

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DA HIDRODINÂMICA E DA QUALIDADE DA ÁGUA APLICADA À BACIA DO RIO GUAPI-MACACU

Daiane Mesquita de Oliveira^{1,2}, daiane@ig.com.br
Roger Matsumoto Moreira^{1,3,4}, roger@vm.uff.br

¹ LabCFD, ² TEQ, ³ PGMEC & ⁴ PGEQ / Escola de Engenharia / Universidade Federal Fluminense
Rua Passos da Pátria 156, bl.D, Niterói, RJ, Brazil. CEP: 24210-240.

Resumo. A bacia do rio Guapi-Macacu está localizada no estado do Rio de Janeiro, Brasil, nos municípios de Cachoeiras de Macacu, Guapimirim e Itaboraí. Dois de seus rios - Guapiaçu e Macacu - representam o principal recurso de água para a cidade de Niterói, acrescentando assim mais responsabilidade para o monitoramento da qualidade da água. O presente estudo apresenta o modelo numérico da hidrodinâmica e da dispersão de efluentes industriais e domésticos nestes corpos de água. As simulações consideram o oxigênio dissolvido (OD) e a demanda bioquímica por oxigênio (DBO) como indicadores da presença de matéria orgânica nestes rios. Os componentes físico-químicos do rio são obtidos a partir de medições de campo, enquanto os efluentes são estabelecidos com base em dados típicos da literatura e ambos são utilizados como entrada do modelo implementado. O método numérico envolve um esquema de elementos finitos 2D e 3D, com um modelo de convecção e difusão não-linear. Os resultados da simulação são consistentes com observações de campo. Esta abordagem revela-se útil para a avaliação ambiental e de estudos relacionados com a capacidade dos recursos hídricos e de viabilidade para novas atividades industriais na região.

Palavras-chave. Modelo de difusão e convecção, fluidodinâmica computacional, qualidade da água.

1. INTRODUÇÃO

Modelagem de fluxos ambientais sempre representou um grande negócio para pesquisadores com o objetivo de compreender os fenômenos naturais. É extremamente difícil - senão impossível - representar a realidade como ela é observada ou medida. No entanto, esta tentativa de representar a realidade reduz a diversidade e a complexidade da natureza em um nível que podemos entender e representar. O surgimento de computadores de processamento rápido e os avanços contínuos em análise numérica têm permitido novos desenvolvimentos em modelagem ambiental, levando a simulações numéricas confiáveis.

Técnicas de fluidodinâmica computacional (CFD) têm sido utilizadas como uma ferramenta para estudar a dispersão de poluentes nos rios. Modenesi *et al.* (2004) utilizou o método de diferenças finitas para resolver a continuidade, força e concentração de substâncias no rio Atibaia, São Paulo. Uma boa concordância entre os resultados numéricos e experimentais foi alcançado. Vários outros estudos relacionados aos fluxos de superfície livre nos rios podem ser citados, incluindo Bradbrook *et al.* (2000), Lane & Bates (2000) e Lane *et al.* (1999). Ma *et al.* (2002) descreve a aplicação de um modelo de CFD tridimensional comercialmente disponível para simular a estrutura de fluxo em um rio de montanha que está propenso a inundações. As simulações utilizam um canal de geometria retangular, paredes lisas e uma topografia do leito obtida no sítio de campo que contém uma sequência de “pool-riffle” subjugadas. O modelo de CFD usa o regime de encerramento de turbulência RNG j-e implementado no Fluent 4.4.4 com uma superfície livre.

Alguns bem estabelecidos modelos tridimensionais de qualidade de água, por exemplo WASP6 (Wool *et al.* 2001), CE-QUAL-ICM (Cercó & Cole 1995), Delft3D-WAQ (Delft Hydraulics 2003), mike3 QE (Danish Hydraulic Institute 2005), a ECOM / RCA (Hydroqual 2004), foram aplicados para simular as variáveis de qualidade da água em rio, lago, estuário e ambientes do oceano. Estes modelos geralmente cobrem os processos físicos, químicos e biológicos básicos dos ecossistemas aquáticos e os efeitos dos sedimentos sobre os processos de qualidade da água também são levados em consideração em alguns destes modelos. Chao *et al.* (2007) apresentam um resumo dos principais modelos de qualidade da água para simular processos ambientais.

O presente trabalho visa simular numericamente a hidrodinâmica e a dispersão de um hipotético lançamento de resíduos domésticos na bacia do Rio Guapi-Macacu. As simulações consideram as concentrações de oxigênio dissolvido (OD) e demanda bioquímica de oxigênio (DBO) como indicadores para a formação de matéria orgânica no

Efeitos da vegetação, rugosidade marginal, sazonalidade, maré e cunha salina foram desconsideradas para efeitos da simulação.

