



UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE PESQUISAS HIDRÁULICAS E ESCOLA DE ENGENHARIA
CURSO DE ENGENHARIA AMBIENTAL

VINICIUS BRANCO SCORTEGAGNA

**SIMULAÇÃO DA PROPAGAÇÃO DE POLUENTES EM MEIO
AQUÁTICO UTILIZANDO TRANSFORMAÇÕES CONFORMES**

Porto Alegre

Julho, 2016

VINICIUS BRANCO SCORTEGAGNA

**SIMULAÇÃO DA PROPAGAÇÃO DE POLUENTES EM MEIO
AQUÁTICO UTILIZANDO TRANSFORMAÇÕES CONFORMES**

Trabalho de Conclusão apresentado ao Curso de Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como parte dos requisitos para a obtenção do título de Engenheiro Ambiental.

Orientador: Jorge Rodolfo Silva Zabadal

Porto Alegre

Julho, 2016

CIP – Catalogação na Publicação

Scortegagna, Vinicius Branco
Simulação da Propagação de Poluentes em Meio
Aquático Utilizando Transformações Conformes /
Vinicius Branco Scortegagna. -- 2016.
50 f.

Orientador: Jorge Rodolfo Silva Zabadal.

Trabalho de conclusão de curso (Graduação) --
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Instituto
de Pesquisas Hidráulicas, Curso de Engenharia
Ambiental, Porto Alegre, BR-RS, 2016.

1. Dispersão de Poluentes. 2. Transformações
Conformes. 3. Transformação de Bäcklund. 4.
Transformada de Fourier. 5. Planejamento de Redes de
Esgoto. I. Zabadal, Jorge Rodolfo Silva, orient. II.
Título.

VINICIUS BRANCO SCORTEGAGNA

**SIMULAÇÃO DA PROPAGAÇÃO DE POLUENTES EM MEIO
AQUÁTICO UTILIZANDO TRANSFORMAÇÕES CONFORMES**

Trabalho de Conclusão do Curso de Engenharia Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul defendido e aprovado em 01/07/2016 pela Comissão Avaliadora constituída pelos professores:

Banca Examinadora:

.....
Prof. Dr. Jorge Rodolfo Silva Zabadal – Orientador
UFRGS – Departamento de Engenharia Mecânica, GENUC

.....
Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann
UFRGS – Departamento de Engenharia Mecânica, GENUC

.....
Prof. Dr. Renato Letizia Garcia
UERGS – Departamento de Energia e Meio Ambiente

Conceito:.....

Dedico este trabalho aos meus pais, Wilson e Tânia, pela paciência e compreensão que sempre tiveram.

Agradeço ao meu professor orientador, Jorge Zabadal, por todo apoio na orientação deste trabalho, pelo empenho nas explicações e pelas inúmeras conversas sobre tópicos avançados.

“Modelagem matemática é o processo de representar problemas provenientes de áreas além da própria matemática usando matemática”.

(Rainer Ansorge & Thomas Sonar)

RESUMO

SCORTEGAGNA, V. B. – Simulação da Propagação de Poluentes em Meio Aquático Utilizando Transformações Conformes. 2016. 50 f. Trabalho de Conclusão de Curso para Graduação em Engenharia Ambiental – Instituto de Pesquisas Hidráulicas e Escola de Engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

O trabalho proposto consiste na obtenção de soluções analíticas para problemas de propagação de poluentes em corpos hídricos bidimensionais com contornos irregulares. A distribuição de concentrações utilizada foi obtida resolvendo a equação advectivo-difusiva expressa em termos de coordenadas curvilíneas ortogonais, correspondentes à função corrente e ao potencial velocidade. Essas coordenadas foram escolhidas com o objetivo de padronizar o processo de aplicação das condições de contorno sobre margens de formato arbitrário. As respectivas soluções analíticas foram utilizadas para efetuar testes de carga unitária, a fim de verificar a influência individual de despejos lançados ao longo de um corpo hídrico sobre regiões estratégicas como balneários e áreas próximas a pontos de coleta de água para abastecimento. Os testes de carga unitária efetuados a partir de soluções analíticas visam reduzir o tempo de processamento requerido para o planejamento de redes de esgoto.

Palavras-chave: dispersão de poluentes; equação advectivo-difusiva; transporte mássico; decaimento bacteriano; transformações conformes, transformação de Bäcklund; transformada de Fourier; soluções analíticas; sistema de coordenadas curvilíneas ortogonais; planejamento de redes de esgoto; computação simbólica.

ABSTRACT

SCORTEGAGNA, V. B. – Simulation of Pollutant Propagation in Aquatic Environment Using Conformal Mapping. 2016. 50 p. Final Work to Graduate as an Environmental Engineer – Hydraulic Research Institute and Engineering School, Federal University of Rio Grande do Sul, Porto Alegre.

The proposed work consists of obtaining analytical solutions for pollutant propagation problems in two-dimensional water bodies with irregular contours. The concentration distribution used was obtained by solving the advection-diffusion equation expressed in terms of orthogonal curvilinear coordinates, corresponding to the stream function and the velocity potential. This coordinate system was chosen in order to standardize the process of applying the boundary conditions on shores of arbitrary format. The respective analytical solutions were used to perform unit load tests in order to verify the individual influence of a sewage dump thrown over a water body on strategical regions such as beaches or collection points for water supply. Unit load tests made using analytical solutions aimed at reducing the processing time required for the planning of sewer networks.

Key words: pollutant dispersion; advection-diffusion equation; mass transport; bacterial decay; conformal mapping, Bäcklund transformation; Fourier transform; analytical solutions; orthogonal curvilinear coordinate system; planning of sewage networks; symbolic computation.

SUMÁRIO

INTRODUÇÃO	11
1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS	14
1.1 EQUAÇÃO GERAL DE BALANÇO.....	14
1.1.1 Particularização ao Transporte Mássico	15
1.1.2 Definição do Fluxo Advectivo-Difusivo	15
1.2 CONSIDERAÇÕES SIMPLIFICATIVAS	16
1.2.1 Meio Homogêneo	17
1.2.2 Meio Isotrópico	18
1.2.3 Meio Uniforme	18
1.2.4 Escoamento Incompressível.....	19
1.2.5 Escoamento Irrotacional.....	19
1.2.6 Escoamento Bidimensional	20
1.2.7 Estado Estacionário.....	21
1.3 SOLUÇÕES ANALÍTICAS	22
1.3.1 Solução da Equação Cinética para Decaimento de Primeira Ordem.....	22
1.3.2 Solução da Equação de Transporte para Fontes Difusas	23
1.3.3 Solução da Equação de Transporte para Fontes Puntuais	27
1.4 TRANSFORMAÇÕES CONFORMES	32
2 RESULTADOS E DISCUSSÃO	34
2.1 RESULTADOS PRELIMINARES	35
2.1.1 Organização de Dados Experimentais.....	35
2.1.2 Análise de Resultados Numéricos	37
2.2 EXPLORANDO O MODELO BIDIMENSIONAL	40
2.2.1 Sensibilidade em Relação à Distância entre Margem e Despejo	40
2.2.2 Sensibilidade em Relação à Velocidade e Difusividade do Escoamento.....	42
2.2.3 Sensibilidade em Relação à Alteração da Geometria do Corpo Hídrico	44
CONCLUSÕES	46
BIBLIOGRAFIA REFERENCIADA	48
BIBLIOGRAFIA CONSULTADA	50

INTRODUÇÃO

É uma prática comum a utilização de rios como receptores das cargas de efluentes líquidos, muitas vezes *in natura*, que são geradas nos sistemas de esgotamento sanitário, e também como destino final dos rejeitos agrícolas e industriais ou de mineração. O objetivo é aproveitar a capacidade de diluição e autodepuração proporcionadas pelos sistemas lóticos e, assim, minimizar os custos de tratamento. Esta abordagem, no entanto, produz ela mesma novos problemas e custos para a população em geral: impactos no ambiente, externalidades na economia e danos à saúde pública. Daí a importância de mecanismos legais que possibilitem o controle da qualidade das águas, bem como das ferramentas técnicas de auxílio ao planejamento, monitoramento e gestão dos recursos hídricos, entre as quais a modelagem matemática se destaca como um instrumento fundamental. Isto se deve em grande parte à escassez de dados ambientais disponíveis, provocada pelos altos custos necessários para obtê-los. Em síntese, os modelos possibilitam a geração de informações organizadas adequadamente, integrando espacial e temporalmente dados experimentais dispersos e não raro estatisticamente desconexos, além de promover um melhor entendimento da dinâmica dos processos e permitir a previsão de condições futuras do sistema em relação a parâmetros relevantes¹.

Nos estudos de impacto ambiental para projetos de redes de esgoto, uma das informações que se deseja produzir é a descoberta de uma distância segura em que se possa despejar o efluente líquido através de um emissário sem que a pluma de dispersão atinja, por exemplo, os balneários localizados na área vicinal ou pontos de captação de água para abastecimento. Naturalmente, pode-se estimar também os níveis de contaminação que serão produzidos caso seja inevitável que o poluente se propague até as regiões de interesse.

A fim de se obter uma estimativa confiável do comprimento ótimo de um emissário, que seja capaz de ao mesmo tempo mitigar ou até eliminar os impactos negativos potenciais e ainda minimizar os custos totais do empreendimento, é necessário realizar diversas simulações computacionais que prevejam a distribuição espacial aproximada das concentrações de poluente para uma quantidade elevada de cenários (de trezentos a quinhentos), utilizando modelos matemáticos de transporte mássico. O tempo de processamento exigido pelo programa que implementa o modelo, portanto, é um fator crítico para o profissional da área, podendo se tornar um impeditivo em certas aplicações que exijam alto nível de detalhe em razão da provável demora na geração de resultados.

¹ (FERNANDEZ, 2007, p. 4).

Como agravante, a equação diferencial que rege estes fenômenos pode se tornar tanto mais complexa quanto menor for o número de considerações simplificativas que possam ser adotadas na forma de hipóteses fracas, ou seja, sem entrar em conflito com as características específicas da situação física de interesse. Além disso, quanto mais irregular for a geometria do sistema maior será o custo computacional, e, conseqüentemente, menor a velocidade de processamento.

Três tipos de método existem para a resolução de equações diferenciais e implementação do modelo: numéricos, analíticos e híbridos. Os métodos numéricos usualmente empregados pela comunidade científica costumam fornecer resultados suficientemente realistas² para problemas de transporte. Entretanto, muitas vezes demandam alto esforço computacional e, por isso mesmo, apresentam um tempo de processamento que em alguns casos pode inviabilizar a geração de um número suficiente de cenários em tempo hábil. Na aplicação de soluções numéricas à dinâmica de fluidos computacional (CFD), seja pelo método das diferenças finitas, dos elementos finitos ou dos volumes finitos, é comum ter de discretizar o domínio em malha fina de densidade variável com milhares ou até milhões de pontos, produzindo sistemas algébricos de ordem demasiadamente elevada³.

No intuito de contornar os problemas mencionados, o emprego de soluções analíticas se mostra mais vantajoso: por estas serem expressas em forma fechada, é possível escrever códigos-fonte pequenos que são executados em um tempo menor de processamento, uma vez que apresentam uma diminuição drástica na quantidade de operações em ponto flutuante a serem feitas e, conseqüentemente, na memória requerida para rodar as rotinas necessárias⁴.

Contudo, apesar da evolução dos métodos analíticos para a obtenção de soluções de equações advectivo-difusivas, a velocidade de processamento dos códigos-fonte resultantes ainda é limitada pela complexidade da geometria do domínio. Frequentemente se faz necessário discretizar o corpo hídrico em malha relativamente fina devido ao formato irregular das margens e ilhas. No trabalho proposto é apresentada uma nova abordagem semi-analítica na qual a equação advectivo difusiva é expressa em termos de novas coordenadas curvilíneas ortogonais, definidas pelo potencial velocidade e pela função corrente. A reformulação do modelo visa padronizar as condições de contorno a prescrever, além de aumentar consideravelmente o tamanho dos elementos da malha correspondente. A definição do novo sistema de coordenadas é obtida através de uma função de variável complexa que efetua uma

² (JOBIM, 2012).

³ (FERNANDEZ, 2007, p. 8; HAAG, 2003, p. 2).

⁴ (POFFAL, 2005, p. 1).

transformação conforme, cujo objetivo consiste em mapear placas planas em trechos relativamente amplos de margens irregulares. O emprego desta técnica produz soluções em forma fechada para modelos uni e bidimensionais de propagação de poluentes tanto conservativos como não conservativos, ao passo que a implementação destas soluções gera códigos simbólicos bastante compactos e de alta performance computacional.

Primeiramente, os fundamentos teóricos que embasam a proposta do trabalho serão apresentados didaticamente, desde princípios gerais, de tal maneira que possa servir como um manual para o estudante interessado em organizar, aprofundar ou ampliar os conhecimentos adquiridos e desenvolvidos nas disciplinas correspondentes ao assunto. Objetiva-se com isso, também, complementar e atualizar a literatura disponível, facilitando a delimitação de trabalhos futuros que explorem aspectos diversos da temática ou que partam para tópicos mais avançados.

A literatura disponível para este empreendimento é bem consolidada. Em Haag (2003) foi apresentado um método analítico para se obter uma solução da equação advectivo-difusiva em coordenadas curvilíneas utilizando transformações conformes para mapear um corpo hídrico de geometria arbitrária em um semiplano. Em Poffal (2005), dois métodos para a solução em coordenadas cartesianas foram desenvolvidos, utilizando regras de manipulação de exponenciais de operadores diferenciais e aplicando simetrias de Lie. Em Fernandez (2007), utilizou-se duas restrições diferenciais de primeira ordem a fim de encontrar transformações auto-Bäcklund para a equação advectivo-difusiva bidimensional em regime estacionário. Posteriormente, o procedimento foi ampliado em Garcia (2009), no qual utilizaram-se três restrições para resolver o problema tridimensional estacionário e desenvolveu-se um método para o cálculo do coeficiente de difusão em escoamentos oscilatórios baseado na equação de Korteweg-de Vries (KdV) escrita em coordenadas cilíndricas. Além disso, em Zabadal, Garcia e Ribeiro (2012) foram introduzidos e sistematizados em livro-texto os principais métodos de resolução de equações diferenciais inspirados na escola russa de matemática, tais como gênese, mapeamento, split, prescrição de variedades, restrições diferenciais e redução de ordem, os quais têm sido desenvolvidos com maior intensidade nos últimos vinte anos com a substituição de algoritmos numéricos por sistemas de processamento simbólico. Também nesta obra foi apresentado o método específico de obtenção das transformações conformes que será utilizado no presente trabalho para gerar trechos de margens de rios com formatos irregulares.

Como complementação, resultados preliminares serão apresentados a fim de estimar a ordem de grandeza das aproximações obtidas em relação a dados experimentais. Em seguida, a solução bidimensional será empregada através de um programa em Maple para gerar cenários explorando as possibilidades oferecidas pelo modelo.

