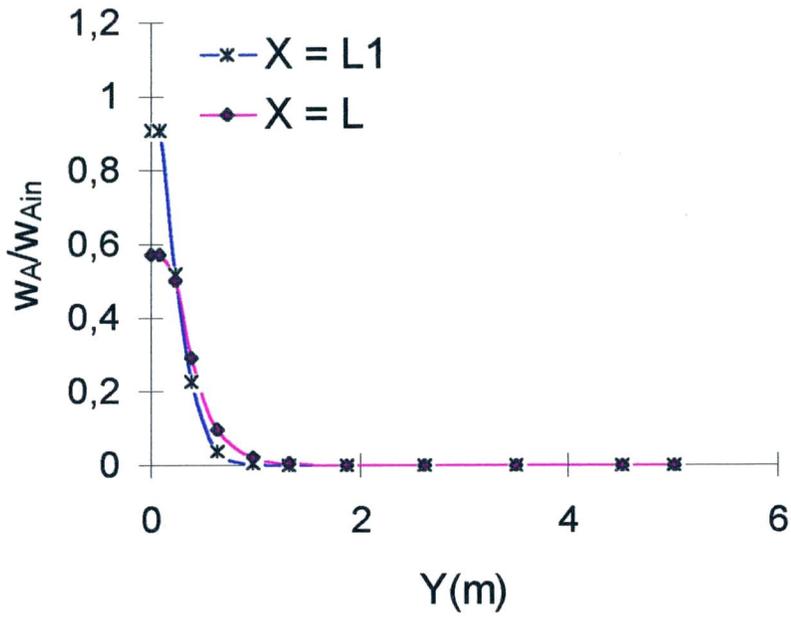


FIGURA 14. Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 1.

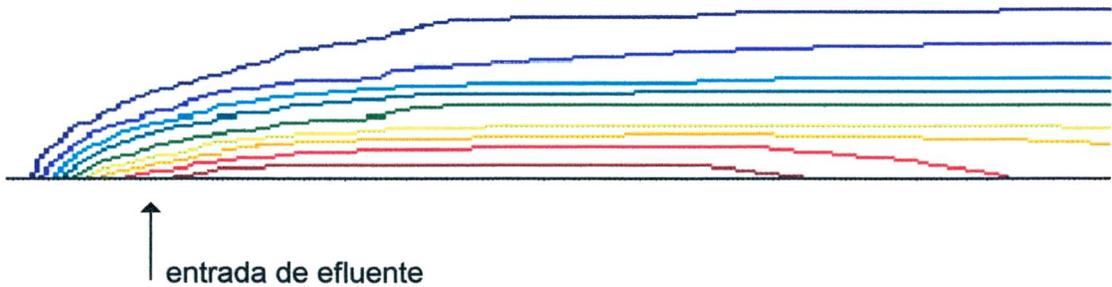


FIGURA 15. Linhas de concentração referentes ao Caso 1.

As FIGURAS 16, 17 e 18 representam também o perfil da concentração do poluente ao longo do eixo y , com os valores tomados em $x=L_1$ e em $x=L$. Contudo o valor da vazão de escoamento do efluente foi aumentado duas, três e cinco vezes comparativamente às condições apresentadas na FIGURA 14, correspondendo aos Casos 2, 3 e 4, respectivamente, com o objetivo de analisar a influência da vazão do escoamento do efluente sobre o comportamento da difusão do poluente.

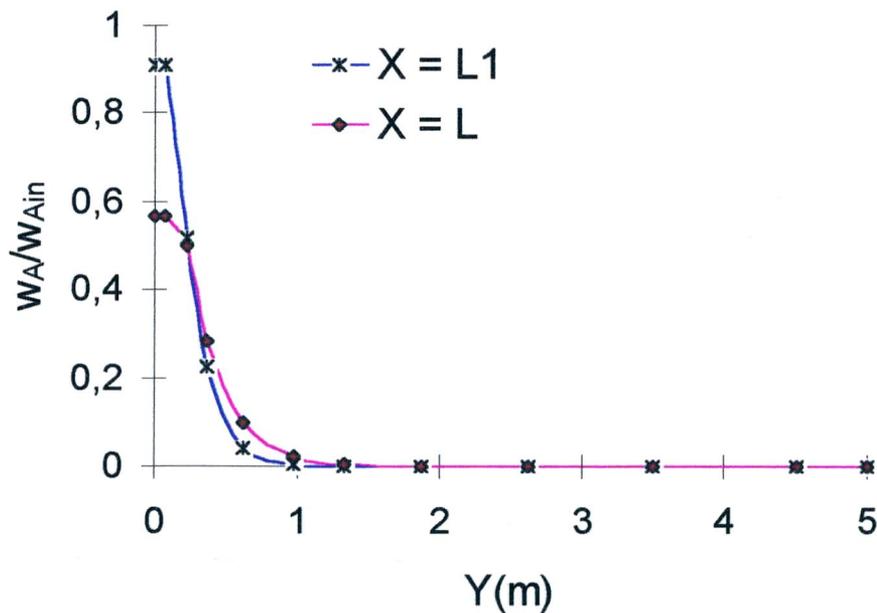


FIGURA 16. Perfil de concentração do poluente para $L=100$ m, $H=5$ m,

$$Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h} \text{ e } Q_2=320\text{m}^3/\text{h}, \text{ Caso 2.}$$

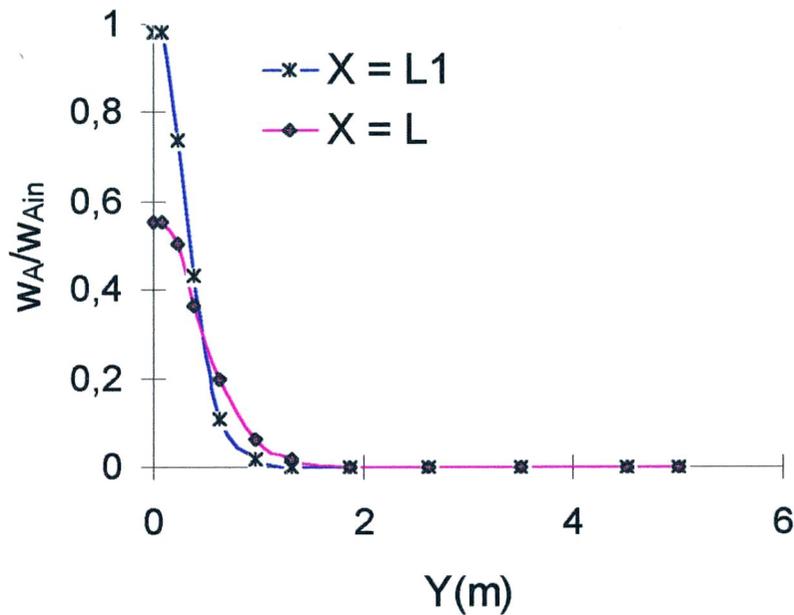


FIGURA 17. Perfil de concentração do poluente para $L=100m$, $H=5m$,
 $Q_1=16.000m^3/h$ e $Q_2=480m^3/h$, Caso 3.

