



## I-199 - MODEL DIF: APLICATIVO COMPUTACIONAL PARA ESTUDOS DOS MODELOS DE DIFUSÃO MOLECULAR E ADVECTIVA EM QUALIDADE DE ÁGUA

**Gustavo Paiva Weyne Rodrigues<sup>(1)</sup>**

Engenheiro Civil. Mestre em Engenharia Civil na área de concentração de Saneamento Ambiental do pela Universidade Federal do Ceará. Doutorando do curso de Doutorado em Engenharia Civil na área de concentração de Saneamento Ambiental pela Universidade Federal do Ceará.

**Soraia Tavares de Souza Gradvohl<sup>(2)</sup>**

Engenheira Civil. Mestre em Engenharia Civil na área de concentração de Saneamento Ambiental pela Universidade Federal do Ceará. Doutoranda do curso de Doutorado em Engenharia Civil na área de concentração de Saneamento Ambiental pela Universidade Federal do Ceará.

**Marco Aurélio Holanda de Castro<sup>(3)</sup>**

Engenheiro Civil. Professor Associado do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental na Universidade Federal do Ceará. PhD., Drexel University - USA.

**Endereço<sup>(1)</sup>:** Rua Costa Sousa, 156 – Benfica – Fortaleza, CE – CEP: 60020-300 - Brasil - Tel: (85) 3283.5592 - e-mail: gweyne@hotmail.com

### RESUMO

Os fenômenos de difusão molecular e advectiva são regidos pela Lei de Conservação das Massas que indica que o fluxo de massa do soluto, que corresponde à massa do soluto que atravessa uma unidade de área por uma unidade de tempo em uma direção, é proporcional ao gradiente da concentração do soluto nessa mesma direção. Diante deste conceito pode-se obter a equação que descreve como a massa (poluente, por exemplo) se espalha em um fluido.

Utilizando estes conceitos foi elaborado um estudo para um rio experimental, com características particulares, para uma substância conservativa. Assim, o presente trabalho vem apresentar o aplicativo computacional MODEL DIF, de cunho educacional, para estudos dos modelos de difusão molecular e advectiva em qualidade de água.

Como resultados foram gerados gráficos para a solução analítica e numérica, podendo-se compará-los. Além disso, foram geradas curvas adotando-se uma velocidade nula do rio, indicando a ocorrência apenas da difusão molecular local.

**PALAVRAS-CHAVE:** Modelos de Difusão, Qualidade de Água.

### INTRODUÇÃO

A primeira Lei de Fick associada à Lei da Conservação das Massas definem a equação diferencial parcial utilizada para descrever os processos de difusão, onde a primeira é definida pelo postulado:

$$q = -E \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

Indicando, portanto, que o fluxo de massa do soluto, que corresponde à massa do soluto que atravessa uma unidade de área por uma unidade de tempo em uma direção, é proporcional ao gradiente da concentração do soluto nessa mesma direção.

Garantindo que a Lei da Conservação das Massas seja satisfeita para um fluxo de massa nas condições indicadas tem-se que:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \bar{\Delta} \bullet \bar{q} = 0 \quad (2)$$



Substituindo (1) em (2) pode-se obter a seguinte equação que descreve como a massa (poluente, por exemplo) se espalha em um fluido:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = E \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right) \quad (3)$$

Para uma dimensão, esta equação diferencial possui a seguinte solução:

$$C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Et}} \exp\left(-\frac{x^2}{4Et}\right) \quad (4)$$

Com o incremento do campo velocidade atuando no fluido, tem-se a definição do processo advectivo de difusão quando as equações (para uma dimensão) tornam-se:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \mu \frac{\partial C}{\partial x} = E \left( \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \right) \quad (5)$$

$$C(x,t) = \frac{M}{\sqrt{4\pi Et}} \exp\left(-\frac{(x-\mu)^2}{4Et}\right) \quad (6)$$

## OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho é apresentar o aplicativo computacional MODEL DIF, de cunho educacional, para estudos dos modelos de difusão molecular e advectiva em qualidade de água.

Dentre os objetivos específicos podem ser evidenciados os seguintes:

- Simular a distribuição de uma substância conservativa em um rio usando a solução analítica nos tempos definidos (0,2, 0,4 e 0,6 h);
- Simular a distribuição de uma substância conservativa em um rio usando a solução numérica nos tempos definidos (0,2, 0,4 e 0,6 h), tanto a partir do método explícito como do método implícito (método das diferenças finitas);
- Comparar os gráficos gerados entre a solução analítica e as soluções numéricas;
- Comparar os gráficos gerados considerando-se a velocidade nula no rio ( $U = 0$ );
- Comparar os gráficos gerados por diferentes metodologias (Excel e Visual Basic - MODEL DIF).

