DINÂMICA DA FLOCULAÇÃO NO TRANSPORTE DE SEDIMENTOS FINOS

Alfredo Emilio Trento

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

_____
Prof. Flávio Cesar Borba Mascarenhas, D.Sc.

_____
Profª. Susana Beatriz Vinzón, D. Sc.

_____
Prof. José Paulo Soares de Azevedo, Ph.D.

_____
Prof. Benoit Le Guennec, Dr.

_____
Prof. Alberto Garcia de Figueiredo, Ph.D.

_____
Prof. Edmilson Costa Teixeira, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL
SETEMBRO DE 2005

TRENTO, ALFREDO EMILIO

Dinâmica da Floculação no Transporte de Sedimentos Finos [Rio de Janeiro] 2005

XV, 170 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc., Engenharia Civil, 2005)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Floculação de Sedimentos Finos
2. Modelo de partículas
3. Rio Paraíba do Sul.

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

Dedicatória

A Tere,
a Martín, Lara e Tomás.

Agradecimentos

Ao meu orientador, Professor Flávio Cesar Borba Mascarenhas, pela sua amizade e confiança depositada no meu trabalho.

À minha co-orientadora, Professora Susana Beatriz Vinzón, pela sua amizade, disposição às discussões técnicas nas atividades de laboratório, nos resultados do modelo numérico e atenção brindada ao longo da minha estadia no Rio de Janeiro.

Ao Professor Paulo C. C. Rosman do Programa de Engenharia Oceânica da COPPE, pela sua colaboração na implementação do sistema hidrodinâmica SisBahia.

Ao Professor Carlos A. F. Schettini, da Universidade do Vale do Itajaí pela valiosa informação hidrodinâmica e sedimentológica fornecida no trabalho do campo em Janeiro de 2004 no estuário do Paraíba do Sul.

À equipe do Professor Giulio Massarani do Programa de Engenharia Química da COPPE, pela colaboração na utilização do Malvern.

Ao Professor Moises Tessler da Universidade de São Paulo pela informação coletada em campo com o aparelho Lisst 25.

Ao meu amigo Marcos Gallo, companheiro nos dois trabalhos de campo, nas tarefas de laboratório e nos pesares diários.

Á Agência Nacional de Águas pelas informações hidrológicas da estação de Campos.

Ao CNPq pelo apoio econômico para a realização do doutorado, pelos recursos financeiros para a construção dos equipamentos de laboratório e assistência a congressos e cursos.

A todo o pessoal docente, alunos e funcionários do Laboratório de Hidráulica Computacional do Programa de Engenharia Civil, e do Laboratório de Dinâmica de Sedimentos Coesivos do Programa de Engenharia Oceânica da Coppe.

À Brandina de Amorim pela sua colaboração no laboratório.

À Valéria Nunez pela sua colaboração com a implementação com o modelo SisBahia.

Aos meus amigos Maxi Strasser e Mariela Gabioux pela ajuda fraternal.

À Universidad Nacional del Litoral (Argentina).

Aos amigos que se foram e ainda me guian.

À toda minha família pelo incondicional apoio espiritual e material.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

DINÂMICA DA FLOCULAÇÃO NO TRANSPORTE DE SEDIMENTOS FINOS

Alfredo Emilio Trento

Setembro/2005

Orientadores: Flávio César Borba Mascarenhas
Susana Beatriz Vinzón

Programa: Engenharia Civil

Neste trabalho foi analisada a dinâmica de agregação de sedimentos finos mediante testes de laboratório com floculadores. Utilizando um modelo de trajetória de partículas e medições de campo o transporte e os processos de agregação de finos no estuário do rio Paraíba do Sul foram preliminarmente abordados.

Com floculadores Couette e de disco mostrou-se que os tamanhos dos flocos tendem a aumentar à medida que crescem as concentrações, tanto em água doce quanto em água salgada, tal como prediz a teoria da agregação, e que os diâmetros de equilíbrio (d_e) são ligeiramente maiores em ambientes salinos, tanto para agregados formados por tensões de cisalhamento como por sedimentação diferencial. O processo de desagregação por tensões de cisalhamento foi adicionado ao modelo de agregação para levar em consideração a quebra dos flocos, a partir de sua tensão resistente. As tensões resistentes foram calculadas a partir das dimensões fractais e da massa específica diferencial.

Após a calibração dos coeficientes de eficiência de colisão, o modelo numérico foi capaz de representar os tamanhos dos flocos medidos no estuário do rio Paraíba do Sul. O tamanho dos flocos observados foram semelhantes aos tamanhos de equilíbrio determinados no floculador Couette.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

AGGREGATION DYNAMICS IN FINE SEDIMENT TRANSPORT

Alfredo Emilio Trento

September/2005

Advisors: Flávio César Borba Mascarenhas
Susana Beatriz Vinzón

Department: Civil Engineering

The aggregation dynamics of fine sediments was analyzed through laboratory tests using flocculators. Their transport and the aggregation processes were preliminary studied in the estuary of the Paraíba do Sul River using a particle tracking model and field data.

By using Couette and disk flocculators it was shown that floc sizes tend to increase as concentrations grow both in fresh and salt water, in agreement with the aggregation theory, and that equilibrium diameters (d_e) are slightly greater in salt environments for flocs developed either under shear stress or by differential sedimentation. The floc breaking-up process by shear stress was included in the model and accounted for their yield stresses, which were determined by the fractal dimensions and the differential density.

After calibration the collision efficiency coefficients, the numerical model was able to predict floc sizes comparable with those measured at the Paraíba do Sul estuary, which, in turn, were similar to those obtained during the laboratory experiments in the Couette flocculator.

Indice

1. INTRODUÇÃO 1

1.1 Motivação e importância do problema 1
1.2 Sumário 3

2. MODELOS DE FLOCULAÇÃO 5

2.1 Funções de freqüência de colisão 9
2.1.1 Floculação por Movimento Browniano 11
2.1.2 Floculação por tensões de cisalhamento em escoamento turbulento 12
2.1.3 Floculação por Sedimentação Diferencial 15
2.2 Modelos matemáticos de floculação 17
2.2.1 Modelo potencial 17
2.2.2 Modelo potencial com parâmetro de dissipação 19
2.2.3 Modelo de WINTERWERP 19
2.2.4 Modelo de FARLEY e MOREL 21
2.3 Cálculo do diâmetro de flocos 27
2.4 Desagregação por tensões de cisalhamento 29
2.5 Conclusões 35

3. EXPERIMENTOS COM FLOCULADORES 36

3.1 Introdução 36
3.2 Floculador de Disco 37
3.2.1 Metodologia de trabalho com floculador de disco 38
3.3 Floculador Couette 41
3.3.1 Metodología de trabalho com floculador Couette 43
3.4 Determinação do diâmetro de equilibrio 45
3.5 Medição de velocidade de sedimentação e cálculo da massa específica diferencial dos flocos 52
3.6 Cálculo da eficiência de colisão na agregação por tensões de cisalhamento 59
3.7 Análise do controle das tensões de cisalhamento e das concentrações sobre o tamanho dos flocos 62
3.8 Determinação da tensão resistente dos flocos 65
3.9 Conclusões 69

4. MODELO DE TRANSPORTE DE SEDIMENTOS 72

4.1 Esquema numérico 74
4.1.1 Cálculo das velocidades das partículas 76
4.1.2 Número de Partículas 77
4.1.3 Condições iniciais e condições de contorno 80
4.2 Aplicação no Lagoa Setúbal 81
4.3 Parametrização de erosão e deposição 81
4.3.1 Erosão 81
4.3.2 Deposição 82
4.3.3 Cálculo do nível do leito 83
4.4 Fluxograma do modelo numérico 84
4.5 Conclusões 86

5. ENSAIOS NUMÉRICOS PRELIMINARES 87

5.1 Sensibilidade à variação dos parâmetros do modelo numérico 88
5.2 Análise do algoritmo para a tensão resistente de flocos τ_f 103
5.3 Representação do diagrama conceitual de DYER 108
5.4 Conclusões 112

6. IMPLEMENTAÇÃO DO MODELO NO ESTUÁRIO DO RIO PARAÍBA DO SUL 113

6.1 Trabalhos de campo 114
6.2 Simulação Hidrodinâmica 117
6.2.1 Implementação do modelo hidrodinâmico 119
6.3 Resultados do modelo de transporte de sedimentos 121
6.3.1 Condições de implementação 121
6.3.2 Resultados e Discussão 122
6.3.3 Cálculo de W_s 133
6.3.4 Transporte de sedimentos no trecho exterior do estuário 137
6.4 Conclusões 143

7. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES 146

7.1 Conclusões 146
7.1.1 Ensaios de Laboratório 146
7.1.2 Modelo de trajetória de partículas 148
7.1.3 Resultados do trabalho de campo e do modelo no Paraíba do Sul 149
7.2 Recomendações 150

8. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS 153

ANEXO 1: "Assessments on the Particle-Tracking Method Applied to Transport Problems" 166
ANEXO 2: Cálculo de d_f pelo método de Newton Raphson 167
ANEXO 3: Determinação granulométrica do sedimentos suspensos. 170

Indice de Figuras

Figura 2.1: Relação da salinidade com a velocidade de sedimentação (VAN RIJN, 1993). 8
Figura 2.2: Variação de G na vertical segundo diferentes profundidades (para $\upsilon=10^{-6}$ m^2s^{-1}). 14
Figura 2.3: variação da escala espacial de Kolmogorov, η, segundo a taxa de dissipação G. 15
Figura 2.4: Funções de freqüência de colisão, β_b , β_{sh} e β_{ds} . Acima, por colisões com uma partícula de 25 μm de diâmetro, abaixo, com uma partícula de 1 μm de diâmetro. Calculado com T=293 K, e G=200 s^{-1}. 16
Figura 2.5: Velocidade média de sedimentação de flocos em função da concentração de sedimentos suspensos, medidos *in situ*, em água salina. (VAN LEUSSEN, 1999). 18
Figura 2.6: W_s em função de C, obtida com a equação (2.30). Comparação com observações de campo e com resultados dos testes de sedimentação. 26
Figura 2.7: W_s em função de C, obtida com a equação (2.30). Comparação com observações de campo e com resultados dos testes de sedimentação. 26
Figura 2.8: Resultados experimentais obtidos por KRONE. Os símbolos representam cinco sedimentos diferentes. As linhas retas representam a equação (2.48) com $D=n_f$= 2.1 e 2.3. (Reproduzido de KRANENBURG, 1994). 32
Figura 3.1: Distribuição granulométrica da amostra padrão, obtida no estuário do rio Paraíba do Sul (fevereiro, 2003). 37
Figura 3.2: Floculador de disco. 38
Figura 3.3: Flocos do floculador de disco em água doce com C= 100 mg l^{-1} 40
Figura 3.4: Flocos do floculador de disco em água salgada com C= 200 mgl^{-1} 40
Figura 3.5: Floculador Couette, motor e regulador de giros. 43
Figura 3.6: Flocos do floculador Couette em água salgada com C= 335 mgl^{-1}. 45
Figura 3.7: Determinação de d_e para água doce e salgada no floculador de disco. 49
Figura 3.8: Determinação de d_e para água salgada em cada tempo de amostragem no floculador de disco, ... 49
Figura 3.9: Determinação de d_e para água doce em cada tempo de amostragem no floculador de disco, + C=335 mgl^{-1}, o C=200 mgl^{-1}, ◊ C=100 mgl^{-1}. 50
Figura 3.10: Determinação de d_e para água doce e salgada no floculador Couette. 50
Figura 3.11: Determinação de d_e para água doce, para C=200 mg l^{-1} com ω=38, 75 e 150 rpm, ... 51
Figura 3.12: Determinação de d_e para água doce e salgada, para C=200 mg l^{-1} com ω=38, 75 e 150 rpm. 51
Figura 3.13: W_s medida em laboratório, em função do d_f para os floculadores de disco e Couette. As linhas de traços indicam $\Delta\rho_f$ constante, segundo a lei de Stokes. 52
Figura 3.14: Número de Re para d_f. 53
Figura 3.15: Seqüência iterativa para $\Delta\rho_f$, e, k_f, β, Ω, C_D. 54
Figura 3.16: Relação C_D calculados com a fórmula de Stokes e o modelo matemático de MASLIYAH e POLIKAR (1980). 55
Figura 3.17: Variação da ρ_f segundo d_f, para os floculadores de disco e Couette. 56
Figura 3.18: Relação entre $\Delta\rho_f$ e o produto τC, com base nos experimentos de laboratório (com os desvios em linhas verticais). 57
Figura 3.19: Eficiência de colisão calculada. 62
Figura 3.20: Relação entre d_e e η. 63