A análise das FIGURAS 14,16,17 e 18 mostra a influência da vazão de efluente no perfil de concentração. Quanto maior a velocidade de escoamento do efluente, maior é o transporte do poluente, ao longo do eixo y , levando o efeito da contaminação mais longe da margem de descarga.

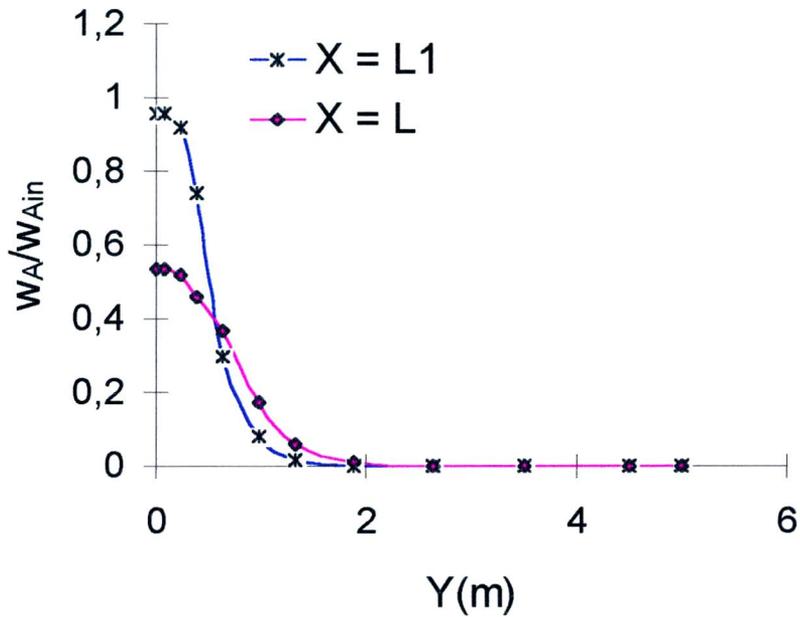


FIGURA 18. Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=800\text{m}^3/\text{h}$, Caso 4.

Os perfis de vazão mássica ao longo do comprimento do rio, representados nas FIGURAS 19, 20, 21 e 22, foram obtidos para as mesmas situações apresentadas nas FIGURAS 14, 16, 17 e 18, correspondendo aos Casos 1, 2, 3 e 4, respectivamente.

Através desses perfis, pode-se verificar que a concentração de poluente diminui gradativamente, da descarga do mesmo até a saída, devido à taxa de reação microbiológica. O aumento da velocidade de escoamento do efluente, Caso 4, além de aumentar o campo de difusão do poluente ao longo do vão do rio, aumenta para 17% a decomposição da matéria poluente na saída do escoamento principal em relação ao ponto após a descarga do efluente.

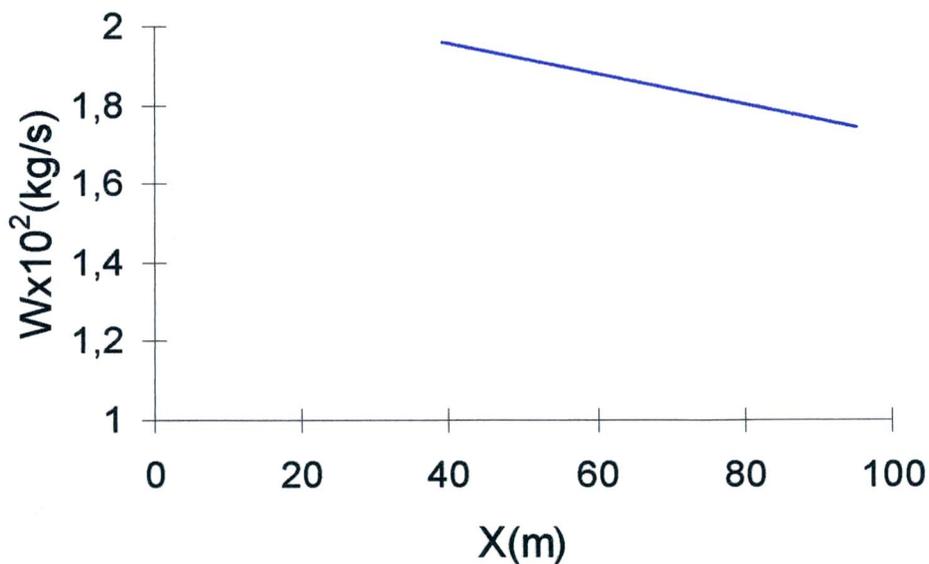


FIGURA 19. Perfil de vazão mássica do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$,

$Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 1.

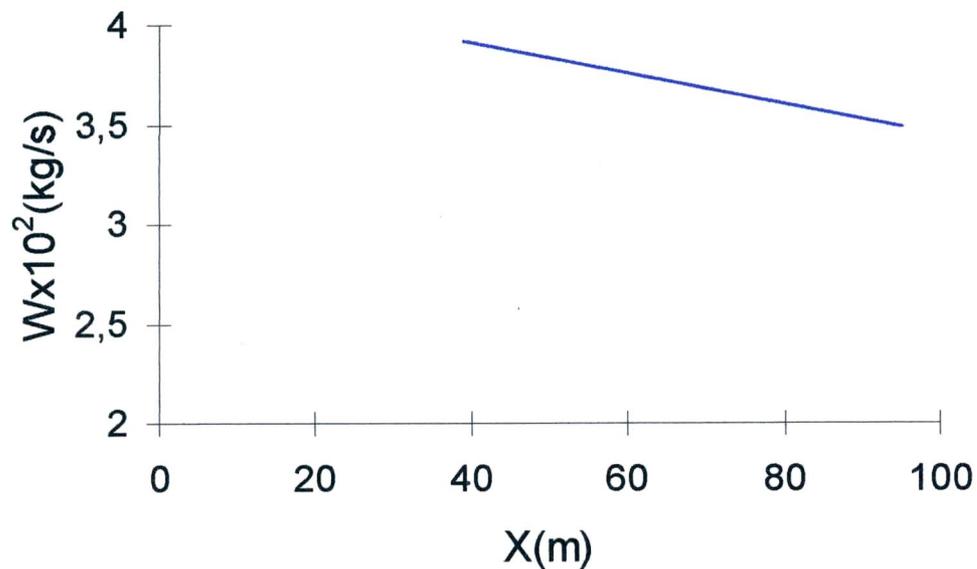


FIGURA 20. Perfil de vazão mássica do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=320\text{m}^3/\text{h}$, Caso 2.

