

Aplicação de Método Espectral em Grade Não-Uniforme na Avaliação de Dispersão de Poluentes no Rio Cocó em Fortaleza-CE

Paulo Alexandre Costa Rocha¹, Ernesto da Silva Pitombeira²

paulo@posmec.ufc.br, glauber@ufc.br

Recebido: 21/10/10 - revisado: 06/01/11 - aceito: 02/10/12

RESUMO

Este trabalho apresenta um estudo de resistência à injeção de carga orgânica na zona estuarina de um importante manancial da Região Metropolitana de Fortaleza (CE), no caso o Rio Cocó. Para tanto, foi desenvolvido um programa em C++, com a finalidade de simular o escoamento e a dispersão de poluentes em um trecho específico do rio, que recebe influência direta da maré. Para a simulação do escoamento, foi utilizada uma forma das equações de Saint-Venant, com as condições de contorno apropriadas. Na resolução numérica foi aplicado um esquema explícito de diferenças finitas, no caso o de MCCORMACK. Uma vez calculados os perfis temporais do escoamento, a equação de Advecção-Dispersão (A-D) foi utilizada, usando um fator de decaimento de 1ª ordem, para simular o transporte de massa de DBO (Demanda Bioquímica de Oxigênio). O programa desenvolvido aplicou um método pseudoespectral com passo de tempo explícito. Os resultados encontrados para o escoamento atestam o bom ajuste do esquema de MCCORMACK a situações de estuário, onde o movimento de maré faz com que o fluxo esteja uma hora em um sentido e em outra hora no sentido oposto. Já os resultados de A-D demonstram a sensibilidade dos métodos espectrais às condições de contorno impostas.

Palavras-chave: Método espectral. Método das diferenças finitas. Estuários. Qualidade de água. Rio Cocó (CE).

INTRODUÇÃO

A palavra estuário advém do latim *æstuarium*, que significa maré de grande altura. Este significado nos leva a visualizar o ambiente estuarino como uma parte do rio fortemente influenciada pelo movimento das águas oceânicas, com a maré “invadindo” o ambiente fluvial. O movimento da água sob a ação de marés e, ao mesmo tempo, sob a ação do escoamento de um rio faz do estuário um sistema que não pode ser considerado isoladamente. Apesar desta característica, normalmente torna-se conveniente considerar vários componentes de forma isolada, contudo sem se esquecer da interdependência de comportamentos.

No vai-e-vem da maré, áreas de pouca renovação de água são geradas, favorecendo o desenvolvimento biológico local. Contudo, esta mesma característica faz com que as regiões estuarinas sejam fortemente caracterizadas pela sua fragilidade ambiental, com pequena capacidade de depuração de poluentes e recuperação/renovação ambiental.

As ondas que se propagam dentro de um estuário são consideradas rasas, pois sua profundidade local é bem pequena, se comparada ao seu comprimento. Apesar disso, grandes massas de água são movidas. O movimento das marés causa gradientes de superfície, que resultam na propagação de uma onda de gravidade, que normalmente se move a uma velocidade cerca de duas vezes maior que o escoamento em si (MCDOWELL & O'CONNOR, 1977).

Na literatura, a definição de estuário é flexível, variando de acordo com a abordagem escolhida. Dentro do escopo do presente trabalho, estuário pode ser entendido como a “(...) região interior de um ambiente costeiro, onde ocorre o encontro das águas fluviais com a do mar transportada pelas correntes de maré, estendendo-se rio acima até o limite da influência da maré (...)” (MIRANDA *et al.*, 2002).

O RIO COCÓ

O Rio Cocó pode ser classificado como um dos mais importantes dispositivos naturais de drenagem da Região Metropolitana de Fortaleza, pois este passa por uma grande parte da cidade. Seu mangue

¹ Departamento de Engenharia Mecânica e de Produção/UFC

² Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental/UFC

exuberante possui fauna e flora ricos e diversificados. Apesar disso, nota-se até então o descaso de autoridades, bem como da população local, em relação à sua preservação, apesar de atos isolados (SEMACE, 2004).

Desta forma, vê-se que o Rio Cocó segue uma tendência histórica mundial, pois cerca de 60% das grandes cidades se desenvolveram em torno dos estuários (MIRANDA *et al.*, 2002).

Apesar da pouca informação disponível, alguns dados sobre sua caracterização puderam ser inferidos (MAVIGNIER (1992), BRANDÃO (1995), VILLELA (1988), NÓBREGA (1998)):

- A frente salina se propaga por aproximadamente 8 quilômetros no rio (Ponte da Av. Washington Soares);
- A frente salina não penetra como a frente de maré, o que é um comportamento típico de um sistema estuarino;
- Não se constatou a estratificação do rio (escoamento bem misturado).

MODELAGEM HIDRODINÂMICA E DE QUALIDADE

Para a modelagem hidrodinâmica e de qualidade da água do estuário escolhido, foram resolvidas numericamente as equações unidimensionais de conservação de massa, de quantidade de movimento e de advecção-dispersão de uma substância qualquer, com decaimento de até 1ª ordem, respectivamente

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0 \quad (1)$$

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{Q}{A} \frac{\partial Q}{\partial x} + gA \frac{\partial H}{\partial x} + gAS_f = 0 \quad (2)$$

$$A \frac{\partial C}{\partial t} + UA \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AF \frac{\partial C}{\partial x} \right) - KAC \quad (3)$$

Para a foz do rio foi aplicada uma função periódica, de forma a termos a variação da maré como condição aplicada à solução. O código usa a equação clássica (JAMES, 1993) como condição de contorno de maré.

$$H = H_m - H_a \cdot \cos\left(\frac{t \cdot 2\pi}{T}\right) \quad (4)$$

Segundo MCDOWELL & O'CONNOR (1977), S_f pode ser calculado pela seguinte relação:

$$S_f = \frac{n^2 \frac{Q}{A} \left| \frac{Q}{A} \right|}{R^{4/3}} \quad (5)$$

O coeficiente de mistura longitudinal, F , representa a difusão diferencial após a integração da equação tridimensional de Advecção-Dispersão na área da seção transversal. A estimativa de F é uma das principais dificuldades em cálculos de A-D unidimensionais. Fischer *et al.* (1979) propõem algumas fórmulas empíricas para estimativa de F , baseando-se em alguns parâmetros do escoamento. James (1993) afirma que o coeficiente de mistura longitudinal, em uma zona estuarina homogênea pode ser calculada a partir de uma expressão como a seguinte:

$$F = 63 \cdot n \cdot U / R \quad (6)$$

O sistema de equações de (1) a (6) foi resolvido por um procedimento de passo fracionado porque, pelo fato de a substância ser de volume desprezível, C não afeta o escoamento, embora sua evolução com o tempo dependa da hidrodinâmica do rio.