1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Na modelagem matemática da dispersão de substâncias ou coliformes em meio aquático utiliza-se a Equação Advectivo-Difusiva, a qual será deduzida primeiramente em sua forma mais genérica a partir da Equação Geral de Balanço, simplificada através de considerações devidamente justificadas e resolvida analiticamente nesta seção. A seguinte derivação⁵, baseada e adaptada de Crank (1975) e Kambe (2007), utiliza a formulação euleriana, perspectiva na qual se adota um ponto de referência fixo em relação ao sistema estudado, ao contrário da lagrangeana, onde a referência acompanha o movimento realizado pelo sistema.

1.1 EQUAÇÃO GERAL DE BALANÇO

Dada uma propriedade extensiva⁶ E , um elemento diferencial de volume $dx dy dz$ é possuidor de uma propriedade intensiva derivada que forma um campo escalar $I(x, y, z, t)$ tal que $I = dE/dx dy dz$, representando uma concentração ou densidade local do campo E . Da mesma forma, o fluxo total da propriedade extensiva forma o campo vetorial $\mathbf{J}(x, y, z, t)$ cujos componentes J_x, J_y e J_z passam respectivamente pelas áreas transversais $dy dz, dz dx$ e $dx dy$ do elemento de volume, tal que $\mathbf{J} = (dE/dy dz dt)\hat{\mathbf{i}} + (dE/dz dx dt)\hat{\mathbf{j}} + (dE/dx dy dt)\hat{\mathbf{k}}$. Fazendo o balanço no elemento diferencial (Fig. 1), tem-se a *equação geral de balanço*

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{dE}{dx dy dz} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{dE}{dy dz dt} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{dE}{dz dx dt} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{dE}{dx dy dt} \right) = \sigma \quad , \quad (1)$$

onde $\sigma(x, y, z, t)$ é um termo que contempla as taxas totais de entrada e saída no sistema.

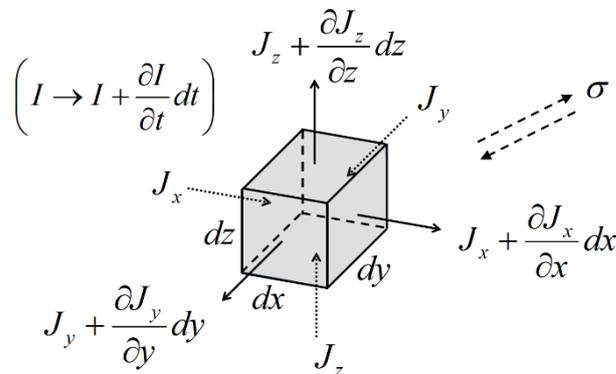


Figura 1: balanço no elemento infinitesimal.

⁵ O pesquisador já familiarizado com o processo de dedução de equações advectivo-difusivas via balanço em volume de controle infinitesimal pode dispensar a leitura desta seção.

⁶ Tal como massa, energia, entropia, entalpia, ou qualquer outra característica que dependa do tamanho do sistema.

1.1.1 Particularização ao Transporte Mássico

Dependendo da situação física que se deseja simular, a função I pode ser tanto a densidade de partículas N quanto a concentração mássica C de algum poluente, ou mesmo a própria massa específica ρ do fluido em questão para o caso de modelagem do escoamento⁷. Se a propriedade E for a massa M de alguma substância, então $I = C$ e tem-se que

$$\sigma = Q + R + S \quad , \quad (2)$$

onde $Q(x, y, z, t)$ é uma fonte arbitrária no interior do domínio, a função $R(x, y, z, t)$ é um polinômio de grau n referente à cinética das reações de formação e degradação

$$R = \sum_{i=1}^{i=n} k_i C^i \quad (1 \leq n \leq 3) \quad , \quad (3)$$

onde k_i são coeficientes cinéticos *indiretamente* dependentes de x, y, z, t , e o termo $S(x, y, z, t)$ contempla possíveis perdas ou ganhos por efeitos como mudanças de fase, evaporação, adsorção, absorção, sedimentação, ressuspensão e redissolução, os quais serão desconsiderados por estarem fora do escopo deste trabalho. Assim, a Eq. 1 pode ser particularizada:

$$\partial C / \partial t + \nabla \cdot \mathbf{J} = Q + R + S \quad . \quad (4)$$

1.1.2 Definição do Fluxo Advectivo-Difusivo

Introduzindo o campo vetorial de velocidades $\mathbf{V}(x, y, z, t)$ do escoamento tal que

$$\mathbf{V} = [u, v, w] \quad , \quad u = dx/dt \quad , \quad v = dy/dt \quad , \quad w = dz/dt \quad , \quad (5)$$

pode-se escrever a expressão do fluxo total \mathbf{J} como um somatório de fluxos mássicos resultantes de diferentes causas. Neste caso, tem-se o fluxo advectivo \mathbf{J}^A , que ocorre em decorrência do movimento do fluido, e o fluxo difusivo \mathbf{J}^D , que ocorre como consequência do movimento browniano e pelo processo de mistura provocado por ondulação e turbulência no escoamento, sendo perceptível graças ao contraste produzido pelo gradiente de concentração, ou seja,

$$\mathbf{J} = \mathbf{J}^A + \mathbf{J}^D = \mathbf{V}C - \Theta \cdot \nabla C \quad , \quad (6)$$

onde $\Theta(x, y, z, t)$ é o campo tensorial de difusividade

$$\Theta = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad . \quad (7)$$

⁷ Com a ressalva de que neste último caso não se podem detectar efeitos difusivos já que $\nabla \rho = 0$.

Nesta matriz, cada componente D_{ij} é o coeficiente de difusão que representa a influência de $\partial C/\partial j$ sobre o fluxo difusivo detectado na direção i . Assim como k_i , podem ser considerados funções *indiretamente* dependentes de x, y, z, t porque são determinados ou influenciados por fatores que podem variar no espaço e no tempo, tais como temperatura, pressão, turbulência, oscilação e agitação do escoamento, além da própria concentração de poluente.

Escrevendo a equação (6) por extenso,

$$\mathbf{J} = \begin{bmatrix} uC \\ vC \\ wC \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} \partial C/\partial x \\ \partial C/\partial y \\ \partial C/\partial z \end{bmatrix}, \quad (8)$$

e resolvendo o produto da matriz 3×3 pelo vetor 3×1, gera-se o sistema de equações

$$\left\{ \begin{array}{l} J_x = uC - D_{xx}(\partial C/\partial x) - D_{xy}(\partial C/\partial y) - D_{xz}(\partial C/\partial z) \\ J_y = vC - D_{yx}(\partial C/\partial x) - D_{yy}(\partial C/\partial y) - D_{yz}(\partial C/\partial z) \\ J_z = wC - D_{zx}(\partial C/\partial x) - D_{zy}(\partial C/\partial y) - D_{zz}(\partial C/\partial z) \end{array} \right\}. \quad (9)$$

Finalmente, para escrever a equação de balanço particularizada em sua forma escalar deve-se aplicar o operador divergente na equação (6),

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = \nabla \cdot \mathbf{J}^A + \nabla \cdot \mathbf{J}^D = \nabla \cdot \mathbf{VC} - \nabla \cdot \mathbf{\Theta} \cdot \nabla C, \quad (10)$$

e substituir na equação (4), gerando:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + C \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) &= Q + R + S + \\ &+ \frac{\partial C}{\partial x} \left(\frac{\partial D_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial D_{zx}}{\partial z} \right) + \frac{\partial C}{\partial y} \left(\frac{\partial D_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial D_{zy}}{\partial z} \right) + \\ &+ \frac{\partial C}{\partial z} \left(\frac{\partial D_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial D_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial D_{zz}}{\partial z} \right) + \left(D_{xx} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{yy} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_{zz} \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) + \\ &+ \left(D_{xy} \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial y} + D_{xz} \frac{\partial^2 C}{\partial x \partial z} + D_{yx} \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial x} + D_{yz} \frac{\partial^2 C}{\partial y \partial z} + D_{zx} \frac{\partial^2 C}{\partial z \partial x} + D_{zy} \frac{\partial^2 C}{\partial z \partial y} \right). \end{aligned} \quad (11)$$

1.2 CONSIDERAÇÕES SIMPLIFICATIVAS

Em qualquer área da Engenharia, a listagem de todas as considerações simplificativas adotadas na fundamentação teórica da modelagem matemática é de grande importância, pois assim as limitações de utilização das equações são explicitadas de forma clara e completa, o que possibilita a correta aplicação das soluções obtidas às diversas situações físicas de interesse, bem como a comparação dos resultados com dados experimentais, para fins de validação, ou com simulações de outros modelos, para análise de semelhanças e diferenças.

1.2.1 Meio Homogêneo

Primeiramente, nota-se a presença de coeficientes de difusão fora da diagonal principal do tensor de difusividade. Estes podem existir porque, de acordo com Crank (1975, p. 5), “*nem sempre é verdadeiro, [...], que a direção do fluxo difusivo em qualquer ponto seja normal à superfície de concentração constante a passar pelo ponto.*” Para os casos em que existem certas “heterogeneidades” no meio, tais como regiões de superconcentração ou mudanças de fase, direções preferenciais de orientação das moléculas, ação de campos que interajam com a substância de interesse, ou mesmo efeitos intermoleculares importantes, será necessário então considerar o tensor completo⁸, em razão da manifestação da estrutura microscópica dos constituintes do fluido. Cada componente do fluxo difusivo corresponderá, portanto, a uma combinação linear dos termos do gradiente de concentração.

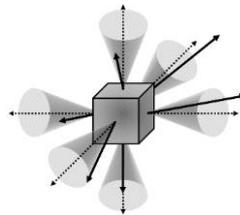


Figura 2: direções e magnitudes dos fluxos difusivos no elemento diferencial em meio não-homogêneo.

Entretanto, quando o meio em questão é *homogêneo*, o tensor Θ é reduzido⁹ a uma matriz diagonal \mathbf{D} , fazendo cada fluxo difusivo depender apenas de um coeficiente de difusão efetivo D_i que atua em sua direção normal (ainda abarcando anisotropia simples):

$$\Theta = \begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \xrightarrow{\text{HOMOGENEIDADE}} \mathbf{D} = \begin{bmatrix} D_x & 0 & 0 \\ 0 & D_y & 0 \\ 0 & 0 & D_z \end{bmatrix} . \quad (12)$$

O meio aquático apresenta homogeneização local e não há interação com campos de vetor gradiente oblíquo aos eixos de referência. Além disso, mesmo para os casos em que exista tal interação, a transformação do tensor ainda poderá ser feita, mas alterando o sistema de coordenadas (x, y, z) para que coincida com os eixos principais de difusão (ξ, η, ζ) .

Com esta consideração, a expressão do fluxo total torna-se

$$\mathbf{J} = \mathbf{VC} - \mathbf{D} \cdot \nabla C \quad , \quad (13)$$

⁸ Exemplos podem ser encontrados em áreas como cristalografia, magnetohidrodinâmica e física atmosférica.

⁹ Baseado em Carcione (2010, p. 4).

e então, desprezando também o termo S , a equação de balanço será simplificada:

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + C \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = Q + R + \\ + \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial D_x}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial D_y}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \frac{\partial D_z}{\partial z} + D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} . \end{aligned} \quad (14)$$

1.2.2 Meio Isotrópico

A expressão do fluxo será novamente simplificada se o meio for considerado *isotrópico*. Na ausência de qualquer característica que faça a probabilidade de uma molécula migrar de um ponto a outro ser diferente para cada direção de propagação do poluente, é seguro adotar $D_x = D_y = D_z = D$. Então, tem-se que $\mathbf{D} = D\delta$, onde δ é a função delta de Kronecker, e isso equivale a transformar o campo tensorial de difusividade em um campo escalar:

$$\mathbf{D} = \mathbf{D}(x, y, z, t) \xrightarrow{\text{ISOTROPIA}} D = D(x, y, z, t) . \quad (15)$$

Daí a expressão mais comumente conhecida para o fluxo total:

$$\mathbf{J} = \mathbf{VC} - D\nabla C . \quad (16)$$

Como não há justificativas físicas para considerar o meio anisotrópico, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + C \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = Q + R + \\ + \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial D}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial D}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial z} \frac{\partial D}{\partial z} + D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) . \end{aligned} \quad (17)$$

1.2.3 Meio Uniforme

Uma vez que as condições de temperatura, pressão, ondulação e turbulência são aproximadamente as mesmas em todos os pontos, é razoável supor que o meio é *uniforme*, adotando coeficientes difusivos e cinéticos válidos para o domínio inteiro, representando médias espaciais (denotadas pela barra superior curva), ou seja:

$$\left\{ \begin{array}{l} D = D(x, y, z, t) \\ k_i = k_i(x, y, z, t) \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{UNIFORMIDADE}} \left\{ \begin{array}{l} D = \bar{D}(t) \\ k_i = \bar{k}_i(t) \end{array} \right\} . \quad (18)$$

Isto permite cancelar as derivadas parciais do coeficiente de difusividade:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} + C \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} \right) = Q + R + D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) . \quad (19)$$

1.2.4 Escoamento Incompressível

Se o fluido que carrega o poluente for *incompressível*, como é o caso do escoamento líquido que constitui o meio de interesse, então o campo de velocidades possui divergente igual a zero como consequência da Equação de Continuidade¹⁰, ou seja, aplicando a Equação Geral de Balanço para o próprio líquido em questão tem-se que a massa específica ($I = \rho$) é constante ($d\rho/dt = 0$) e não há termos difusivos ($\nabla\rho = 0$) nem geração ou decaimento ($\sigma = 0$):

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = -\frac{1}{\rho} \frac{d\rho}{dt} \xrightarrow{\text{INCOMPRESSIBILIDADE}} \nabla \cdot \mathbf{V} = 0 \quad . \quad (20)$$

Isso permite cortar os termos entre parênteses que multiplicam a concentração C no membro esquerdo da equação principal:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} = Q + R + D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad . \quad (21)$$

1.2.5 Escoamento Irrotacional

Um aspecto importante a ser reconhecido é que, quando se trabalha em um problema de escala geográfica, os efeitos da viscosidade que formam a camada limite hidrodinâmica nas margens do rio podem ser desprezados e o fluido considerado invíscido (com viscosidade igual a zero). O escoamento, portanto, resulta *irrotacional*, ou seja, o rotacional do campo de velocidades é cancelado ao invés de constituir a vorticidade $\boldsymbol{\omega}$:

$$\nabla \times \mathbf{V} = \boldsymbol{\omega} = \begin{vmatrix} \hat{\mathbf{i}} & \hat{\mathbf{j}} & \hat{\mathbf{k}} \\ \partial_x & \partial_y & \partial_z \\ u & v & w \end{vmatrix} \xrightarrow{\text{IRROTACIONALIDADE}} \nabla \times \mathbf{V} \equiv 0 \quad . \quad (22)$$

Isto implica

$$\frac{\partial w}{\partial y} = \frac{\partial v}{\partial z} \quad , \quad \frac{\partial u}{\partial z} = \frac{\partial w}{\partial x} \quad , \quad \frac{\partial v}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial y} \quad . \quad (23)$$

Adotada a consideração de irrotacionalidade em conjunto com a de incompressibilidade, resulta que o escoamento é dito *potencial*, o que terá sua importância apreciada na posterior apresentação de soluções analíticas da equação advectivo-difusiva durante o processo de generalização da geometria do domínio.