## MATERIAIS E MÉTODOS

Para o estudo proposto foram utilizadas algumas ferramentas computacionais, tais como:

- Microsoft Excel®: para manipulação dos dados (planilhas) e geração dos gráficos;
- Microsoft Visual Basic®: para criação do programa, manipulando os dados e também gerar os gráficos comparativos.

De acordo com Canady (2000) o Visual Basic (VB) teve sua origem na linguagem Basic, que é uma linguagem de programação estruturada. No entanto, o Visual Basic usa um modelo de programação dirigido por eventos. O VB é uma linguagem desenvolvida pela empresa americana Microsoft Corporation.

No primeiro caso, foram utilizadas todas as soluções: analítica e numérica – pelo método das diferenças finitas (explícito e implícito) e, a partir da manipulação dos dados, foram gerados os gráficos para os tempos de 0,2, 0,4 e 0,6 horas.



Já no caso do Visual Basic, os gráficos também foram gerados para a solução analítica. Mas, para a solução numérica somente foi concluído utilizando o método explícito. Ficando a solução implícita a ser adicionada em uma nova versão do MODEL DIF.

Para a elaboração do trabalho foram considerados os seguintes dados gerais: profundidade = 1 m; largura = 60 m; velocidade = 2.400 m/h; vazão = 144.000 m<sup>3</sup>/h; dispersão = 150.000 m<sup>2</sup>/h; área transversal = 60 m<sup>2</sup>.

Considerou-se ainda que o estudo é baseado em um derramamento de uma substância conservativa com 5 Kg, que ocorreu em um rio 0,5 Km abaixo de uma cidade.

O rio foi subdividido em 50 seções de 100 m cada, considerando-se uma extensão total de 5 km. O tempo foi subdividido em um  $\Delta t$  de 0,01 h para os procedimentos, com exceção do método implícito utilizando o Excel como forma de diminuir a quantidade de matrizes a serem calculadas, utilizando-se, neste caso, um  $\Delta t$  de 0,1 h.

## RESULTADOS OBTIDOS / ESPERADOS

Os resultados serão apresentados em duas etapas: resultados obtidos pelo Excel e resultados obtidos pela programação no Visual Basic.

Para a solução analítica foram elaboradas planilhas no Excel, tanto para a solução geral como considerando a velocidade do rio nula. A partir daí, foram gerados, então, os gráficos para os tempos  $t = 0,2$  h,  $t = 0,4$  h e  $t = 0,6$  h, indicados nas Figuras 1 e 2.

Para a solução numérica utilizando tanto o método explícito como o implícito também foram elaboradas planilhas no Excel, respectivamente, para solução geral e considerando a velocidade do rio nula. A partir daí, foram gerados, então, os gráficos para os tempos  $t = 0,2$  h,  $t = 0,4$  h e  $t = 0,6$  h, indicados nas figuras 3 e 4 para o método explícito e 5 e 6 para o método implícito.

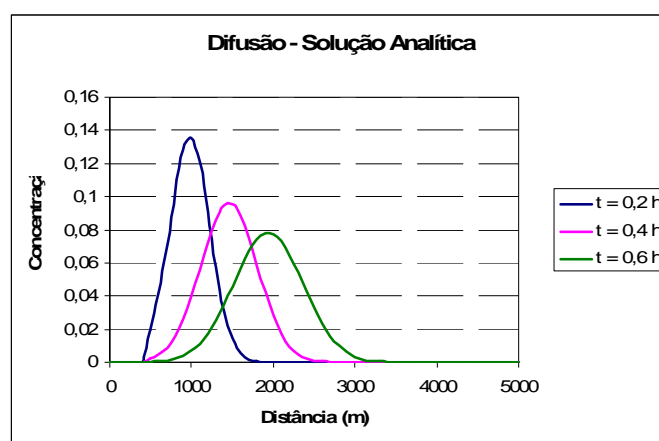


Figura 1: Gráfico - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Analítica.