Figura 3.21: Relação entre $d_{f\,max}$ e η. 64
Figura 3.22: Correlação entre o produto C/G e η/d_e. 64
Figura 3.23: Dimensão fractal segundo d_f, para agregados formados no floculador Couette, para diferentes C. 65
Figura 3.24: Dimensão fractal segundo d_f, para agregados formados no floculador de disco , para diferentes C. 66
Figura 3.25: τ_f médio para cada amostra e intervalo de dimensões fractais. 67
Figura 3.26: τ_f para cada floco e intervalo de dimensões fractais. 68
Figura 3.27: Relação entre p_f e tensão resistente para cada amostra obtida com n_f= 2.15. 69
Figura 4.1: Isolinhas de concentração para a solução analítica (linha contínua) e o modelo de partículas (linhas de tracejadas), para NP=100000 partículas em t =1200 segundos. 78
Figura 4.2: Relação entre o número de partículas NP e ε_r para o experimento bidimensional. 80
Figura 4.3: Seqüência iterativa para C_D e d_f. 84
Figura 4.4: Esquema do funcionamento do modelo de partículas. 85
Figura 5.1: Geometria do canal. 88
Figura 5.2: Variações de d_f segundo α_{sh} para o tramo fluvial e o estuário. 90
Figura 5.3: Variações de W_s segundo α_{sh} para o tramo fluvial e para o estuário. 91
Figura 5.4: Perfil do parâmetro de dissipação G no trecho fluvial e para o estuário. 91
Figura 5.5: Variações de d_f segundo α_{ds} para o tramo fluvial e o estuário. 92
Figura 5.6: Variações de W_s segundo α_{ds} para o tramo fluvial e o estuário. 93
Figura 5.7: Variações de d_f segundo ρ_f para o trecho fluvial e para o estuário. 94
Figura 5.8: Variações de W_s segundo ρ_f para o trecho fluvial e para o estuário. 94
Figura 5.9: Variações de d_f segundo C para o trecho fluvial e o estuário. 95
Figura 5.10: Variações de W_s segundo C para o trecho fluvial e para o estuário. 95
Figura 5.11: Variações de d_f segundo α_{sh} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial. 98
Figura 5.12: Variações de d_f segundo α_{sh} com diferentes ρ_f para o trecho de estuário. 98
Figura 5.13: Variações de W_s segundo α_{sh} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial. 99
Figura 5.14: Variações de W_s segundo α_{sh} com distintas ρ_f para o trecho de estuário. 99
Figura 5.15: Variações de d_f segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial. 101
Figura 5.16: Variações de d_f segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho de estuário. 102
Figura 5.17: Variações de W_s segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial. 102
Figura 5.18: Variações de W_s segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho de estuário. 103
Figura 5.19: Perfil espacial de τ_b no trecho de estuário. 106
Figura 5.20: Variações de d_f com diferentes ρ_f para o trecho fluvial. 106
Figura 5.21: Variações de d_f com distintas ρ_f para o trecho de estuário. 107
Figura 5.22: Variações de W_s com diferentes ρ_f para o trecho fluvial. 107
Figura 5.23: Variações de W_s com diferentes ρ_f para o trecho de estuário. 108
Figura 5.24: Diagrama conceitual de DYER que representa qualitativamente as relações entre as tensões de cisalhamento, a concentração e o tamanho dos flocos (Reproduzido de DYER, 1989). 110
Figura 5.25: Resultado da aplicação do modelo de floculação para simular o diagrama conceitual de DYER (1989). 111

Figura 5.26: Representação do esquema conceitual com base em experimentos de laboratório (Reproduzido de MANNING e DYER, 1999)..... 111
Figura 6.1: Imagem de satélite do rio Paraíba do Sul (*www.cdbrasil.cnpm.embrapa.br*). 113
Figura 6.2: Domínio do modelo e batimetria da área em estudo..... 115
Figura 6.3: Localização de fontes e de verticais de amostragem de sedimentos suspensos, de medição de velocidades da corrente, no trecho fluvial e estuarino, na campanha de janeiro de 2004. 116
Figura 6.4: Calibração do turbidimetro. 117
Figura 6.5: Malha completa do modelo hidrodinâmico. 119
Figura 6.6: Vista ampliada da malha para o trecho de estuário..... 120
Figura 6.7: Comparação da previsão de maré obtida a partir de dados de marégrafo de Atafona com resultados do modelo hidrodinâmico no mesmo local..... 121
Figura 6.8: Tamanhos de flocos a diferentes profundidades nas verticais 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 e 15. 123
Figura 6.9: d_f calculados e medidos com Lisst 25, e diâmetros de partículas medidas com Malvern, nas diferentes verticais. 124
Figura 6.10: Perfis de concentrações medidas nas verticais 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 e 14, no interior do estuário (ver Figura 6.3). 126
Figura 6.11: Concentrações calculadas e das amostras coletadas em diferentes profundidades, em cada vertical 126
Figura 6.12:Vazões medidos na estação do Campos (RJ), dados da ANA. 127
Figura 6.13: Imagem do satélite do estuário do rio Paraíba do Sul, correspondente ao 3 de março de 1995 com Q≈ 700 m^3s^{-1}. 127
Figura 6.14: Imagem do satélite do estuário do rio Paraíba do Sul, correspondente ao 14 de janeiro de 1996 com Q≈ 2500 m^3s^{-1}. 128
Figura 6.15: d_f calculados e medido, z, G e U, na vertical 9. 129
Figura 6.16: W_s e G calculados na vertical 9. 130
Figura 6.17: Coeficientes B_{sh} e B_{ds}, do modelo de FARLEY e MOREL para a vertical 9. 131
Figura 6.18: Perfis de concentrações medidas nas verticais 2, 3, 4, 5, 6 e 15, fora do estuário. 131
Figura 6.19: Perfis verticais de salinidade, temperatura, oxigênio dissolvido e turbidez na vertical 15. 132
Figura 6.20: W_s medidas e calculadas, em cada vertical. 134
Figura 6.21: Velocidades U e V medidas nas verticais 2 a 6. 136
Figura 6.22: % de água em amostras de fundo N.E. e N.O. 136
Figura 6.23: Relação C-W_s calculada com o modelo. 137
Figura 6.24: Isolinhas de diâmetros de flocos para t=65 horas. 138
Figura 6.25: Perfis verticais de salinidade, temperatura, oxigênio dissolvido e turbidez na verticais 14 (acima) e 6 (abaixo)..... 139
Figura 6.26: Isolinhas de C para t=65 horas. 141
Figura 6.27: Isolinhas de G para t=65 horas..... 142
Figura 6.28: Isolinhas de W_s para t=65 horas. 143

Indice de Tabelas

Tabela 2.1: Mecanismos de floculação, parâmetros e dimensões. 11
Tabela 2.2: Definição dos coeficientes K_b, K_{sh}, K_{ds} e S/h, a partir das freqüências de colisão (FARLEY e MOREL, 1986)..... 23
Tabela 2.3: Cálculo de C_D em função do *Re.* 29
Tabela 3.1. Variáveis dos experimentos efetuadas com o floculador de disco. 39
Tabela 3.2: Variáveis dos experimentos efetuadas com o floculador Couette. 44
Tabela 3.3: Cálculo de G_m e porcentagem da aceleração da gravidade. 45
Tabela 3.4. Número de fotos analisadas, de flocos, d_e e desvio médio $\bar{s}$ por cada *C* do disco. 46
Tabela 3.5: Número de fotos, de flocos, d_e e desvio médio $\bar{s}$ por cada *C* do Couette... 47
Tabela 3.6: Porosidade e permeabilidade para os flocos gerados no disco. 58
Tabela 3.7: Variáveis médias dos flocos gerados no Couette para cada *C.* 58
Tabela 3.8: Variáveis médias dos flocos gerados no disco para cada *C*. 59
Tabela 3.9: n_f, ρ_f e τ_f médios para os flocos gerados no Couette. 67
Tabela 3.10: n_f, ρ_f e τ_f médios para os flocos gerados no disco. 67
Tabela 5.1: Variáveis utilizadas para a análise de sensibilidade. 89
Tabela 5.2: Variáveis implementadas para a análise de sensibilidade do sétimo experimento. 97
Tabela 5.3: Variáveis implementadas para a análise de sensibilidade do oitavo experimento. 100
Tabela 5.4: Variáveis implementadas na análise de sensibilidade do nono experimento. 105
Tabela 5.5: Variáveis implementadas para representar o esquema conceitual..... 109
Tabela A1: Cálculo de C_D em função do *Re* 167

Lista de símbolos

a, altura acima do leito de medição da concentração média temporal pontual, (m).
B_b, coeficiente da floculação para o movimento Browniano, ($m^{0.9}\ kg^{-0.3}\ s^{-1}$).
B_{ds}, coeficiente da floculação para a sedimentação diferencial, ($m^{3.9}\ kg^{-1.3}\ s^{-1}$).
B_{sh}, coeficiente da floculação para a ação do cisalhamento, ($m^{2.7}\ kg^{-0.9}\ s^{-1}$).
B_k,B_j, coeficientes que dependem das propriedades físico-químicas dos agregados, da sua massa específica efetiva, geometria e tensões de cisalhamento, (s^{-1}).
c, concentração média temporal pontual, (kgm^{-3}).
c_a, concentração de referência a uma altura a acima do leito, (kgm^{-3}).
C a concentração média na vertical de sedimentos suspensos, (kgm^{-3}).
C_D , coeficiente de arrasto.
CE , condutividade específica, ($\mu S\ cm^{-1}$).
d_{50} , diâmetro de sedimentos da mediana da distribuição granulométrica, (m).
$\bar{d}_f$, diâmetro médio de um grupo de flocos, (m).
d_p , diâmetro da partícula de sedimento, (m).
D , diâmetro da partícula, (m).
D_e , diâmetro de equilíbrio do floco, (m).
D_{xx}, coeficiente de dispersão segundo o eixo x, ($m^2\ s^{-1}$).
D_{yy} , coeficiente de dispersão segundo o eixo y, ($m^2\ s^{-1}$).
e , porosidade dos flocos.
$g = 9.81$, aceleração da gravidade, ($m\ s^{-2}$).
G, parâmetro de dissipação, (s^{-1}).
h, profundidade total do escoamento, (m).
h_f, espessura de sedimentação do leito, (m).
k =0.41, coeficiente de von Karman, adimensional.
k_B =1,38 10^{-23}, constante de Boltzmann, ($N\ m\ K^{-1}$).
k_f , permeabilidade dos flocos, (m^2).
K, parâmetro do modelo potencial de floculação.
K, parâmetro do movimento Browniano, ($m^3\ s^{-1}$).
K_A , K_B , parâmetros empíricos do modelo de Winterwerp.
K_b , coeficiente para o movimento Browniano, ($m^3 s^{-1}$).
K_{sh} , coeficiente para a sedimentação por cisalhamento, (s^{-1}).
K_{ds} , coeficiente para a floculação diferencial, ($s^{-1}m^{-1}$).
K_s, difusividade de turbilhão, ($m^2 s^{-1}$).
l , escala integral dos turbilhões grandes do fluxo, (m).
M , constante empírica da fórmula de erosão, ($kgm^{-2}\ s^{-1}$).
m, parâmetro do modelo potencial de floculação.
m_e , taxa de erosão, ($kgm^{-2}\ s^{-1}$).
m_d , taxa de deposição, ($kgm^{-2} s^{-1}$).
n, coeficiente de rugosidade de Manning, ($s\ m^{-1/3}$).
$n(v)$, concentração em número de partículas no volume v, (m^{-3}).
n_f, dimensão fractal dos flocos.
N, função de distribuição de partículas por volume do fluido e das partículas, (L^{-6}).
P, probabilidade que os flocos alcancem o leito na fórmula de deposição.
Q, vazão líquido, ($m^3 s^{-1}$).
r , distância radial no floculador Couette, (m).