4.3 Resultados Obtidos Para Os Casos 5 e 6

As dimensões do domínio, para os Casos 5 e 6, são: $L= 100\text{ m}$ e $H^*=50\text{m}$.

O aumento na dimensão do vão do rio, mantendo-se Q_1 igual a $16.000\text{ m}^3/\text{h}$, diminui a velocidade de escoamento do rio, sendo este efeito, sobre o perfil de fração mássica, observado nas Figuras 23 a 26.

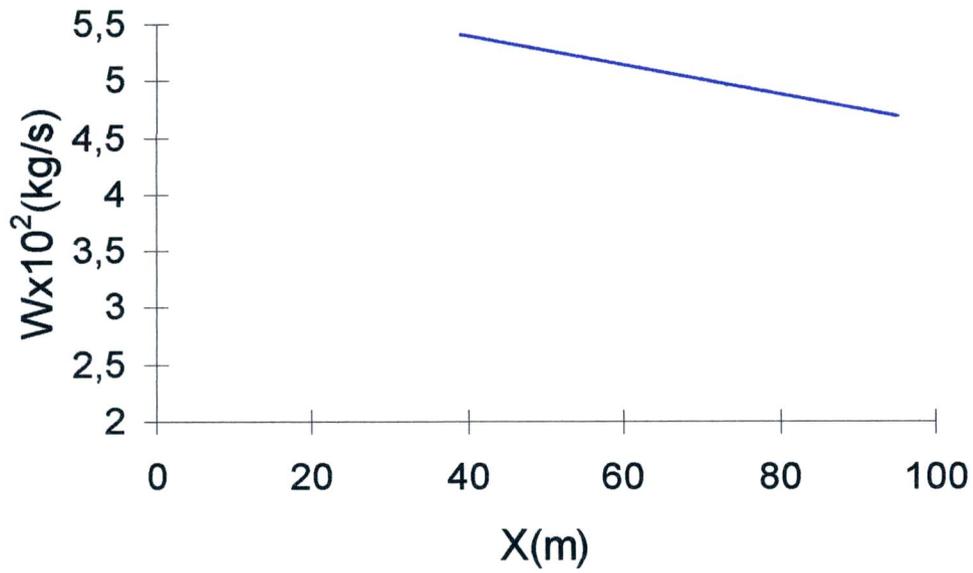


FIGURA 21. Perfil de vazão mássica do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=480\text{m}^3/\text{h}$, Caso 3.

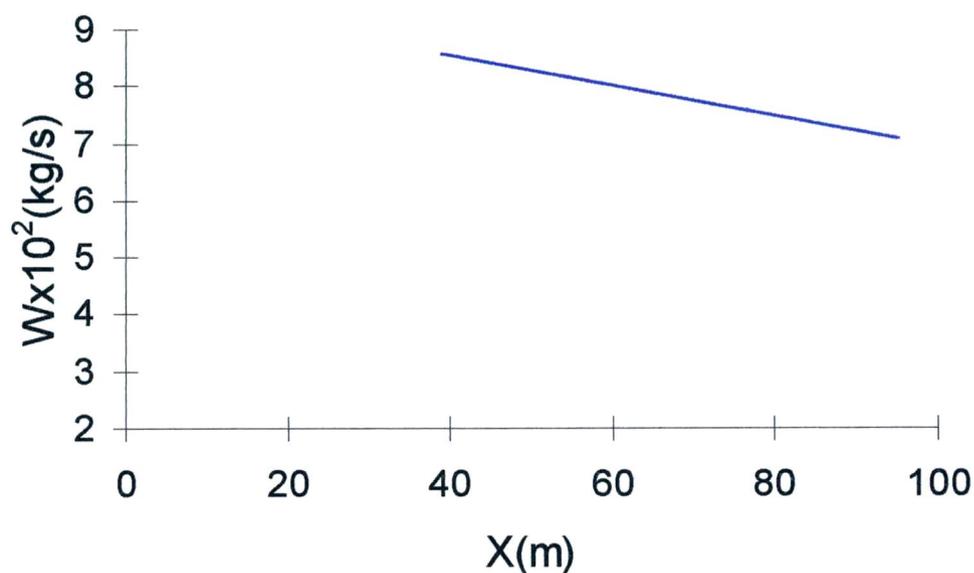


FIGURA 22. Perfil de vazão mássica do poluente para $L=100\text{m}$, $H=5\text{m}$,
 $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=800\text{m}^3/\text{h}$, Caso 4.

As FIGURAS 23 e 24 representam o perfil da concentração do poluente ao longo do eixo y , com os valores tomados em $x=L_1$ e $x=L$, para Q_2 igual a $160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 5. A diferença entre estas duas figuras está na escala adotada. A FIGURA 24 proporciona uma melhor visualização do fenômeno de difusão do poluente, cujos valores de concentração foram tomados somente até y igual a 6m , pois já a partir de 1m , a concentração da matéria poluente já não é mais detectada.

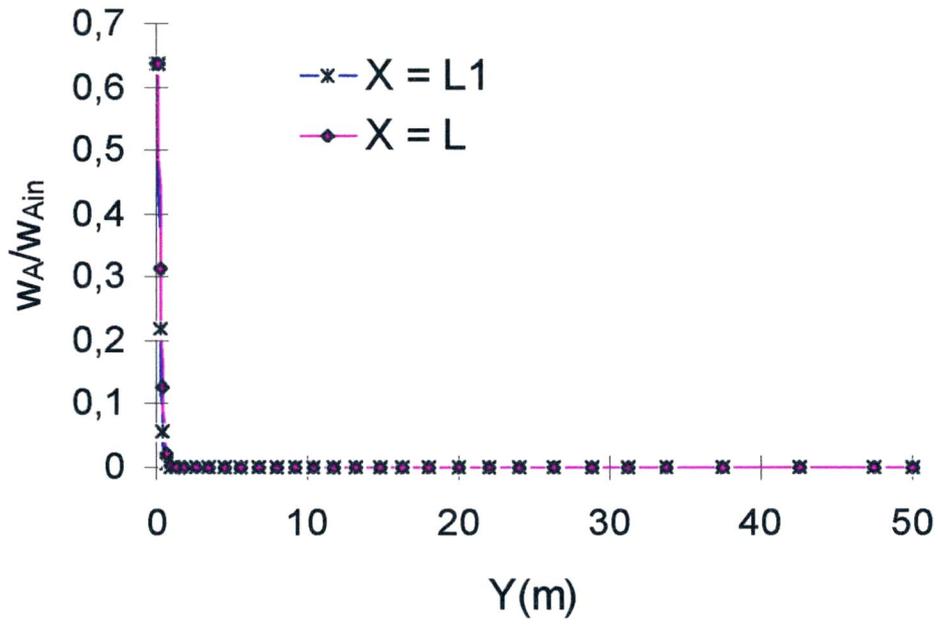


FIGURA 23. Perfil de concentração do poluente para $L=100m$, $H^*=50m$,
 $Q_1=16.000m^3/h$ e $Q_2=160m^3/h$, Caso 5.