Os parâmetros avaliados *in situ* no rio Guapi-Macacu estão listados na Tab. (1).

Tabela 1. Propriedades físico-químicas dos rios. Valores obtidos como médias de medições de campo.

| Rio | DBO(mg/L) | OD(mg/L) | Salinidade(mg/L) | Temperatura (°C) |
|--------------|-----------|----------|------------------|------------------|
| Guapi-Macacu | 1.72 | 6.52 | 0,02 | 23,9 |

O vazamento do resíduo hipotético tem a duração de 40 minutos. O conteúdo do tubo de descarga está nas seguintes concentrações: CBO (220mg / l), QOD (500mg / l), TSS (450mg / l), nitrogênio total (40mg / l) e fósforo total (10mg / l). Para os fins deste estudo, será apenas considerado o comportamento das concentrações de DBO e DO no Rio Guapi-Macacu. Estes parâmetros são modelados no regime transiente, sendo o modelo de convecção foi alimentado com a solução da hidrodinâmica para estado estacionário.

3.1. Considerações Gerais

O presente estudo considera uma geometria 2D para implementar a modelagem, e não uma 3D. Isso pode ser explicado devido à complexidade de uma geometria 3D. O rio é muito longo, e as seções transversais são diferentes para cada trecho do Rio Guapi-Macacu. Uma consideração que se faz relevante é que a difusão horizontal é geralmente muito maior que a vertical.

A superfície livre não é considerada neste modelo 2D, embora a troca com a atmosfera esteja no balanço do oxigênio dissolvido. A modelagem completa do balanço para OD envolve reaeração atmosférica, fotossíntese do fitoplâncton, respiração, oxidação de CBOD, oxidação de NBOD e demanda de oxigênio do sedimento. Devido à falta de dados, a modelagem do oxigênio dissolvido apresenta a reaeração e oxidação de CBOD, que são os dois principais fenômenos analisados no modelo de Streeter-Phelps.

CBOD representa a demanda de oxigênio por bactérias na oxidação da matéria orgânica (carbonácea) que está presente em um resíduo. CBOD pode ser particulado ou dissolvido na água. A mudança na concentração geralmente resulta de ambos, sedimentação do CBOD particulado e a oxidação do CBOD. A oxidação do CBOD pode ser representada por um processo cinético de primeira ordem. Além disso, CBOD é gerada como resultado da morte do fitoplâncton e a perda devido à reação de desnitrificação sob condições de baixa OD. Para este estudo, apenas a oxidação da CBOD dissolvido está representado.

As constantes cinéticas são retiradas de Von Sperling, M.(2007). O coeficiente de desoxigenação foi avaliado para o caso de curso d'água recebendo esgoto bruto concentrado, enquanto que o coeficiente de reaeração de oxigênio é obtido para rios rasos e com velocidade normal.

3.2. Equações Governantes

Navier –Stokes

$$\rho \frac{\partial \tilde{u}}{\partial t} - \nabla \cdot \left[\eta \left(\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^T \right) \right] + \rho \tilde{u} \cdot \nabla \tilde{u} + \nabla p = \tilde{F} \quad (1)$$

Equação da continuidade

$$\nabla \cdot \tilde{u} = 0 \quad (2)$$

Onde:

ρ = Densidade

\tilde{u} = Campo de velocidades

η = Viscosidade dinâmica

p = Pressão

\tilde{F} = Força de Campo

Modelo de difusão e convecção

$$\delta_{is} \frac{\partial C}{\partial t} + \nabla \cdot (-D \nabla c) = R - \tilde{u} \cdot \nabla c \quad (3)$$

Onde:

δ_{ts} = Coeficiente temporal

D = Coeficiente difusivo

C = Concentração do parâmetro

\tilde{u} = Campo de velocidades

R = Taxa de reação

Para DBO:

$$R = -kC_{DBO} \quad (4)$$

Para OD:

$$R = -kC_{DBO} + ks(C_{OD} - Cs) \quad (5)$$

Onde:

k = Coeficiente de desoxigenação

ks = Coeficiente de reaeração de oxigênio

Cs = Concentração de saturação do oxigênio dissolvido

$$C_s = 14,652 - 4,1022 \cdot 10^{-1}T + 7,9910 \cdot 10^{-3}T^2 - 7,7774 \cdot 10^{-5}T^3 \quad (6)$$

Valores Importantes:

$$k = 1,105 \cdot 10^{-5} \text{ 1/s e } ks = 9.5428 \cdot 10^{-6} \text{ 1/s}$$

Modelo de turbulência

As equações de Navier-Stokes e da Continuidade são resolvidas usando o modelo de turbulência k-ε, que é o modelo de turbulência mais utilizado baseado na consideração de turbulência isotrópica.