Re , número de Reynolds.
Re_p , número de Reynolds da partícula.
$R_{ij} = r_i + r_j$, soma dos raios das partículas i, j em colisão, (m).
R_e e R_d são funções degrau para a erosão e deposição respectivamente.
R_1 , R_2 , raios interior e exterior do floculador Couette, respectivamente, (m).
*rm*s, erro médio quadrático.
s , termo fonte que representa os processos de erosão e deposição, ($kgm^2 s^{-1}$).
S , salinidade, (unidade prática de salinidade=psu).
S/h , parâmetro de escala no modelo de Farley e Morel, ($m^{-2} s^{-1}$).
S_d , parâmetro da sedimentação diferencial, ($m^{-1} s^{-1}$).
t, coordenada temporal, (s).
t_T, escala de tempo para a velocidade de atrito, (ms^{-1}).
T , temperatura absoluta, (K).
Te , tempo de equilíbrio para a taxa de crescimento dos flocos (s).
u , flutuações de velocidade na direção x, (ms^{-1}).
u_* , velocidade de atrito, (ms^{-1}).
U , velocidade média na vertical, segundo o eixo x, (ms^{-1}).
v , flutuações de velocidade na direção y, (ms^{-1}).
$\bar{v}$, v ,volumes das partículas que colidem, (m^3).
$v_i = 1/6\,\pi d_p^3$, volume i da partícula de sólido, (m^3).
v_t , velocidade tangencial a uma distância r no floculador Couette, ($m\ s^{-1}$).
V , velocidade média na vertical, segundo o eixo y, (ms^{-1}).
w , flutuações de velocidade na direção z, (ms^{-1}).
$w = \log_{10} Re$.
W_s , velocidade média de sedimentação dos flocos na vertical, (ms^{-1}).
$\overline{W_s}$, velocidade de sedimentação média dos flocos Couette e de disco, (ms^{-1}).
x , coordenada espacial horizontal, positiva no sentido da corrente principal, (m).
y , coordenada espacial horizontal, transversal à corrente principal, (m).
z , coordenada espacial vertical, (m).
z , altura da onda de maré sobre nível médio do mar, nmm, (m).

Símbolos gregos

α_{ds} , parâmetros da eficiência de colisão para a sedimentação diferencial, ($m^3 s^{-1}$).
α_{sh} , parâmetros da eficiência de colisão para a ação do cisalhamento, ($m^3 s^{-1}$).
α_b , parâmetros da eficiência de colisão para o movimento Browniano, ($m^3 s^{-1}$).
α_2 , parâmetro da tensão resistente dos flocos.
β, raio adimensional ou normalizado dos flocos.
β_b, função freqüência de colisão para o movimento Browniano, ($m^3 s^{-1}$).
β_{sh}, função freqüência de colisão para as tensões de cisalhamento turbulentas, ($m^3 s^{-1}$).
β_{ds}, função freqüência de colisão para a sedimentação diferencial, ($m^3 s^{-1}$).
β_2 , parâmetro da tensão resistente dos flocos.
$\Delta\rho_f$, massa específica diferencial dos flocos, (kgm^{-3}).
$\Delta\rho_s$, massa específica diferencial dos sedimentos, (kgm^{-3}).
ε , taxa de dissipação de energia cinética da turbulência , ($m^2 s^{-3}$).
ε_r , erro relativo.
η, longitude dos turbilhões menores que dissipam energia da turbulência, (m).
υ, viscosidade cinemática do fluido, ($m^2 s^{-1}$).

μ , viscosidade dinâmica do fluido (Nsm^{-2}).
ρ , massa específica da água, (kgm^{-3}).
$\rho_{D,}$ massa específica seca do depósito, (kgm^{-3}).
ρ_f , massa específica dos flocos, (kgm^{-3}).
$\overline{\rho}_f$, massa específica média de um grupo de flocos, (kgm^{-3}).
ρ_s , massa específica dos sedimentos, (kgm^{-3}).
ρ_w , massa específica da água, (kgm^{-3}).
τ, tensões de cisalhamento para os experimentos de laboratório, (Nm^{-2}).
τ_b , tensão de cisalhamento, (Nm^{-2}).
τ_e , tensão de cisalhamento crítica para erosão, (Nm^{-2}).
τ_d , tensão de cisalhamento crítica para deposição, (Nm^{-2}).
τ_f , tensão resistente dos flocos, (Nm^{-2}).
γ , taxa de cisalhamento, (s^{-1}).
γ_{jk} , probabilidade de que uma partícula de medida k seja formada depois da desagregação de uma partícula de medida j.
ω , velocidade angular, (rad s^{-1}).
ω_1, ω_2, velocidade angular dos cilindros interior e exterior, respectivamente, (rad s^{-1}).
Ω , relação de resistência experimentada por um floco relativa à de uma esfera sólida.

1. Introdução

1.1 Motivação e importância do problema

Diversos problemas ambientais estão relacionados com o transporte de sedimentos finos (menores do que 62 μm), os quais geralmente constituem o conjunto que contém argilas, com propriedades coesivas, cujos diâmetros são menores que 2 a 4 μm. Devido à sua grande área específica, definida como a área da superfície externa das partículas referida à unidade de massa, e a sua alta capacidade de sorção, os sedimentos coesivos são capazes de transportar diversos contaminantes. A floculação e deposição de matéria suspensa têm um efeito importante sobre a qualidade da água pois os sedimentos coesivos são responsáveis pela transparência da água (que incide na penetração de luz, e portanto sobre a biota), pelas correntes de turbidez em estuários, pela demanda bioquímica de oxigênio, pelo transporte de metais pesados, bactérias e vírus (EDSZWALD *et al.*, 1974).

As argilas têm forma achatada e superfícies carregadas com íons, criando forças da mesma ordem ou maiores que a força gravitacional, dando origem a uma interação eletrostática entre as partículas (DYER, 1989). Conseqüentemente, os grãos de sedimentos finos não se apresentam separadamente, como as areias por exemplo, mas como agregados ou aglomerados de partículas, chamados flocos, compostos por uma grande quantidade de partículas sólidas, com formas e massas específicas completamente diferentes das correspondentes a partículas individuais. De fato, nas observações *in situ*, raramente foi encontrado material argiloso não floculado (EISMA *et al*., 1996).

Em rios, em geral a turbulência do escoamento mantém os sedimentos finos permanentemente em suspensão. No entanto, em cenários com menor intensidade de turbulência, como em ambientes marinhos em geral e estuários em particular, os sedimentos encontram condições propícias para a deposição e de tal modo o leito desses ambientes se transformam no último sumidouro dos contaminantes (GIBBS, 1983). Por exemplo, no rio Paraíba do Sul, seriamente afetado pela presença de metais pesados,

CARVALHO *et al.*, (2002) estimam um aporte da ordem de 10^6 toneladas anuais de sedimentos (majoritariamente finos) ao mar.

A mecânica de agregação e desagregação de partículas coesivas ocorre basicamente por: 1) colisões entre partículas e, 2) pela turbulência do escoamento (LICK e LICK, 1988). Enquanto a turbulência atua permanentemente no escoamento turbulento gerando tensões de cisalhamento capazes de desagregar flocos, as colisões atuam em forma descontinua e só podem produzir formação ou ruptura de flocos enquanto sejam eficientes em gerar novos flocos. Neste trabalho, e daqui por diante, serão usados como sinônimos os termos agregação e floculação, tal como é aceito geralmente na literatura (MCANALLY e MEHTA, 2002).

Devido à natureza dos processos de formação de flocos, seu estudo deve ser abordado em conjunto com a dinâmica geral do transporte de sedimentos e a turbulência do escoamento, em um contexto integral. De modo que a importância do problema crie uma forte motivação para o estudo destes processos.

O objetivo geral deste trabalho é melhorar nosso conhecimento sobre a importância dos mecanismos de floculação nas suspensões de sedimentos coesivos em ambientes fluviais e costeiros.

Em particular, os objetivos desta tese são:

- Desenvolver uma ferramenta computacional baseada em modelos de trajetória de partículas, capaz de representar os principais processos envolvidos na floculação de sedimentos coesivos: sedimentação por tensões de cisalhamento da turbulência e sedimentação diferencial, determinando os diâmetros de flocos e velocidade de queda, considerando massa específica variável e tensão resistente de flocos. Esta ferramenta será verificada a partir de experimentos de laboratório.

- Realizar experimentos de laboratório com floculadores Couette e de disco para:
    - calcular a massa específica diferencial dos flocos e sua dimensão fractal,
    - verificar a dependência da concentração com o tamanho e massa específica dos flocos,

- analisar a relação entre a salinidade e os processos de agregação e desagregação,
- quantificar a eficiência de agregação para a sedimentação por cisalhamento.

- Implementar o modelo numérico para um caso real, o estuário do rio Paraíba do Sul, contrastando os resultados obtidos com as medições de concentrações e tamanhos de flocos efetuados, com a finalidade de verificar a aplicabilidade da ferramenta.

1.2 Sumário

No capítulo 2 são expostos os modelos matemáticos de floculação relacionados diretamente com as aplicações que são realizadas mais adiante, são definidos conceitualmente os processos de agregação (por movimento Browniano, tensões de cisalhamento e floculação diferencial) e desagregação pela turbulência do escoamento.

No capítulo 3 são documentadas as atividades levadas a cabo no Laboratório de Dinâmica de Sedimentos Coesivos (LDSC) da COPPE, com os floculadores construídos e utilizados durante o transcurso desta tese, um do tipo Couette e outro de disco. São explicadas as tarefas de identificação gráfica digital dos flocos, quantificação de tamanhos, cálculo da velocidade média de sedimentação e massa específica. Para tal fim foram utilizadas amostras de sedimentos obtidas no estuário do rio Paraíba do Sul e amostras de água do estuário e do mar nos testes com ambos floculadores, com diferentes concentrações e salinidades, a fim de recriar distintas condições ambientais.

No capítulo 4 é explicada a fundamentação do método das partículas, base do esquema numérico utilizado para simular o transporte dos sedimentos coesivos com o modelo numérico Lagrangeano desenvolvido no Laboratório de Hidráulica Computacional (LHC) da COPPE durante o transcurso desta tese. Mostram-se em detalhe as aplicações e verificações para fontes lineares instantâneas e contínuas. São descritas as equações para condições de erosão e deposição dos sedimentos coesivos em corpos de águas fluviais e de estuário, sob a hipótese de mistura completa.

No capítulo 5 efetuou-se a análise da sensibilidade dos parâmetros do modelo Lagrangeano. Foi considerado um domínio simplificado, com uma geometria e hidrodinâmica semelhante ao percurso superior do rio Paraíba do Sul. Foram analisadas a distribuição espacial de diâmetros e velocidades de queda dos flocos em um trecho fluvial e outro de estuário, para diferentes coeficientes de eficiência de colisão, por tensões de cisalhamento e sedimentação diferencial, massa específica dos flocos e concentrações de sedimentos suspensos. Representam-se numericamente a relação conceitual entre o tamanho dos flocos, as tensões de cisalhamento e concentrações propostos por DYER (1989).

No capítulo 6 são mostrados resultados dos trabalhos de campo no rio Paraíba do Sul em janeiro de 2004, e do modelo numérico implementado. Foram calculadas as concentrações médias na vertical, velocidades de queda e diâmetros dos flocos.

No capítulo 7 são apresentadas as conclusões e recomendações desta tese.

Nesta tese foi trocada a vírgula por o ponto decimal na representação da fração decimal dos números.

2. Modelos de floculação

2.1 Floculação

A primeira teoria matemática da cinética de agregação por colisões binárias, ou seja entre 2 partículas, por movimento Browniano e tensões de cisalhamento laminares, foi formulada por Smoluchowski em 1917 (citado por FRIEDLANDER, 2000). Foi empregada não só para a cinética de colóides, como também para a análise da formação de polímeros e aerossóis (ADACHI, 1995). Para a caracterização da floculação, foi tomada como referência a definição adotada por MEHTA *et al*. (1989), descrita a seguir.