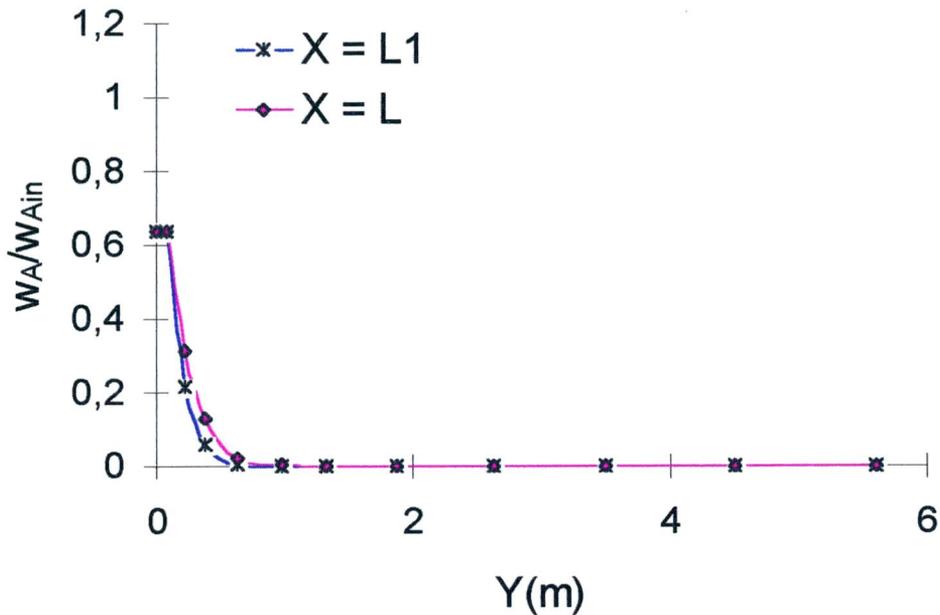


FIGURA 24. Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H^*=50\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 5 - ampliação de escala.

Pela análise da FIGURA 24, pode-se dizer que a diminuição da velocidade de escoamento do rio não diminuiu a concentração do poluente, a qual permaneceu próxima à região de entrada do efluente. Isto pode ser explicado considerando-se que a taxa de reação é função da concentração do substrato que, neste caso, é extremamente reduzida.

Analisou-se, então, a influência do aumento na velocidade do escoamento do efluente, sendo esta duplicada, correspondendo ao Caso 6. Nas

Figuras 25 e 26, é apresentado o perfil de concentração do poluente ao longo de y . A FIGURA 26 mostra mais detalhadamente o gráfico apresentado na FIGURA 25, através de uma mudança de escala. Nas FIGURAS 25 e 26, observa-se que a região de difusão do poluente aumentou, ocasionando ainda uma diminuição da concentração do mesmo em $x=L$. Pode-se observar, ainda, que o gradiente de velocidades provocou a formação de uma região de recirculação, a qual pode ser identificada na FIGURA 13.

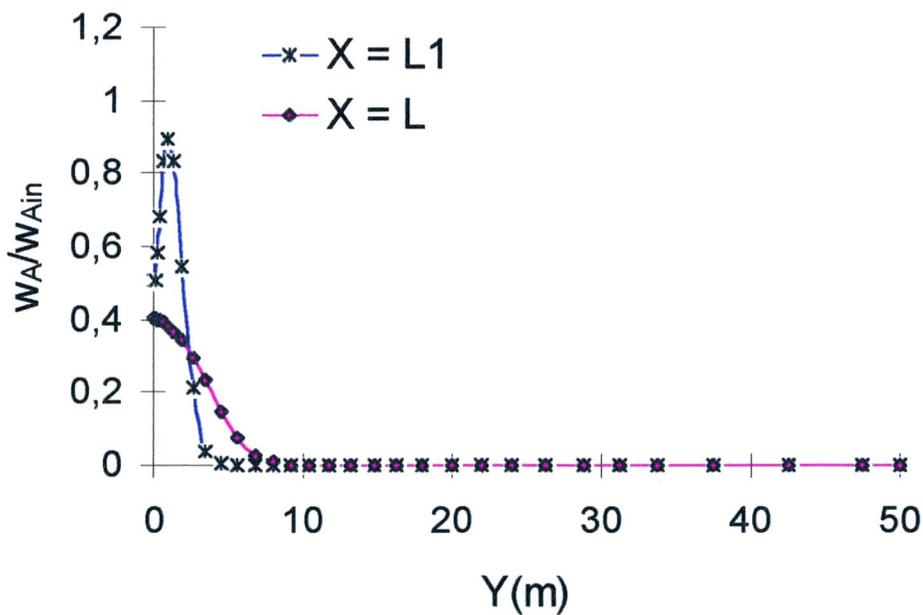


FIGURA 25. Perfil de concentração do poluente para $L=100m$, $H^*=50m$, $Q_1=16.000m^3/h$ e $Q_2=320m^3/h$, Caso 6.