O Método Espectral

CANUTO *et al.* (1988) chamam atenção para o fato de os métodos espectrais poderem ser vistos como um desenvolvimento extremo da classe de esquemas de discretização, conhecidos genericamente como método dos resíduos ponderados. Os pontos-chave do método dos resíduos ponderados são as funções de interpolação (também conhecidas como funções de expansão, de aproximação ou de forma) e as funções de teste (também conhecidas como funções de ponderação). As primeiras são usadas como funções básicas para a expansão truncada da solução, enquanto as segundas servem para garantir que a equação diferencial seja satisfeita da melhor maneira possível pelos resultados gerados.

A escolha das funções de teste fazem a distinção entre os três esquemas espectrais mais comumente usados, a saber: O de Galerkin, onde as funções de teste são as mesmas que as de interpolação; o da colocação pontual, que usa funções delta de Dirac em pontos especiais (de colocação); e o

esquema tau, que é totalmente análogo ao de Galerkin, mas não força suas funções de teste a satisfazer as condições de contorno.

Para problemas de engenharia, um dos métodos mais apropriados é o da colocação pontual, pois este, por usar explicitamente os valores dos nós, facilita a incorporação das condições de contorno (SHIZGAL, 2002). Além disso, sua estrutura permite um cálculo mais direto e conseqüentemente mais rápido das não linearidades. Para tanto, também se recomenda, como equações de aproximação os polinômios de Chebyshev, pois permitem uma determinação acurada das derivadas espaciais além de serem preferíveis, se a variável é não periódica (GOTTLIEB & ORSZAG, 1977).

O PROBLEMA FÍSICO

O problema abordado pelo modelo desenvolvido consiste em determinar o perfil de concentração de uma substância não-conservativa em um estuário. Para tanto, as seguintes premissas devem ser obedecidas:

- As larguras das seções do estuário devem ser bem menores do que o comprimento do trecho estudado.
- A medição da vazão deve ser efetuada seguindo alguma metodologia de integração na área. NÓBREGA (1998) usou o método velocidade x área para obtenção dos dados utilizados neste trabalho.
- O valor da concentração da substância estudada é o resultado médio da mesma em cada seção. Para o caso de um estuário bem misturado, a concentração deve ser a mesma em qualquer ponto da seção.
- A substância estudada deve ocupar volume desprezível em relação ao escoamento do rio.
- A substância poderá ser não-conservativa, com decaimento de 1ª ordem.

Tendo isto em mente, o modelo físico proposto, com as variáveis estudadas, está descrito nas Figuras 1 e 2, onde a seção A-A representa a seção (corte) transversal ao escoamento do rio:

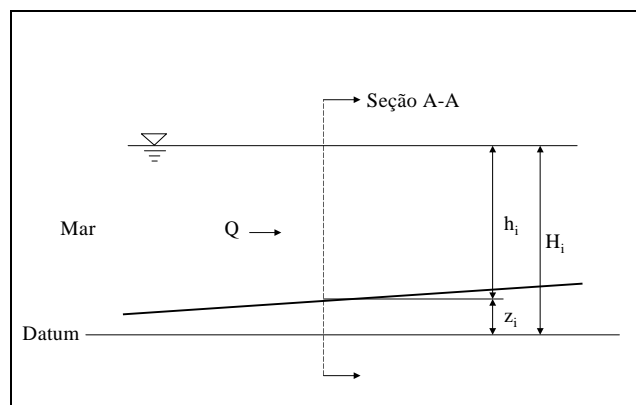


Figura 1 - Descrição do estuário considerado no problema (corte longitudinal).

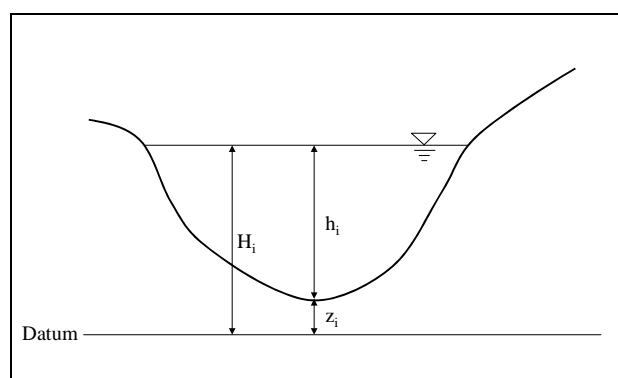


Figura 2 - Descrição do estuário considerado no problema (seção A-A).

O MODELO NUMÉRICO

Partindo da suposição básica de que em uma zona estuarina o escoamento é não permanente, o conjunto de equações (1) a (6) foi resolvido numericamente em duas fases. A primeira fase, referente ao escoamento em si, é representado pelas equações (1), (2), (4) e (5). Já a segunda fase, que descreve o processo de advecção-dispersão, faz uso das equações (3) e (6).

O sistema de equações do escoamento foi resolvido pelo Método das Diferenças Finitas, usando-se o esquema explícito de MCCORMACK (MCCORMACK, 1969). Ele usa uma abordagem de dois passos. O primeiro passo, o "Preditor" é um valor temporário para a variável no passo futuro de tempo. No passo "Corretor", o esquema de diferenças espaciais se inverte (de progressivo para regressivo ou vice-versa), conforme pode ser visto nas equações discretizadas a seguir (detalhes podem ser encontrados em Rocha (2006):

Preditor:

$$A_i^{j+1} = A_i^j - \left[\frac{(Q_{i+1}^j - Q_i^j)}{\Delta x} \right] \cdot \Delta t \quad (7)$$

$$Q_i^{j+1} = Q_i^j - \left[\frac{Q_i^j}{A_i^j \cdot \Delta x} \cdot (Q_{i+1}^j - Q_i^j) + \frac{g \cdot A_i^j}{\Delta x} \cdot (H_{i+1}^j - H_i^j) + g \cdot A_i^j \cdot \left(\frac{Q_i^j}{A_i^j} \cdot \left| \frac{Q_i^j}{A_i^j} \right| \cdot \frac{n_i^2}{R_i^{4/3}} \right) \right] \cdot \Delta t \quad (8)$$

Corretor:

As equações 7 e 8 por si só constituiriam uma solução de diferenças finitas, contudo o esquema desenvolvido desta forma se torna incondicionalmente instável. O esquema proposto por MC-Cormack (1969) estabiliza a solução da equação diferencial. Ele consiste em aplicar outro passo de tempo à solução, utilizando a solução do passo “Preditor” como condição inicial, com um esquema regressivo no espaço. O resultado final é a soma destes dois passos dividida por dois, logo:

$$A_i^{j+1} = \frac{1}{2} \cdot \left\{ A_i^j + A_i^{j+1} - \left[\frac{(Q_{i+1}^{j+1} - Q_{i-1}^{j+1})}{\Delta x} \right] \cdot \Delta t \right\} \quad (9)$$

$$Q_i^{j+1} = \frac{1}{2} \cdot \left\{ Q_i^j + Q_i^{j+1} - \left[\frac{Q_i^{j+1}}{A_i^{j+1} \cdot \Delta x} \cdot (Q_{i+1}^{j+1} - Q_{i-1}^{j+1}) + \frac{g \cdot A_i^{j+1}}{\Delta x} \cdot (H_{i+1}^{j+1} - H_{i-1}^{j+1}) + g \cdot A_i^{j+1} \cdot \left(\frac{Q_i^{j+1}}{A_i^{j+1}} \cdot \left| \frac{Q_i^{j+1}}{A_i^{j+1}} \right| \cdot \frac{n_i^2}{R_i^{4/3}} \right) \right] \cdot \Delta t \right\} \quad (10)$$

Onde os sobrescritos e subscritos das variáveis indicam o ponto da malha de tempo e o ponto da malha de espaço, respectivamente.