Floculação e um processo dinâmico que depende das taxas de agregação e desagregação dos sedimentos, variável no tempo. As colisões entre as partículas, provocando floculação, são resultado do movimento Browniano, das tensões de cisalhamento da corrente, e da sedimentação diferencial das partículas (DYER, 1989; BURBAN *et al*., 1990). Na desagregação, são fundamentais as tensões de cisalhamento da corrente, que ainda sem colisões podem provocar a ruptura dos flocos. A agregação de partículas por colisões produz uma redução em seu número e um incremento do diâmetro médio dos agregados.

O movimento Browniano, de natureza aleatória, depende da energia térmica do fluido. Para partículas maiores do que 1 μm a floculação devida ao movimento Browniano é menos relevante e as colisões entre partículas são induzidas pelo seu movimento relativo, originadas pela hidrodinâmica de micro e macro escala. A floculação por colisões induzidas por agitação térmica (movimento Browniano) para partículas menores que um micrômetro, chama-se floculação pericinética. Quando as partículas são maiores do que 1 μm a floculação pericinética perde relevância pois a agregação por colisões depende da hidrodinâmica do escoamento, e então o processo é chamado floculação ortocinética (IVES e BOHLE, 1973). Na sedimentação diferencial as colisões entre partículas são ocasionadas pelas diferentes velocidades de sedimentação, as maiores e mais velozes capturam as menores e mais lentas. Em lugares

de baixos gradientes de velocidades e turbulência, como em lagos ou no período na estofa de maré nos estuários, este tipo de mecanismo é predominante (TSAI *et al.*, 1987). Em ambientes fluviais, sob ação de ondas, na região da termoclina ou haloclina, e na região costeira com altas tensões cisalhantes, o efeito predominante será o induzido pela turbulência.

O conhecimento ainda incompleto da mecânica de agregação e desagregação promoveu uma grande quantidade de trabalhos de laboratório, destacando-se as pesquisas pioneiras em canais (KRONE, 1962; PARTHENIADES, 1965; MEHTA e PARTHENIADES 1975), assim como em diferentes floculadores de laboratório para analisar a sedimentação por tensões de cisalhamento (VAN DUUREN, 1968; IVES e BOHLE, 1973, 1977; GIBBS, 1983, 1985; BURBAN *et al.*, 1989), e sedimentação diferencial (LICK *et al.*, 1993) entre outros.

O efeito da concentração sobre a máxima medida dos flocos é objeto de controvérsias. Ainda que a teoria da agregação preveja que para a maior concentração de partículas, produzem-se maiores agregados, TSAI *et al.* (1987) mostraram experimentalmente com sedimentos coesivos do lago Erie que os diâmetros de flocos em equilíbrio, produzidos em um floculador Couette sempre em regime laminar, decresceram com o incremento da concentração de sedimentos de 50 a 800 mg/l. As partículas individuais, com tamanhos entre 3.1 e 23.7 μm, foram floculadas com tensões de cisalhamento de 1, 2 e 4 dinas cm^{-2}, correspondentes a parâmetros de dissipação G de 100, 200 e 400 s^{-1} respectivamente. LICK e LICK (1988) sugeriram que esses resultados podiam ser explicados pelo incremento de colisões entre três partículas, em lugar de colisões binarias. SERRA e CASAMITJANA (1998), mediante experimentos com partículas de látex em um floculador Couette, concluíram que o tamanho dos agregados aumentava para concentrações crescentes em regime laminar e diminuíam em regime turbulento. MANNING e DYER (1999) demonstraram em um canal anular que para baixas tensões o aumento de concentrações produz aumento do diâmetro dos flocos, enquanto que para tensões maiores do que um certo valor, 0.35 Nm^{-2} aproximadamente, o aumento de concentrações provoca uma diminuição do tamanho dos flocos.

Assim como as tensões do escoamento favorecem a formação de flocos, quando essas tensões superam determinado valor, chamado tensão resistente do floco τ_f, produz-se a desagregação em flocos menores. LICK e LICK (1988), BURBAN *et al.*, (1989) formularam as equações que descrevem o fenômeno de ruptura de flocos, mais não foram resolvidas. A primeira determinação de τ_f foi obtida por KRONE em 1963 mediante experimentos de laboratório com um viscosímetro, τ_f foi expressa em função da massa específica dos flocos. Mediante uma análise das propriedades fractais dos processos de agregação, KRANENBURG (1994), analisou a informação obtida por KRONE e propôs uma relação para τ_f em função da massa específica diferencial dos flocos e sua dimensão fractal. O modelo fractal para τ_f é muito utilizado atualmente (WINTERWERP, 2000) e será descrito no item 3.8.

O efeito da salinidade sobre o tamanho dos agregados é outra questão que merece ser analisada. Até poucos anos atrás existia na comunidade científica um consenso bastante generalizado de que os sedimentos coesivos transportados pela água doce dos rios tendiam a flocular pela salinidade e se depositar à medida que penetravam nas águas dos estuários (EDZWALD *et al*., 1974; MEHTA e PARTENIADES, 1975; VAN RIJN, 1993). No entanto, diferentes autores demonstraram que a máxima turbidez depende, fundamentalmente, de condições hidrodinâmicas POSTMA (1967). Na Figura 2.1 são apresentados resultados obtidos por diferentes autores quanto à relação entre a salinidade e a velocidade de sedimentação. Apesar das numerosas evidências em relação ao aumento da floculação com a salinidade, alguns pesquisadores tem posto em dúvida seu papel como principal agente capaz de acelerar os processos de floculação (VAN LEUSSEN, 1999; THILL *et al*., 2001; FOX *et al.*, 2004). GIBBS (1983) analisou o efeito da salinidade sobre os processos de agregação quando substâncias orgânicas naturais recobriram os sedimentos argilosos em amostras dos rios Amazonas (2 ‰ de salinidade) e Yukón (0.6 ‰ de salinidade), em um floculador tipo Couette. Concluiu que o recobrimento diminui a taxa de agregação e que o efeito da salinidade é maior a baixas salinidades e decresce à medida que a salinidade aumenta, existindo uma "salinidade crítica de coagulação". MIKES *et al*. (2004) demonstraram em experimentos com sedimentos do rio Sena que a salinidade atuava sobre a floculação a partir de um valor limiar e que logo a floculação era controlada por outros fatores. BURBAN *et al.* (1989; 1990), mostraram a pouca diferença de velocidades de

sedimentação entre flocos gerados em água doce e salgada em experimentos de laboratório.

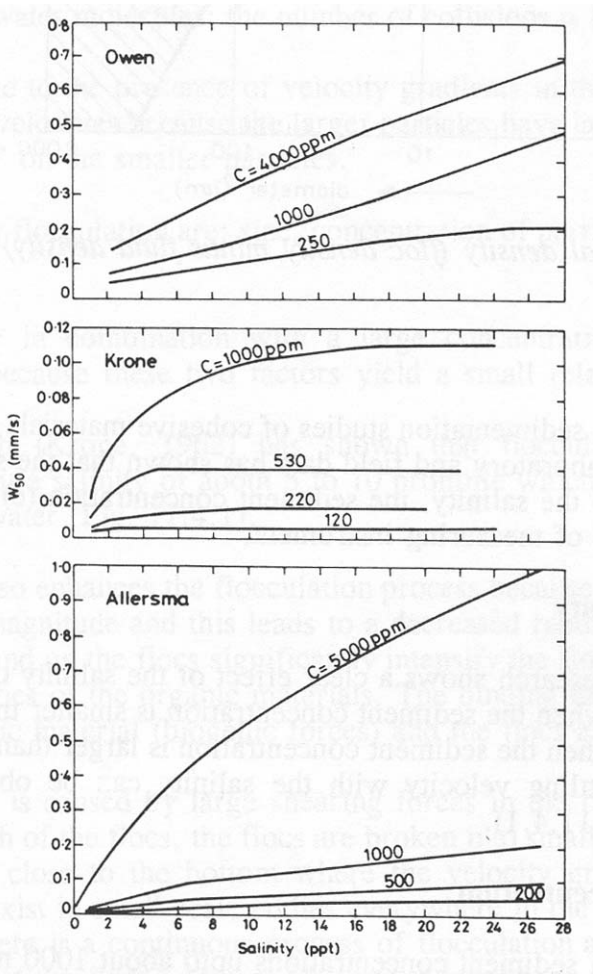


Figura 2.1: Relação da salinidade com a velocidade de sedimentação (VAN RIJN, 1993).

O transporte de sedimentos coesivos em rios e estuários é um fenômeno cujas escalas espaciais envolvem áreas extensas, e escalas temporais próprias de problemas de deposição dos sedimentos sobre vias navegáveis ou erosão do leito. Nesses casos a aplicação de modelos numéricos tridimensionais pode tornar-se cara e pouco prática. Como uma primeira aproximação ao problema de transporte de coesivos no estuário do rio Paraíba do Sul, e tendo em conta a escassa informação disponível se utilizarão equações bidimensionais integradas na vertical. Para o caso da simulação de sedimentos finos e outros constituintes, esta aproximação pode proporcionar resultados adequados, havendo numerosos exemplos na literatura (ARIATHURAI, 1974; TEISSON e

LATTEUX, 1986; JIANG e MEHTA, 2001), documentados mais amplamente no capítulo 4.

A equação básica de advecção-dispersão nas dimensões horizontais *x,y* é (ARIATHURAI e KRONE, 1976):

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\partial UC}{\partial x}+\frac{\partial VC}{\partial y}=\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial x}\left(hD_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial y}\left(hD_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right)+\frac{1}{h}\left(m_e-m_d\right) \tag{2.1}$$

onde C é a concentração média na vertical de sedimentos suspensos, h é a profundidade total do escoamento, D_{xx} e D_{yy} são os coeficientes de dispersão segundo os eixos x e y respectivamente, em direções ortogonais horizontais, U e V são as velocidades médias na vertical, segundo os eixos de referência x e y respectivamente, t é o tempo, m_e é a taxa de erosão, ou seja, a incorporação do material do leito na suspensão, m_d é a taxa de deposição. Este último termo é função de W_s, a velocidade média de sedimentação dos flocos (na direção vertical), objeto deste capítulo.

2.2 Funções de freqüência de colisão

A teoria básica para o espectro de partículas que colidem e floculam, devido ao movimento Browniano e tensões de cisalhamento laminares, foi primeiramente formulada por Smoluchowski em 1917. Na teoria são adotadas as seguintes hipóteses:

- todas as partículas são esféricas, portanto a medida representativa dos seus volumes v e $\bar{v}$ são seus diâmetros.
- todas as colisões são binárias.
- Quando duas partículas colidem, formam por agregação instantaneamente uma terceira, onde o volume resultante é a soma dos volumes das duas partículas originais.
- $\beta(v, \bar{v})$ é uma função de freqüência de colisão que depende das propriedades das partículas, do fluido e do escoamento. A relação funcional dessas variáveis fica determinada pelo mecanismo dominante pelo qual entram em contato.