¹⁰ Onde o operador $d(\)/dt$ representa a derivada material: $\partial(\)/\partial t + \mathbf{V} \cdot \nabla(\)$.

1.2.6 Escoamento Bidimensional

Muitos rios e lagos podem ser reduzidos a um problema *bidimensional* pelo fato de serem como lâminas d'água: já que a profundidade é muito menor que a distância entre as margens, a dispersão já terá tido tempo suficiente para homogeneizar o perfil vertical de concentração no momento em que a pluma houver se espalhado horizontalmente em escala geográfica. Como conseqüência, $\partial C/\partial z = 0$ e os campos envolvidos passam então a ser considerados independentes da dimensão vertical:

$$\left\{ \begin{array}{l} C = C(x, y, z, t) \\ \mathbf{J} = \mathbf{J}(x, y, z, t) \\ \mathbf{V} = \mathbf{V}(x, y, z, t) \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{BIDIMENSIONALIDADE}} \left\{ \begin{array}{l} C = C(x, y, t) \\ \mathbf{J} = \mathbf{J}(x, y, t) \\ \mathbf{V} = \mathbf{V}(x, y, t) \end{array} \right\} . \quad (24)$$

No entanto, mantém-se a tridimensionalidade dos vetores unitários para que o operador rotacional continue fazendo sentido:

$$\hat{\mathbf{i}} = [1, 0, 0] \quad , \quad \hat{\mathbf{j}} = [0, 1, 0] \quad , \quad \hat{\mathbf{k}} = [0, 0, 1] \quad . \quad (25)$$

A bidimensionalidade do sistema pode ainda facilitar a aplicação de um procedimento que introduz uma nova simplificação: dependendo da maneira pela qual o corpo hídrico é subdividido, o termo de fonte Q na equação principal pode ser negligenciado. Para tanto, basta considerar que o efeito da presença de cada fonte pode ser emulado através da prescrição de condições de contorno a montante de cada subdomínio gerado, conforme ilustrado a seguir.

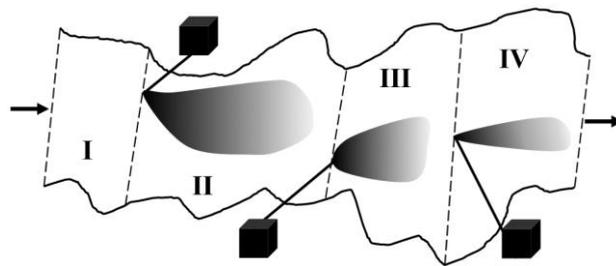


Figura 3: exemplo genérico de definição dos subdomínios com base nas posições de despejos pontuais.

Com estas alterações, e admitindo que a cinética de reações pode ser representada por um decaimento de primeira ordem $R = -kC$, gera-se a *equação advectivo-difusiva bidimensional para poluentes não conservativos*:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - kC \quad . \quad (26)$$

Esta é a expressão que constitui a equação alvo principal deste trabalho.

1.2.7 Estado Estacionário

Quando se tenciona estimar o nível da poluição causada por despejos de sistemas de esgoto em diferentes regiões de um curso d'água, seja para classificação e enquadramento de acordo com a legislação vigente ou para projeção das condições de balneabilidade, existe interesse em gerar resultados que expressem o sistema em seu *estado estacionário*. Já que a escala de tempo na qual ocorre a dispersão é muito superior ao período característico das flutuações térmicas e hidrodinâmicas do escoamento, o padrão de evolução temporal dos coeficientes difusivos e cinéticos e do campo de velocidades apresenta estacionariedade, ou seja, oscilações estocásticas de baixa amplitude ao redor de um valor médio fixo.

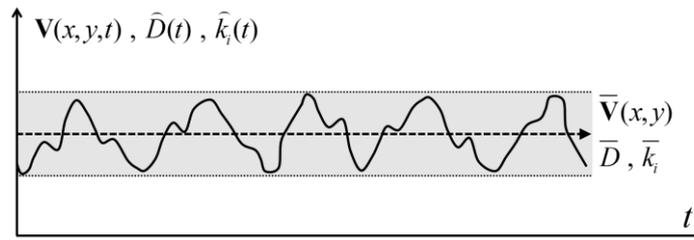


Figura 4: representação hipotética de uma série estacionária.

Assim, os coeficientes podem ser considerados constantes representando médias temporais (denotadas pela barra superior reta), enquanto as velocidades passam a ser funções independentes do tempo:

$$\left\{ \begin{array}{l} D = \widehat{D}(t) \\ k_i = \widehat{k}_i(t) \\ u = u(x, y, t) \\ v = v(x, y, t) \end{array} \right\} \xrightarrow{\text{ESTACIONARIEDADE}} \left\{ \begin{array}{l} D = \bar{D} \\ k_i = \bar{k}_i \\ u = \bar{u}(x, y) \\ v = \bar{v}(x, y) \end{array} \right\} . \quad (27)$$

Finalmente, dado que o único efeito transiente sobre a distribuição de concentrações a ser considerado se deve aos efeitos da cinética de degradação, constituindo um fenômeno independente do transporte mássico, a equação alvo pode ser desacoplada em um sistema de equações diferenciais através do processo de “*split*”¹¹:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -kC \quad , \quad u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) . \quad (28)$$

Estas duas equações serão doravante chamadas, respectivamente, de *equação cinética* e *equação de transporte*.

¹¹ (ZABADAL; GARCIA; RIBEIRO, 2012, p. 103).

1.3 SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Uma vez que a equação alvo foi desacoplada em um sistema de duas equações, as mesmas podem ser resolvidas paralelamente: a equação cinética por separação de variáveis e integração direta, e a equação de transporte utilizando transformações de Bäcklund e de Fourier.

1.3.1 Solução da Equação Cinética para Decaimento de Primeira Ordem

Em sua forma geral, a equação cinética pode ser escrita com não-linearidades polinomiais de segundo ou até terceiro grau para que seja possível simular, por exemplo, a dinâmica populacional de algas ou o efeito de cadeias mais complexas de reações químicas. Na equação alvo, entretanto, foi adotado um decaimento de primeira ordem facilmente solúvel, onde $k_1 = -k$ e $k_2 = k_3 = 0$, pois o comportamento assintótico do modelo cinético para a grande maioria dos poluentes é exponencial. Fazendo a separação de variáveis na primeira equação do sistema (28):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -kC \quad \rightarrow \quad \frac{\partial C}{C} = -k \partial t \quad . \quad (29)$$

Ao integrar os dois lados da equação em relação ao tempo, o membro direito deve receber a adição de uma função arbitrária $f(x, y)$. Desta forma, integrando e exponenciando ambos os membros, vem

$$\ln C = -kt + \ln f \quad \rightarrow \quad C = f \exp(-kt) \quad . \quad (30)$$

Explicitando os argumentos das funções, identifica-se a seguinte estrutura:

$$C(x, y, t) = f(x, y) e^{-kt} \quad . \quad (31)$$

A função $f(x, y)$, por sua vez, constitui justamente uma solução exata para a equação de transporte, pois, inserindo (31) na segunda equação de (28), resulta

$$\left(u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} \right) e^{-kt} = D \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) e^{-kt} \quad , \quad (32)$$

e já que o termo exponencial é não-nulo, este é cancelado e a eq. de transporte é restaurada:

$$u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \quad . \quad (33)$$

Isto significa que basta introduzir a solução de (33) em (31) para reacoplar *a posteriori* o efeito da cinética de degradação ao transporte mássico.

1.3.2 Solução da Equação de Transporte para Fontes Difusas

Genericamente, pode-se dizer que resolver uma equação diferencial significa reduzir sua ordem até a ordem zero, na qual não há mais derivadas de funções em sua expressão. Em outras palavras, encontra-se uma função definida implicitamente por uma equação algébrica a partir da qual pode ser obtida uma solução explícita. Ao mesmo tempo, o processo inverso de resolução, chamado de *gênese*, consiste em sintetizar equações diferenciais a partir da aplicação de operadores diferenciais sobre funções prescritas como variedades.

Neste espírito, o procedimento conhecido por *transformação de Bäcklund* na literatura especializada¹² consiste na fatoração da equação diferencial em um sistema de equações de ordem reduzida que sejam capazes de restaurar a equação alvo quando sobre ele são aplicados operadores diferenciais, tais como o divergente e o rotacional, por exemplo. Uma vez que a equação alvo compartilha soluções exatas com o sistema auxiliar, não se faz necessário resolver a equação em sua forma original. Além disso, como o sistema oriundo da fatoração consiste em leis de Fick generalizadas, o subespaço de soluções obtido obedece a condições de contorno de terceira espécie, que são fisicamente realistas.

A equação de transporte em regime estacionário, que constitui a equação alvo desta subseção, já possui uma forma fatorada em virtude do processo de dedução via conservação de massa em volume de controle infinitesimal, pois pode ser escrita em notação vetorial como

$$\nabla \cdot \mathbf{J} = 0 \quad (\mathbf{J} = \mathbf{V}C - D\nabla C) \quad . \quad (34)$$

A forma fatorada $\mathbf{F}(x, y)$ da equação de transporte, escrita em termos da função $f(x, y)$ introduzida anteriormente, corresponde à estrutura da expressão do fluxo total $\mathbf{J}(x, y, t)$. Assim,

$$\mathbf{F} = \mathbf{V}f - D\nabla f \quad (\nabla \cdot \mathbf{F} = 0) \quad . \quad (35)$$

Considerando que a equação alvo é obtida através da aplicação do operador divergente sobre o sistema auxiliar, é conveniente acrescentar elementos do espaço nulo do divergente às equações de ordem reduzida. Para tanto, basta definir o membro direito de cada equação desse sistema como os componentes de um campo puramente rotacional, denominado $\mathbf{A}(x, y)$. Em outras palavras, quando se impõe que

$$\mathbf{F} = \nabla \times \mathbf{A} \quad (36)$$

a equação alvo será satisfeita identicamente, posto que o divergente do rotacional é nulo:

$$\nabla \cdot \mathbf{F} = \nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{A}) \equiv 0 \quad . \quad (37)$$

¹² (POLYANIN *apud* PAGANIN, 2015, p. 3).

Expandindo o rotacional de \mathbf{A} e igualando as duas expressões de \mathbf{F} forma-se o sistema

$$\left\{ \begin{array}{l} uf - D \frac{\partial f}{\partial x} = F_x = \frac{\partial A_3}{\partial y} - \frac{\partial A_2}{\partial z} \\ vf - D \frac{\partial f}{\partial y} = F_y = \frac{\partial A_1}{\partial z} - \frac{\partial A_3}{\partial x} \\ wf - D \frac{\partial f}{\partial z} = F_z = \frac{\partial A_2}{\partial x} - \frac{\partial A_1}{\partial y} \end{array} \right\}, \quad (38)$$

onde w e as derivadas em relação a z são desprezadas pela consideração de bidimensionalidade:

$$\left\{ \begin{array}{l} uf - D \frac{\partial f}{\partial x} = + \frac{\partial A_3}{\partial y} \\ vf - D \frac{\partial f}{\partial y} = - \frac{\partial A_3}{\partial x} \end{array} \right\}, \quad \frac{\partial A_2}{\partial x} - \frac{\partial A_1}{\partial y} = 0. \quad (39)$$

A identidade vetorial explicitada em (37) sugere ainda que, necessariamente, o rotacional da própria forma fatorada \mathbf{F} também deve satisfazer a equação alvo, afinal

$$\nabla \cdot (\nabla \times \mathbf{F}) \equiv 0. \quad (40)$$

Ao aplicar o operador rotacional sobre o sistema auxiliar obtém-se uma equação adicional de segunda ordem, denominada *restrição diferencial*. Como o próprio nome indica, essa equação extra restringe o espaço de soluções da equação alvo, introduzindo implicitamente novas considerações simplificativas. Seu efeito sobre a descrição do cenário físico correspondente deve ser analisado a fim de verificar se as restrições que surgem como consequência de seu emprego são excessivamente severas. Tomando o rotacional dos membros da equação (36):

$$\nabla \times \mathbf{F} = \nabla \times \nabla \times \mathbf{A}. \quad (41)$$

Escrevendo o modelo vetorial dado por (41) como um sistema de equações escalares, vem

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial F_z}{\partial y} - \frac{\partial F_y}{\partial z} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial A_2}{\partial x} - \frac{\partial A_1}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial A_1}{\partial z} - \frac{\partial A_3}{\partial x} \right) \\ \frac{\partial F_x}{\partial z} - \frac{\partial F_z}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\partial A_3}{\partial y} - \frac{\partial A_2}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial A_2}{\partial x} - \frac{\partial A_1}{\partial y} \right) \\ \frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial A_1}{\partial z} - \frac{\partial A_3}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial A_3}{\partial y} - \frac{\partial A_2}{\partial z} \right) \end{array} \right\}. \quad (42)$$

Eliminando-se os termos anulados pela consideração de bidimensionalidade, as duas primeiras equações do sistema em (42) são inteiramente canceladas, restando apenas a terceira.