Para o problema de A-D de uma substância não conservativa, foi aplicado um método pseudo-espectral (colocação pontual), utilizando polinômios de Chebyshev como funções de aproximação. Como o domínio do problema original (variável física) não se aplica à função de interpolação, uma transformação linear de coordenadas se faz necessária (de $x \rightarrow \xi$).

$$A \frac{\partial C}{\partial t} + UA \frac{\partial C}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial x} \left(AF \frac{\partial C}{\partial x} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} - K \cdot A \cdot C \quad (11)$$

Aplicando a equação para um domínio discreto, e lembrando que $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ é uma constante (não depende de x), chega-se a:

$$A_i^j \frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta t} + Q_i^j \frac{\partial C}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} = A_i^j \cdot F_i^j \cdot \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 - K \cdot A_i^j \cdot C_i^j \quad (12)$$

Lembrando que, para o domínio espectral, utilizando-se polinômios de Chebyshev, a variável C fica aproximada por

$$C = \sum_{k=1}^N s_k^j \cdot T_k(\xi) \quad (13)$$

Logo, a equação discreta no domínio espectral é a seguinte:

$$C_i^{j+1} = C_i^j - \left[Q_i^j \cdot \sum_{k=1}^N s_k^j \cdot \frac{\partial T_k(\xi)}{\partial \xi} \cdot \frac{\partial \xi}{\partial x} - A_i^j \cdot F_i^j \cdot \sum_{k=1}^N s_k^j \cdot \frac{\partial^2 T_k(\xi)}{\partial \xi^2} \cdot \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + K \cdot A_i^j \cdot C_i^j \right] \cdot \frac{\Delta t}{A_i^j} \quad (14)$$

onde $T_k(\xi) = \cos[k \cdot (\arccos \xi)]$ é o k -ésimo termo do polinômio de Chebyshev.

Para o passo de tempo, o método de Euler modificado foi aplicado (GOTTLIEB & ORSZAG, 1977).

O MÉTODO PSEUDOSPECTRAL

O método pseudoespectral se baseia na abordagem da colocação pontual. Esta obriga, em cada passo de tempo, a função de aproximação a passar por todos os pontos do domínio físico, tornando-a uma função de interpolação. Neste momento da resolução, os termos da expansão do polinômio de Chebyshev (no caso da eq. 14, s_k) devem ser determinados, através da resolução de um sistema linear.

Pela característica dos polinômios de Chebyshev, a matriz dos coeficientes do sistema linear é densa, logo métodos iterativos não podem ser usados (GOTTLIEB & HESTHAVEN, 2001). No caso do modelo desenvolvido, o método de Gauss sem condensação pivotal foi utilizado.

APLICAÇÃO DO MODELO NUMÉRICO

No código desenvolvido, o usuário deve informar os dados em 5 seções, numeradas de 0 (foz) a 4 (rio). No primeiro passo de tempo, o programa introduz água fresca na seção 4, ao passo que modifica o nível na seção zero, guiado pelo movimento de maré. Os cálculos são realizados nos passos *preditor* e *corretor*, usando-se as equações 7, 8, 9 e 10, determinando o novo perfil de vazões e níveis da superfície d'água. As condições de contorno são novamente aplicadas e um novo passo de tempo é levado à frente.

A convergência é rápida, e após dois ou três ciclos de maré os resultados se estabilizam.

Com relação ao processo de A-D, o procedimento é similar ao realizado no modelo hidrodinâmico. A diferença básica consiste em que, baseado nos resultados de convergência do modelo hidrodinâmico, os cálculos de A-D são adiados para se iniciarem a partir do 3º ciclo de maré, onde o escoamento já está estabilizado.

A grade para os cálculos do escoamento é fixa e independente da escolha do usuário, com 101 pontos igualmente espaçados, conforme o diagrama apresentado na Figura 3.

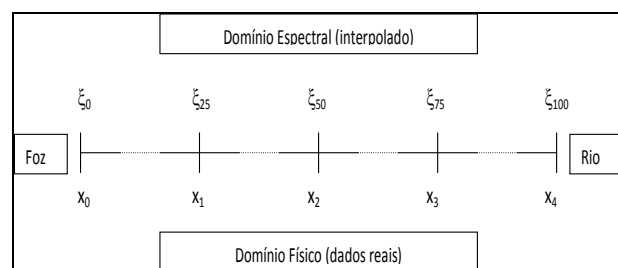


Figura 3 – Diagrama representativo da grade espacial utilizada para a resolução do problema numérico desenvolvido

Para a advecção-dispersão, foi usado método espectral, de colocação pontual, usando polinômios de Chebyshev como funções de aproximação. O tamanho da grade é definido pelo usuário, através da escolha do número de intervalos interpolados, desde que este seja um múltiplo de 4.

A resolução da A-D é concomitante à do escoamento, usando deste os dados necessários. Todavia, como são utilizados os três primeiros ciclos de maré para considerar o escoamento estabilizado,

o programa só realiza os cálculos do processo de A-D a partir do final do terceiro ciclo de maré, quando a hidrodinâmica já se estabilizou. Para a eliminação dos erros de *alias* (CANUTO *et al.*, 1988), usou-se um filtro do tipo tudo ou nada. O mesmo elimina os últimos 1/3 termos da série de Chebyshev, evitando geração de oscilações de alta frequência. Para atenuação das dispersões numéricas típicas da equação de A-D, usou-se um filtro do tipo “*raised cosine*” (BEREZOWSKY, 1996):

O modelo desenvolvido foi aplicado para diversas cargas orgânicas de entrada, variando-se também o coeficiente de dispersão longitudinal, F. Desta forma seria possível encontrar valores críticos de DBO.

CONDIÇÕES HIDRODINÂMICAS

Para a resolução do problema de escoamento do rio, as seguintes condições foram aplicadas (Tabela 1):

Tabela 1 – Dados de identificação e geométricos das seções utilizadas para a simulação computacional, obtidos por NÓBREGA (1998).

Nome da Seção (Programa)	Nome da Seção (NÓBREGA, 1998)	Cota do Leito (m)	Largura da Seção (m)	Distância à Foz (m)	n de Manning
0	0	0,5	73,8120	0	0,022
1	Barraca	0,4	45,9778	3440	0,022
2	Árvore	0,8	32,9472	7200	0,025
3	Murilo Borges	0,9	23,3097	11040	0,050
4	39	4,2	16,9270	19500	0,040

Para as condições de contorno, serão usadas as mesmas de NÓBREGA (1998), nomeadas COCOFIM2 e COCOFIM3. Isto possibilitará a comparação dos resultados obtidos pelo programa ora desenvolvido e os resultados obtidos pelo autor, que utilizou a sub-rotina DYNHYD do programa WASP, desenvolvido pela EPA – Environmental Protection Agency. Os valores das condições de contorno encontram-se na Tabela 2:

Tabela 2 – Conjunto de valores utilizados como condição de contorno para a simulação computacional.