3.3. Condições de Contorno

Equações de Navier-Stokes e da Continuidade

Há três entradas de rio e a descarga de efluentes. Para cada entrada do rio, o vetor velocidade é dado com base em dados de medições de campo e para o efluente é baseado em dados da refinaria:

$$\tilde{u} = -nU_0 \quad (7)$$

A normal n está apontando para fora do domínio.

A saída do rio é definida com a pressão, sem estresse viscoso:

$$\eta(\nabla \tilde{u} + (\nabla \tilde{u})^T)n = 0, \quad p = p_0 \quad (8)$$

Os outros contornos da geometria são descritos por uma parede sólida na qual o fluido da parede não está se movendo:

$$\tilde{u} = 0 \quad (9)$$

Modelo de Difusão e Convecção

As entradas dos rios são especificadas com concentrações dos efluentes obtidas como médias de medições *in situ*. Na descarga de efluente é utilizada uma condição de contorno dependente do tempo:

$$C = C_0 \exp\left(-\left(\frac{t}{2100}\right)^{12}\right) \quad (10)$$

As entradas dos rios estão configuradas com concentração constante:

$$c = c_0 \quad (11)$$

A condição de contorno na saída é de fluxo convectivo afirmando que todos os transportes de massa ao longo da fronteira ocorrem por convecção:

$$n \cdot (-D\nabla c) = 0 \quad (12)$$

Os demais contornos são isolados:

$$n \cdot \left(-D\nabla c + c\vec{u}\right) = 0 \quad (13)$$

4. RESULTADOS NUMÉRICOS

Os resultados numéricos são divididos em duas partes: Comparação dos Modelos Analítico e Numérico, e Resultados Numéricos para a Bacia do Rio Guapi-Macacu.

4.1. Comparação dos Modelos Analítico e Numérico

A validação analítica utiliza uma equação de transporte 1D para descrever a concentração de DBO. Ambos os modelos foram resolvidos de duas formas, com carga instantânea e contínua do efluente. A concentração na descarga de efluente é de 1 mg/L e coeficiente de difusão é 27,8 m² / s, que é um valor típico para rios. A modelagem analítica não é alimentada pelo perfil de velocidade, uma vez que esta possui um valor constante. O coeficiente de desoxigenação é 6,94 · 10⁻⁶ 1/s adequada para rios rasos e de baixa concentração de DBO.

Modelo de Difusão e Convecção para 1 dimensão:

$$\left(\frac{\partial C(x,t)}{\partial t}\right) + v\left(\frac{\partial C(x,t)}{\partial x}\right) - D \cdot \left(\frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}\right) + K1 \cdot C(x,t) = 0 \quad (14)$$

Lançamento Instantâneo:

$$C(x,t) = \frac{1}{2} \cdot \frac{e^{-\frac{1}{4} \cdot \frac{(x-v \cdot t)^2}{D \cdot t} - k \cdot t}}{\sqrt{\pi \cdot D \cdot t}} \quad (15)$$

Lançamento contínuo:

$$C(x,t) = \frac{1}{2} \cdot C_0 \cdot e^{-\frac{k \cdot x}{v}} \cdot \left(\operatorname{erf}\left(\frac{1}{2} \cdot \frac{x + v \cdot t \cdot (1+n)}{\sqrt{D \cdot t}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{1}{2} \cdot \frac{x - v \cdot t \cdot (1+n)}{\sqrt{D \cdot t}}\right) \right) \quad (16)$$

Para o modelo numérico, foram realizados vários testes de sensibilidade de malha, considerando discretizações de 2291 e 9164 elementos para o canal e de 8246 e 32984 elementos para o Rio Guapi-Macacu. Em todas as simulações realizadas, houve uma concordância entre os resultados encontrados para a hidrodinâmica e o campo de concentrações, com um erro de 3% encontrado para os valores máximos de velocidades.

Os modelos numérico e analítico apresentam curvas de mesmo perfil para cada forma de lançamento de efluente. Para a solução numérica os picos de concentração são menores devido ao transporte ser dado em duas dimensões. Com base nesta análise, o modelo numérico demonstra vantagens com a possibilidade de análise do transporte 2D e obtenção do perfil de velocidade, sem ser necessário considerá-la constante.