Renomeia-se então a componente $A_3 = a(x, y)$ no intuito de obter maior clareza na notação:

$$\frac{\partial F_y}{\partial x} - \frac{\partial F_x}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(- \frac{\partial a}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial a}{\partial y} \right). \quad (43)$$

Substituindo em seguida as expressões para F_x e F_y , resulta:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(v f - D \frac{\partial f}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(u f - D \frac{\partial f}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(-\frac{\partial a}{\partial x} \right) - \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial a}{\partial y} \right) . \quad (44)$$

Aplicando as derivadas parciais com auxílio da regra do produto e rearranjando:

$$f \underbrace{\left(\frac{\partial v}{\partial x} - \frac{\partial u}{\partial y} \right)}_{=0} + v \frac{\partial f}{\partial x} - u \frac{\partial f}{\partial y} - D \underbrace{\left(\frac{\partial^2 f}{\partial x \partial y} - \frac{\partial^2 f}{\partial y \partial x} \right)}_{=0} = -\frac{\partial^2 a}{\partial x^2} - \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} . \quad (45)$$

Os termos correspondentes à vorticidade no membro esquerdo em (45) são desprezados em virtude da irrotacionalidade do escoamento discutida na Seção 1.2.5, e as derivadas cruzadas se cancelam mutuamente. Multiplicando ambos os membros por -1 , tem-se:

$$u \frac{\partial f}{\partial y} - v \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} . \quad (46)$$

As derivadas parciais de $f(x, y)$ em (46) podem ser reescritas isolando-as em (39):

$$\frac{\partial f}{\partial x} = \frac{1}{D} \left(u f - \frac{\partial a}{\partial y} \right) , \quad \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{1}{D} \left(v f + \frac{\partial a}{\partial x} \right) . \quad (47)$$

Substituindo em (46) e rearranjando:

$$\underbrace{\frac{u v f}{D} - \frac{v u f}{D}}_{=0} + \frac{u}{D} \frac{\partial a}{\partial x} + \frac{v}{D} \frac{\partial a}{\partial y} = \frac{\partial^2 a}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 a}{\partial y^2} . \quad (48)$$

Finalmente, a expressão resultante em (48), escrita apenas em termos de $a(x, y)$, adquire a mesma estrutura da equação alvo quando $a = Df$. Substituindo em (39) e rearranjando:

$$u f = D \left(\frac{\partial f}{\partial x} + \frac{\partial f}{\partial y} \right) , \quad v f = D \left(\frac{\partial f}{\partial y} - \frac{\partial f}{\partial x} \right) . \quad (49)$$

O sistema assim produzido pode ser resolvido por integração direta. Isolando $D(\partial f / \partial x)$:

$$D \frac{\partial f}{\partial x} = u f - D \frac{\partial f}{\partial y} , \quad D \frac{\partial f}{\partial x} = -v f + D \frac{\partial f}{\partial y} . \quad (50)$$

Igualando os membros direitos em (50), rearranjando e separando as variáveis:

$$(u + v) f = 2D \frac{\partial f}{\partial y} \rightarrow \frac{\partial f}{f} = \frac{u + v}{2D} \partial y . \quad (51)$$

Adotando a função de integração $g(x)$, integrando e exponenciando ambos os membros:

$$\ln f = \frac{\int u \partial y + \int v \partial y}{2D} + \ln g \rightarrow f = g(x) \exp \left(\frac{\int u \partial y + \int v \partial y}{2D} \right) . \quad (52)$$

O mesmo procedimento pode ser feito novamente, desta vez isolando $D(\partial f / \partial y)$:

$$D \frac{\partial f}{\partial y} = uf - D \frac{\partial f}{\partial x} \quad , \quad D \frac{\partial f}{\partial y} = vf + D \frac{\partial f}{\partial x} \quad . \quad (53)$$

Igualando os membros direitos, rearranjando e separando as variáveis:

$$(u - v)f = 2D \frac{\partial f}{\partial x} \quad \rightarrow \quad \frac{\partial f}{f} = \frac{u - v}{2D} \partial x \quad . \quad (54)$$

Adotando a função de integração $h(y)$, integrando e exponenciando ambos os membros:

$$\ln f = \frac{\int u \partial x - \int v \partial x}{2D} + \ln h \quad \rightarrow \quad f = h(y) \exp \left(\frac{\int u \partial x - \int v \partial x}{2D} \right) \quad . \quad (55)$$

Graças às considerações adotadas na seção 1.2, estas expressões podem ser simplificadas. Já que o escoamento é considerado potencial e bidimensional, então o mesmo pode ser descrito em termos do *potencial velocidade* $\phi(x, y)$ e da *função corrente* $\psi(x, y)$, definidas pelas identidades de mecânica de fluidos e pelas condições de Cauchy-Riemann:

$$u = \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad , \quad v = \frac{\partial \phi}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x} \quad . \quad (56)$$

Este procedimento possibilitará definir um novo sistema de coordenadas curvilíneas ortogonais que generalizará o modelo para corpos hídricos de qualquer geometria, bem como padronizar as condições de contorno a fim de simplificar o código fonte correspondente e reduzir o respectivo tempo de processamento. Com base nas novas coordenadas, as integrais em (52) e (55) podem ser reescritas como

$$\int u \partial x = \int v \partial y = \phi + c_\phi \quad , \quad \int u \partial y = -\int v \partial x = \psi + c_\psi \quad , \quad (57)$$

onde c_ϕ e c_ψ são constantes de integração que podem ser consideradas nulas sem perda de generalidade por representarem valores de fundo arbitrários na região que contorna o domínio. Assim, as integrais de dentro da função exponencial em (52) e (55) são iguais:

$$\int u \partial x - \int v \partial x = \int v \partial y + \int u \partial y = \phi + \psi \quad . \quad (58)$$

Para que ambas as soluções sejam idênticas, portanto, é imperativo que $g(x) = h(y) = c_0$, ou seja, um valor constante representando a concentração à montante. Definindo que $\phi = (-\infty, 0]$, então, a solução da equação de transporte $f(x, y)$, escrita agora como $f(\phi, \psi)$, bem como seu subsequente reacoplamento com a cinética de degradação $C(\phi, \psi, t)$, serão dadas por:

$$f = b_0 + c_0 \exp \left(\frac{\phi + \psi}{2D} \right) \quad \rightarrow \quad C = c_0 \exp \left(\frac{\phi + \psi}{2D} - kt \right) \quad . \quad (59)$$

Aqui, b_0 é um termo adicionado para contemplar a simetria de translação da equação alvo, representando um *buffer* constante, ou seja, o valor mínimo de concentração que a substância de interesse atingirá, o qual pode ser considerado nulo para poluentes não conservativos, já que para estes a concentração C em geral cairá a zero quando $\phi \rightarrow -\infty$ na ausência de novas fontes.

É importante ressaltar que esta solução encontrada, expressa em (59), representa a distribuição de concentrações em regime estacionário para um cenário de propagação de poluentes provenientes de fontes difusas localizadas nas margens do corpo hídrico, como despejos de fossas sépticas. Por ser uma exponencial pura, ela não pode reproduzir o efeito de cargas pontuais, tal como emissários de redes de esgoto, uma vez que para isso seria necessária uma função de suporte compacto, a exemplo de um perfil gaussiano. Para que isto seja possível, uma solução adicional, válida para meio infinito, será apresentada a seguir.

1.3.3 Solução da Equação de Transporte para Fontes Pontuais

O processo de obtenção da solução para fontes difusas consistiu em resolver a forma fatorada da equação de transporte em regime estacionário primeiramente em coordenadas cartesianas (x, y) . No entanto, será possível produzir uma segunda solução para o modelo bidimensional invertendo a ordem dos procedimentos, ou seja, escrevendo primeiro a equação de transporte em termos do novo sistema de coordenadas curvilíneas (ϕ, ψ) e só então resolvê-la. Procede-se, portanto, redefinindo as derivadas parciais de primeira e segunda ordem da função $f(x, y)$ em termos de $\phi(x, y)$ e $\psi(x, y)$ utilizando a regra da cadeia e as identidades de mecânica de fluidos:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial f}{\partial x} = \frac{\partial \phi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \phi} + \frac{\partial \psi}{\partial x} \frac{\partial f}{\partial \psi} = u \frac{\partial f}{\partial \phi} - v \frac{\partial f}{\partial \psi} \\ \frac{\partial f}{\partial y} = \frac{\partial \phi}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial \phi} + \frac{\partial \psi}{\partial y} \frac{\partial f}{\partial \psi} = v \frac{\partial f}{\partial \phi} + u \frac{\partial f}{\partial \psi} \end{array} \right\} \quad (60)$$

Deve-se ainda aplicar mais uma vez a regra da cadeia neste resultado, a fim de redefinir as derivadas de segunda ordem. Em outras palavras, substitui-se os membros direitos das expressões resultantes do sistema em (60) dentro de si mesmas:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial^2 f}{\partial x^2} = u \frac{\partial}{\partial \phi} \left(u \frac{\partial f}{\partial \phi} - v \frac{\partial f}{\partial \psi} \right) - v \frac{\partial}{\partial \psi} \left(u \frac{\partial f}{\partial \phi} - v \frac{\partial f}{\partial \psi} \right) \\ \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} = v \frac{\partial}{\partial \phi} \left(v \frac{\partial f}{\partial \phi} + u \frac{\partial f}{\partial \psi} \right) + u \frac{\partial}{\partial \psi} \left(v \frac{\partial f}{\partial \phi} + u \frac{\partial f}{\partial \psi} \right) \end{array} \right\} \quad (61)$$

Já que o interesse está em reescrever o laplaciano de f em termos das novas coordenadas, é necessário somar as duas equações em (61). Aplicando as derivadas parciais ao conteúdo dos parênteses e multiplicando por u , v ou $-v$ de acordo com cada expressão, gera-se:

$$\begin{aligned} \nabla^2 f = & \left(u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + u \frac{\partial u}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \phi} - u \frac{\partial v}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \psi} - uv \frac{\partial^2 f}{\partial \phi \partial \psi} \right) + \\ & + \left(v^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} + v \frac{\partial v}{\partial \psi} \frac{\partial f}{\partial \psi} - v \frac{\partial u}{\partial \psi} \frac{\partial f}{\partial \phi} - uv \frac{\partial^2 f}{\partial \psi \partial \phi} \right) + \\ & + \left(v^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + v \frac{\partial v}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \phi} + v \frac{\partial u}{\partial \phi} \frac{\partial f}{\partial \psi} + uv \frac{\partial^2 f}{\partial \phi \partial \psi} \right) + \\ & + \left(u^2 \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} + u \frac{\partial u}{\partial \psi} \frac{\partial f}{\partial \psi} + u \frac{\partial v}{\partial \psi} \frac{\partial f}{\partial \phi} + uv \frac{\partial^2 f}{\partial \psi \partial \phi} \right) . \end{aligned} \quad (62)$$

Os termos com derivadas cruzadas se anulam e, rearranjando os restantes, tem-se

$$\begin{aligned} \nabla^2 f = & (u^2 + v^2) \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} \right) + \\ & + \frac{\partial f}{\partial \phi} \left(\left(u \frac{\partial u}{\partial \phi} - v \frac{\partial u}{\partial \psi} \right) + \left(v \frac{\partial v}{\partial \phi} + u \frac{\partial v}{\partial \psi} \right) \right) + \\ & + \frac{\partial f}{\partial \psi} \left(\left(v \frac{\partial u}{\partial \phi} + u \frac{\partial u}{\partial \psi} \right) - \left(u \frac{\partial v}{\partial \phi} - v \frac{\partial v}{\partial \psi} \right) \right) , \end{aligned} \quad (63)$$

onde se pode notar que as derivadas parciais das componentes do campo de velocidades podem ser também definidas com auxílio da regra da cadeia, tal como feito no sistema em (60):

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial u}{\partial x} = u \frac{\partial u}{\partial \phi} - v \frac{\partial u}{\partial \psi} \\ \frac{\partial u}{\partial y} = v \frac{\partial u}{\partial \phi} + u \frac{\partial u}{\partial \psi} \end{array} \right\} , \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial v}{\partial x} = u \frac{\partial v}{\partial \phi} - v \frac{\partial v}{\partial \psi} \\ \frac{\partial v}{\partial y} = v \frac{\partial v}{\partial \phi} + u \frac{\partial v}{\partial \psi} \end{array} \right\} . \quad (64)$$

Assim, estas relações podem ser substituídas na equação em (63) e os termos identificados respectivamente como o divergente e o rotacional do campo de velocidades são cancelados em função das considerações simplificativas discutidas e adotadas nas seções 1.2.4 e 1.2.5, permitindo enfim reescrever os termos difusivos da equação alvo:

$$\nabla^2 f = (u^2 + v^2) \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} \right) + \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \phi} \left(\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} \right)}_{=0} + \underbrace{\frac{\partial f}{\partial \psi} \left(\frac{\partial u}{\partial y} - \frac{\partial v}{\partial x} \right)}_{=0} . \quad (65)$$

Para completar o procedimento, resta apenas reescrever os termos advectivos,

$$\mathbf{V} \cdot \nabla f = u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} = u \left(u \frac{\partial f}{\partial \phi} - v \frac{\partial f}{\partial \psi} \right) + v \left(v \frac{\partial f}{\partial \phi} + u \frac{\partial f}{\partial \psi} \right) , \quad (66)$$

e reorganizar a expressão, gerando

$$\mathbf{V} \cdot \nabla f = (u^2 + v^2) \frac{\partial f}{\partial \phi} + \underbrace{(uv - vu)}_{=0} \frac{\partial f}{\partial \psi} \quad . \quad (67)$$

Finalmente a equação advectivo-difusiva para estado estacionário pode ser explicitada em função do novo sistema de coordenadas. Igualando os dois membros encontrados em (65) e (67) e dividindo ambos por $u^2 + v^2$:

$$u \frac{\partial f}{\partial x} + v \frac{\partial f}{\partial y} = D \left(\frac{\partial^2 f}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial y^2} \right) \rightarrow \frac{\partial f}{\partial \phi} = D \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} \right) \quad . \quad (68)$$

Este procedimento de generalização do sistema de coordenadas equivale a “desentortar” as linhas de fluxo e das margens ao passar de um gráfico $x \times y$ para $\phi \times \psi$.

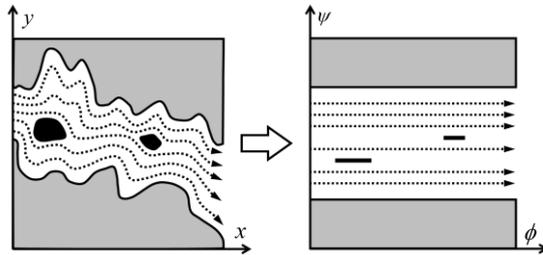


Figura 5: transformação do sistema de coordenadas (x, y) em (ϕ, ψ) .

A nova expressão em (68), por sua vez, pode ser simplificada de duas maneiras diferentes, dependendo das características do corpo hídrico específico que se deseja simular. O procedimento consiste em escolher uma entre duas possíveis considerações simplificativas suplementares, mutuamente excludentes, as quais permitem realizar a supressão de uma das derivadas parciais de segunda ordem da equação¹³.

Para os casos de *rios estreitos ou de escoamento lento*, o mesmo argumento que justifica a consideração de bidimensionalidade discutida na seção **1.2.6** também é válido para a distância entre margens: quando a distribuição de concentrações atingir o regime estacionário, o perfil transversal já estará homogeneizado. Assim, o termo difusivo nesta direção ($\partial^2 f / \partial \psi^2$) poderá ser desprezado e o modelo se tornará unidimensional, descrito por uma eq. diferencial ordinária:

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = D \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \cancel{\frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2}} \right) \rightarrow \frac{df}{d\phi} = D \frac{d^2 f}{d\phi^2} \quad . \quad (69)$$

¹³ A solução da expressão completa e a respectiva análise de sensibilidade relativa à supressão de cada um dos termos de segunda ordem serão temas de trabalhos futuros.

Esta equação pode ser integrada em ϕ e resolvida, a exemplo dos casos anteriores, utilizando separação de variáveis e uma segunda integração, como segue:

$$f = D \frac{df}{d\phi} + b_0 \rightarrow \frac{d\phi}{D} = \frac{df}{f - b_0} \rightarrow \frac{\phi}{D} + \ln c_0 = \ln(f - b_0) . \quad (70)$$

Exponenciando e reacoplando a solução da equação cinética, tem-se

$$f = b_0 + c_0 \exp\left(\frac{\phi}{D}\right) \rightarrow C = c_0 \exp\left(\frac{\phi}{D} - kt\right) , \quad (71)$$

onde b_0 representa o mesmo *buffer* constante mencionado na seção 1.3.2. Nota-se, no entanto, que novamente não se gerou como solução uma função de suporte compacto. De fato, a mesma não é necessária neste caso particular em virtude da própria consideração que o define.