Nome da Simulação (NÓBREGA, 1998)	Carga Hidráulica Média na Foz (m)	Amplitude da Carga Hidráulica na Foz (m)	Vazão de entrada (m ³ /s)
COCOFIM2	1,6	1,6	10
COCOFIM3	1,6	1,6	3

RESULTADOS

Modelagem Hidrodinâmica

Executou-se o programa, usando as condições de contorno especificadas na Tabela 2, para efeito de comparação com os resultados obtidos por Nóbrega (1998). Os resultados são apresentados nas Figuras 4 e 5. Nas legendas, “MC” significa curva obtida com o esquema de MCCORMACK, enquanto “NB” se relaciona às curvas obtidas por Nóbrega (1998). Logo após vem a hora referente ao ciclo da maré, representada por H1, H3, H5, H7 e H11.

Modelagem de Advecção-Dispersão

Com os perfis do escoamento determinados para cada instante de tempo dentro de um ciclo de maré, passou-se a testar diversas configurações de execução do problema de A-D, com o objetivo de encontrar a que melhor se adapte ao algoritmo espectral de colocação pontual desenvolvido. Os parâmetros testados foram:

- Número de intervalos do domínio espectral (consequentemente o tamanho da série truncada de Chebyshev, Equação 13). Os valores de N testados foram 4, 8, 16, 32 e 64;

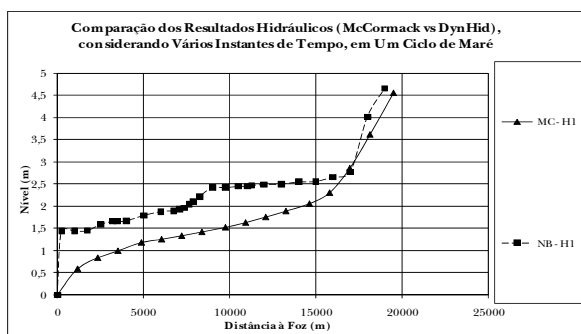


Figura 4a – Resultados comparativos de nível referentes à primeira hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM2, de Nóbrega (1998).

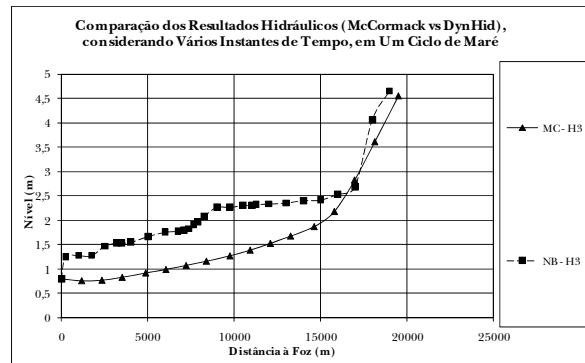


Figura 4b – Resultados comparativos de nível referentes à terceira hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM2, de Nóbrega (1998).

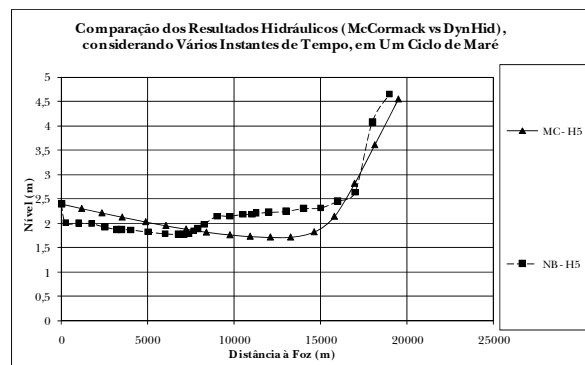


Figura 4c – Resultados comparativos de nível referentes à quinta hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM2, de Nóbrega (1998).

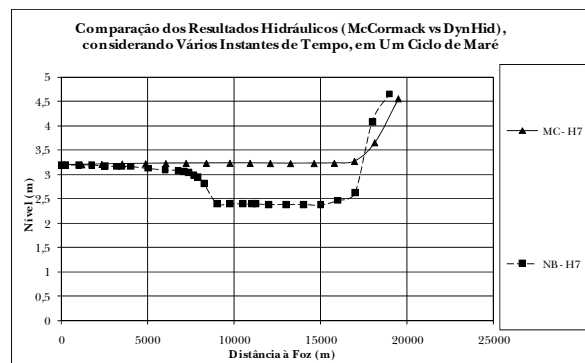


Figura 4d – Resultados comparativos de nível referentes à sétima hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM2, de Nóbrega (1998).

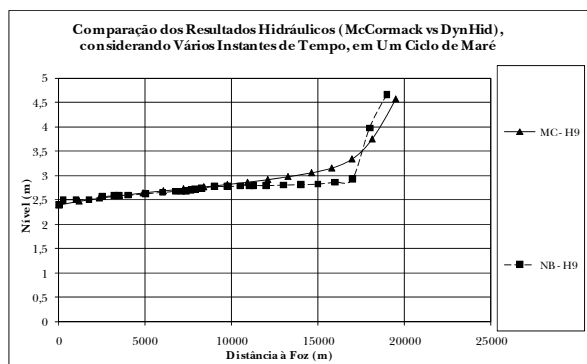


Figura 4e – Resultados comparativos de nível referentes à nona hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM2, de Nóbrega (1998).

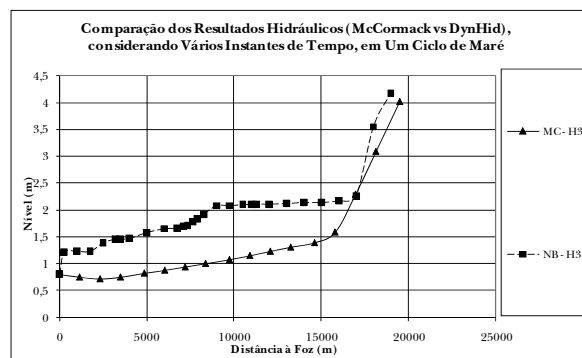


Figura 5b – Resultados comparativos de nível referentes à terceira hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM3, de Nóbrega (1998).

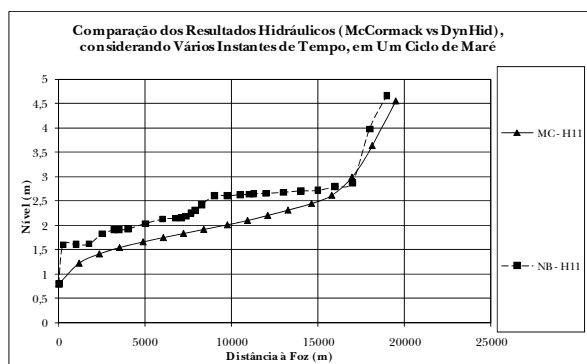


Figura 4f – Resultados comparativos de nível referentes à décima primeira hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM2, de Nóbrega (1998).