Para a função de distribuição contínua das medidas das partículas, a taxa de colisão entre partículas de volumes *v* e $\bar{v}$, nos intervalos v a $v+dv$ e $\bar{v}$ a $\bar{v}+d\bar{v}$ é

$$\text{Taxa de colisão} = \beta(v,\bar{v})n(v)\,n(\bar{v})\,dv\,d\bar{v} \tag{2.2}$$

Com *n(v)* a concentração em número de partículas do volume *v.* A taxa de formação de partículas de medida *v* por colisões com partículas menores de medidas *v*-$\bar{v}$ e $\bar{v}$, é dada por

$$\text{Formação no intervalo } dv = \frac{1}{2}\left[\int_0^v \beta(\bar{v},v-\bar{v})n(\bar{v})\;n(v-\bar{v})\,d\bar{v}\;\right]dv \tag{2.3}$$

A taxa de perda de partículas de medida *v* por colisões com outras partículas é

$$\text{Perda no intervalo } dv = \left[\int_0^\infty \beta(v,\bar{v})n(v)\;n(\bar{v})\,d\bar{v}\;\right]dv \tag{2.4}$$

A equação de balanço para o espectro contínuo, que integra todos os processos de agregações por colisões binárias, movimento Browniano, tensões de cisalhamento da corrente e sedimentação diferencial, está dada em termos do número de partículas *n(v)*, no volume *v,* FRIEDLANDER (2000):

$$\frac{\partial n(v)}{\partial t} = \frac{1}{2}\int_0^v \beta(\bar{v},v-\bar{v})n(\bar{v})\,n(v-\bar{v})\,d\bar{v} - \int_0^\infty \beta(v,\bar{v})n(v)\,n(\bar{v})\,d\bar{v} - \tag{2.5}$$

$$-\frac{g(\rho_s-\rho_w)}{18\mu}\left(\frac{6}{\pi}\right)^{2/3} v^{2/3}\,\frac{\partial n(v)}{\partial z}$$

o primeiro termo da direita representa a colisão de partículas que produzem um agregado de volume *v*, onde $\beta(\bar{v},v-\bar{v})$ é uma função de freqüência de colisão para partículas de volume $\bar{v}$, que colidem com partículas de volume $(v-\bar{v})$ para todos os mecanismos de agregação. O segundo termo é a remoção de partículas de volume *v* por coagulação com todas as partículas. O último termo é a remoção das partículas por sedimentação de acordo com a lei de Stokes, com *g* a aceleração da gravidade, ρ_s a

massa específica dos sólidos, ρ_f a dos flocos, ρ_w a da água, μ a viscosidade dinâmica, z a coordenada espacial vertical. A equação (2.5) não foi resolvida analiticamente para casos de interesse prático (FRIEDLANDER, 2000).

De acordo com HUNT (1982), cada mecanismo de floculação pode ser caracterizado por somente um parâmetro, definidos na Tabela 2.1, com L e t, unidades espacial e temporal respectivamente, k_B a constante de Boltzmann (1.38 10^{-23} Nm K^{-1}) e T a temperatura absoluta (K),

Tabela 2.1: Mecanismos de floculação, parâmetros e dimensões.

Mecanismo	Parâmetro	Dimensões	
Movimento Browniano	$K_b=k_B T/\mu$	$[L^3 t^{-1}]$	(2.6)
Tensões de Cisalhamento	$K_{sh}=G$	$[t^{-1}]$	(2.7)
Sedimentação Diferencial	$K_{ds}=g(\rho_s - \rho_w)/\mu$	$[L^{-1} t^{-1}]$	(2.8)

Cada mecanismo de floculação tem uma expressão para a função β. As funções de freqüência de colisão para o movimento Browniano, as tensões de cisalhamento turbulentas e a sedimentação diferencial, β_b, β_{sh} e β_{ds} respectivamente, serão discutidas em 2.3.1, 2.2.2 e 2.2.3 respectivamente.

2.2.1 Floculação por Movimento Browniano

De acordo com a teoria de Smoluchowski, a freqüência de colisão devido ao movimento Browniano, β_b (m^3s^{-1}), é dada por:

De acordo com a teoria de Smoluchowski, a freqüência de colisão devido ao movimento Browniano, β_b (m^3s^{-1}), é dada por:

$$\beta_b\left(v_i, v_j\right) = K_b \frac{\left(v_i^{1/3} + v_j^{1/3}\right)^2}{v_i^{1/3} v_j^{1/3}} \tag{2.9}$$

onde o volume que contém as partículas da classe *i* é $v_i = 1/6\,\pi\, d_p^3$, com d_p o diâmetro da partícula da classe *i* (e em forma análoga com as partículas da classe *j*).

2.2.2 Floculação por tensões de cisalhamento em escoamento turbulento

A freqüência de colisão devido a tensões de cisalhamento de um escoamento laminar, β_{sh} (m^3s^{-1}), está dada pela expressão de Smoluchowski:

$$\beta_{sh}\left(v_i, v_j\right) = \frac{4}{3}\gamma\, R_{ij}^3 \tag{2.10}$$

onde γ é a taxa de tensões de cisalhamento laminar e $R_{ij} = r_i + r_j$ é a soma dos raios das partículas i, j que colidem.

Para escoamento turbulento CAMP e STEIN (BURBAN *et al*., 1990) propuseram que o mecanismo de colisão podia ser tratado de forma análoga ao escoamento laminar, sendo a freqüência de colisão uma função do gradiente efetivo de velocidade ou mais propriamente de um parâmetro de dissipação *G* (s^{-1}). A expressão desse parâmetro de dissipação foi deduzida por SAFFMAN e TURNER (1956), que estudaram os processos turbulentos de formação de gotas de água em nuvens. Na turbulência, a microescala de Kolmogorov (TENNEKES E LUMLEY, 1972), é uma escala de comprimento η, que caracteriza a medida dos vórtices menores que dissipam energia da turbulência, define-se $\eta = \upsilon^{3/4}\varepsilon^{-1/4}$, onde ε (m^2s^{-3}) é a taxa de dissipação de energia cinética da turbulência e υ a viscosidade cinemática do fluido (m^2s^{-1}). Se a escala espacial do fenômeno estudado for menor do que η, então a turbulência pode ser definida como isotrópica. De acordo a DYER (1989), a escala espacial dos microflocos é de aproximadamente 150 μm. Então a hipótese de turbulência isotrópica é aplicável para calcular a taxa de cisalhamento; assim, de acordo com a análise estatística de TAYLOR (1935), ε expressa-se como:

$$\varepsilon = 15\upsilon \overline{\left(\partial u_i / \partial x_i\right)^2} \tag{2.11}$$

com u_i a flutuação de velocidade na direção i. A escala da taxa de dissipação da energia cinética da turbulência, é u^3/l, com u a flutuação de velocidade característica e l a escala integral que pode corresponder-se com a medida dos vórtices grandes do escoamento que dissipam energia.

$$G = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\upsilon}} \tag{2.12}$$

$$\beta_{sh}\left(v_i, v_j\right) = \sqrt{\frac{8\pi}{15}}\, G\, R_{ij}^3 = 1.30\, G\, R_{ij}^3 \tag{2.13}$$

o parâmetro G, é também chamado gradiente de velocidade médio do escoamento nos experimentos de laboratório com floculadores Couette (TSAI *e tal.*, 1987). Observa-se a similitude entre as equações (2.10) e (2.13), para β_{sh} em regime laminar e turbulento respectivamente.

2.2.2.1 Cálculo de *G*

A dissipação da energia cinética da turbulência pode ser aproximada de acordo com NEZU e NAKAGAWA (1993):

$$\varepsilon \approx \frac{u_*^3}{kh}\frac{\left(1 - z/h\right)}{z/h} \tag{2.14}$$

com z a altura desde o leito, k=0.41 o coeficiente de von Karman, considerado constante tanto para o transporte de sedimentos finos quanto para grossos. A velocidade de atrito u_* expressa-se em função do coeficiente de rugosidade n de Manning (NEZU e RODI, 1986):

$$u_* = U\frac{ng^{1/2}}{h^{1/6}} \tag{2.15}$$

com U a velocidade média na vertical para um escoamento uniforme. Substituindo na equação (2.12), depois de aproximar se obtém:

$$G = \sqrt{\frac{\tau_b u_*}{\mu h k} \frac{1-\varsigma}{\varsigma}} \approx \sqrt{\frac{\tau_b u_*}{\mu z k}} \tag{2.16}$$

com $\varsigma = z/h$. A tensão de cisalhamento total pode ser expressa segundo a clássica distribuição na vertical:

$$\tau_b = \rho_w u_*^2 \left(1 - \frac{z}{h}\right) \tag{2.17}$$

a variação de G na vertical, para valores típicos de U, n e h, representada na Figura 2.2, permite observar que só se supera o valor de 100 s^{-1} em uma região muito próxima ao leito, enquanto que no resto da vertical, G está por baixo de 10 s^{-1}. Sua média na vertical, $\overline{G}$, é:

$$\overline{G} = \sqrt{\frac{2 u_*^3}{h \upsilon k}} \tag{2.18}$$

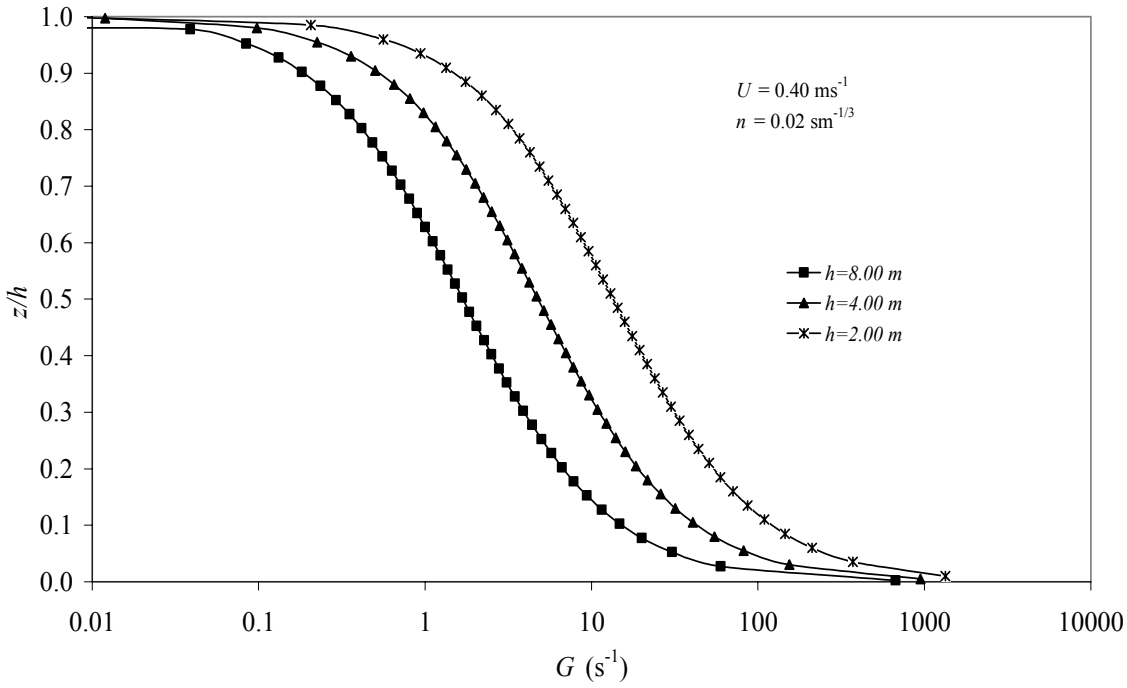


Figura 2.2: Variação de G na vertical segundo diferentes profundidades (para υ=10^{-6} m^2s^{-1}).

A escala espacial dos macroflocos, igual à de Kolmogorov, é estimada na Figura 2.3, a partir da relação

$$\eta = \sqrt{\frac{\upsilon}{G}} \tag{2.19}$$

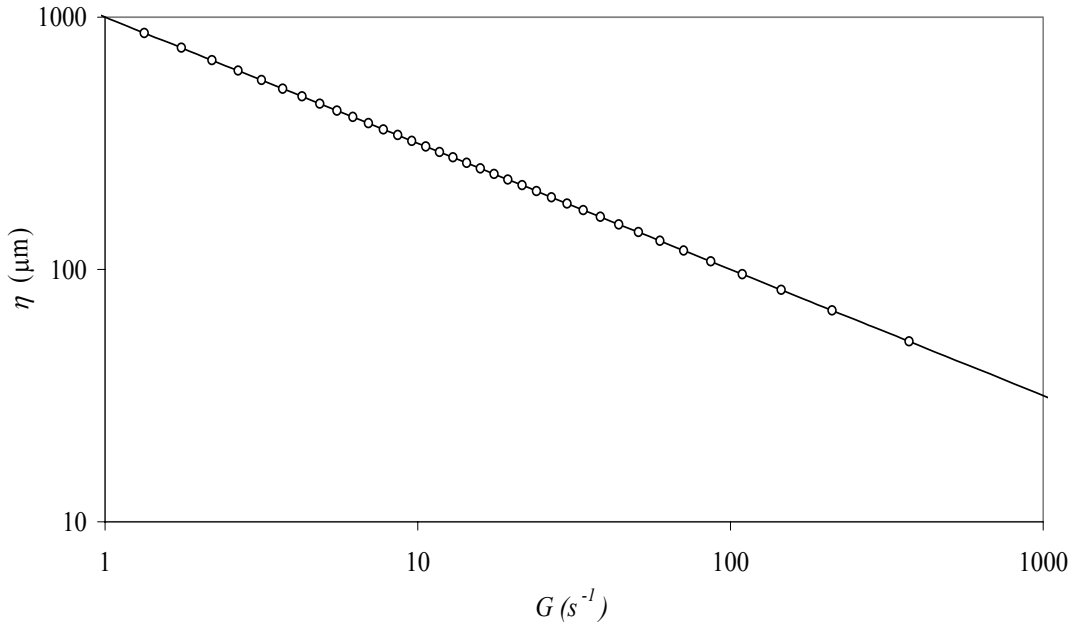


Figura 2.3: variação da escala espacial de Kolmogorov, η, segundo a taxa de dissipação G.