Para os casos de *rios largos ou de escoamento rápido*, ao contrário, o termo difusivo a ser negligenciado passa a ser o da direção longitudinal ($\partial^2 f / \partial \phi^2$), visto que sua magnitude se torna desprezável se comparada à do termo advectivo ($\partial f / \partial \phi$) e, além disso, a difusão na direção transversal constitui neste caso justamente uma das informações de interesse do problema. Desta forma, a equação alvo mantém-se bidimensional e torna-se análoga à lei de Fourier para condução térmica:

$$\frac{\partial f}{\partial \phi} = D \left(\frac{\partial^2 f}{\partial \phi^2} + \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} \right) \rightarrow \frac{\partial f}{\partial \phi} = D \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} . \quad (72)$$

Isto significa que a mesma pode ser resolvida utilizando a solução clássica obtida através da *transformada de Fourier* (\mathbf{F}). Baseando-se em Strauch (2008) e aplicando \mathbf{F} na variável ψ ,

$$\mathbf{F}_\psi \left\{ \frac{\partial f}{\partial \phi} \right\} = D \mathbf{F}_\psi \left\{ \frac{\partial^2 f}{\partial \psi^2} \right\} , \quad (73)$$

tem-se que as operações de derivada parcial em relação a ϕ e de transformada em ψ no membro esquerdo são comutativas, e no membro direito se utiliza a propriedade de transformada da derivada. Adotando a notação $\mathbf{F}_\psi \{f(\phi, \psi)\} = \bar{f}(\phi, \omega)$ e separando variáveis:

$$\frac{\partial \bar{f}}{\partial \phi} = -D\omega^2 \bar{f} \rightarrow \frac{\partial \bar{f}}{\bar{f}} = -D\omega^2 \partial \phi , \quad (74)$$

onde ω é a frequência. Adotando uma função transformada $\bar{q}(\omega)$ para integrar e exponenciar,

$$\ln \bar{f} = -D\omega^2 \phi + \ln \bar{q} \rightarrow \bar{f} = \bar{q} \exp(-D\omega^2 \phi) , \quad (75)$$

tem-se que a função original q corresponde ao valor de f onde $\phi = 0$, ou seja,

$$\bar{f}(0, \omega) = \bar{q}(\omega) , \quad f(0, \psi) = q(\psi) . \quad (76)$$

Esta condição de contorno pode ser representada por uma função delta de Dirac $\delta(\psi - \psi_0)$ multiplicada pela vazão mássica de poluente Q_M resultante de um despejo puntual, aqui tomado como constante em razão da consideração de estado estacionário discutida na seção 1.2.7. Já que a função transformada $\bar{\delta}$ é conhecida, escreve-se

$$q = Q_M \delta(\psi - \psi_0) \rightarrow \bar{q} = Q_M \bar{\delta}(\psi - \psi_0) = Q_M \exp(-i\omega\psi_0) . \quad (77)$$

Substituindo (77) em (75) resta apenas aplicar a transformada inversa de Fourier:

$$\bar{f} = Q_M \exp(-D\omega^2\phi - i\omega\psi_0) \rightarrow f = \mathbf{F}_\psi^{-1}\{\bar{f}\} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \bar{f} \exp(i\omega\psi) d\omega , \quad (78)$$

ou seja,

$$f = \frac{Q_M}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-D\omega^2\phi + i\omega(\psi - \psi_0)) d\omega . \quad (79)$$

Utilizando a fórmula de Euler para reescrever a exponencial complexa e reconhecendo a paridade do integrando em relação à frequência ω resulta que

$$f = \frac{Q_M}{\pi} \int_0^{+\infty} \exp(-D\omega^2\phi) \cos(\omega(\psi - \psi_0)) d\omega , \quad (80)$$

onde a integral no membro direito desta equação possui uma solução gaussiana tabelada¹⁴:

$$\int_0^{+\infty} \exp(-r^2 s^2) \cos(ms) ds = \frac{\sqrt{\pi}}{2r} \exp\left(-\frac{m^2}{4r^2}\right) \quad (r \neq 0) . \quad (81)$$

Identificando $r = \sqrt{D\phi}$, $s = \omega$ e $m = \psi - \psi_0$ e rearranjando, vem

$$f = \frac{Q_M}{\sqrt{4\pi D\phi}} \exp\left(-\frac{(\psi - \psi_0)^2}{4D\phi}\right) \quad (\phi \neq 0) . \quad (82)$$

Esta solução admite simetrias de translação e de escala. Em outras palavras, as seguintes constantes arbitrárias podem ser incluídas, onde b_0 é o mesmo *buffer* citado anteriormente:

$$f = b_0 + \frac{c_0}{\sqrt{4\pi D(\phi + c_3)}} \exp\left(-\frac{c_1(\psi + c_2)^2}{4D(\phi + c_3)}\right) \quad (\phi + c_3 \neq 0) . \quad (83)$$

Aqui, os parâmetros c_0 e c_1 são fatores de escala que especificam respectivamente a altura e a largura da gaussiana gerada de acordo com a concentração e a vazão de entrada da carga de poluente, sendo que c_0 já incorpora o termo correspondente à vazão mássica Q_M em seu valor.

¹⁴ (DWIGHT *apud* STRAUCH, 2008). A expressão teve sua notação adaptada ao contexto deste trabalho.

Além disso, as constantes c_2 e c_3 são fatores de translação que modificam a localização do ponto de despejo, onde c_2 absorveu a constante $-\psi_0$. Supondo que c_2 e c_3 são previamente conhecidos, os parâmetros c_0 e c_1 são obtidos através da aplicação de duas restrições:

$$f(0, \psi_0) = f_0 \quad , \quad Q_M = \int_{\psi_{\min}}^{\psi_{\max}} \int_{\phi_{\min}}^{\phi_{\max}} f(\phi, \psi) d\phi d\psi \quad , \quad (84)$$

onde f_0 e ψ_0 representam, respectivamente, a concentração da descarga de poluente e a localização do ponto de despejo em relação ao eixo transversal. Da primeira equação é isolada a constante c_0 , enquanto c_1 pode ser estimada a partir da segunda equação via varredura e integração numérica.

Assim como nas subseções anteriores, pode-se reacoplar o modelo de transporte à cinética de decaimento, gerando a expressão

$$C = \frac{c_0}{\sqrt{4\pi D(\phi + c_3)}} \exp\left(-\frac{c_1(\psi + c_2)^2}{4D(\phi + c_3)} - kt\right) \quad (\phi + c_3 \neq 0) \quad , \quad (85)$$

para a qual as restrições apresentadas no sistema de equações (84) permanecem válidas ao fazer a substituição de f por C .

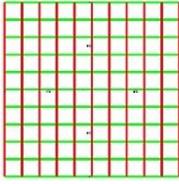
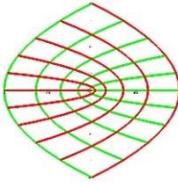
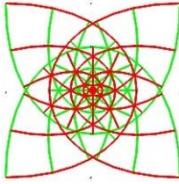
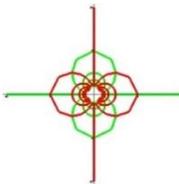
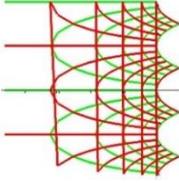
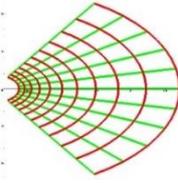
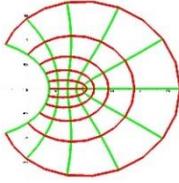
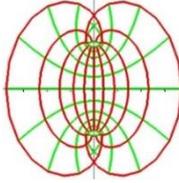
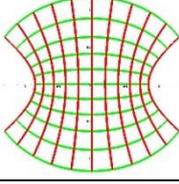
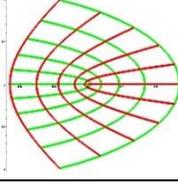
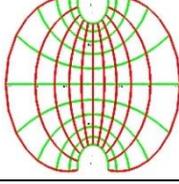
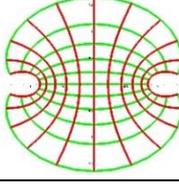
1.4 TRANSFORMAÇÕES CONFORMES

Uma transformação conforme consiste, basicamente, em um mapeamento entre funções que deforma o plano complexo preservando localmente os ângulos e conservando, assim, a ortogonalidade do sistema de coordenadas. Para aplicá-la a um corpo hídrico de interesse, define-se primeiramente uma função de variável complexa $w = w(z)$ e, em seguida, identificam-se as partes real e imaginária, respectivamente, como o potencial velocidade e a função corrente do escoamento, ou seja,

$$z = x + iy \quad \rightarrow \quad w = \phi + i\psi \quad . \quad (86)$$

Exemplos genéricos do efeito que a escolha de uma função $w(z)$ arbitrária exerce ao ser aplicada a transformação conforme podem ser encontrados em Haag (2003, p. 37 a 40). Entretanto, mais alguns são apresentados no quadro a seguir (Tab. 1), onde se utilizou o mesmo intervalo de valores $-(1+i) \leq z \leq +(1+i)$ para a plotagem dos gráficos em linha de comando da plataforma de trabalho clássica do Maple 15 (cuja licença é disponibilizada pela UFRGS para sua rede de computadores, ou para acesso remoto via VPN).

Tabela 1: exemplos de transformações conformes para várias funções $w(z)$ utilizando o mesmo intervalo.

$w = z$ 	$w = z^2$ 	$w = z^3$ 	$w = 1/z$ 
$w = \ln(z)$ 	$w = \exp(z)$ 	$w = \exp(z^2)$ 	$w = z + z \exp(z^2)$ 
$w = \sin(z)$ 	$w = \cos(z)$ 	$w = \tan(z)$ 	$w = \operatorname{erf}(z)$ 

Para que uma função $w(z)$ seja capaz de deformar a geometria do domínio de acordo com o formato de um corpo hídrico específico ela deve corresponder à inversa de uma função de ajuste $p(\phi)$ definida a partir de duas equações paramétricas que descreve aproximadamente a forma das margens. Entretanto, há uma maneira de evitar o emprego desse processo. Para isto pode-se segmentar as margens em subdomínios relativamente extensos (entre 2 e 10 km), mas que apresentam formatos mais simples do que a margem completa, e definir uma função $w(z)$ para cada trecho com a seguinte estrutura¹⁵:

$$w(z) = z + i \ln(g(z)) \quad , \quad (87)$$

onde $g(z)$ é um “modelo de ajuste baseado em polinômios e combinações lineares de funções trigonométricas”¹⁶ destinado a determinar a geometria do corpo hídrico. A expressão adotada tem como objetivo dispensar o uso de séries de Laurent para efetuar o ajuste da transformação conforme que mapeia a margem desejada. De fato, se as equações paramétricas que definem localmente uma determinada margem são dadas pelas funções $x_p(\phi)$ e $y_p(\phi)$, seria necessário, a princípio, efetuar a mudança de variável $\phi \rightarrow \phi + i\psi$ a fim de obter $z(w)$, ou seja:

$$p(\phi) = x_p(\phi) + iy_p(\phi) \quad \rightarrow \quad z(w) = x_p(\underbrace{\phi + i\psi}_w) + iy_p(\underbrace{\phi + i\psi}_w) \quad . \quad (88)$$

¹⁵ Por razões de orientação, o logaritmo natural da parte imaginária de $w(z)$ foi adotado com sinal negativo.

¹⁶ (ZABADAL; GARCIA; RIBEIRO, 2012, p. 110).

Entretanto, a transformação desejada, dada por $w = z^{-1}(z)$, exigiria a inversão da função, o que tornaria o processo computacionalmente oneroso. Embora o ajuste direto da função $w(z)$ possa ser feito utilizando séries de Laurent, essa representação produz, via de regra, um número excessivamente elevado de termos, de modo que seria necessário reescrever a função de variável complexa em termos de novas funções de base. Levando em conta que uma série de Laurent contém basicamente polinômios e funções racionais, e que apenas funções de suporte compacto poderiam ser usadas para construir trechos adjacentes que formam uma margem específica, a função logaritmo natural constitui um modelo adequado para efetuar esta operação de montagem¹⁷.

2 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo é apresentada uma análise prévia de viabilidade para a solução unidimensional obtida, com o objetivo de estimar indiretamente a confiabilidade da respectiva solução bidimensional. Para tanto, a solução unidimensional será inicialmente comparada com dados experimentais de oxigênio dissolvido (OD) ao longo do rio dos Sinos¹⁸. Em seguida o modelo bidimensional é investigado no que diz respeito à sensibilidade da distribuição de concentrações em relação a variações da localização do ponto de despejo e da predominância de efeitos difusivos ou advectivos no sistema. Finalmente, diferentes funções de variável complexa são exploradas, com o intuito de alterar a geometria das margens, bem como verificar os limites de aplicação de cada função específica.

Em todos os cálculos (salvo quando explicitado diferentemente) foi adotado um *coeficiente de difusão por oscilação superficial* $D = 0,24 \text{ m}^2/\text{s}$, estimado através de uma média aritmética entre os valores obtidos de duas formas diferentes em Garcia (2009, p. 71): o primeiro resolvendo a equação de Korteweg-de Vries (KdV) dada em coordenadas cilíndricas

$$\frac{\partial^3 u}{\partial r^3} - 6u \frac{\partial u}{\partial r} + \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u}{2t} = 0 \rightarrow D = 0,23 \text{ m}^2/\text{s} \quad , \quad (89)$$

e o segundo utilizando a definição do coeficiente de difusão em Mecânica Estatística

$$D = \lambda^2/2\tau \rightarrow D = 0,25 \text{ m}^2/\text{s} \quad , \quad (90)$$

onde λ é o percurso livre médio de um volume fictício e τ o período entre colisões sucessivas.

¹⁷ Contudo, deve-se ter em mente que o argumento do logaritmo natural deve tender a 1 em ambos os extremos do intervalo de interesse, para que o modelo represente uma função de suporte compacto.

¹⁸ A escolha deste parâmetro para comparação se deu principalmente pela disponibilidade das informações na bibliografia consultada e simultânea escassez dos dados aproveitáveis de outras substâncias.

2.1 RESULTADOS PRELIMINARES

Primeiramente, deseja-se testar os resultados do modelo unidimensional sem a preocupação de alterar a geometria do corpo hídrico.

2.1.1 Organização de Dados Experimentais

Foi escolhido um trecho do Rio dos Sinos para o qual puderam ser encontrados dados experimentais referentes à concentração de oxigênio dissolvido (COD), resumidos na Tabela 2:

Tabela 2: concentrações máximas, médias e mínimas de oxigênio dissolvido em cada ponto correspondente à localização das seções transversais do rio dos Sinos com vazão de $14,43 \text{ m}^3/\text{s}$ (GARCIA, 1997, p. 86 e 87).