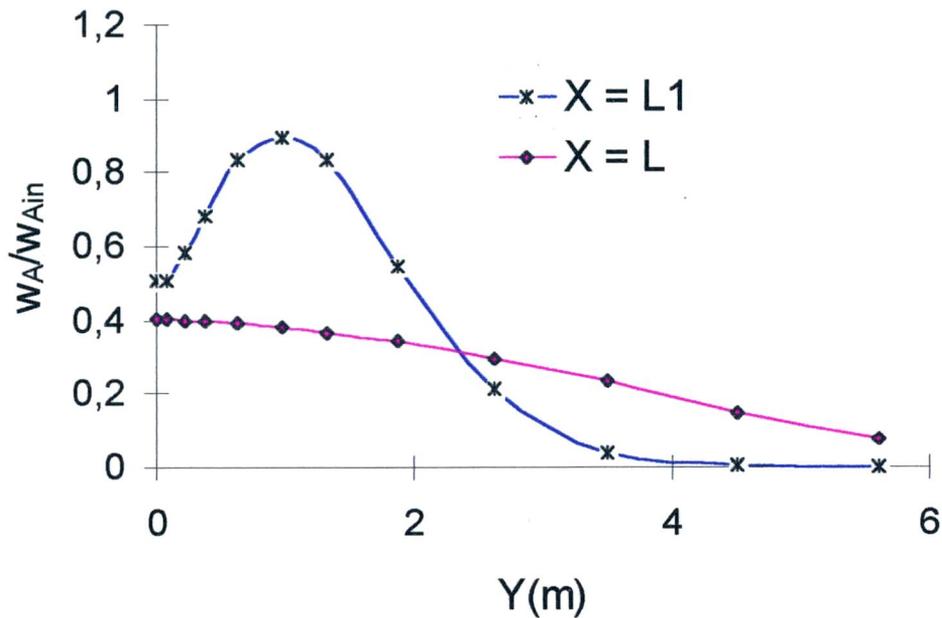


FIGURA 26. Perfil de concentração do poluente para $L=100\text{m}$, $H^*=50\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=320\text{m}^3/\text{h}$, Caso 6 - ampliação de escala.

4.4 Resultados Obtidos para os Casos 7, 8, 9 e 10

Uma expansão do domínio de cálculo foi realizada a fim de verificar sua influência no processo de decomposição da matéria poluente. Foram considerados os seguintes comprimentos do rio: $L^*=600\text{m}$ e $L^{**}=1000\text{m}$, sendo utilizadas malhas de 55×10 para os Casos 7 e 8, e 63×10 , para os Casos 9 e 10.

A FIGURA 27 representa o perfil da vazão mássica do efluente ao longo do comprimento do rio, para L^* , Caso 7, considerando-se a vazão do efluente igual a $160\text{m}^3/\text{h}$. A FIGURA 28 apresenta o perfil de concentração, Caso 8, para a vazão de efluente igual a $800\text{m}^3/\text{h}$.

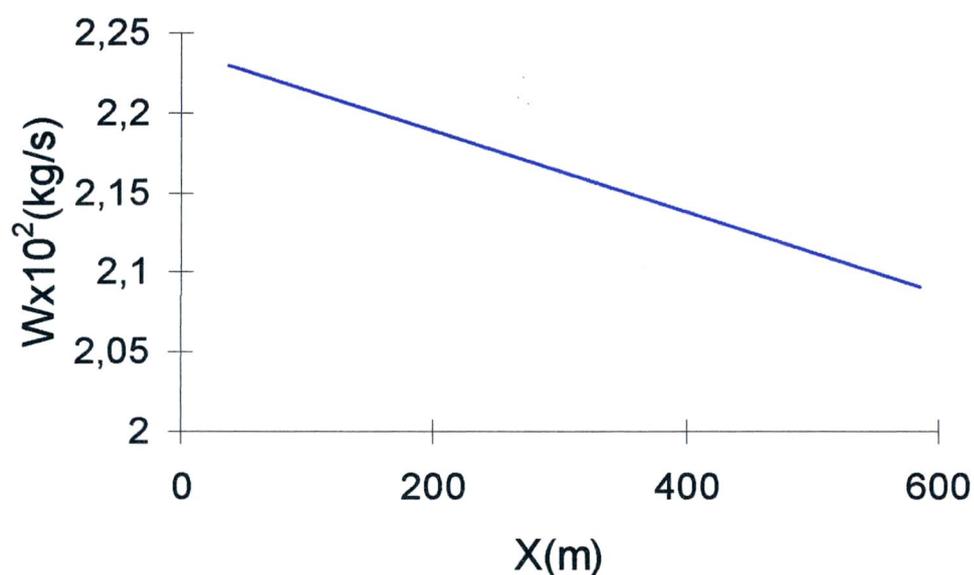


FIGURA 27. Perfil de vazão mássica do poluente para $L^*=600\text{m}$, $H=5\text{m}$,

$Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 7.

A análise destas figuras demonstra uma queda linear da concentração do poluente ao longo do comprimento do rio, muito embora com baixo coeficiente angular. Pode-se verificar que, para maiores vazões de efluente, ocorre um aumento no coeficiente angular da reta, indicando uma maior taxa de consumo do poluente.

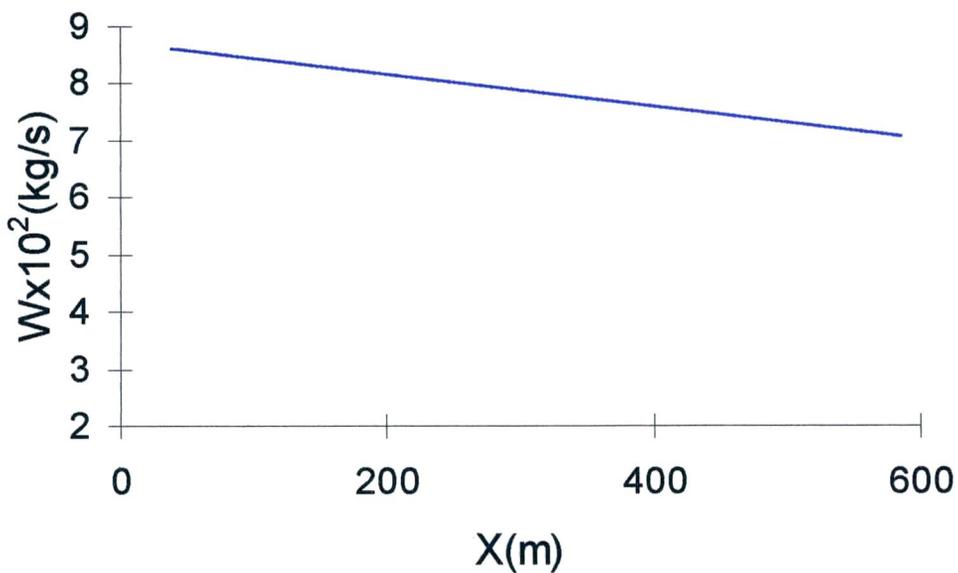


FIGURA 28. Perfil de vazão mássica do poluente para $L^*=600\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=800\text{m}^3/\text{h}$, Caso 8.

A influência do aumento da vazão do efluente sobre a concentração do poluente foi analisada para nova condição de comprimento do rio, ou seja, $L^{**}=1000\text{m}$.

A FIGURA 29 apresenta o perfil de vazão mássica ao longo do comprimento do rio para L^{**} e Q_2 igual a $160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 9. A FIGURA 30 apresenta os resultados obtidos, para as mesmas condições do Caso 9, aumentando-se a vazão do efluente, Q_2 , para $800\text{m}^3/\text{h}$.