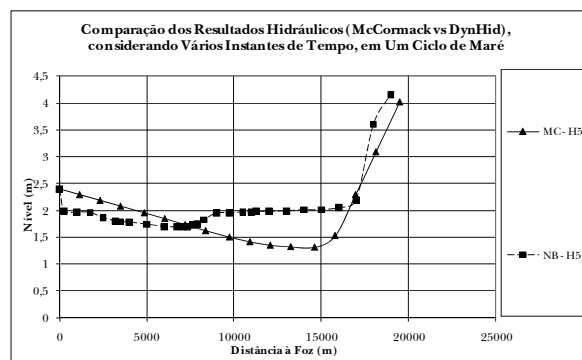


Figura 5c – Resultados comparativos de nível referentes à quinta hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM3, de Nóbrega (1998).

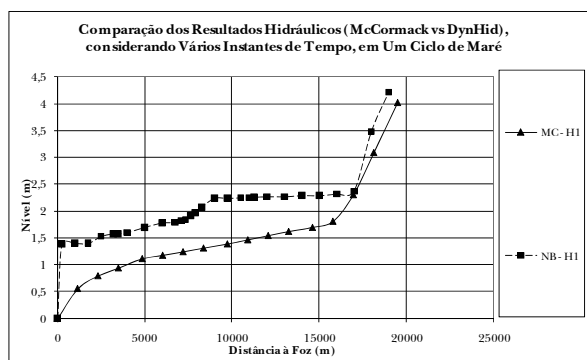


Figura 5a – Resultados comparativos de nível referentes à primeira hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM3, de Nóbrega (1998).

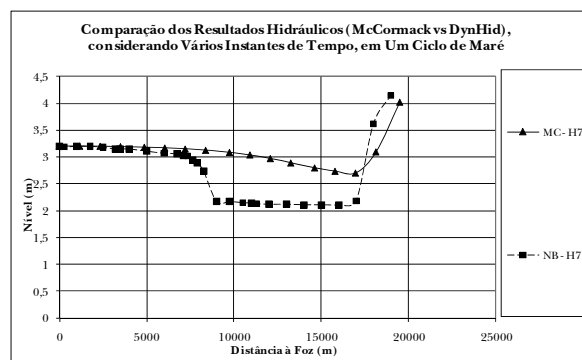


Figura 5d – Resultados comparativos de nível referentes à sétima hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM3, de Nóbrega (1998).

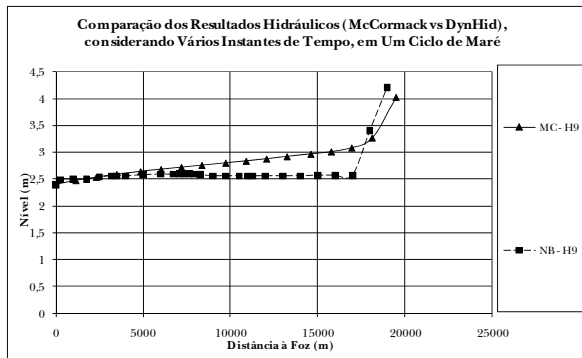


Figura 5e – Resultados comparativos de nível referentes à nona hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM3, de Nóbrega (1998).

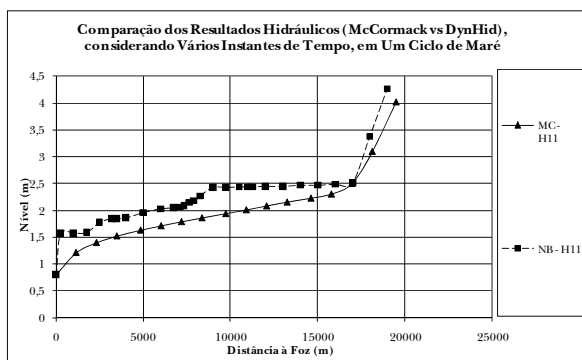


Figura 5f – Resultados comparativos de nível referentes à décima primeira hora de um ciclo inteiro de maré, usando como condições de contorno os valores de COCOFIM3, de Nóbrega (1998).

- O valor do coeficiente de mistura longitudinal. Para este parâmetro, usou-se a Equação 6, multiplicada por uma constante, o que altera o fluxo difusivo. Os multiplicadores foram: 0 (fluxo puramente convectivo), 1, 10, 100 e 1000.

Os testes foram feitos da seguinte maneira: Foi aplicado como condição de contorno de maré uma concentração de valor 1, enquanto na outra ponta o valor usado foi 0 (zero). Como condição inicial, usou-se concentração nula para todos os outros pontos do domínio. Este tipo de abordagem permite a simulação de uma quantidade significativa de possíveis problemas físicos, e.g., na simulação do movimento da frente salina, onde o valor de C/C_0 seria resolvido no problema, este variando de 1 (maré) a 0 (rio) (BEREZOWSKY, 1996). O programa foi executado para simular 10 ciclos de maré, sendo os três primeiros usados para a convergência do resul-

tado hidrodinâmico. Consequentemente, foram reservados para o problema de A-D, 7 ciclos de maré. A convergência dos resultados implica que a solução é fisicamente possível, devendo o valor de F sofrer o ajuste fino a partir de dados experimentais com uma substância conservativa, ou seja, com o fator de decaimento igual a zero. Uma vez ajustado o coeficiente de mistura longitudinal, a equação pode ser usada para o cálculo de qualquer substância (JAMES, 1993). Soluções que apresentaram valores sem significado físico (negativos ou acima de 1) também foram descartadas.

A escolha das configurações a serem usadas nas simulações obedeceu, primeiramente, um critério de exclusão. Observou-se que o uso de 64 intervalos não pode ser recomendado, pois isto acarretava uma alta propensão à instabilidade numérica. O mesmo argumento pode ser usado para o uso de 32 intervalos. Já para o caso do uso de 4 intervalos, apesar da estabilidade dos resultados, estes são relativamente grosseiros. Isto se explica pelo uso de uma série truncada curta, que possui somente componentes de baixa frequência. Pelo mesmo motivo, não se usou a solução com 8 intervalos no domínio espectral.

Em vista do apresentado, optou-se por usar 16 intervalos do domínio espectral, pois esta opção apresentou as melhores características de convergência e tempo de execução.

A segunda escolha recai sobre o uso dos multiplicadores para cada tipo de discretização do domínio. O multiplicador zero pode ser automaticamente descartado, pois ele dificilmente representaria uma situação física real. Ficaram então os multiplicadores 1, 10, 100 e 1000.

Resultados da Simulação

Com os parâmetros de execução determinados, partiu-se para a simulação de situações de injeção de poluentes no estuário.