2.2.3 Floculação por Sedimentação Diferencial

O terceiro mecanismo de floculação, a sedimentação diferencial, representa a agregação produzida quando as partículas maiores, e portanto geralmente mais rápidas, capturam as menores, e mais lentas. A função freqüência de colisão para massa específica constante dos sólidos é, β_{ds} (m^3s^{-1}), e é dada pela expressão (HUNT, 1982):

$$\beta_{ds}\left(v_i, v_j\right) = \left(\frac{6}{\pi}\right)^{4/3} \frac{\pi g\left(\rho_s - \rho_w\right)}{72\mu}\left(v_i^{1/3} + v_j^{1/3}\right)^2 \left|v_i^{2/3} - v_j^{2/3}\right| \tag{2.20}$$

onde ρ_s é a massa específica dos sedimentos.

Na Figura 2.4 mostra-se a magnitude relativa dos coeficientes de freqüência de colisão, β_b, β_{sh} e β_{ds} , calculados com as equações (2.9), (2.13) e (2.20) segundo o

tamanho das partículas que colidem (TSAI *et al*., 1987). Observa-se que o movimento Browniano só é relevante para partículas menores a 1 μm.

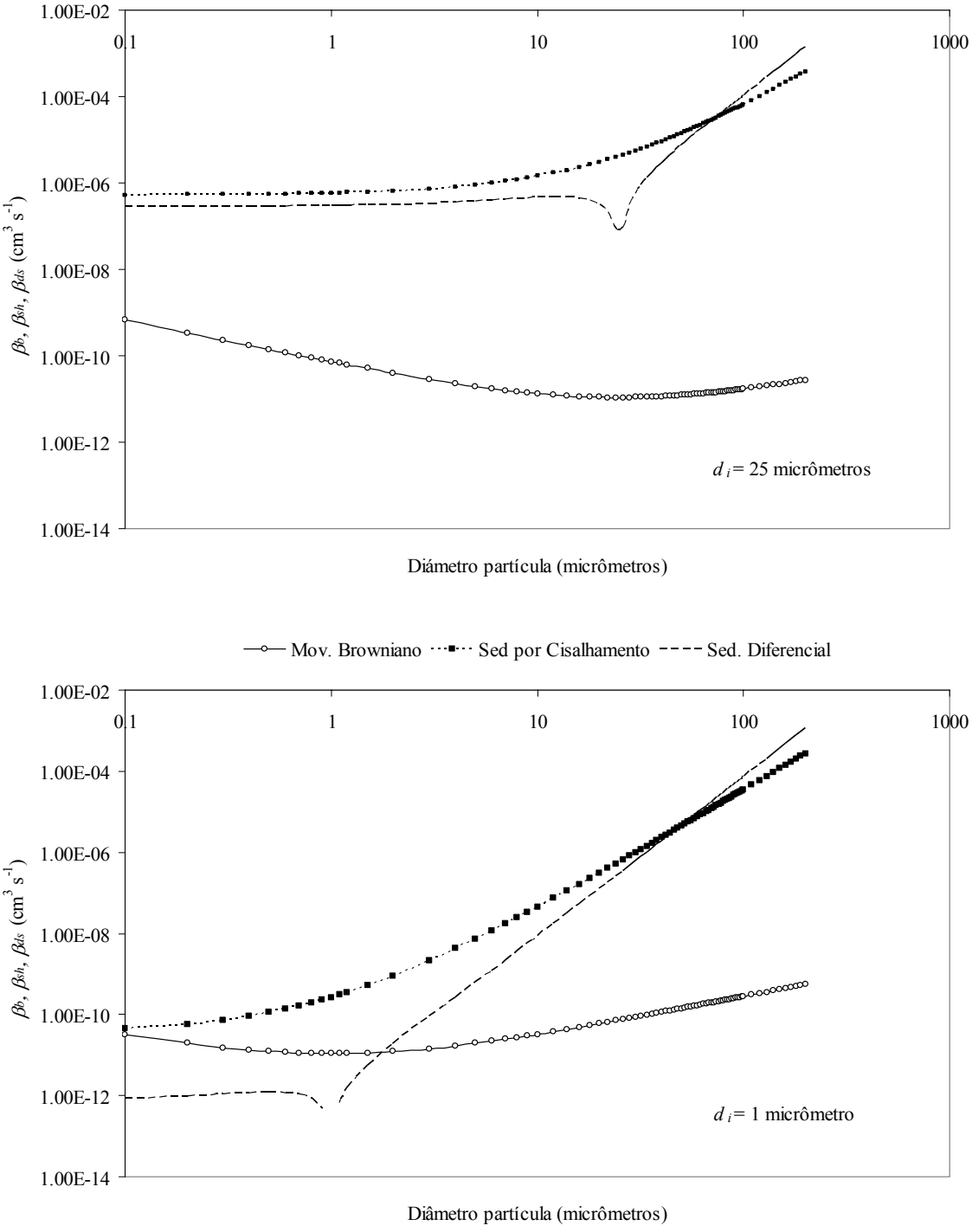


Figura 2.4: Funções de freqüência de colisão, β_b , β_{sh} e β_{ds} . Acima, por colisões com uma partícula de 25 μm de diâmetro, abaixo, com uma partícula de 1 μm de diâmetro. Calculado com T=293 K, e G=200 s^{-1}.

No gráfico inferior se traçaram as curvas para colisões entre partículas de 1 μm de diâmetro com partículas de tamanhos no intervalo de 0.1 até 200 μm. Os três coeficientes de freqüência de colisão diferem só em duas ordens até aproximadamente o diâmetro de 5 μm. No gráfico superior as curvas mostram que quando uma partícula de 25 μm colide com todas as outras do mesmo intervalo de tamanhos anterior, o coeficiente β_b não tem praticamente relevância.

O cálculo dos coeficientes põe de manifesto que também são importantes β_{sh} e β_{ds} para tamanhos pequenos, particularmente β_{sh}, ainda no intervalo das argilas muito finas. Em quanto a HUNT (1982), postula que: em quanto a que cada mecanismo era importante para somente uma franja de tamanhos, observa-se que mais de um mecanismo pode estar ativo numa franja de tamanhos.

2.3 Modelos matemáticos de floculação

A continuação, descrevem-se brevemente modelos matemáticos para calcular a velocidade de sedimentação dos flocos, desde os mais simples que seguem uma lei potencial, até os que são o resultado de uma maior fundamentação teórica. O objetivo é analisar a dependência funcional de W_s em relação a C, G e outras variáveis.

2.3.1 Modelo potencial

É muito comum encontrar na literatura especializada modelos empíricos, obtidos a partir de um ajuste de dados medidos em laboratório ou campo, como por exemplo os que se regem por uma lei potencial onde a concentração C (em mgl^{-1}) e a velocidade de sedimentação W_s, (em mms^{-1}) se relacionam do seguinte modo:

$$W_s = K\, C^m \tag{2.21}$$

Tanto K como m são parâmetros empíricos. Esta classe de modelos simples é utilizada freqüentemente para calcular W_s em modelos numéricos quando $0.1<C<10$ gl^{-1} (WU e FALCONER, 2000; WU *et al*., 1998). VAN DER HAM e WINTERWERP (2001) usaram um critério similar para aplicar um modelo de transporte de sedimentos

no estuário de Ems/Dollard. Os parâmetros variam consideravelmente de um estuário a outro, m varia no intervalo 0.5 a 3.5 (VAN LEUSSEN, 1999), para outros autores m varia entre 1 e 2 (VAN RIJN, 1993). Resultados de medições com tubos de sedimentação em diferentes estuários são mostrados na Figura 2.4. Este modelo pressupõe que W_s cresce indefinidamente com C, e portanto não contempla nenhuma limitação da velocidade de queda por ruptura de flocos.

De acordo a MEHTA (1989) quando C excede o intervalo de 100 a 300 mgl^{-1} a sedimentação deixa de ser livre e passa a ser floculada. Quando não existe floculação ou é muito débil, então pode-se adotar m=0. Portanto, W_s=K=constante o qual constitui um caso particular de aplicação do modelo potencial (JIANG e MEHTA, 2001).

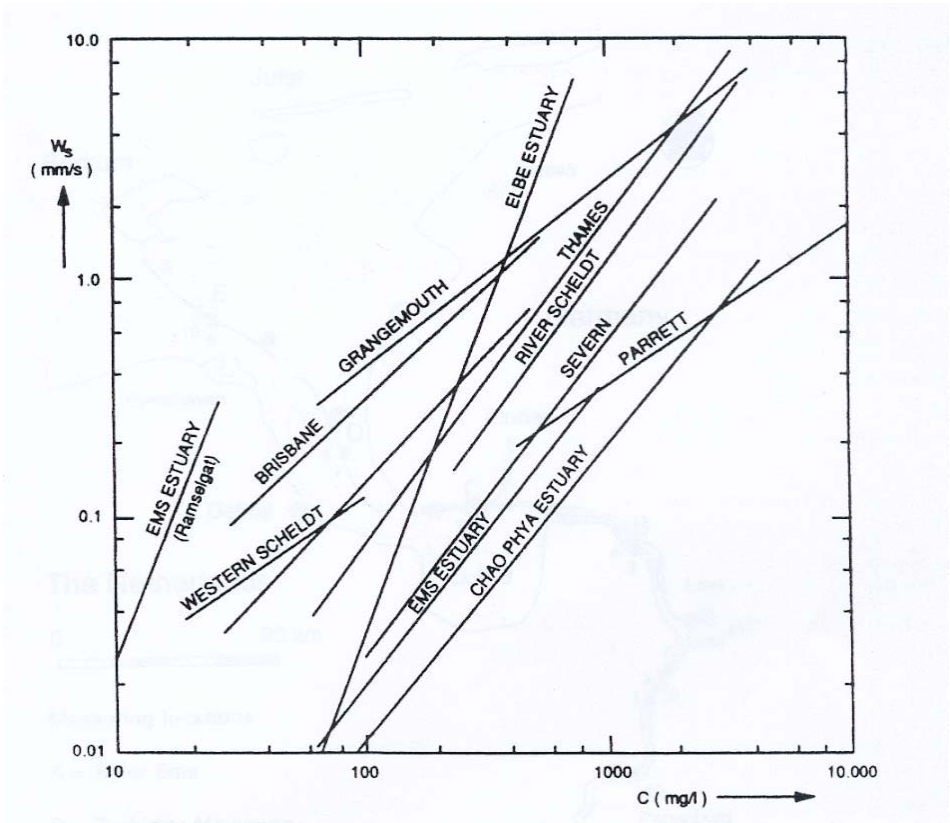


Figura 2.5: Velocidade média de sedimentação de flocos em função da concentração de sedimentos suspensos, medidos *in situ*, em água salina. (VAN LEUSSEN, 1999).

Em caso de sedimentação obstruída, quando por exemplo C>10 gl^{-1}, costuma-se utilizar uma equação similar à de Richardson-Zaki:

$$W_{s,m} = W_{si}\left(1-\phi\right)^{\beta} \qquad (2.22)$$

onde $W_{s,m}$ é a velocidade de sedimentação dos flocos na suspensão, W_{si} é a velocidade de sedimentação dos flocos em água em repouso, β um coeficiente com valor entre 3 e 5, ϕ é a concentração em volume.