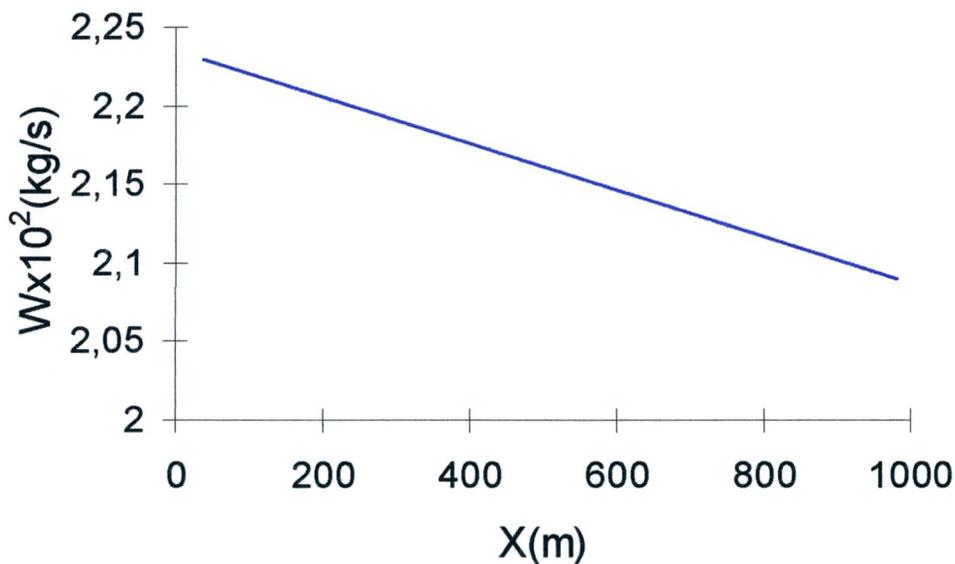


FIGURA 29. Perfil de vazão mássica do poluente para $L^{**}=1000\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=160\text{m}^3/\text{h}$, Caso 9.

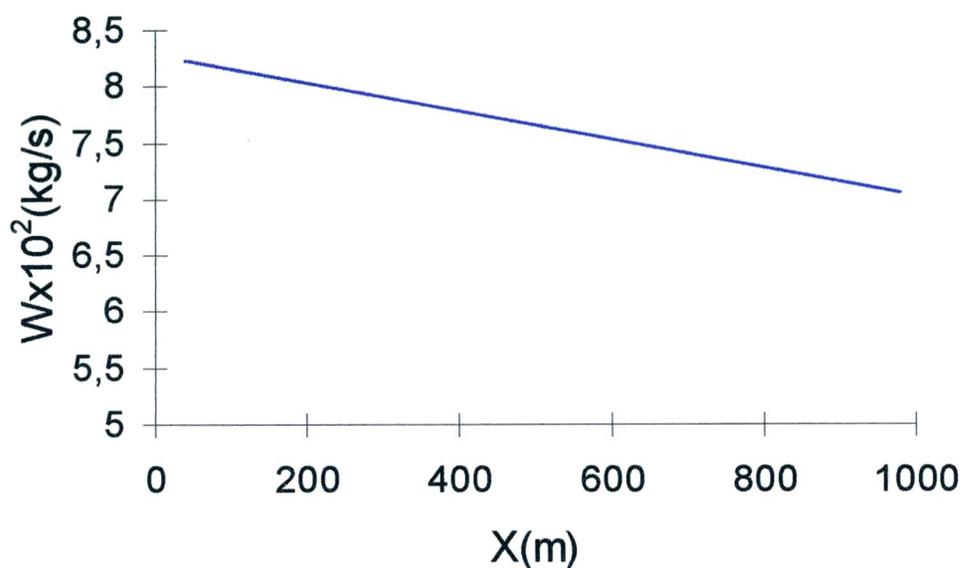


FIGURA 30. Perfil de vazão mássica do poluente para $L^{**}=1000\text{m}$, $H=5\text{m}$, $Q_1=16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $Q_2=800\text{m}^3/\text{h}$, Caso 10.

Analisando-se as Figuras 29 e 30, pode-se concluir que quanto maior o comprimento do rio, maior é a decomposição do poluente, devido à ação da taxa de reação microbiológica, diminuindo o efeito da descarga poluidora, restaurando a qualidade da água do rio.

Conforme se pode verificar através dos resultados obtidos apresentados, o modelo adotado neste trabalho para o estudo da poluição por descargas de efluentes líquidos em rios permite prever os efeitos da poluição

ao longo do comprimento do rio, tornando-se uma ferramenta útil no estudo do impacto ambiental.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

O principal objetivo deste trabalho é o estudo do problema da poluição de rios por descarga de efluente líquido industrial, através de uma metodologia numérica, onde são resolvidas as equações de conservação da massa, quantidade de movimento e espécie química.

A modelagem numérica do problema físico, considerando-se escoamento laminar, bidimensional e isotérmico de um fluido newtoniano incompressível, em regime permanente, permitiu conhecer os campos de velocidade, concentração e vazão mássica ao longo do comprimento do rio.

Os parâmetros geométricos do fenômeno físico estudado foram variados, a fim de se determinar sua influência e a das velocidades de escoamento do rio e do efluente sobre o perfil de concentração através da seção transversal e vazão mássica do poluente ao longo do comprimento do rio. Desta forma, foram estudados dez casos.

No primeiro caso estudado, Caso 1, as vazões do rio e do efluente foram mantidas a $16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $160\text{m}^3/\text{h}$, respectivamente, considerando-se

como, dimensões do rio, 100m para o comprimento e 5m para a largura. Observou-se que a concentração do poluente, na saída do escoamento, diminuiu 11% em relação à concentração no ponto tomado logo após a descarga do efluente.

Para as mesmas condições acima apresentadas, variou-se a vazão do efluente para $320\text{m}^3/\text{h}$, $480\text{m}^3/\text{h}$ e $800\text{m}^3/\text{h}$, correspondendo aos Casos 2, 3 e 4, respectivamente, através do que se observou que o aumento na vazão do efluente aumenta o campo de difusão do poluente, levando o efeito de contaminação mais longe da margem de descarga. Por outro lado, diminui para 83%, no Caso 4, a concentração do poluente na saída do escoamento, em relação a um ponto logo após a descarga do mesmo.

Para o Caso 5, mantendo-se o comprimento do rio de 100m e a vazão do rio de $16.000\text{m}^3/\text{h}$, a largura do rio foi aumentada para 50m. Observou-se que a diminuição na velocidade de escoamento do rio não diminuiu a concentração do poluente, a qual permaneceu próxima ao valor da região de entrada do efluente. Este fato pode ser explicado devido a taxa de reação ser função da concentração do substrato que, neste caso, é extremamente reduzida. Além disso, o campo de difusão é menor, não chegando a um metro da margem de descarga.