Usou-se, pelo lado da maré, um valor de DBO de 5 ppm, que é o máximo aceito para águas salgadas na Resolução CONAMA nº 020/86. Já pelo lado do rio, foi utilizado como injeção de carga orgânica o valor de 200 ppm.

Primeiramente testou-se uma substância considerada conservativa, ou seja, o fator de decaimento é nulo. Os perfis no último ciclo de maré foram determinados, para o caso específico do multiplicador igual a 1.

Apesar de aparentemente caótico, os resultados apresentados nos gráficos dizem muito a respeito do problema físico resolvido. Para comprova

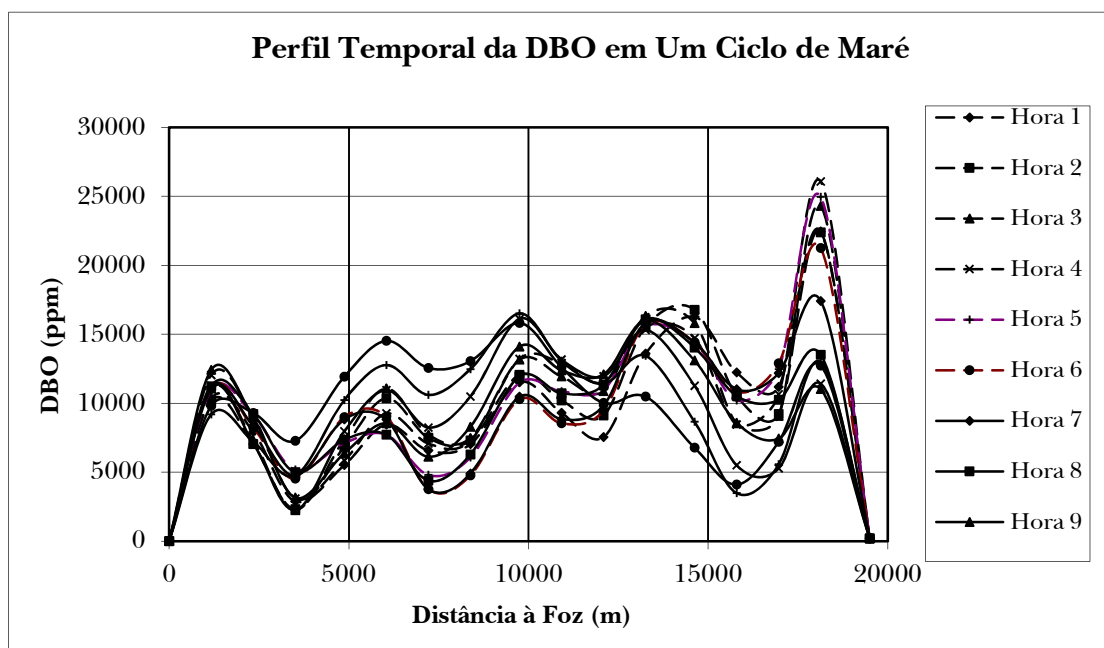


Figura 6 – Perfil de concentrações em um ciclo de maré, para multiplicador 1 e DBO igual a 200 ppm.

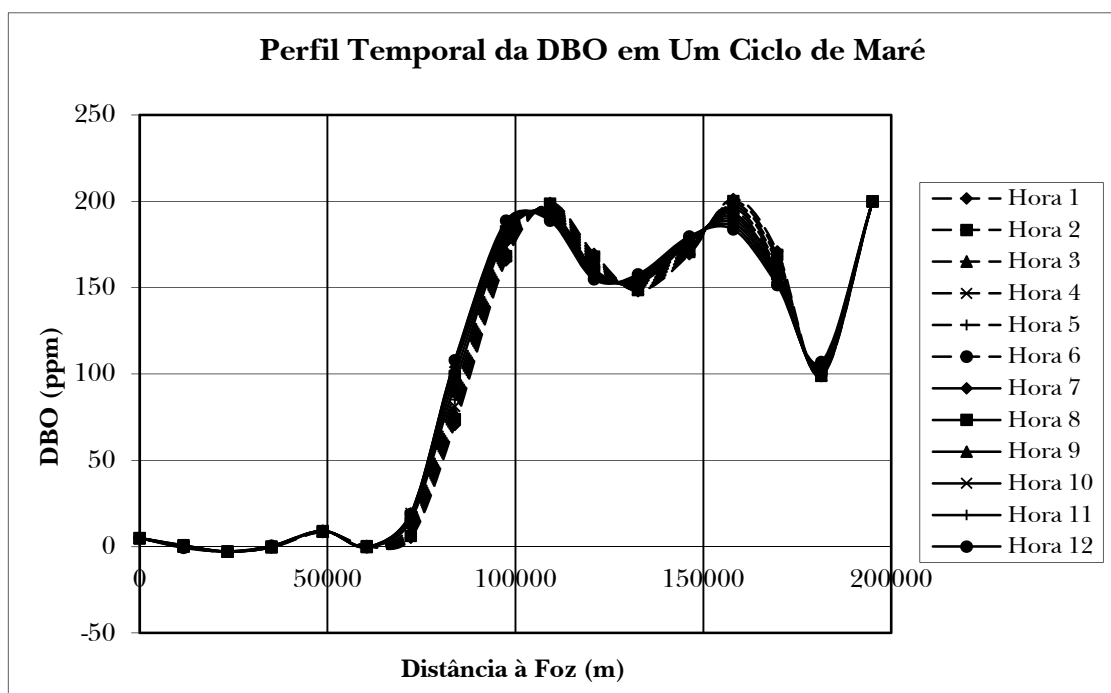


Figura 7 – Perfil de concentrações em um ciclo de maré, para multiplicador 1 e DBO igual a 200 ppm, em um estuário hipotético dez vezes maior que o trecho do Rio Cocó considerado.