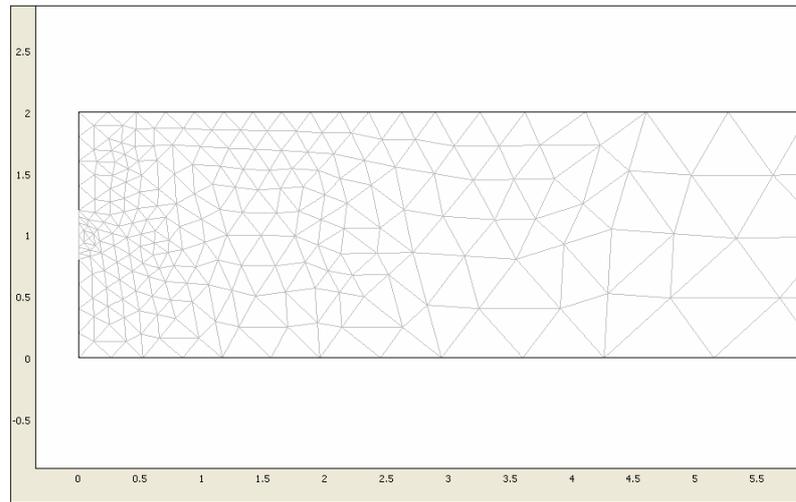


Figura 3. Malha Computacional no inlet de efluente do canal utilizado para a modelagem numérica. O canal possui a dimensão de 2mx2000m e a malha consiste de 9164 elementos.

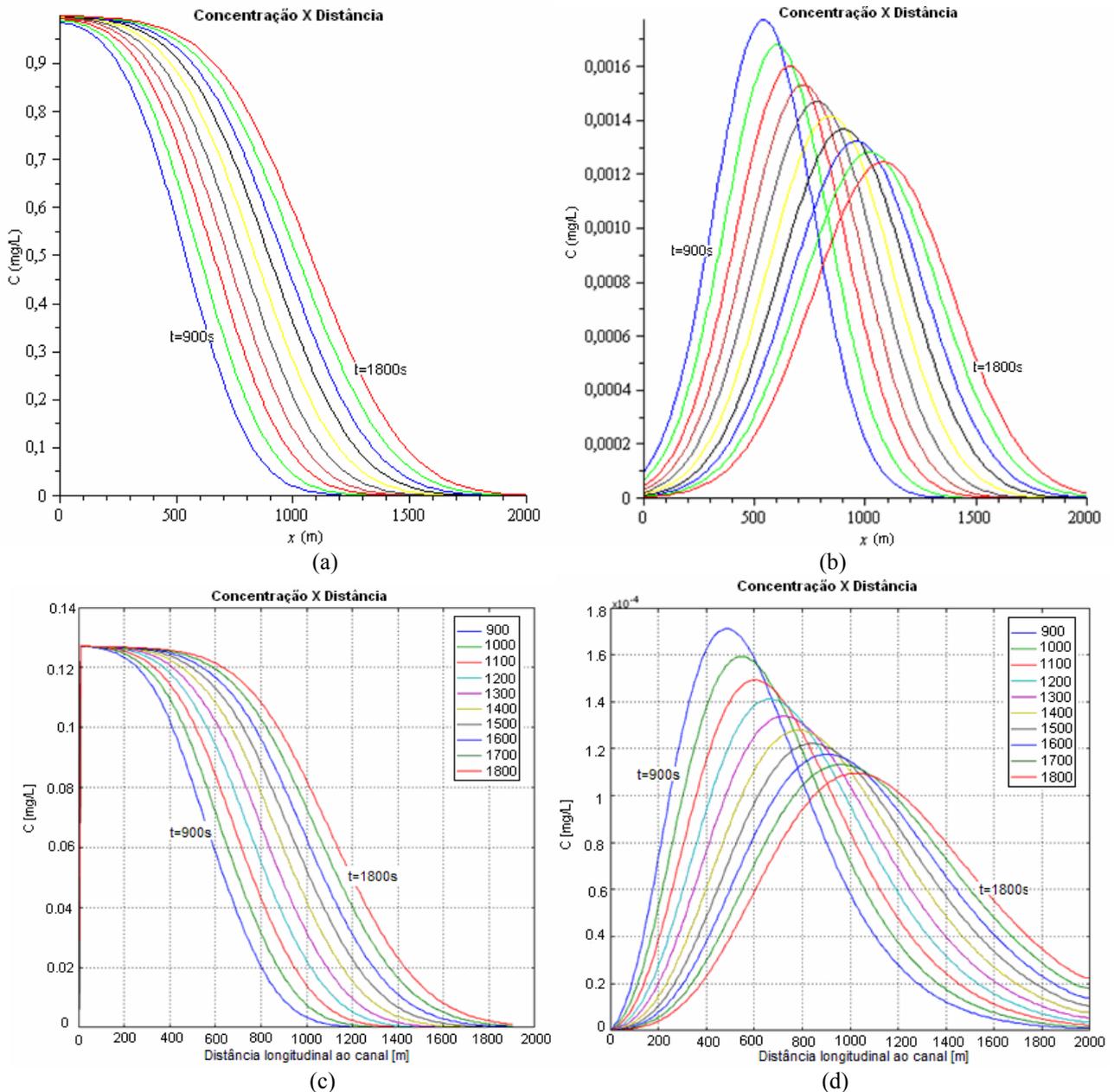


Figura 4. Soluções analíticas (a,b) e numéricas (c,d) para lançamentos contínuo (esq.) e instantâneo (dir.), utilizando o canal 2D. As curvas variam de 900s a 1800s com intervalos de 100s entre estas.