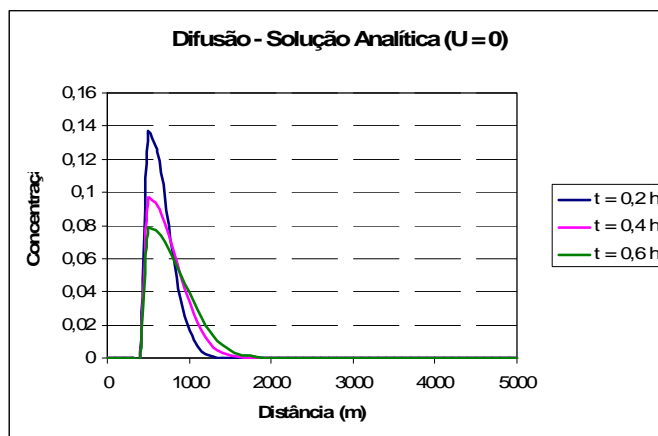


Figura 2: Gráfico - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Analítica com velocidade nula.

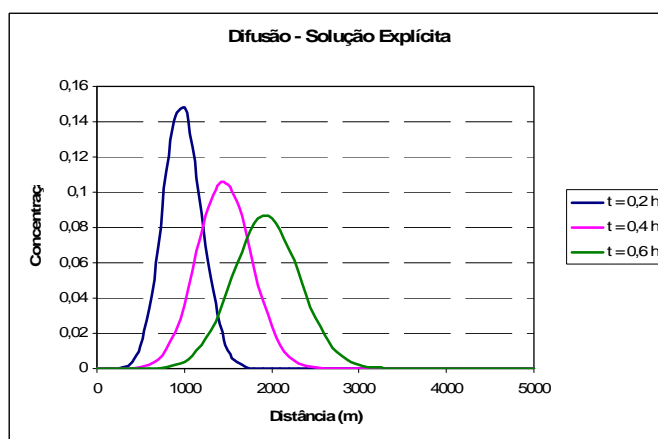


Figura 3: Gráfico - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Numérica – Método Explícito.

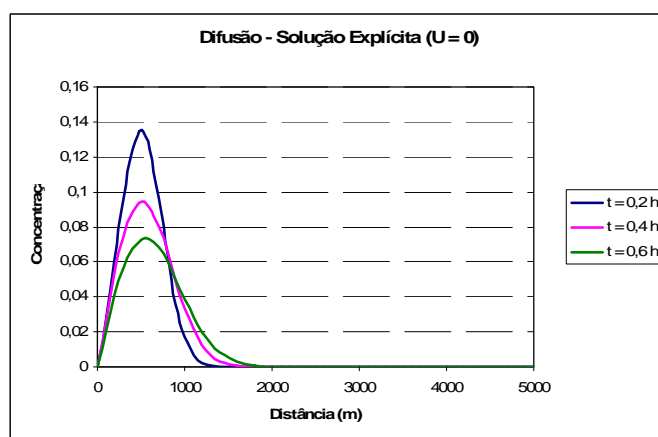
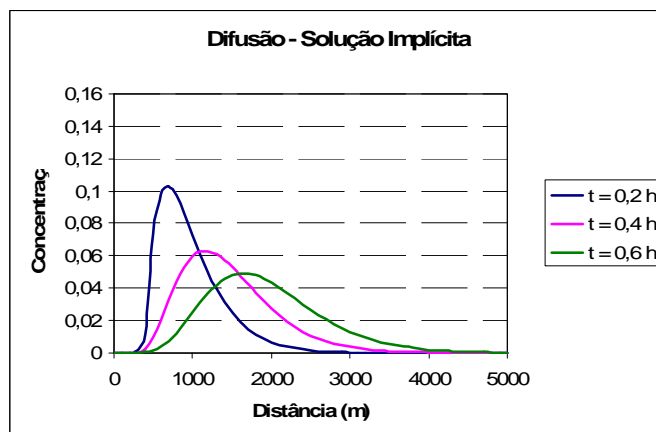
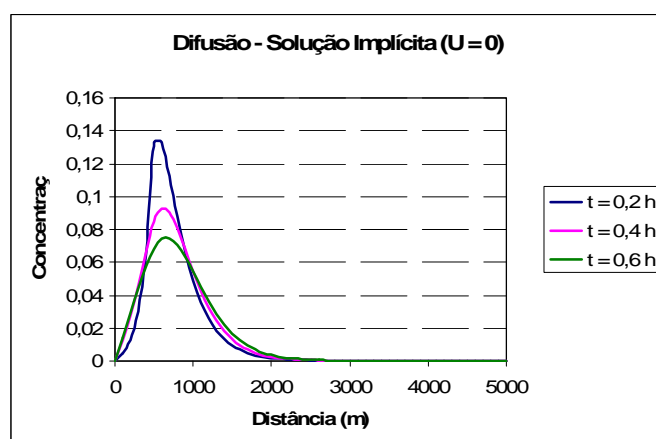


Figura 4: Gráfico - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Numérica – Método Explícito com velocidade nula.