Ponto (i)	S1	S4	S8	S10	S17	S20
X_i [m]	0	12500	25550	32450	53050	61800
ϕ_i [m^2/s]	0,000	-0,116	-0,237	-0,301	-0,492	-0,573
COD_{max} [mg/L]	7,60	8,80	6,00	3,80	3,80	5,30
COD_{min} [mg/L]	6,00	5,00	4,00	1,80	0,00	0,80
COD_{med} [mg/L]	6,75	6,19	4,91	3,06	1,87	3,53

As distâncias X_i de cada ponto em relação ao primeiro foi obtida estimando visualmente as localizações dos pontos com auxílio do Google Earth Pro e, em seguida, medindo o caminho através de sucessivos pontos ao longo do percurso do rio utilizando o recurso de Régua:

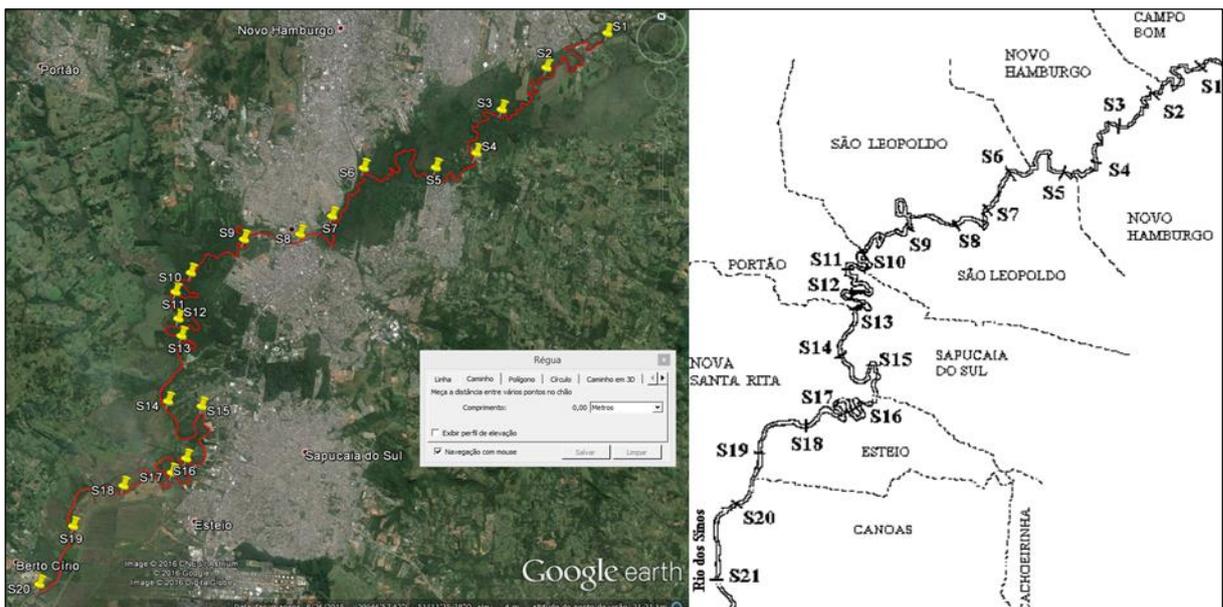


Figura 6: estimativa aproximada da localização dos pontos e cálculo da distância percorrida ao longo do rio.

Além disso, foram calculados os valores da coordenada ϕ de cada ponto considerando uma velocidade média de escoamento. Pela definição do potencial velocidade tem-se que

$$\phi_i = \alpha \int_0^{-X_i} u \, dx \rightarrow \phi_i = \alpha \hat{u} \int_0^{-X_i} dx = -\alpha \hat{u} X_i \quad , \quad (91)$$

onde α representa um fator de correção adimensional e \hat{u} a velocidade média. Já que as concentrações de OD são referentes à faixa de vazão de escoamento de 14,43 m³/s, a velocidade adotada foi de 0,0927 m/s, referente à média das velocidades de cada ponto.

Tabela 3: velocidade de escoamento em cada ponto com vazão de 14,43 m³/s (HAAG, 2003, p. 24).

Seção	S1	S4	S8	S10	S17	Média (\hat{u})
$u(x)$ [m/s]	0,0432	0,1832	0,0325	0,1471	0,0573	0,0927

A velocidade média de escoamento deve ser multiplicada por um fator de correção $\alpha = 10^{-4}$ para contemplar o efeito que a agitação da massa líquida exerce sobre a bóia de medição da velocidade, fazendo com que a mesma seja deslocada de diferentes formas em todas as direções. Já que a velocidade para fins de cálculo do potencial velocidade corresponde ao vetor resultante na direção principal de escoamento, a ordem de grandeza precisa ser ajustada como mencionado (informação verbal¹⁹). Em outras palavras, não apenas o valor do coeficiente de difusão deve ser corrigido para levar em consideração a oscilação superficial, mas também o próprio potencial velocidade, pois o escoamento real não é perfeitamente potencial como considerado previamente.

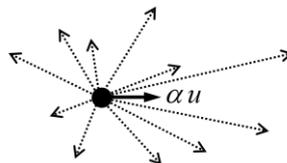


Figura 7: ilustração das direções e velocidades de deslocamento da bóia e vetor resultante.

Desta maneira, foi possível contrapor os dados experimentais aos resultados do modelo unidimensional, para o qual foi adotado um valor de b_0 igual ao mínimo da série correspondente e estimado um valor de c_0 da seguinte maneira, gerando a Tabela 4:

$$b_0 = \min(COD) \quad , \quad f_0 = COD_{S1} \quad , \quad c_0 = f_0 - b_0 \quad . \quad (92)$$

¹⁹ Em aulas da segunda edição do Curso de Maple para Engenharia e Ciências Radiológicas (ZABADAL, 2016).

Tabela 4: parâmetros do modelo unidimensional.

	f_{\min}	f_{med}	f_{\max}
b_0	0,00	1,87	3,80
f_0	6,00	6,75	7,60
c_0	6,00	4,88	3,80

2.1.2 Análise de Resultados Numéricos

Aplicando os parâmetros estimados à solução unidimensional, gerou-se a Figura 8:

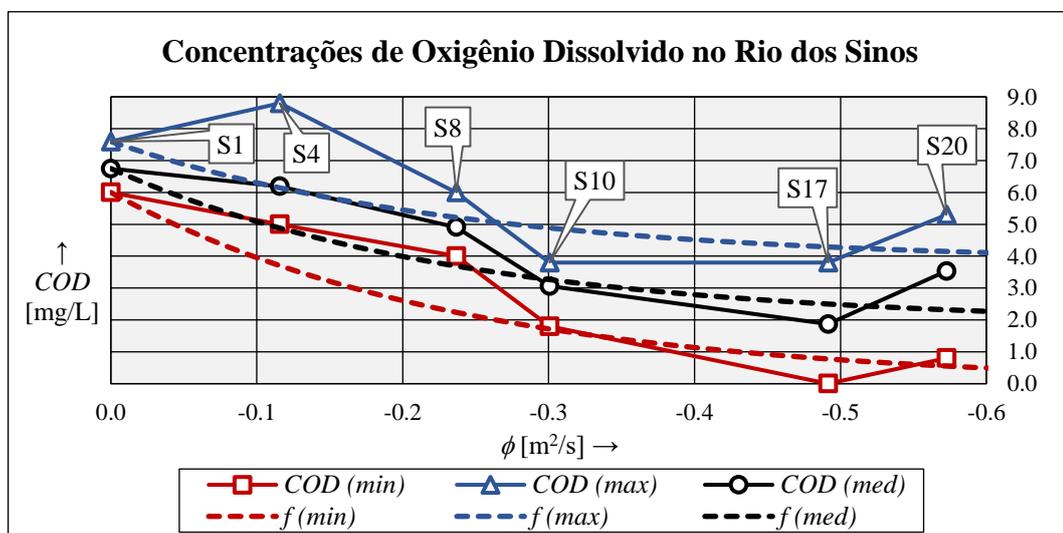


Figura 8: comparação entre os dados de concentração de O.D. (GARCIA, 1997) e os resultados do modelo.

Comparando as curvas resultantes com os dados experimentais correspondentes, pode-se perceber que nas três séries os pontos mais destoantes foram S4 e S8, para os quais o modelo subestimou os valores de concentração com uma diferença de 1,8 e até 2,7 mg/L (Fig. 9).

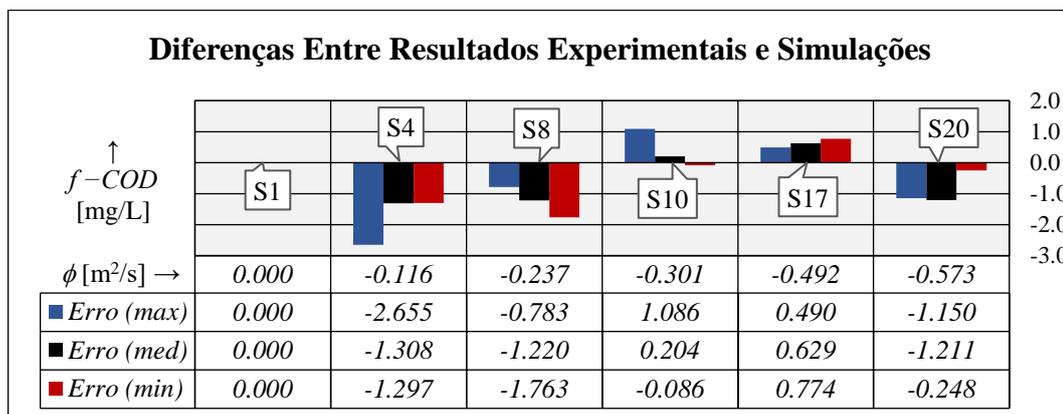


Figura 9: gráfico de erros.

Em um primeiro momento, pode-se cogitar pelo menos dois motivos principais para explicar a discrepância, reconhecendo: [1] que pode haver regiões onde a estratificação transversal do perfil de concentrações não seja negligenciável, ao passo que a amostragem pode ter sido feita em diferentes linhas de fluxo; e [2] que é possível que valores altos de concentração de oxigênio dissolvido sejam resultantes de um processo de reaeração local causado, por exemplo, pelo cascadeamento do fluxo líquido e aumento súbito da turbulência ou pela alteração no campo de velocidades do vento que incide sobre o corpo hídrico e altera o regime de oscilações superficiais do escoamento.

Além disso, uma terceira fonte de erros resulta da adoção de uma velocidade média constante para o trecho modelado, no intuito de evitar a integração necessária para calcular o potencial velocidade. Nota-se que, talvez não por coincidência, os pontos de maior discrepância (S4 e S8) foram justamente aqueles cujos valores de velocidade local apresentaram a maior distância da média (Fig. 10), o que pode ter ocasionado um erro não desprezável no cálculo dos valores da coordenada ϕ para os pontos correspondentes.

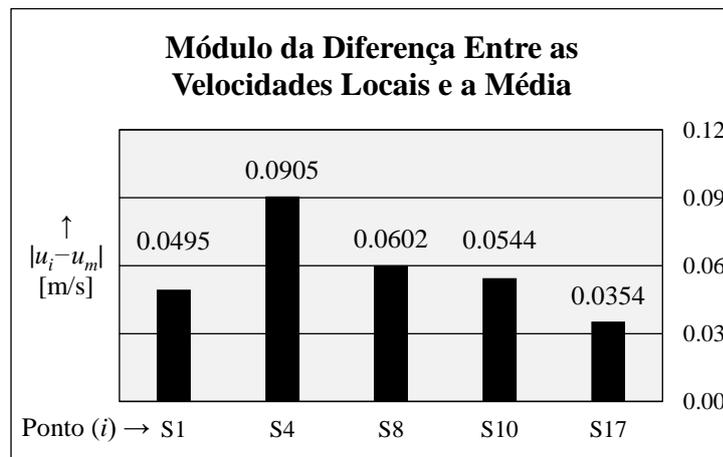


Figura 10: divergência da velocidade local em relação à média.

Para se evitar a primeira causa de erros seria necessário utilizar o modelo bidimensional, ao passo que a segunda exigiria o reacoplamento com a solução da equação cinética particularizada para o caso do oxigênio dissolvido, ou seja, levando em consideração fenômenos de reaeração e consumo de oxigênio por reações químicas e bioquímicas. A terceira causa seria eliminada fazendo a integração correta para o cálculo do potencial velocidade. Para isto, o mais adequado seria obter dados de velocidade para a mesma faixa de vazão em uma quantidade minimamente razoável de pontos intermediários que viabilizasse, por exemplo, uma interpolação polinomial aproximada da curva $u(x)$, a fim de integrá-la.

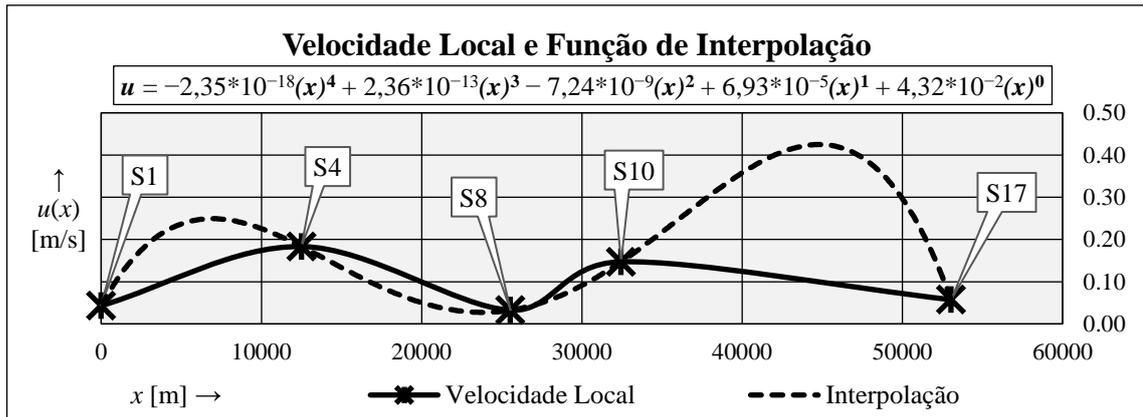


Figura 11: dados de velocidade de escoamento disponíveis para cada ponto e falha de interpolação.

Como se pode observar no gráfico da Figura 11, e já que ajustes melhores estão fora de escopo, a quantidade de pontos com dados disponíveis não é suficiente para que uma interpolação polinomial exata produza um ajuste minimamente satisfatório. Caso fosse, bastaria integrar a função em x e aplicar como limites de integração as distâncias de cada ponto em relação ao primeiro para produzir estimativas menos grosseiras do potencial velocidade de cada ponto. Assim, a terceira fonte potencial de erros seria minimizada significativamente.

No entanto, apesar das limitações desta análise preliminar, a tendência geral exibida pelo conjunto completo dos resultados numéricos concorda razoavelmente bem com o dos dados experimentais. Contrapondo-se os dois conjuntos em um gráfico de nuvem de pontos (Fig. 12), percebe-se que linha de tendência da regressão linear gerada apresenta uma relativa proximidade com a reta $y = x$, enquanto o coeficiente de determinação ficou acima de 80%. Considerando que o modelo é determinístico ao passo que o fenômeno estudado é fortemente influenciado por fatores estocásticos, é esperado que haja distribuição dos resultados em torno da bissetriz.

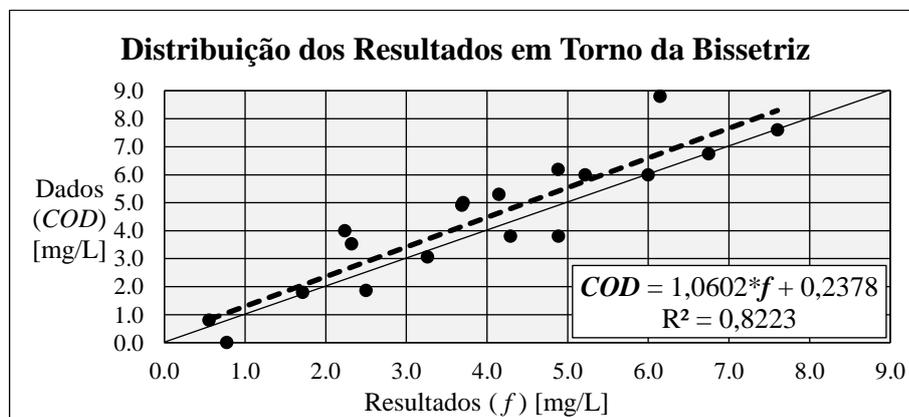


Figura 12: nuvem de pontos resultante da comparação dos valores resultantes com dados experimentais.