4.2. Resultados Numéricos para a Bacia do Rio Guapi-Macacu

A geometria utilizada nas simulações retrata a original, a malha computacional consiste de 32984 elementos. Nas proximidades do inlet a malha é mais refinada de modo a detalhar melhor o lançamento de efluente. O rio possui dimensão muito superior ao cano de descarga.

Uma análise do perfil de velocidades é realizado, com base nas figuras descritas abaixo obtidas das simulações e nos valores de medições em campo:

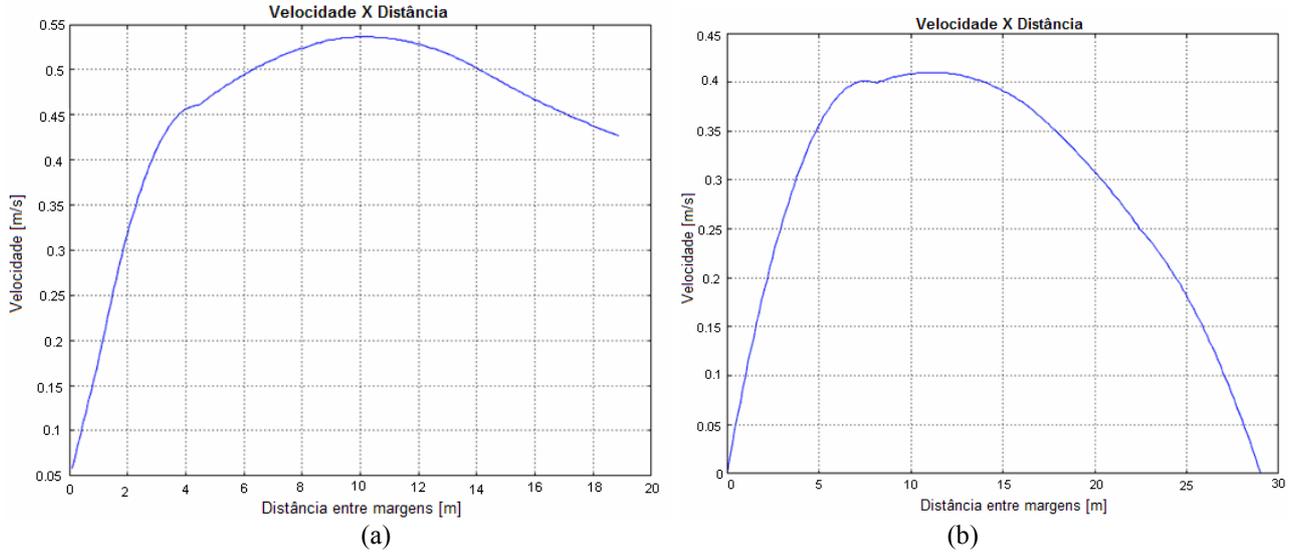


Figura 5. Velocidades no ponto P6 (a) e no ponto P5 (b).

Para medições de campo no ponto P6, a velocidade máxima encontrada foi de 68,59 cm/s, e a mínima de 14,15 cm/s, sendo a média 52,43 cm/s. Observamos que o resultado numérico está coerente, porém a velocidade a esquerda do rio não é nula. A justificativa pode estar em um elemento da malha que não tenha avaliado diretamente a condição de contorno. Refinamentos não foram realizados dada a complexidade da geometria, há problemas na solução numérica para malhas muito refinadas. No ponto P5, a velocidade máxima é de 41,01 cm/s, a mínima 13,00 cm/s e a média 29,20 cm/s. As velocidades obtidas estão maiores do que a média verificada em campo, isto pode estar associado à utilização da condição média no inlet do rio. As variações observadas são aceitáveis do ponto de vista da complexidade do problema e dadas as simplificações, desvios mais significativos não foram constatados.