Mantendo-se as dimensões e a vazão do rio iguais às do Caso 5, aumentou-se a vazão do efluente para $320\text{m}^3/\text{h}$, Caso 6. O aumento da velocidade do efluente provocou um aumento na região de difusão da contaminação, além do surgimento de uma região de recirculação, logo após a

descarga de efluente, devido à diferença no gradiente de velocidades do rio e do efluente. Observa-se, ainda, uma pequena diminuição na concentração do poluente na saída do escoamento.

Estudaram-se, ainda, os casos em que a vazão do rio foi mantida igual a $16.000\text{m}^3/\text{h}$, a largura do rio igual a 5m , o comprimento do rio igual a 600m , variando-se vazão do efluente de $160\text{m}^3/\text{h}$ (Caso 7) para $800\text{m}^3/\text{h}$ (Caso 8). Foi obtido, em ambos os casos, o perfil da vazão mássica do poluente, através do qual se observou uma queda linear da concentração do poluente ao longo do comprimento do rio. Para maiores vazões de efluente, ocorre um aumento no coeficiente angular da reta, indicando uma maior taxa de consumo do poluente.

Uma última situação foi estudada, na qual as condições dos Casos 7 e 8 foram mantidas; contudo, variou-se o comprimento do rio para 1000m . Pelos perfis de vazão mássica obtidos, pôde-se observar que quanto maior o comprimento do rio, maior é a decomposição do poluente, devido à ação da taxa de reação microbiológica, diminuindo o efeito da descarga poluidora, restaurando a qualidade da água do rio.

Uma análise global dos resultados obtidos demonstra que o ponto do comprimento do rio, em que a concentração do poluente pode ser desprezada, depende dos valores adotados tanto para a vazão do rio como para a do efluente. Desta forma, para os casos estudados, pode-se concluir que o caso que apresentou uma maior decomposição de poluente foi aquele em que as vazões do rio e do efluente eram iguais à $16.000\text{m}^3/\text{h}$ e $800\text{m}^3/\text{h}$,

respectivamente, e as dimensões iguais a 5m para a largura e 1000m para o comprimento do rio.

Através desse trabalho pode-se concluir , também, que o estudo do impacto ambiental de efluentes pode ser realizado através da solução das equações fundamentais, onde muitas contribuições podem ser dadas pelo relaxamento das hipóteses simplificativas aqui adotadas.

Como trabalhos futuros, sugere-se considerar o problema transiente, levando-se em conta a influência da profundidade do rio, tomando o problema tridimensional. Sugere-se, ainda, a abordagem do problema levando-se em conta vários pontos de descarga ao longo de um rio, as várias substâncias presentes na composição de um efluente industrial e, sobretudo, o uso de modelos cinéticos microbianos mais complexos para a determinação da taxa de reação, visando o aprofundamento do estudo sobre tratamentos preventivos da poluição ambiental.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [01] AIBA, S., SHODA, M. and NAGATANI, M., Kinetics of Product Inhibition in Alcohol Fermentation, Biotech. Bioeng., Vol. X, pp. 845-864, 1968.
- [02] BAILEY, J.E., Biochemical Engineering Fundamentals, McGraw-Hill, Tokyo, 1977.
- [03] BORTOLI, A.L. de, O Uso de Variáveis Co-localizadas na Solução de Escoamentos Supersônicos sobre corpos de Geometrias Arbitrárias, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1990.
- [04] BU'LOCK, J. and KRISTIANSEN, B., Basic Biotechnology, Academic Press, New York, 1987.
- [05] CHUNG, T.J., Finite Element Analysis of Fluid Dynamics, McGraw-Hill, New York, 1978.
- [06] Companhia Têxtil Hering, Blumenau, Santa Catarina, "Comunicação pessoal com Eng. Vidal Bazanini", 1995.
- [07] EDWARDS, V.H., The Influence of High Substrate Concentrations on Microbial Kinetics, Biotech. Bioeng., Vol. XII, pp. 679-712, 1970.
- [08] FISCHER, H.B., Dispersion predictions in natural streams, J. Hydraulics Div., Am. Soc. Civ. Engrs., Vol. 94, 927-943, 1968.

- [09] GHIA, K.N., GHIA, U. and SHIN, C.T., Adaptive Grid Generation for Flows with Local High Gradient Regions, Advances in Grid Generation, ASME, FED, Vol. 5, pp. 35-47, 1986.
- [10] GRAY, N.F., Activated Sludge - Theory and Practice, Oxford University Press, New York, 1990.
- [11] GRAY, N.F., Biology of Wastewater Treatment, Oxford University Press, New York, USA, 1992.
- [12] HASSAN, Y.A., RICE, J.G. and KIM, J.H., A Stable Mass-Flow-Weighted Two-Dimensional Skew Upwind Scheme, Numerical Heat Transfer, Vol. 6, pp. 395-408, 1983.
- [13] HUGET, R.G., The Evaluation and Development of Finite Volume Approximation Schemes for Fluid Flow and Heat Transfer Predictions, Ph.D Thesis, Waterloo, Canada, 1985.
- [14] JAMES, A., Mathematical Models in Water Pollution Control, John Wiley & Sons Co., 1978.
- [15] KAHLIG, P., One-Dimensional Transient Model for Short-Term Prediction of Downstream Pollution in Rivers, Water Research, Vol. 13, pp. 1311-1316, 1979.
- [16] KLEIN, L., River Pollution 1. Chemical Analysis, Butterworths Co., London, UK, 1971.
- [17] KLEIN, L., River Pollution 2. Causes and Effects, Butterworths Co., London, UK, 1972.
- [18] Lange's Handbook of Chemistry, McGraw-Hill, 13a. ed., 1985.

- [19] LEE, K.J. and ROGERS, P.L., The Fermentation Kinetics of Ethanol Production by *Zimomonas mobilis*, The Chemical Eng. J., Vol. 27, pp. B31-B38, 1983.
- [20] LILLINGTON, J.N., A Vector Upstream Differencing Scheme for Problems in Fluid Flow Involving Significant Source Terms in Steady-State Linear Systems, Int. Journal Numer. Methods in Fluids, Vol. 1, pp.3-16, 1981.
- [21] LONGO, A.N., Sistemas de Tratamento de Águas Residuais Têxteis, Química Têxtil, Vol. 20, pp. 19-22, São Paulo, 1987.
- [22] MALISKA, C.R., A Solution Method for Three-Dimensional Parabolic Fluid Flows Problems in Non-Orthogonal Coordinates, Ph.D. Thesis, University of Waterloo, Canada, 1981.
- [23] MALISKA, C.R., Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional - Coordenadas Generalizadas, Monografia submetida como requisito para o concurso de Professor Titular na área de Ciências Térmicas, Departamento de Engenharia Mecânica, UFSC, 1992.
- [24] MALISKA, C.R., Solução Numérica de Problemas de Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos em Coordenadas Genealizadas, I ENCIT, Rio de Janeiro, 1986.
- [25] MARCHI, C.H., MALISKA, C.R. and BORTOLI, A.L. de, The Use of Co-located Variables in the Solution of Supersonic Flows, COBEM 89 - X Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 1989.