Uma vez obtidos resultados qualitativamente consistentes com o comportamento exibido pelos dados experimentais e relativamente concordantes do ponto de vista quantitativo, parece razoável supor que o emprego de um modelo bidimensional venha a refinar as estimativas. Essa suposição é baseada na possibilidade de reduzir a primeira causa de erro citada anteriormente. Na próxima seção serão apresentados novos resultados, desta vez com enfoque qualitativo, a fim de esclarecer o argumento proposto, além de explorar demais tópicos relevantes.

2.2 EXPLORANDO O MODELO BIDIMENSIONAL

A fim de explorar o potencial de aplicação da solução bidimensional, obtida a partir da supressão do termo difusivo longitudinal, foram efetuados testes de sensibilidade da distribuição de concentrações em relação à variação da distância entre a pluma e a margem, bem como em relação à alteração da velocidade de escoamento ou do coeficiente de difusão e, posteriormente, também em relação à escolha da função $g(z)$ que define a geometria do corpo hídrico ao ser introduzida no argumento do logaritmo natural que participa da parte imaginária da função $w(z)$. Nas duas primeiras subseções, entretanto, a função adotada foi a seguinte²⁰:

$$g_1(z) = 1 + (z) - 0,42(z)^2 + 0,07(z-2)^3 \quad . \quad (93)$$

Além disso, cabe fazer a observação de que a região continental foi diferenciada do corpo hídrico através da aplicação da função de Heaviside, cujo respectivo fator de escala serve, neste caso, para ajustar o contraste de cores nos gráficos durante o período de pós-processamento. Em razão disto, a cor da parte continental que aparece representada na parte superior dos diagramas pode ser ignorada, assim como a altura do patamar produzido pela função de Heaviside utilizada, visível na imagem apresentada em perspectiva.

2.2.1 Sensibilidade em Relação à Distância entre Margem e Despejo

Como mencionado anteriormente, a distância de um ponto de despejo de efluente líquido em relação às margens de um corpo hídrico é um fator crítico em projetos de redes de esgoto. Para avaliar a capacidade do modelo bidimensional de retornar informação útil a respeito deste aspecto, considere-se a Figura 13, na qual se apresenta uma pluma de dispersão resultante do lançamento de uma carga contínua nas imediações de um litoral hipotético:

²⁰ (ZABADAL; RIBEIRO, 2016, p. 76).

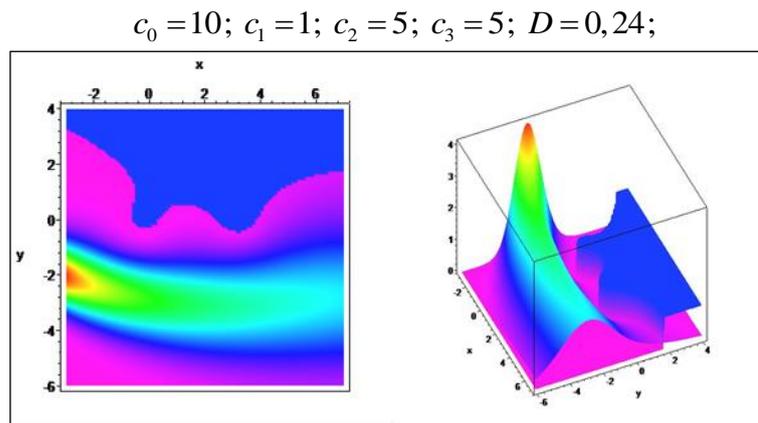


Figura 13: despejo longe da margem (Cenário 1).

Nota-se, a princípio, que a pluma obedece grosseiramente a geometria das margens, aparentemente sem levar em consideração seu efeito sobre a batimetria local. Entretanto, ao aproximar a pluma da margem, a fim de ressaltar eventuais efeitos da batimetria sobre a distribuição de concentrações, obtém-se o diagrama da Figura 14 a seguir:

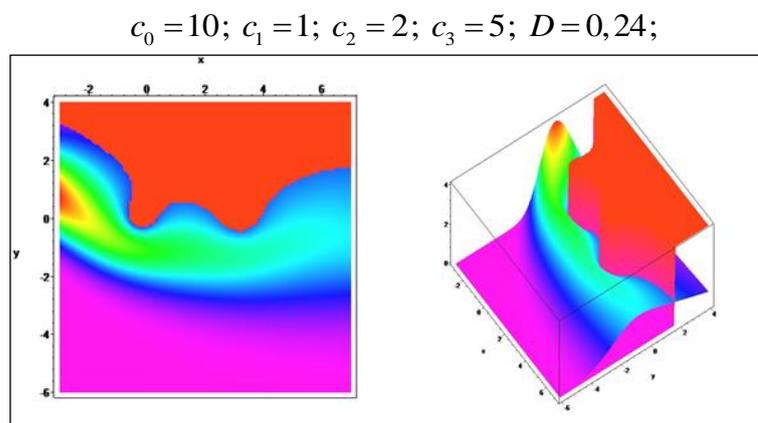


Figura 14: despejo perto da margem (Cenário 2).

Neste segundo cenário, onde se alterou apenas o parâmetro c_2 ($5 \rightarrow 2$), é possível observar claramente que a imposição indireta das condições de Cauchy-Riemann produz uma extrapolação batimétrica a partir da margem para o interior do domínio, a qual é qualitativamente consistente com o comportamento de litorais predominantemente arenosos. Essa característica permite estimar futuras distribuições de profundidade provocadas por assoreamento nas margens, dispensando o emprego de mapas disponibilizados pela Marinha do Brasil a períodos regulares de cinco anos.

No entanto, esta técnica não é capaz de reproduzir o mapa batimétrico nas imediações de um canal de navegação, por exemplo, por este se encontrar submerso, gerando imagens de satélite difusas e imprecisas. Por essa razão, torna-se conveniente utilizar funções de suporte compacto a fim de descrever não apenas margens, mas também canais de navegação, bancos de areia ou qualquer outro acidente topográfico presente no corpo hídrico que se manifeste com um contraste razoável a ponto de ser modelado. Assim, a função $w(z)$ pode ser generalizada:

$$w(z) = z + i \sum_k a_k \ln(g_k(z)) \quad . \quad (94)$$

Aqui, cada parâmetro a_k é um fator de escala e cada função $g_k(z)$ representa um acidente batimétrico que provoca desvios sobre a corrente principal.

Comparando os dois cenários, percebe-se que no primeiro (Fig. 13) a pluma de dispersão resultante do despejo de esgoto apresenta uma distância adequada dos possíveis balneários à jusante, ao passo que no segundo (Fig. 14), caso este representasse um cenário de projeto real, o despejo estaria localizado demasiadamente próximo da margem, poluindo as praias do litoral.

2.2.2 Sensibilidade em Relação à Velocidade e Difusividade do escoamento

Outro aspecto importante que pode influenciar nos resultados das simulações de cenários (e, portanto, na tomada de decisão) é a capacidade relativa do escoamento de fazer a pluma de dispersão se propagar na direção transversal. Preliminarmente, deve-se reconhecer que, graças à supressão do termo difusivo longitudinal, existe equivalência perfeita entre o ato hipotético de aumentar a difusividade e diminuir a velocidade do escoamento (ou vice-versa). Em ambos os casos, o efeito difusivo “compete” com o advectivo pela predominância sobre os resultados: o primeiro propicia uma abertura comparativamente maior da pluma, enquanto o segundo age no sentido inverso. Assim, uma maneira simples de visualizar as alterações que o predomínio de um ou de outro produz no cenário resultante é multiplicar ou dividir o coeficiente de difusão por uma constante, para que se possa ampliá-lo ou diminuí-lo arbitrariamente.

O diagrama seguinte (Fig. 15) foi plotado adotando a mesma distância do despejo em relação à margem utilizada no Cenário 1 (Fig. 13), porém desta vez utilizando um valor para o coeficiente de difusão *ampliado em dez vezes*, a fim de simular um rio de baixas velocidades de escoamento, porém sujeito à ação do campo de ventos regional, o qual provoca grande agitação da água na forma de movimentos de ondulação superficial e, conseqüentemente, propicia o predomínio do efeito difusivo sobre o sistema através da intensificação do processo de mistura:

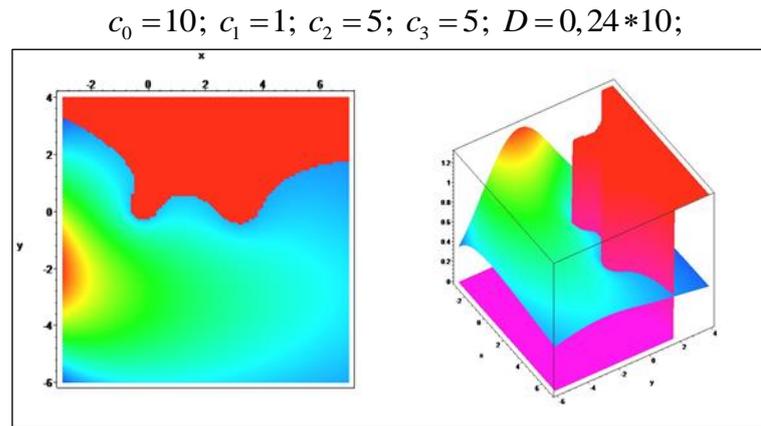


Figura 15: despejo longe da margem, mas com predominância relativa do efeito difusivo (Cenário 3).

Neste caso, apesar da carga ser lançada longe do litoral, este será mesmo assim atingido pela pluma de dispersão em virtude da predominância relativa do efeito difusivo no sistema. Assim, é possível que esta conjuntura se inverta para rios de velocidades altas. O cenário seguinte, apresentado na Figura 16, mostra o diagrama gerado para verificar esta suposição, onde desta vez se adotou a mesma proximidade em relação à margem utilizada no Cenário 2, mas com um valor de D *diminuído em dez vezes*²¹:

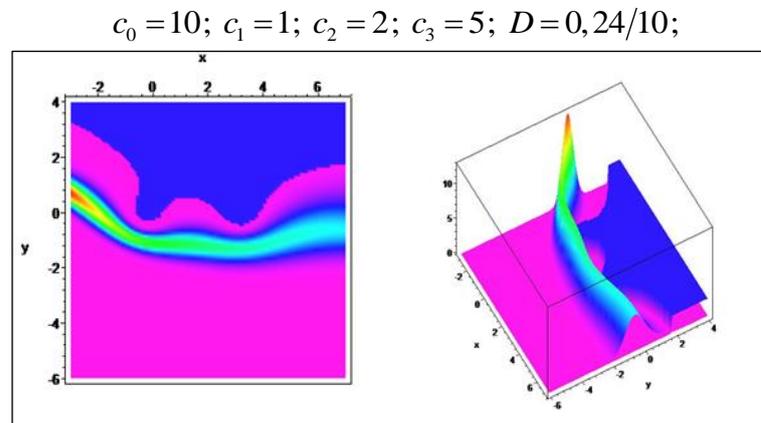


Figura 16: despejo perto da margem, mas com predominância relativa do efeito advectivo (Cenário 4)

Como se esperava, o resultado demonstra que o ponto de despejo pode ser aproximado do litoral para os casos de rios que apresentem velocidades suficientemente altas, de tal maneira que o efeito advectivo predomine sobre o difusivo, pois desta forma a pluma apresentará pequena propagação transversal e não atingirá as margens do corpo hídrico.

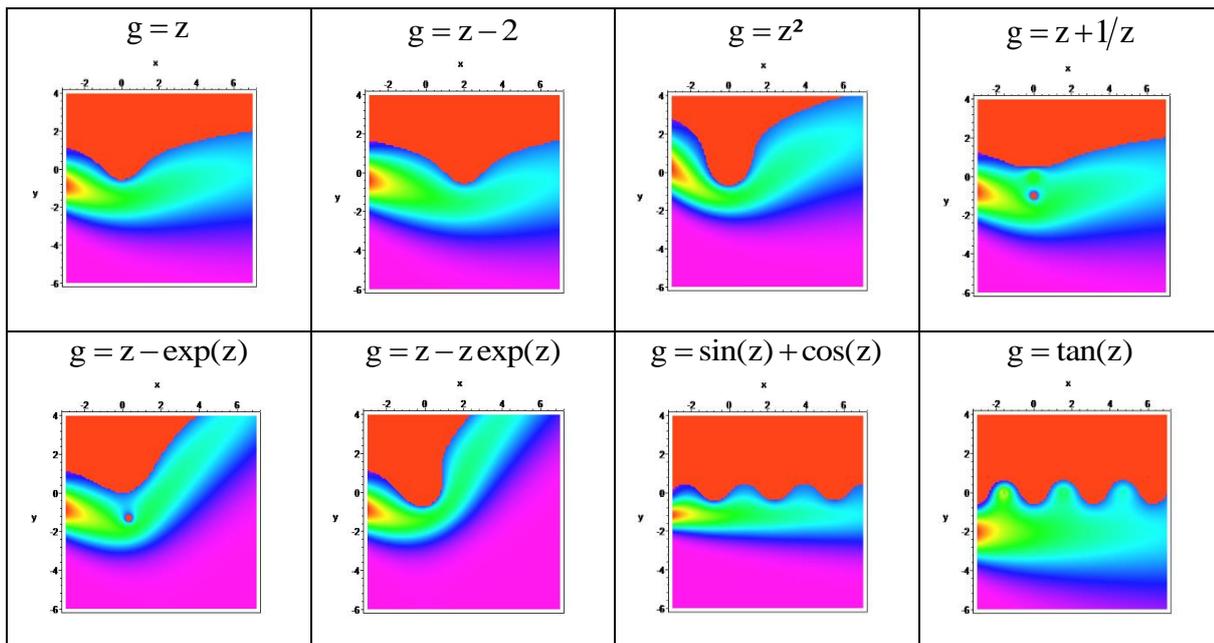
²¹ Foi escolhido alterar o coeficiente de difusão, mas o mesmo resultado é obtido realizando com a constante c_1 a operação inversa, ou seja, dividindo-a por dez para produzir o Cenário 3 e multiplicando para obter o Cenário 4.

2.2.3 Sensibilidade em Relação à Alteração da Geometria do Corpo Hídrico

Uma vez que o foco principal do trabalho²² exige que sejam efetuados diversos testes qualitativos, foram simulados cenários hipotéticos para diferentes formatos de margem. Essas simulações visam, basicamente, visualizar o efeito que a escolha da função de transformação conforme provoca na geração dos formatos litorâneos e verificar os limites operacionais dos modelos utilizados. Em particular, ao identificar problemas de multivaloração da função logaritmo natural, torna-se possível estabelecer delimitações geográficas para a validade dos modelos em variável complexa que definem a geometria das margens e ilhas a considerar.