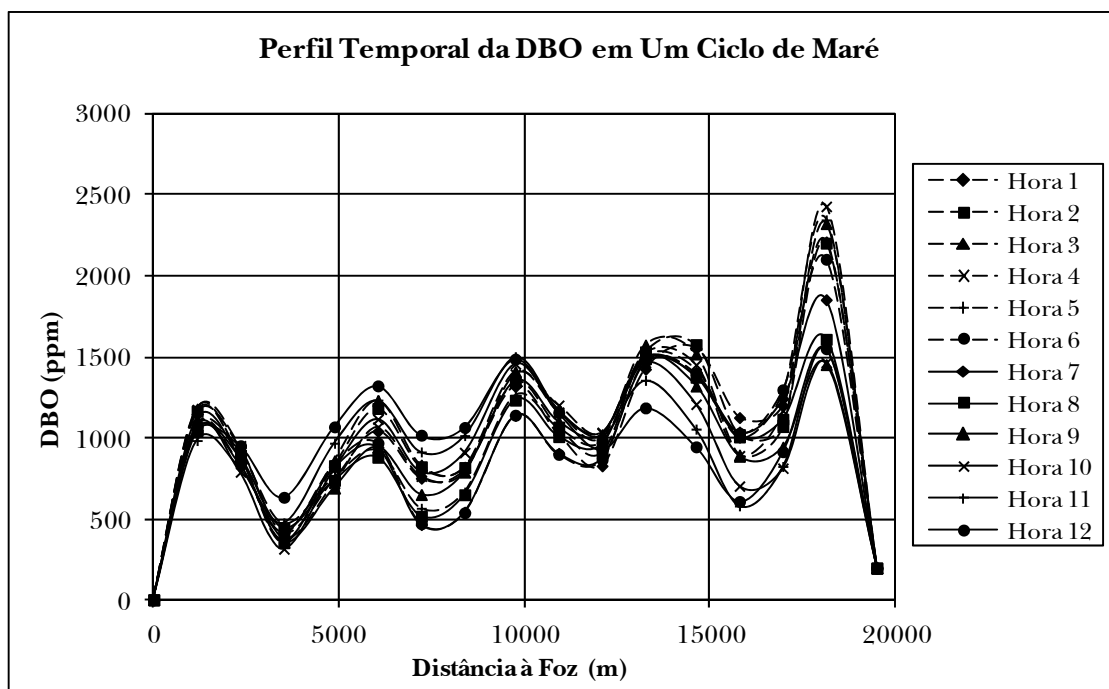


Figura 8 – Perfil de concentrações em um ciclo de maré, para multiplicador 1 e DBO igual a 200 ppm, com coeficiente de decaimento de 0,3500.

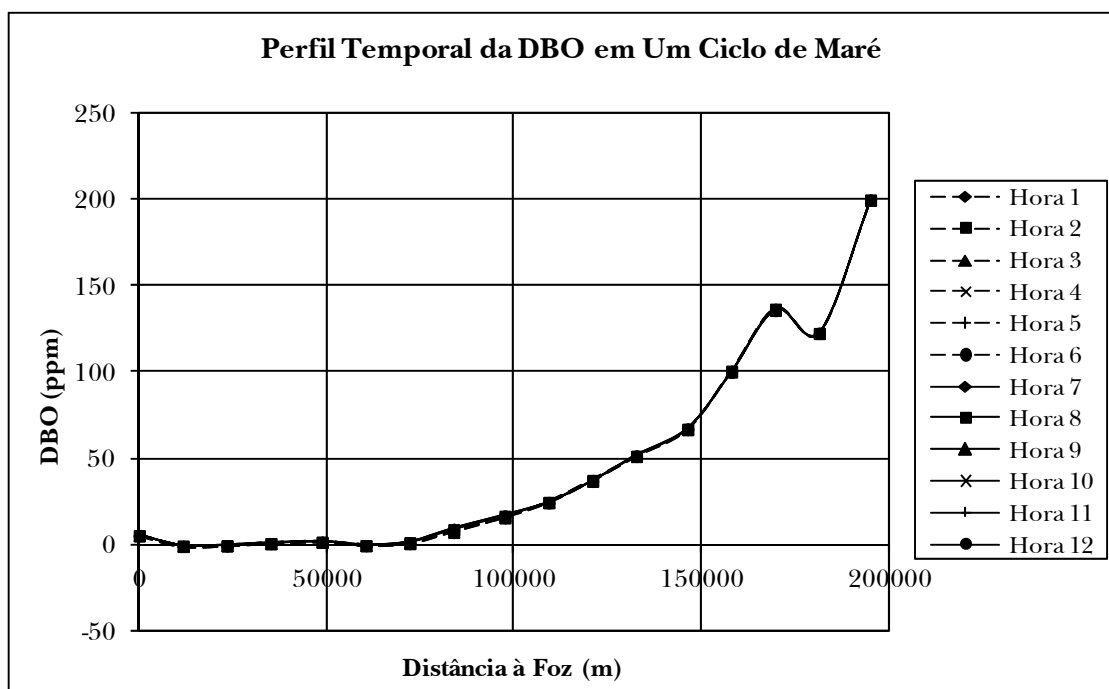


Figura 9 – Perfil de concentrações em um ciclo de maré, para multiplicador 1 e DBO igual a 200 ppm, com coeficiente de decaimento de 0,3500, em um estuário hipotético dez vezes maior que o trecho do Rio Cocó considerado.

ção da conformidade dos resultados com a realidade física, foram testadas as mesmas condições em um estuário hipotético, agora dez vezes mais comprido (os valores de x foram multiplicados por dez). Os perfis estão nas Figuras 6 e 7:

Para outros multiplicadores os resultados são análogos. Para uma substância não-conservativa, o programa foi executado com as mesmas condições, com exceção do coeficiente de decaimento, que foi considerado 0,3500. Os resultados encontram-se nas Figuras 8 e 9.

Da mesma forma que no caso conservativo, testaram-se as mesmas condições, desta vez em um estuário hipotético, dez vezes maior que o trecho do Rio Cocó estudado. Os perfis para um ciclo inteiro de maré encontram-se no gráfico a seguir.

CONCLUSÕES

Foi desenvolvido um ambiente computacional, usando-se a linguagem C++ em ambiente visual, com a finalidade de simular o comportamento de uma zona estuarina, tanto do ponto de vista hidrodinâmico como do ponto de vista do movimento de uma substância qualquer, de volume desprezível, submetida a processos de A-D (Advecção-Dispersão). O algoritmo desenvolvido usou interpolação dos dados das seções, com a finalidade de se necessitar de poucos pontos reais (cinco, de fato), uma vez que campanhas de campo são comumente onerosas, tanto do ponto de vista financeiro como de tempo.

Para a solução do problema hidrodinâmico, utilizou-se o esquema explícito de MCCORMACK de diferenças finitas. A aplicação do mesmo revelou-se bastante satisfatória para condições estuarinas. Através de comparação com os resultados obtidos por NÓBREGA (1998), constatou-se que no esquema desenvolvido a frente de maré avançou mais. Estes resultados estão de acordo com o obtido por VILLELA (1988), que analisou os perfis de carga hidráulica até uma distância de 24 km da foz, onde ainda achou influência da maré. Este transformou-se em um fato-chave para a análise dos resultados de A-D. Isto implica dizer que, talvez o uso de uma condição de vazão estacionária no limite-rio do programa não condissesse com a realidade do trecho do Rio Cocó estudado, e um outro ponto devesse ser buscado, que atendesse este critério. Contudo as condições de contorno usadas foram as mesmas aplicadas por NÓBREGA (1998), para fins de comparação.

Os resultados foram satisfatórios, tornando a aproximação unidimensional factível, uma vez que

a comparação dos resultados com os obtidos por NÓBREGA (1998), que por sua vez foram calibrados com resultados de campo, apresentou perfis similares.