- [26] NASSEHI, V. and BIKANGAGA, J.H., A Mathematical Model for the Hydrodynamics and Pollutants Transport in Long and Narrow Tidal Rivers, Appl. Math. Modelling, Vol. 17, pp. 415-422, 1993.
- [27] NEMEROW, N.L., Scientific Stream Pollution Analysis, Hemisphere Publishing Co., Washington, USA, 1980.
- [28] NIECKELE, A.O., Development and Evaluation of Numerical Schemes for the Solution of Convection-Diffusion Problems, Ph.D. Thesis, University of Minnesota, 1985.
- [29] ODEN, J.T. and WELFORD, L.C., Analysis of Flow of Viscous Fluids by Finite Element Method, AIAA Journal, Vol. 10, pp. 1590-1599, 1976.
- [30] PATANKAR, S.V., Numerical Heat Transfer and Fluid Flow, Hemisphere Publishing Co., Washington, USA, 1980.
- [31] PATANKAR, S.V., A Calculation Procedure for Two-Dimensional Elliptic Situations, Numerical Heat Transfer, Vol. 4, pp. 409-425, 1981.
- [32] PATANKAR and SPALDING, D.B., A Calculation Procedure for Heat, Mass and Momentum Transfer in Three-Dimensional Parabolic Flows, International Journal for Heat and Mass Transfer, Vol. 15, pp. 1787-1806, 1972.
- [33] PEREZ, J.O., Simulação Numérica de Descargas Térmicas em Corpos D'Água Rasos de Geometria e Profundidade Variáveis, Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1987.
- [34] PERRY, R.H. and CHILTON, C.H., Chemical Engineer's Handbook, 5a. ed., McGraw-Hill, 1973.

- [35] PERIC, M., KESSLER, R. and SCHEUERER, G., Comparison of Finite-Volume Numerical Methods with Staggered and Co-located Grids, Computers and Fluids, Vol. 16, pp. 389-403, 1988.
- [36] RAITHBY, G.D., Predictions of Dispersion by Surface Discharge, Basin Investigation and Modelling Section, Canada Centre for Inland Waters, Burlington, Ontario, Canada, 1976.
- [37] RAITHBY, G.D., Skew Upstream Differencing Schemes for Problems Involving Fluid Flow, Comp. Meth. Applied Mech. Eng., Vol. 9, pp. 153-164, 1976.
- [38] RAITHBY, G.D. and TORRANCE, K.E., Upstream-Weighted Differencing Schemes and their Application to Elliptic Problems Involving Fluid Flow, Computers and Fluids, Vol. 2, pp. 191-206, 1974.
- [39] RAW, M.J., A New Control-Volume Based Finite Element Procedure for the Numerical Solution of the Fluid Flow and Scalar Transport Equations, Ph.D. Thesis, Waterloo, Canada, 1985.
- [40] REID, R.C., PRAUSNITZ, J. and POLING, B.E., The Properties of Gases and Liquids, 4a. ed., McGraw-Hill, New York, USA, 1987.
- [41] ROACHE, P.J., Computational Fluid Dynamics, Hermosa Publishers, Albuquerque, N.M., USA, 1976.
- [42] SAWYER, C.N. and McCARTY, P.L., Chemistry for Environmental Engineering, McGraw-Hill, New York, USA, 1978.
- [43] SCHNEIDER, G.E. and RAW, M.J., Control Volume Finite-Element Method for Heat Transfer and Fluid Flow Using Co-located Variables - 1.

Computational Procedure, Numerical Heat Transfer, Vol. 11, pp. 363-390, 1987.

- [44] SCHNEIDER, G.E. and ZEDAN, M., A Modified Strongly Implicit Procedure for the Numerical Solution of Field Problems, Numerical Heat Transfer, Vol. 4, pp. 1-19, 1981.
- [45] SHIH, T.M., TAN, C.H. and HWANG, B.C., Effects of Grid Staggering on Numerical Schemes, Int. Journal for Numerical Methods in Fluids, Vol. 9, pp. 193-212, 1989.
- [46] SILVA, A.F.C. da, Um Procedimento em Volumes Finitos para a Solução de Escoamentos de Qualquer Velocidade, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1991.
- [47] SPALDING, D.B., A Novel Finite Difference Formulation for Differential Expressions Involving Both First and Second Derivatives, Int. Journal Num. Meth. Eng., Vol. 4, pp. 551-559, 1972.
- [48] TAYLOR, C. and HOOD, P., A Numerical Solution of the Navier-Stokes Equations Using the Finite Element Technique, Comput. Fluids, Vol. 1, pp. 73-100, 1973.
- [49] The MERCK Index, 10a. ed., Merck & Co., Inc., USA, 1983.
- [50] THOMPSON, J.F., WARSI, Z.U.A. and MASTIN, C.W., Numerical Grid Generation, Elsevier Sc. Pub. Co., Inc., USA, 1985.
- [51] ULSON DE SOUZA, A.A., Um Esquema para Minimização da Difusão Numérica na Solução de Escoamentos em Geometrias Arbitrárias, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.

- [52] ULSON DE SOUZA, A.A. e MALISKA, C.R., Utilização de Malhas Adaptativas em Problemas com Recirculação, Simpósio Mineiro de Mecânica Computacional, Belo Horizonte, pp. 320-326, 1991.
- [53] ULSON DE SOUZA, S.M.A.G., Um Esquema Numérico Utilizando Variáveis Co-localizadas com Função de Interpolação Completa para a Solução de Problemas de escoamento de Fluidos, Tese de Doutorado, Universidade Federal de Santa Catarina, 1992.
- [54] VAN DOORMAAL, J.P. and RAITBY, G.D., Enhancements of the SIMPLEC Method for Predicting Incompressible Fluid Flows, Numerical Heat Transfer, Vol. 7, pp. 147-163, 1984.
- [55] WEAST, R.C., Handbook of Chemistry and Physics, 64a. ed., CRC Press, Inc., USA, 1983.