**Figura 5: Gráfico - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Numérica – Método Implícito.**

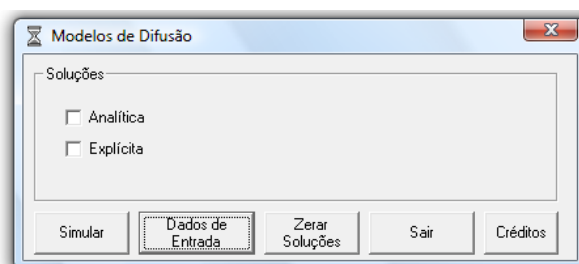


**Figura 6: Gráfico - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Numérica – Método Implícito com velocidade nula.**

Já para os resultados obtidos a partir da programação serão apresentados no documento os formulários a serem vistos e utilizados pelo usuário do programa e ainda os gráficos gerados para o estudo aqui realizado.

O programa gerado possui um formulário para seleção da solução (analítica ou numérica com o método explícito), com botões de comando para simular a(s) solução (ões) requerida(s), para ir para o formulário de dados de entrada, para zerar a seleção da(s) solução(ões) feita anteriormente, para sair do programa e para indicar os créditos (dados da equipe que elaborou o programa). Há o formulário utilizado para determinação dos dados de entrada (neste caso já se encontram preenchidos com os valores mencionados).

As figuras 7 e 8 indicam os formulários inicial e de dados de entrada do MODELdif.

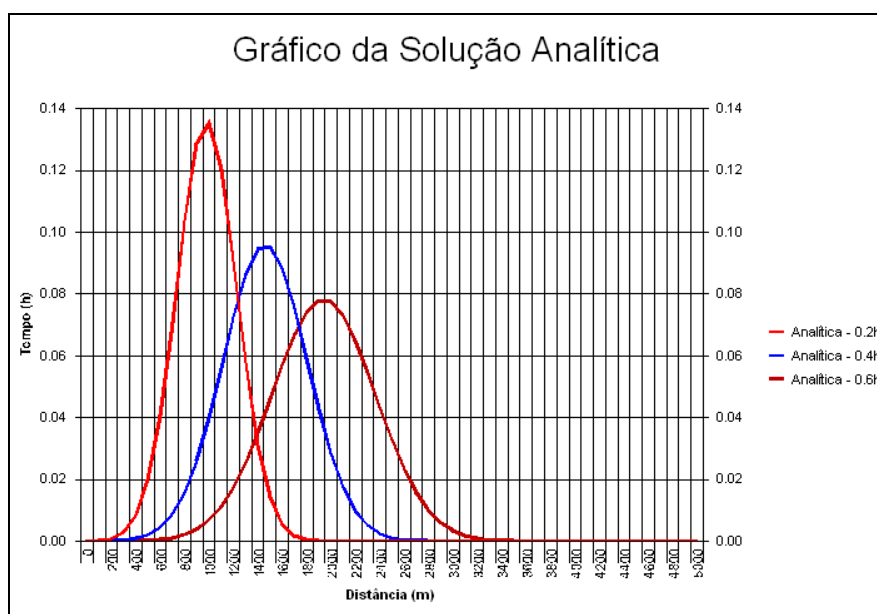


**Figura 7: Formulário inicial do programa MODELdif.**

Parâmetro	Valor
Profundidade (m):	1
Largura (m):	60
Velocidade (m/h):	2400
Vazão (m³/h):	144000
Coeficiente de Dispersão (m²/h):	150000
Área transversal (m²):	60
Massa (kg):	5
Extensão total (m):	5000
Ponto de lançamento da substância (m):	500

**Figura 8: Formulário dos Dados de Entrada do programa MODELDIF.**

Os gráficos gerados pelo MODELDIF, para os métodos analítico e implícito, estão apresentados nas figuras 9, 10, 11 e 12.