Com relação à solução de A-D, foi aplicado um método pseudoespectral, explícito. Os métodos espectrais têm como uma de suas principais características uma alta sensibilidade às condições impostas pelo problema. Quaisquer descontinuidades, principalmente nos contornos, se transformam rapidamente em um fenômeno de Gibbs (BOYD, 2000), que se caracteriza por soluções altamente oscilatórias nas vizinhanças destas descontinuidades. É então necessário que se tomem cuidados matemáticos na hora de se definir as condições de contorno. Para o caso do trecho do Rio Cocó estudado, o aumento dos valores nos resultados dos perfis de concentração só pode ser explicado por um acúmulo de massa. Pelo formato dos mesmos, essa concentração está ocorrendo no contorno do rio (lado direito dos gráficos). Esta é uma instabilidade matemática que indica que a condição de contorno (de valor fixo) não é adequada. Para o comprimento considerado do rio, esta condição não se adequa à situação real, ou seja, deveria haver uma condição oscilatória, fato que é corroborado pelos dados de VILLELA (1988). Assim sendo, os resultados de concentração, que são acoplados aos resultados do escoamento pela equação de transporte, não deixam o domínio pelo processo de advecção.

Desta forma, repetiram-se os cálculos de A-D para um novo estuário, hipotético, dez vezes maior que o trecho do Rio Cocó estudado. Isto foi feito com a finalidade de se obter uma dissipação natural da onda hidrodinâmica ao longo do trecho considerado, de forma que a condição de contorno estacionária no rio fosse satisfatória. Obtiveram-se então perfis de concentração fisicamente coerentes, ou seja, com valores entre as duas condições de contorno aplicadas.

Os valores negativos encontrados nas Figuras 7 e 9 indicam oscilações típicas da função de interpolação (polinômio de Chebyshev), denotando a já mencionada sensibilidade dos métodos espectrais. Para um estudo destes ajustes, novos filtros, além dos aplicados neste estudo (tudo ou nada e “*raised cosine*”), devem ser testados. Apesar disso, infere-se pelos gráficos que estes valores indicam realmente concentração nula do poluente na região em que os mesmos surgem.

NOMENCLATURA

x	coordenada de posição longitudinal, [L]
z	nível do fundo do leito do rio, [L]
Q	descarga volumétrica, [L ³ /T]
A	área da seção de escoamento, [L ²]
g	aceleração da gravidade, [L/T ²]
H	elevação da superfície da água acima de um Datum, [L]
h	nível da lâmina d'água na seção, a partir do fundo, [L]
n	coeficiente de rugosidade de Manning [T.L ^{1/3}]
R	raio hidráulico, [L]
U	velocidade do escoamento, [L/T]
i	número do nó na malha de espaço (adimensional)
j	número do nó na malha de tempo (adimensional)
N	número de nós do domínio espectral (adimensional)
K	taxa de decaimento de 1ª ordem de uma substância, [T ⁻¹]
S _f	declividade de fricção, [L/L]
C	concentração da substância na área perpendicular ao fluxo [M/L ³]
F	coeficiente de mistura longitudinal, [L ² /T]
ξ	transformação linear de x, para o domínio espectral
T _k (ξ)	k-ésimo termo do polinômio de Chebyshev

REFERÊNCIAS

- BEREZOWSKY, M. Amixed character istics-spectral method for one-dimensional advection computation. In: INTERNATIONAL CONFERENCE CIMENICS 96. *Proceedings*. Mérida, Venezuela, 1996.
- BOYD, J. P. *Chebyshev and Fourier Spectral Methods*. 2nd edition. New York: Dover, 2000.
- BRANDÃO, R. L. *Sistema de informações para gestão e administração territorial da Região Metro-politana de Fortaleza – Projeto SINFOR: Diagnóstico geoambiental e os principais problemas de ocupação do meio físico da Região Metropolitana de Fortaleza*. Fortaleza: CPRM, 1995. 105 p.
- CANUTO, C.; HUSSAINI, M.Y.; QUARTERONI, A.; ZANG, T. *Spectral methods in fluid mechanics*. New York: Springer-Verlag, 1988.
- CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE. Resolução nº 020, de 18 de junho de 1986. Estabelece a classificação das águas, doces, salobras e salinas do Território Nacional. Brasília, DF, 1986.
- GOTTLIEB, D.; ORSZAG, S.A. *Numerical Analysis of Spectral Methods: Theory and Applications*. Pennsylvania: Society for Industrial and Applied Mathematics, 1977.
- GOTTLIEB, D.; HESTHAVEN, J. S. Spectral Methods for Hyperbolic Problems. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, n. 128, p. 83-131, 2001.
- JAMES, A. *An introduction to water quality modelling*. 2nd. ed. New York: John Wiley, 1993. 311p.
- MAVIGNIER, A. L. *Estudo físico, químico e bacteriológico do Rio Cocó*. 1992, 108f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 1992.
- McCORMARK, R.W. *The efect of viscosity in hypervelocity impact cratering*. AIAA Paper 69-354, Ohio: Cinicinnati, 1969.
- MCDOWELL & O'CONNOR. *Hydraulic Behavior of Estuaries*. Manchester: McMillan Press, 1977.
- MIRANDA, L. B.; CASTRO, B. M.; KJERFVE, B. *Princípios de Oceanografia Física de Estuários*. São Paulo: Edusp, 2002. 414 p.
- NÓBREGA, M. T. *Simulação do comportamento dos transientes hidráulicos na calha do Rio Cocó*. 1998. 152 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 1998.
- SUPERINTENDÊNCIA ESTADUAL DO MEIO AMBIENTE DO CEARÁ. Ações de conservação são realizadas no Rio Cocó. *SEMACE Notícias - Construindo a Sustentabilidade*. Ano I, Nº 5. Fortaleza: Semace, 2004. 8 p.
- SHIZGAL, B. D. Spectral Methods Based on Nonclassical Basis Function: the Advection–Diffusion Equation. *Computers & Fluids*, n. 31, p. 825-843, 2002.

VILLELA, S. *Estudo do transiente hidráulico do estuário do Rio Cocó*. Fortaleza: AGUASOLOS – Consultora de engenharia LTDA, 1988. 22 p.

Use of a Spectral Method on a Non-Uniform Grid to Evaluate Pollutant Dispersion in the River Cocó, Fortaleza, Ceará State

ABSTRACT

This is study of resistance to the injection of an organic load into the estuarine zone of a major source in the Metropolitan Region of Fortaleza (CE), here involving the River Cocó. For this a program was developed in C++, to simulate flow and dispersion of pollutants in a specific river reach that is under the direct influence of the tide. To simulate flow, a form of the Saint-Venant equations was used, with the appropriate contour conditions. In numerical resolution, an explicit scheme of finite differences was applied, in this case that of MCCORMACK. Once the flow profiles had been calculated, the Advection-Dispersion (A-D) equation was used, with a 1st order decay factor to simulate mass transport of BOD (Biochemical Oxygen Demand). The program developed applied a pseudospectral method with an explicit time step. The results found for flow show the good fit of the MCCORMACK scheme to estuarine situations, where the tidal movement makes the flux go in one direction at one time, and in the opposite direction the next. On the other hand, the results of A-D show the sensitivity of the spectral methods to the contour conditions imposed. ...

Key-words: *spectral method, method of finite differences, estuaries, water quality, River Cocó (CE).*