A Fig. 6-(a) e (b) mostram os resultados de concentração de DBO nas proximidades do inlet. A Fig. 6-b ilustra os

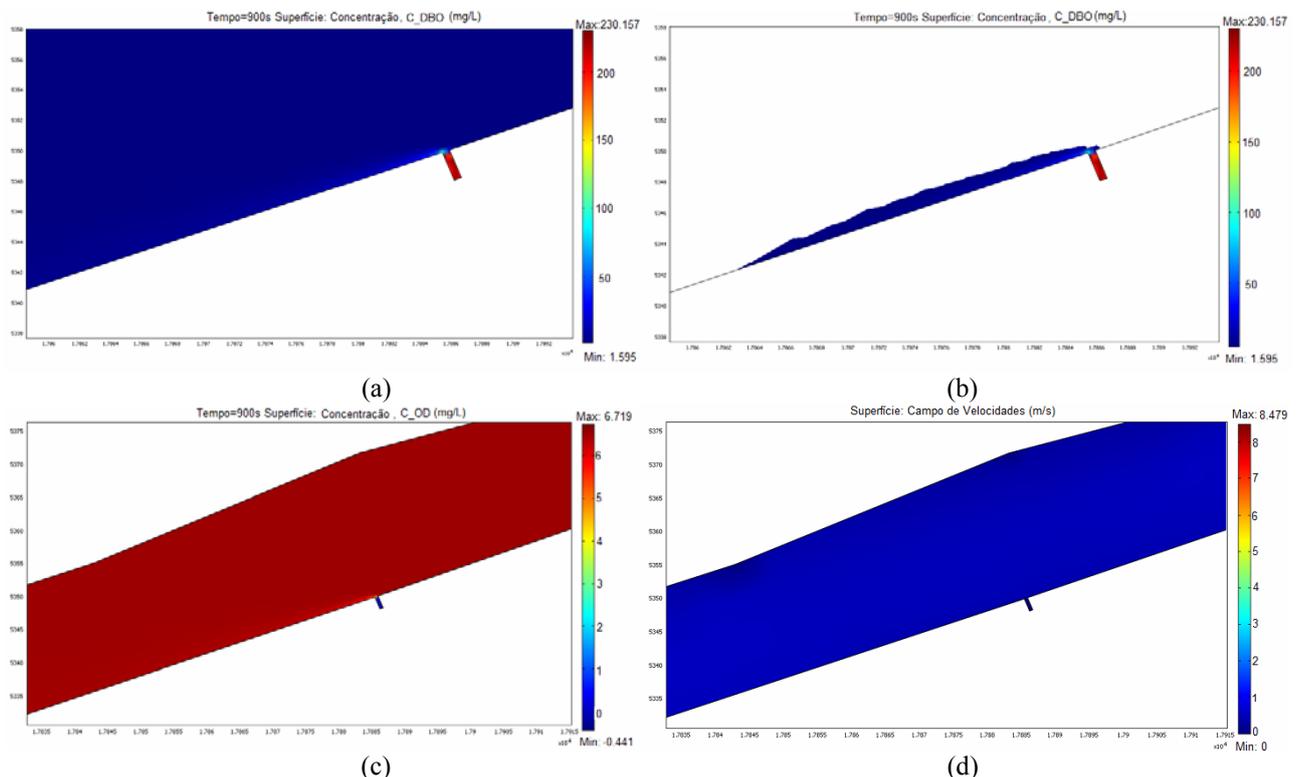


Figura 6. Concentrações de DBO (a,b) e OD (c) para t=900s e perfil de velocidades (d) nas proximidades do inlet.

valores de DBO acima de 5 mg/L (limite CONAMA) em 900s.