A função $g(z)$ pode ser redefinida sucessivamente para verificar o efeito de cada tipo de expressão a ser adotada. Desta forma, é possível sistematizar o processo de criação de trechos litorâneos. Começando pelas funções mais simples, geram-se os seguintes resultados:

Tabela 5: alterações simples da geometria modificando a função $g(z)$.



Na Tabela 5, pode-se notar claramente o caráter logarítmico²³ do formato gerado ao adotar-se $g(z) = z$. Além disso, a península centrada em $x = 0$ pode ser deslocada ao somar ou subtrair uma constante e ampliada ao se adotar z^2 , ao passo que o ato de somar o termo $1/z$ introduziu uma ilha no interior do domínio.

²² A saber, a obtenção de plumas cuja geometria seja compatível com a batimetria local do corpo hídrico.

²³ O que ocorre, naturalmente, em virtude da estrutura da função $w(z)$.

A adição de termos exponenciais na expressão provocou um giro em sentido anti-horário na região da margem à direita da península, produzindo uma curva abrupta na pluma de dispersão, além de gerar uma ilha, a qual foi absorvida pela região continental quando se multiplicou a exponencial por “z”. A presença da curva repentina pode indicar que expressões contendo exponenciais podem simular a região de entrada de um afluente em um rio principal, por exemplo. Por outro lado, a utilização de funções trigonométricas produziu, como era de se esperar, uma margem oscilatória, a qual pode se tornar mais irregular conforme mais termos são agregados em combinação linear, como a seguir (Fig. 17). A mera adição de uma função tangente ao seno e cosseno já bastou para produzir margens bastante irregulares e uma ilha:

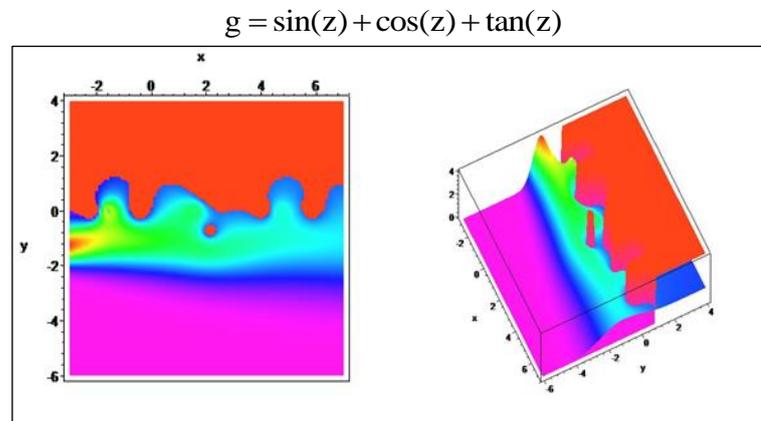
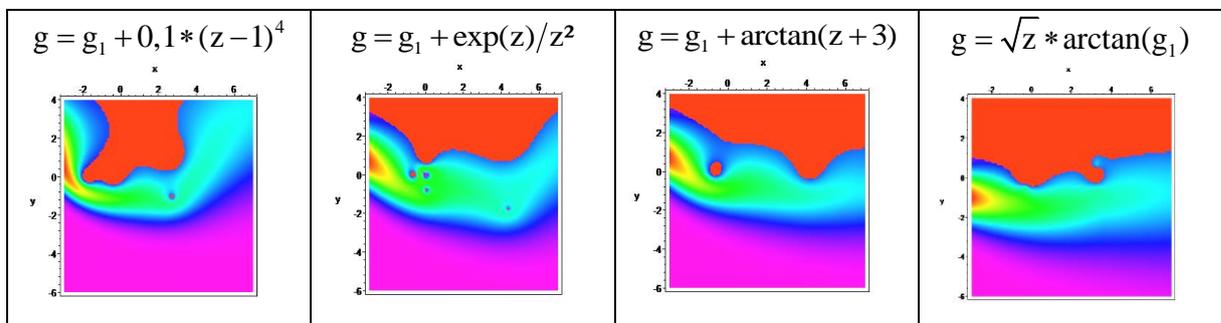


Figura 17: combinação linear de funções trigonométricas.

Uma vez apresentados os resultados para combinações de funções simples, pode-se ainda impor modificações sobre a expressão g_1 utilizada nas subseções anteriores:

Tabela 6: modificações baseadas na função g_1 .



Finalmente, resta observar o efeito de um fator de escala aplicado ao próprio logaritmo natural da função $w(z)$, como segue:

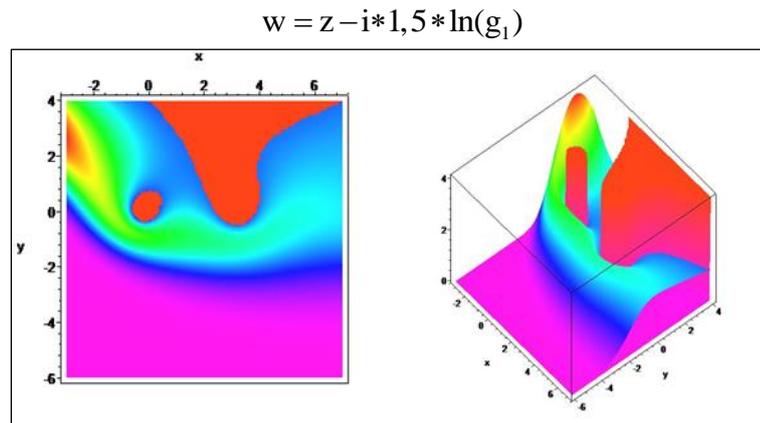


Figura 18: efeito de um fator de escala de 1,5 aplicado ao logaritmo natural da função $w(z)$.

Um efeito peculiar pode ser observado com maior nitidez no diagrama da Figura 18: a região entre o continente e a ilha apresenta concentrações menores de poluente, como se uma ilha bidimensional pudesse sozinha causar um desvio no caminho principal da pluma de dispersão antes mesmo de ser atingida por ela, emulando um efeito tridimensional que aparentemente leva em consideração as profundidades locais do corpo hídrico. Apesar de se tratar de um modelo bidimensional, a explicação deste fenômeno é relativamente simples²⁴: já que as curvas de nível da função corrente coincidem com as linhas de fluxo, a velocidade de escoamento em um ponto qualquer do corpo hídrico será tanto maior quanto maior for a taxa de variação espacial local dessa função. Tendo em vista que os contornos do litoral e da ilha foram ambos gerados pelo mesmo modelo de transformação conforme, e que portanto correspondem ao mesmo valor de cota no mapa da função corrente, o fato desta função ser suave indica que sua variação será bem menor na região entre as duas margens. Conseqüentemente, a velocidade do escoamento local será igualmente menor, fazendo com que uma carga maior de poluente se desloque através da correnteza principal.

CONCLUSÕES

A abordagem apresentada se mostrou robusta no que diz respeito ao grau de liberdade oferecido para geração de formatos litorâneos de complexidade relativamente alta, mesmo utilizando fórmulas pequenas de estrutura simples, como combinações de funções polinomiais, exponenciais e trigonométricas no argumento do logaritmo natural que participa da estrutura da função de transformação conforme.

²⁴ (ZABADAL; GARCIA; RIBEIRO, 2012, p. 113).

Graças ao baixíssimo tempo de processamento, da ordem de 1 a 2 segundos mesmo com pós-processamento incluído para cada cenário individual, uma quantidade imensa de cenários pode ser gerada em pouco tempo, viabilizando a verificação dos efeitos de inúmeras configurações possíveis para a localização de pontos de despejo de esgotos, e ainda possibilitando procedimentos de tentativa e erro para a definição da função que produz a geometria das margens, a fim de refiná-la.

Mesmo utilizando o modelo unidimensional em sua versão mais simplificada, os resultados numéricos se mostraram razoavelmente satisfatórios em relação às ordens de grandeza obtidas e à tendência geral exibida pelos dados experimentais, apresentando desvios esperados em razão dos efeitos de fenômenos físicos conhecidos que não foram levados em consideração no presente trabalho. Assim, pode-se concluir que a formulação adotada, especialmente em versão bidimensional, é capaz de produzir aproximações consistentes com cenários reais de dispersão de poluentes em meio aquático e pode ser empregada como uma das ferramentas principais em estudos de impacto ambiental e projetos de redes de esgoto.

Pode-se citar como sugestões de trabalhos futuros:

- 1) Resolver a equação de transporte em coordenadas curvilíneas sem a eliminação do termo difusivo longitudinal, a fim de empreender uma análise de sensibilidade em relação a esta supressão.
- 2) Testar as soluções reacopladas à cinética de reações, bem como resolver a equação cinética para polinômios de segundo e terceiro grau e analisar os resultados.
- 3) Implementar uma rotina de ajuste de funções de variável complexa que produza automaticamente a função $w(z)$ a partir dos pontos que definem as margens de um corpo hídrico específico de interesse.
- 4) Diminuir o número de considerações simplificativas adotadas, tais como as condições de uniformidade e isotropia do meio e de escoamento potencial e bidimensional, para que o método possa ser expandido no sentido de abarcar as características necessárias à simulação da dispersão de poluentes na atmosfera, por exemplo. Naturalmente, uma das maneiras de tornar isto possível seria a reformulação das transformações conformes utilizando a *teoria dos quaternions*, que consiste basicamente na extensão quadridimensional dos números complexos ($q = a + ib + jc + kd$, $i^2 = j^2 = k^2 = -1$), e adotando ainda o conceito de *função corrente generalizada*, definida por Elshabka (1996) como um campo vetorial $\Psi = [\Psi_1, \Psi_2, \Psi_3]$ e escrevendo as identidades da mecânica de fluidos em notação compacta como $\mathbf{V} = \nabla\phi = \nabla \times \Psi$, a fim de satisfazer as condições de Cauchy-Riemann.

BIBLIOGRAFIA REFERENCIADA

CARCIONE, José Maria. **Simulation of Electromagnetic Diffusion in Anisotropic Media**. Cambridge: Progress In Electromagnetics Research, 2010. 26 p.

CRANK, John. **The Mathematics of Diffusion**. 2. ed. Bristol: Oxford University Press, 1975. 414 p.

ELSHABKA, Ahmed M.; CHUNG, T. J. **New Definition of Three-Dimensional Stream Function Vector, Verification of Theory and Associated Physics**. New Orleans: American Institute of Aeronautics and Astronautics Meeting Papers, 1996. 9 p. (1st Theoretical Fluid Mechanics Meeting).

FERNANDEZ, Leonardo Cabral. **Simulação da Propagação de Poluentes Utilizando Transformação de Bäcklund: Modelo Bidimensional**. 2007. 66 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2007.

GARCIA, Renato Letizia. **Simulação da Qualidade da Água em Regime Não-Permanente no Rio dos Sinos, RS**. 1997. 124 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, Instituto de Pesquisas Hidráulicas, Programa de Pós-graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 1997.

GARCIA, Renato Letizia. **Soluções Exatas para Problemas de Dispersão de Poluentes: Modelo Difusivo Baseado na Equação KdV**. 2009. 123 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2009.

HAAG, Anelise. **Simulação da Propagação de Poluentes no Canal do Jacuí e no Rio dos Sinos**. 2003. 64 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2003.

JOBIM, Giordano da Silva. **Dispersão de Poluentes: Simulação Numérica do Lago Guaíba**. 2012. 66 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Civil, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Civil, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2012.

KAMBE, Tsutomu. **Elementary Fluid Mechanics**. Singapore: World Scientific Publishing, 2007. 386 p.

PAGANIN, Tomás Mallmann. **Estudo Exploratório de escoamentos Transversais Sobre Corpos Submersos: Geração de Soluções Preliminares para as Equações de Navier-Stokes Bidimensionais em Regime Transiente**. 2015. 18 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.

POFFAL, Cristiana Andrade. **Solução da Equação Advectivo-Difusiva Utilizando Regras para Manipulação de Exponenciais de Operadores Diferenciais e Simetrias de Lie: Aplicações em Engenharia Ambiental.** 2005. 105 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2005.

STRAUCH, Irene. **Apostila da Disciplina de Matemática Aplicada II: Análise Vetorial em Dez Aulas, Transformada de Laplace em Nove Aulas e Análise de Fourier em Nove Aulas.** Porto Alegre: Departamento de Matemática Pura e Aplicada - Instituto de Matemática - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2008. 3 v.

ZABADAL, Jorge Rodolfo Silva. **Curso de Maple para Engenharia e Ciências Radiológicas: Segunda Edição.** Porto Alegre, 2016. Curso de extensão presencial ministrado entre 2 março e 4 de maio de 2016 e oficializado pela Pró-Reitoria de Extensão da Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Código da ação: 30151.

ZABADAL, Jorge Rodolfo Silva; GARCIA, Renato Letizia; RIBEIRO, Vinicius Gadis. **Equações Diferenciais para Engenheiros: Uma Abordagem Prática.** Porto Alegre: Editora UniRitter, 2012. 115 p. (Coleção Experiência Acadêmica).

ZABADAL, Jorge Rodolfo Silva; RIBEIRO, Vinicius Gadis. **Fenômenos de Transporte: Fundamentos e Métodos.** São Paulo: Cengage Learning, 2016. 165 p.

BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

ANSORGE, Rainer; SONAR, Thomas. **Mathematical Models of Fluid Dynamics: Modelling, Theory, Basic Numerical Facts - An Introduction**. 2. ed. Weinheim: Wiley-VCH Verlag, 2009. 227 p.

BAJPAI, Avinash Chandra; MUSTOE, Leslie Raymond; WALKER, Dennis. **Matemática Avançada para Engenharia**. São Paulo: Editora Hemus, 1980. 578 p. Tradução de Luiz Roberto de Godoi Vidal.

CARSLAW, Horatio Scott; JAEGER, John Conrad. **Conduction of Heat in Solids**. 2. ed. London: Oxford University Press, 1959. 510 p.

FURASTÉ, Pedro Augusto. **Normas Técnicas para o Trabalho Científico: Explicitação das Normas da ABNT**. 16. ed. Porto Alegre: Dáctilo Plus, 2013. 230 p.

LAMB, Horace. **Hydrodynamics**. 4. ed. Cambridge, UK: Cambridge University Press, 1916. 706 p.

LOGAN, Bruce Ernest. **Environmental Transport Processes**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, Inc., 2012. 479 p.

MOREIRA, Davidson Martins; CARVALHO, Jonas da Costa; VILHENA, Marco Túllio. **Tópicos em Turbulência e Modelagem da Dispersão de Poluentes na Camada Limite Planetária**. Porto Alegre: Editora da UFRGS, 2005. 207 p.

MOREIRA, João Baptista Dias. **Análise dos Efeitos da Supressão da Condição de Não Deslizamento na Solução de Escoamentos Bidimensionais**. 2015. 16 f. TCC (Graduação) - Curso de Engenharia Mecânica, Escola de Engenharia, Departamento de Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2015.

ZABADAL, Jorge Rodolfo Silva; RIBEIRO, Vinicius Gadis; POFFAL, Cristiana Andrade. **Differential Restrictions Applied to Pollutant Dispersion**. Singapore: World Scientific Publishing, 2014. 10 p. International Journal Of Mathematical Models And Methods In Applied Sciences.