2.3.2 Modelo potencial com parâmetro de dissipação

Um modelo potencial que inclui o parâmetro de dissipação foi sugerido por VAN LEUSSEN em 1994 (SPEARMAN e ROBERTS, 2002). O modelo considera o efeito do incremento da turbulência sobre a agregação e desagregação.

$$W_s = K\,C^m \frac{1+aG}{1+bG^2} \qquad (2.23)$$

onde *K, m, a* e *b* são parâmetros a ser determinados em forma experimental ou numérica. Foi utilizado para simular a sedimentação em estuário do rio Tamar em Inglaterra por SPEARMAN e ROBERTS (2002), obtendo por tentativa e erro a=0.12 e b=0.02, com os quais para os K e m ajustados (0.715 e 0.202 respectivamente), o modelo prevê crescimento de W_s até G=2.55 e após este valor diminui a velocidade de queda. Deste modo, tem-se em conta o efeito da desagregação dos flocos por um incremento da turbulência.

2.3.3 Modelo de WINTERWERP

WINTERWERP (2000) desenvolveu um modelo 1DV para determinar a evolução temporal dos flocos na coluna de água, que empregou no seu modelo unidimensional. A equação de evolução do tamanho de flocos proposta é:

$$\frac{\partial d_f}{\partial t} = K_A C G d_f^{4-nf} - K_B G^{q+1} d_f^{2q+1}\left(d_f - d_p\right)^p \qquad (2.24)$$

onde d_p e d_f são as medidas das partículas e flocos respectivamente. K_A é um parâmetro de agregação e K_B parametriza a quebra dos flocos, função da dimensão fractal dos agregados (e sua força resistente às tensões turbulentas definida na equação (2.48)), *p, q*

e são parâmetros empíricos a determinar em laboratório. Na condição de equilíbrio, ou seja $\partial d_f/\partial t$=0, se obtém um floco de medida d_e

$$d_e = d_p + \frac{K_A C}{K_B \sqrt{G}} \tag{2.25}$$

e uma velocidade de sedimentação W_s:

$$W_{s,e} = W_{s,p} + \alpha' \frac{K_A}{K_B} d_p \frac{\Delta g}{\upsilon} \frac{C}{\sqrt{G}} \tag{2.26}$$

onde $W_{s,e}$ é a velocidade de queda em equilíbrio, $W_{s,p}$ é a velocidade de queda da partícula primária, $\alpha' = \alpha/18\beta$ e um fator da forma do sedimento, α e β dependem da esfericidade das partículas, $\Delta=(\rho_s-\rho_w)/\rho_w$, n_f é a dimensão fractal dos agregados. Para Re_p <1, partículas esféricas (α =β=1), e n_f =3, e outras substituições, WINTERWERP demonstra que a equação (2.26) recai na fórmula de Stokes. Pode-se observar que $W_{s,e}$ é proporcional a C/$\sqrt{G}$, e portanto o modelo prediz uma diminuição da velocidade de queda com um aumento de G.

Os valores empregados por SPEARMAN e ROBERTS foram K_A=*16.0* m^2kg^{-1} e K_B=14000 $s^{1/2}m^{-2}$. Estes autores destacam que o modelo representa razoavelmente as medições, no entanto foram melhores os resultados obtidos com o modelo potencial. As diferenças foram relacionadas à incerteza dos efeitos advectivos no modelo 1DV mais do que ao modelo em si mesmo.

A agregação por sedimentação diferencial não é considerada neste modelo matemático, da mesma forma que o modelo comentado no parágrafo anterior.

2.3.4 Modelo de FARLEY e MOREL

FARLEY e MOREL (1986) consideraram a cinética de sedimentação a partir da teoria de Smoluchowski, os trabalhos de HUNT (1982) e outros pesquisadores. Efetuaram medições de concentrações de flocos formados por goetita e esferas de cobre em um tubo de sedimentação e cálculos numéricos. Desenvolveram as seguintes hipóteses necessárias para analisar a distribuição dos agregados:

1. Supõe-se a esfericidade das partículas antes e depois de cada agregação.
2. As funções de colisão (para o movimento Browniano, as tensões de cisalhamento e a sedimentação diferencial) são aditivas.
3. A eficiência dos mecanismos de agregação é independente dos tamanhos das partículas.
4. A massa específica dos flocos se mantém constante.
5. A coluna de água é verticalmente homogênea com respeito à concentração.

Então expressaram a taxa de remoção de sólidos como a soma de três expressões de potências, propondo a seguinte expressão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -B_{ds} C^{2.3} - B_{sh} C^{1.9} - B_b C^{1.3} \tag{2.27}$$

onde os diferentes mecanismos da floculação estão contemplados nos coeficientes: B_{ds} para a sedimentação diferencial, B_{sh} para a ação das tensões de cisalhamento e B_b para o movimento Browniano.

Para uma suspensão em um meio em repouso, sem difusão molecular, a equação de conservação de massa se reduz a:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial (W_s C)}{\partial z} = 0 \tag{2.28}$$

considerando-se que a velocidade de sedimentação W_s não é uma função de z, pode-se escrever:

$$W_s = -\frac{\partial C}{\partial t} / \frac{\partial C}{\partial z} \tag{2.29}$$

então, a velocidade de sedimentação pode ser determinada considerando os experimentos de sedimentação e valores típicos dos coeficientes de acordo com a expressão de FARLEY e MOREL:

$$W_s = \left(- B_{ds} C^{2.3} - B_{sh} C^{1.9} - B_b C^{1.3} \right) / \frac{\partial C}{\partial z} \tag{2.30}$$

Na implementação da equação (2.30) no contexto de um modelo numérico 2D integrado na vertical requer relaxar a condição $\partial C/\partial z=0$ na equação (2.29), o que é consistente para baixas concentrações médias na vertical.

Os coeficientes B_b, B_{sh} e B_{ds} estão relacionados com as funções de freqüência de colisão, β_b, β_{sh} e β_{ds}, respectivas de cada mecanismo, através dos parâmetros K_b, K_{sh} e K_{ds} definidos antes por Smoluchowski e HUNT (ver Tabela 2.1). As expressões propostas para os coeficientes são as seguintes:

$$B_b = 1.33 \left(\frac{S}{h} \right)^{0.60} \rho_f^{-0.30} \left(\alpha_b K_b \right)^{0.40} \tag{2.31}$$

$$B_{sh} = 10 \left(\frac{S}{h} \right)^{0.15} \rho_f^{-0.90} \left(\alpha_b K_b \right)^{0.10} \left(\alpha_{sh} K_{sh} \right)^{0.75} \tag{2.32}$$

$$B_{ds} = 3.12 \left(\frac{S}{h} \right)^{-0.32} \rho_f^{-1.30} \left(\alpha_b K_b \right)^{0.17} \left(\alpha_{ds} K_{ds} \right)^{1.15} \tag{2.33}$$

Sendo $\frac{S}{h}=\left(\frac{1}{6\pi^2}\right)^{1/3}\left(\frac{g}{3\upsilon h}\right)\left(\frac{\rho_f-\rho_w}{\rho_w}\right)$ um fator de escala da sedimentação das partículas, h neste caso é a altura da coluna de sedimentação, ρ_f a massa específica dos flocos, α_b, α_{sh} e α_{ds} são parâmetros de eficiência de colisão de cada mecanismo. Os coeficientes K_b, K_{sh} e K_{ds} são obtidos da freqüência de colisão para cada mecanismo, ver expressões (2.9), (2.13) e (2.20), de acordo mostrado na Tabela 2.2. Observe-se que K_b, K_{sh} e K_{ds} diferem só em uma constante dos parâmetros definidos por HUNT, na Tabela 2.1.

O modelo de FARLEY e MOREL foi utilizado por HAYTER e PAKALA (1989) para um modelo tridimensional Euleriano de transporte de contaminantes e sedimentos, que foi implementado para o rio Sampi (Carolina do Sul, USA). Foi empregado por HONEYMAN e SANTSCHI (1989) para descrever a agregação de partículas coloidais no mar, da mesma forma que BURD e JACKSON (1997) para calcular a taxa de remoção de thorio por adsorção sobre partículas coloidais que se agregam e sedimentam no oceano. O modelo também foi usado com modificações por BURD *et al.* (2000) para calcular carbono orgânico particulado no mar.

Tabela 2.2: Definição dos coeficientes K_b, K_{sh}, K_{ds} e S/h, a partir das freqüências de colisão (FARLEY e MOREL, 1986)

Funções de freqüência de colisão do modelo de Smoluchowski/HUNT	Coeficientes utilizados no modelo de FARLEY e HUNT
$\beta_b\left(v_i,v_j\right)=K_b\frac{\left(v_i^{1/3}+v_j^{1/3}\right)^2}{v_i^{1/3}v_j^{1/3}}$	$K_b=\frac{2k_B\,T}{3\mu}$
$\beta_{sh}\left(i,j\right)=K_{sh}\left(v_i^{1/3}+v_j^{1/3}\right)^3$	$K_{sh}=\frac{G}{\pi}$
$\beta_{ds}\left(v_i,v_j\right)=K_{ds}\left(v_i^{1/3}+v_j^{1/3}\right)^3\left\lvert v_i^{1/3}-v_j^{1/3}\right\rvert$	$K_{ds}=\left(\frac{6}{\pi}\right)^{1/3}\left(\frac{g}{12\upsilon}\right)\left(\frac{\rho_f-\rho_w}{\rho_w}\right)$

2.3.4.1 Exemplo de aplicação do modelo

Com o objetivo de ilustrar os resultados do modelo, foi realizado um cálculo de velocidade de sedimentação dos flocos, com base em um experimento de laboratório realizado em uma coluna de sedimentação com sedimentos obtidos da plataforma continental amazônica e de observações de tamanho de flocos no lugar. Através de testes de laboratório com amostras de lama da plataforma continental em frente ao rio Amazonas, determinou-se W_s em condições de repouso e em função da concentração (VINZÓN, 1998), de acordo com a metodologia descrita a seguir. Integrou-se a equação (2.28) em relação à coordenada vertical *z*, obtendo-se:

$$W_s\, C\Big|_{z=h} = -\frac{\partial}{\partial t}\int_0^h C\, dz \tag{2.34}$$

onde h é a altura da coluna de água. Assim, utilizando a distribuição vertical de concentrações de sedimentos ao longo do tempo, calculou-se a relação $C(z,t)$ - W_s. Para cada altura h escolhida, calculou-se a integral da equação (2.34) para os diferentes tempos em que foram medidos os perfis de concentração. Então, a equação discretizada:

$$W_{s\,z=h}^{i+\frac{1}{2}} = -\frac{1}{C_{z=h}^{i+\frac{1}{2}}\left(t_{i+1}-t_i\right)}\left(\int_0^h Cdz\Big|_{i+1} - \int_0^h Cdz\Big|_i\right) \tag{2.35}$$

com $C_{z=h}^{i+\frac{1}{2}} = \left(C_{z=h}^{i+i} + C_{z=h}^{i}\right)/2$, proporciona um par, $C(z,t)$ - W_s, para cada tempo *i+1/2*.

Os testes de sedimentação foram realizados em um tubo de acrílico de 2 m de altura e 10 cm de diâmetro, com saídas localizadas em oito elevações, a 6, 16, 31, 56, 81, 106, 131 e 156 cm (VINZÓN, 1998). As amostras de sedimento analisadas foram diluídas com água potável até alcançar uma concentração inicial desejada e encher a coluna de sedimentação (15,7 litros). Adicionou-se sal para alcançar 5 psu de salinidade ambiente a fim de normalizar os experimentos. Com os dados obtidos destes experimentos, e a equação (2.35), foi ajustada por VINZON (1998) a seguinte relação empírica entre a velocidade de queda e a concentração:

$$W_z = 0.11\ C^{1.6}\ \text{mms}^{-1} \qquad \text{para C} < 6\ \text{gl}^{-1} \tag{2.36}$$

mostrando um aumento da velocidade de sedimentação com o incremento de concentração, devido ao efeito da floculação.

2.3.4.2 Resultados e conclusões

Os resultados do modelo implementado são mostrados na Figura 2.6 e na Figura 2.7, para G=0 e 10 s^{-1}, e G=0 e 100 s^{-1}, respectivamente. O coeficiente de eficiência α_{ds} foi ajustado de forma de aproximar os dados experimentais com G=0.