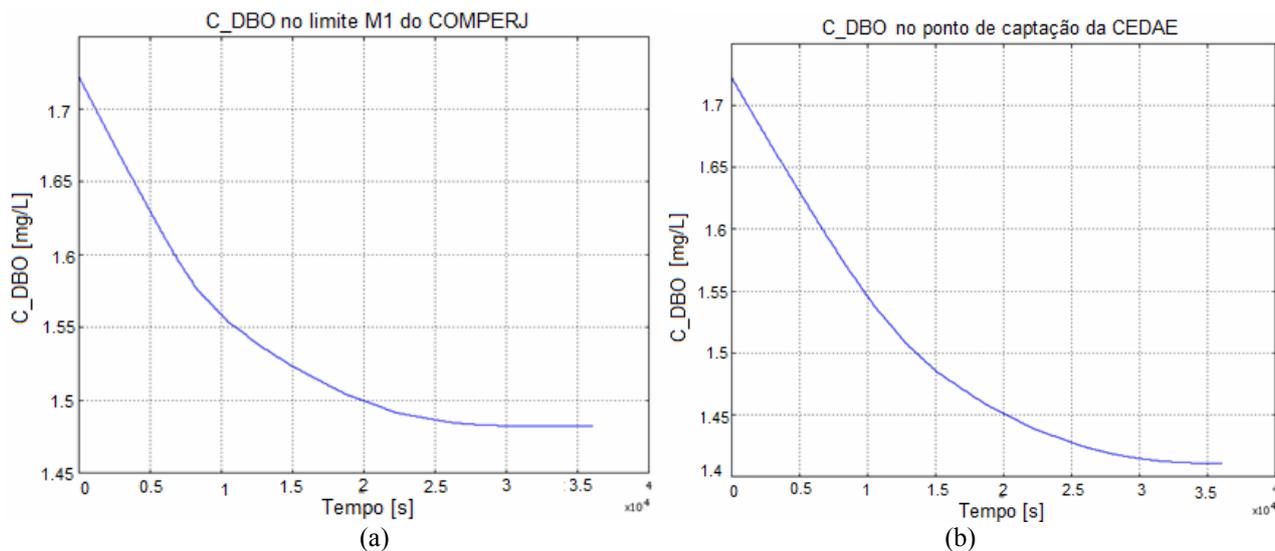


Figura 7. (a) corresponde à variação de concentração de DBO no ponto M1 e (b) na captação de água da CEDAE.

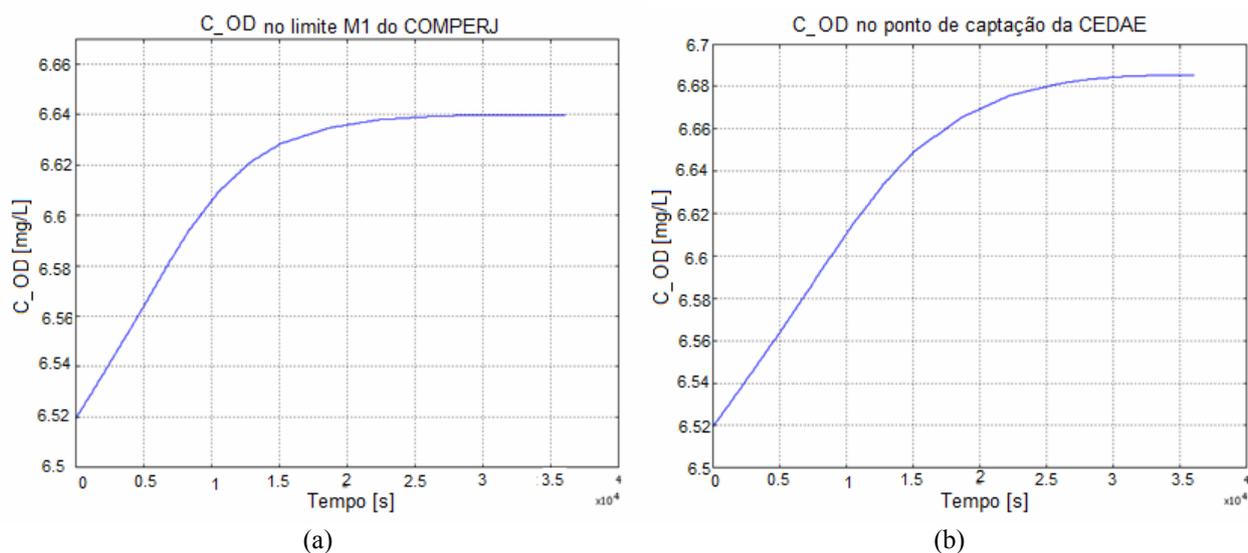


Figura 8. (a) corresponde à variação de concentração de OD no ponto M1 e (b) na captação de água da CEDAE.

Observamos que os resultados estão consistentes com o esperado para o comportamento de DBO e OD. Isto é, o DBO decai e o OD evolui até valores estacionários. O limítrofe permitido pela CONAMA não foi atingido seja para o DBO (5mg/L por 5 dias) ou para OD (maior que 5mg/L).

5. CONCLUSÃO

A aplicação de métodos numéricos para simular rios pode ter boa eficiência para representar os resultados do problema de convecção não-linear. O procedimento de solução é resolver um campo de velocidades e, em seguida, esta será a entrada para o modelo de convecção. Utilizar métodos numéricos para realizar o estudo é mais interessante, devido à dificuldade de realização de experimentos *in situ* que podem ocasionar danos ao corpo d'água.

A partir dos resultados obtidos, avalia-se que é mais vantajoso a solução numérica em virtude da possibilidade de representação da geometria com maior proximidade à realidade, sendo necessárias menos simplificações que em uma modelagem analítica.

Dos resultados numéricos para a Bacia do Rio Guapi-Macacu conclui-se que as concentrações de ambos os parâmetros estão adaptadas aos limites permitidos pela CONAMA.

6. AGRADECIMENTOS

Os autores agradecem o suporte financeiro da FAPERJ. Esta pesquisa é apoiada pela CNPq segundo o contrato no. 62.0018/2003-8-PADCT III / FAPERJ.