**Figura 9: Gráfico do MODELDIF - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Analítica.**

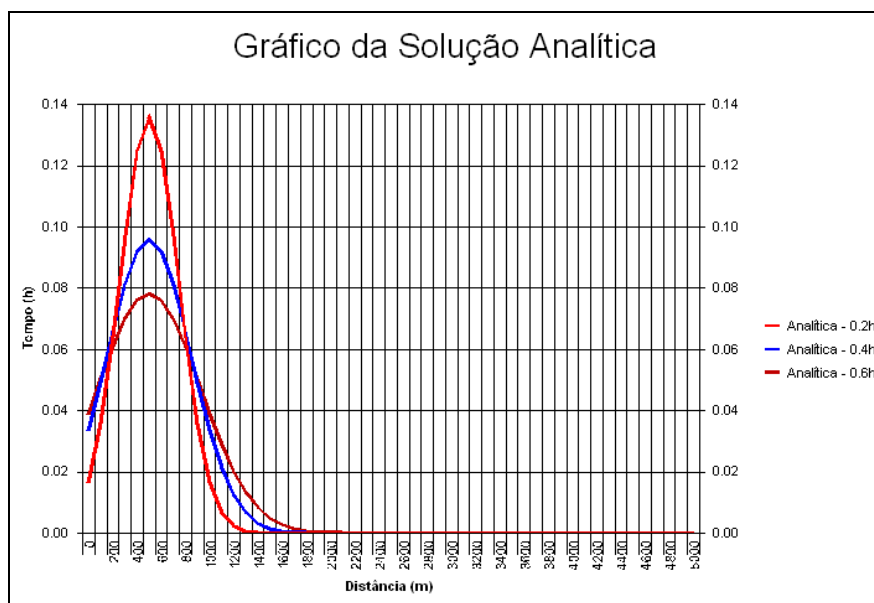


Figura 10: Gráfico do MODELDF - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Analítica com velocidade nula.

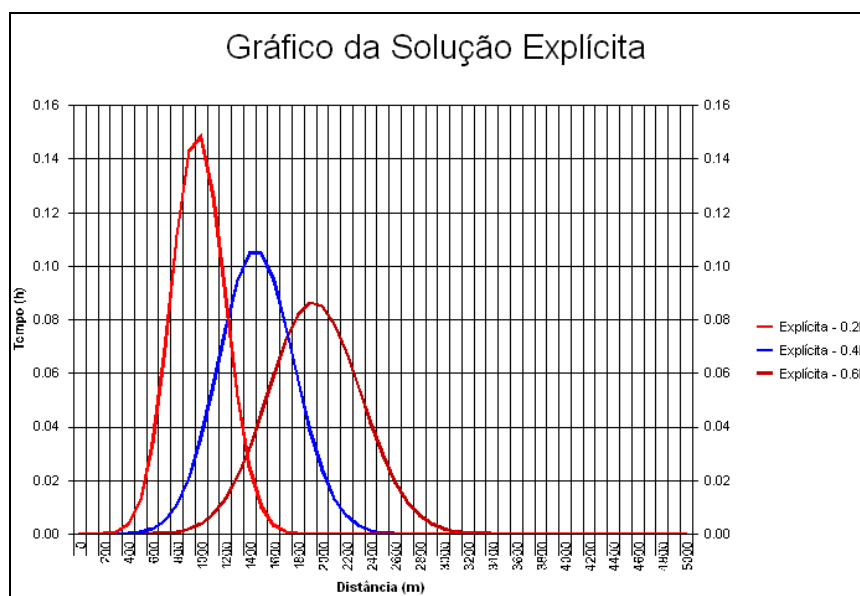


Figura 11: Gráfico do MODELDF - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Numérica – Método Explícito.



Figura 12: Gráfico do MODEL DIF - Concentração versus Distância (m), utilizando a Solução Numérica – Método Explícito com velocidade nula.

## CONCLUSÕES/RECOMENDAÇÕES

A partir da análise dos dados realizada neste trabalho, podem ser apresentadas as seguintes considerações:

- Os gráficos gerados utilizando a solução analítica, bem como as soluções numéricas, apresentaram-se dentro do esperado, e ainda bastante semelhantes entre si;
- Os gráficos gerados a partir da solução analítica apresentam-se de forma concentrada no meio da curva quando comparado aos de solução numérica, já que estes apresentam uma curva de forma mais distribuída;
- Quando a velocidade do rio é considerada nula, pode-se observar em todos os casos que as curvas de concentração se sobrepõem indicando apenas que há uma difusão molecular local, já que o poluente não mais sofre ação do campo velocidade;
- É importante salientar que o tanto o programa criado no Visual Basic como a manipulação de dados no Excel puderam dar subsídios para gerar as curvas necessárias para a análise do processo de dispersão. Mas, deve-se atentar-se ao fato de ter sido feito um aumento do intervalo de tempo (de 0,01 para 0,1 h) para o método implícito, o que pode gerar erros no cálculo das concentrações.
- Recomenda-se, como continuação do trabalho, a inclusão do método implícito no MODEL DIF.

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CANADY, T. Microsoft Visual Basic 6.0: Expert sem limites. São Paulo: Editora Berkeley, 2000. 474 p.
2. FISCHER, H. B. Mixing in Inland and Coastal Waters. Academic Press, Inc. 1979.