7. REFERÊNCIAS

- Bradbrook, K.F., Lane, S.N. & Richards, K.S. 2000. Numerical simulation of three-dimensional time-averaged flow structure at river channel confluences. *Water Resour. Res.* v. 36 (9), pp. 2731-2746.
- Cerco, C.F. & Cole, T. 1995. *User's guide to the CE-QUAL-ICM: three-dimensional eutrophication model*. Technical Report EL-95-1-5. U.S. Army Corps of Engineers, Vicksburg, MS.
- Chao, X., Jia, Y., Douglas Shields Jr., F., Wang, S.S.Y. & Cooper, C.M. 2007. Numerical modeling of water quality and sediment related processes. *Ecological Modelling.* v.201, pp.385-397.
- Cunha, C.L.N., Rosman, P.C.C., Ferreira, A.P. & Monteiro, T.C.N. 2006. Hydrodynamics and water quality models applied to Sepetiba Bay. *Continental Shelf Research.* v.26, pp.1940-1953.
- Danish Hydraulic Institute. 2005. *Coastal and Inland Waters in 3D*. Danish Hydraulic Institute. <http://www.dhi.dk>.
- Delft Hydraulics. 2003. *Delft3D-WAQ: Technical Reference Manual*. WL Delft Hydraulics, The Netherlands.
- Hydroqual. 2004. *User's Guide for RCA, Release 3.0*. Hydroqual, Inc. New Jersey.
- Lane, S.N. & Bates, P.D. 2000. Introduction. In: *High Resolution Flow Modelling in Hydrology and Geomorphology*. Eds. Bates, P.D., Lane, S.N. Wiley, Chichester, pp.1-12.
- Lane, S.N., Bradbrook, K.F., Richards, K.S., Biron, P.A. & Roy, A.G. 1999. The application of Computational Fluid Dynamics to natural river channels: three-dimensional versus two-dimensional approaches. *Geomorphology.* v.29, pp.1-21.
- Ma, L., Ashworth, P.J., Best, J.L., Elliott, L., Ingham, D.B. & Whicombe, L.J. 2002. Computational fluid dynamics and the physical modelling of an upland urban river. *Geomorphology.* v.44, pp.375-391.
- Modenesi, K., Furlan, L.T., Tomaz, E., Guirardello, R. & Núñez, J.R. 2004. A CFD model for pollutant dispersion in rivers. *Brazilian Journal of Chemical Engineering.* v.21 (4), pp.557-568.
- Tucci, C.E.M. 1998. *Modelos Hidrológicos*. 1ª edição. Editora UFRGS.
- Von Sperling, M. 2007. *Estudos e modelagem da qualidade da água de rios*. 7ª edição. Editora UFMG.
- Wool, T.M. et al. 2001. *Water Quality Analysis Simulation Program (WASP) Version 6 User's Manual*. US Environmental Protection Agency, Atlanta, GA.

8. DIREITOS AUTORAIS

Os autores são os únicos responsáveis pelo conteúdo do material impresso incluído neste trabalho.

NUMERICAL MODELING OF HYDRODYNAMICS AND WATER QUALITY APPLIED TO GUAPI-MACACU RIVER BASIN

Daiane Mesquita de Oliveira^{1,2}, daiane@ig.com.br
Roger Matsumoto Moreira^{1,3,4}, roger@vm.uff.br

¹ LabCFD, ² TEQ, ³ PGMEC & ⁴ PGEQ / School of Engineering / Fluminense Federal University
Rua Passos da Pátria 156, bl.D, Niterói, RJ, Brazil. CEP: 24210-240.

Abstract. *The Guapi-Macacu river basin is located at Rio de Janeiro state, Brazil, within the municipalities of Cachoeiras de Macacu, Guapimirim and Itaboraí. Two of its rivers - namely Guapiaçu and Macacu - represent the main water resource for Niterói city, thus adding further responsibility for water quality monitoring. The present study aims to model numerically the hydrodynamics and the dispersion of industrial and domestic effluents in these bodies of water. The simulations consider the dissolved oxygen (DO) concentration and biochemical oxygen demand (BOD) as indicators for the presence of organic matter in these rivers. River physical-chemical components are taken from field measurements, while effluent sources are established based on typical data from the literature, and both used as an input of the implemented model. The numerical method involves a finite element scheme for 2D and 3D dispersion with a nonlinear convection-diffusion model. The simulation results are consistent with field observations. This approach proves to be useful for environmental assessment and for studies related to water resource capacity and feasibility for new industrial activities in the region.*

Keywords. *Convection-diffusion model, computational fluid dynamics, water quality.*