O modelo de floculação implementado (equação (2.30), G=0 s^{-1}) reproduz adequadamente a relação funcional entre a velocidade de sedimentação e a concentração da suspensão obtida a partir das medições na coluna de sedimentação, equação (2.36). Como esperado, as velocidades obtidas em condições de repouso ($G = 0\ s^{-1}$) tendem a subestimar os valores de campo, (de 0.02 a 2.8 mm s^{-1}). Um único valor de α foi assim adotado, α_{ds} = 0.05 (α_b = α_{sh} = 0) e uma massa específica dos flocos de 1100 kgm^{-3}, constituindo estes últimos valores os parâmetros do modelo de floculação. Os parâmetros G=$10 s^{-1}$ e G=$100\ s^{-1}$ são valores típicos para um escoamento de acordo na Figura 2.2.

A inclusão do efeito da turbulência no crescimento dos flocos é clara no modelo implementado. As velocidades de sedimentação obtidas a partir do tamanho dos flocos observados (*in situ*) também são mostradas nas respectivas figuras. Os detalhes desta aplicação se encontram em TRENTO e VINZÓN (2002).

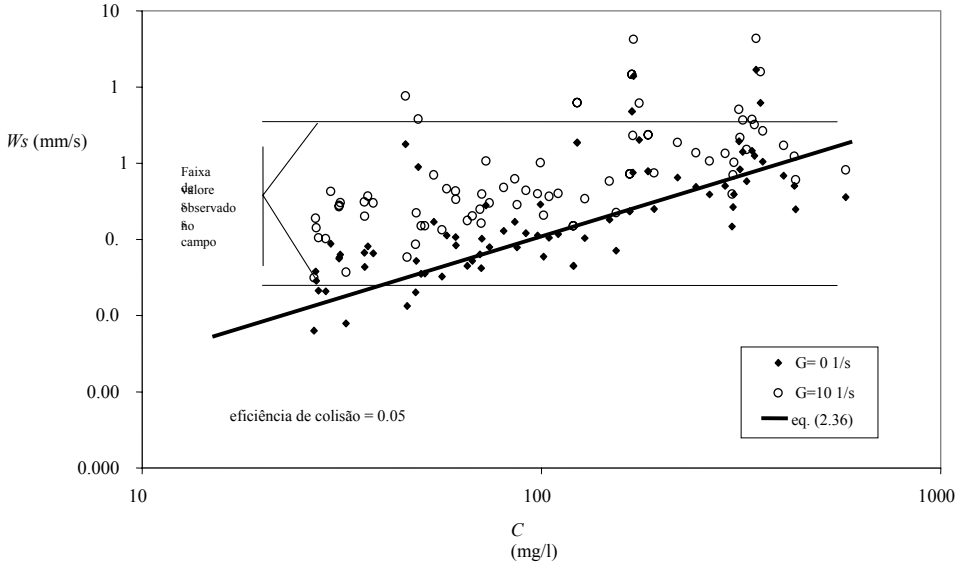


Figura 2.6: W_s em função de C, obtida com a equação (2.30). Comparação com observações de campo e com resultados dos testes de sedimentação.

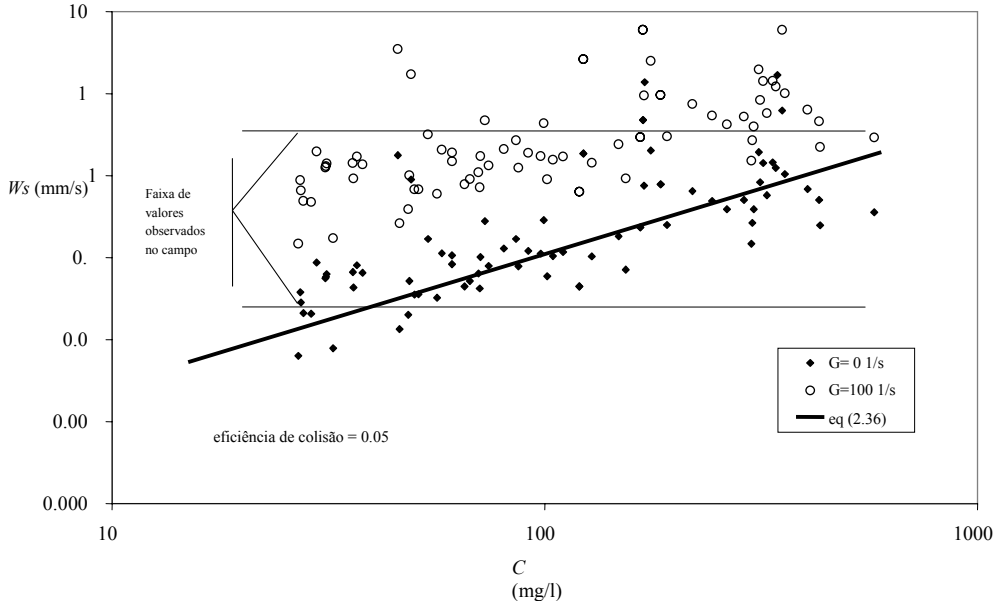


Figura 2.7: W_s em função de C, obtida com a equação (2.30). Comparação com observações de campo e com resultados dos testes de sedimentação.

2.4 Cálculo do diâmetro de flocos

O modelo anteriormente descrito permite calcular W_s, no entanto não informa o diâmetro médio dos flocos. O balanço de forças para um floco caindo em forma estacionária em um meio infinito pode ser descrita com a seguinte equação (WU e LEE, 1998; NEALE *et al*., 1973):

$$\frac{\pi d_f^3}{6} g\left(\rho_f - \rho_w\right) = C_D \rho_w \Omega \frac{\pi d_f^2}{4} \frac{W_s^2}{2} \tag{2.37}$$

com C_D o coeficiente de arrasto, d_f o diâmetro dos flocos e Ω a relação de resistência experimentada por um floco permeável relativa à de uma esfera sólida. O fator Ω pode ser calculado de acordo a NEALE *et al*. (1973) com a fórmula:

$$\Omega = \frac{2\beta^2\left[1 - \left(tanh\,\beta\right)/\beta\right]}{2\beta^2 + 3\left[1 - \left(tanh\,\beta\right)/\beta\right]} \tag{2.38}$$

Onde β é um diâmetro adimensional do floco

$$\beta = \frac{d_f}{2\sqrt{k_f}} \tag{2.39}$$

com k_f a permeabilidade dos flocos em (m^2), que pode ser calculada com o modelo de Brinkman (LEE *et al*., 1996) :

$$k_f = \frac{d_p^2}{72}\left(3 + \frac{4}{1-e} - 3\sqrt{\frac{8}{1-e} - 3}\right) \tag{2.40}$$

com e a porosidade dos flocos (NEALE *et al*., 1973)

$$e = 1 - \frac{\Delta\rho_f}{\Delta\rho_s} \tag{2.41}$$

com $\Delta\rho_f = \rho_f - \rho_w$ é a massa específica diferencial dos flocos, e $\Delta\rho_s = \rho_s - \rho_w$.

Desenvolveu-se um programa computacional com um algoritmo iterativo para calcular em forma seqüencial $\Delta\rho_f$, e, k_f, β, Ω, C_D, para os dados de laboratório (ver parágrafo 3.5).

Para flocos impermeáveis pode-se adotar Ω =1, aproximação justificável para condições de escoamento de Stokes (Re<0.5) em volta do floco. Esta hipótese é totalmente compatível para flocos com escalas espacial e de velocidades da mesma ordem que a da microescala de Kolmogorov (ver parágrafo 2.2.2). À medida que se incrementa Re acima de 0.5 deve considerar-se que as esferas porosas permeáveis experimentam um maior arrasto que as esferas porosas impermeáveis, devido a efeitos inerciais (NEALE *et al.*, 1973). Estes podem ser devidos tanto a efeitos superficiais como ao escoamento interno dentro dos flocos na sua queda.

Para calcular o coeficiente de arrasto C_D pode utilizar-se á conhecida relação

$$C_D = \frac{K}{Re} \tag{2.42}$$

válida para número de Reynolds dos flocos, Re<0.5, com $Re = \frac{W_s d_f}{\upsilon}$, e K uma constante que depende da esfericidade do floco. A partir destas relações, o diâmetro dos flocos pode ser calculado, depois de operar algebricamente com as equações (2.39) e (2.42) com:

$$d_f = \sqrt{\frac{3 K \mu}{4 g \Delta\rho_f} W_s} \tag{2.43}$$

TAMBO e WATANABE (1979) adotaram K=45 (com Ω =1). MASLIYAH e POLIKAR (1980) trabalharam em laboratório com esferas plásticas especialmente realizadas, mediram sua porosidade, permeabilidade e velocidade de queda. Para esferas

com 0.1<*Re*<120, obtiveram com uma análise de regressão para C_D as seguintes fórmulas:

Tabela 2.3: Cálculo de C_D em função do *Re*.

C_D	Intervalo do *Re*	
$\frac{24\,\Omega}{Re}\left(1+0.1315\,Re^{(0.82-0.05\log_{10} Re)}\right)$	$0.1 < Re \leq 7$	(2.44)
$\frac{24\,\Omega}{Re}\left(1+0.0853\,Re^{(1.093-0.105\log_{10} Re)}\right)$	$7 < Re \leq 120$	(2.45)

Devido à dependência funcional $C_D=f(Re)$, deve-se adotar um procedimento iterativo para calcular d_f (ver ANEXO 2).

2.5 Desagregação por tensões de cisalhamento

Uma expressão geral, em forma discreta, para a desagregação por tensões de cisalhamento do escoamento foi aportada por LICK e LICK (1988): $\frac{dn_k}{dt} = -B_k n_k + \sum_{j=k+1}^{\infty} \gamma_{jk}\, B_j\, n_j$, com n_k o número de flocos por unidade de volume de ordem *k*. O primeiro termo da direita representa a perda de flocos de ordem *k*. Os coeficientes B_k e B_j dependem das propriedades físico-químicas dos agregados, da sua massa específica efetiva, geometria e tensões de cisalhamento. O segundo termo do lado direito representa a taxa de incremento de flocos de ordem *k,* devido à desagregação de flocos de ordem *j*>*k*. A quantidade γ_{jk} é a probabilidade de que um floco de ordem *k* seja formado depois da desagregação de uma partícula de ordem *j*. Não existem atualmente soluções analíticas para quantificar com certeza os coeficientes específicos

deste processo (WINTERWERP, 2000). Uma discussão sobre diferentes hipóteses para definir este parâmetro pode consultar-se em LICK e LICK (1988). Nesta tese será considerado que o único mecanismo capaz de produzir desagregação é a tensão de cisalhamento do escoamento.

Baseado na observação que flocos mais densos são mais resistentes, KRONE em 1963 conseguiu experimentalmente a determinação de τ_f para sedimentos da baía de San Francisco, segundo sua massa específica. PARTHENIADES (1993) formulou a seguinte equação para calcular τ_f, a tensão resistente do floco, em função da $\Delta\rho_f$, também chamada massa específica em excesso,

$$\tau_f = \alpha_2 \, \Delta\rho_f{}^{\beta_2} \tag{2.46}$$

com α_2 e β_2 parâmetros empíricos.

A partir da teoria dos fractais auto-similares, entidades que possuem propriedades geométricas invariantes com respeito à escala geométrica, se desenvolveram trabalhos na literatura que demonstraram esta propriedade para os agregados em suspensões coloidais (KRANENBURG, 1994; HUANG, 1994; OLES, 1992; WIESNER, 1992, entre outros), e técnicas de laboratório baseadas em difração de luz para determinar a dimensão fractal de agregados (BUSHELL, 2005), mas não é a intenção do presente trabalho estender-se nos detalhes da teoria dos fractais. Somente se pretende dar uma introdução para compreender o contexto da sua aplicação. Em um processo de agregação com N partículas em um agregado fractal de medida d_f, é possível descrever (WINTERWERP, 2000):

$$N \propto \left[\frac{d_p}{d_f} \right]^{n_f} \tag{2.47}$$

A dimensão fractal varia no intervalo de 1 a 3. Uma importante confirmação da equação (2.47) foi dada por TAMBO e WATANABE (1979) que obtiveram $n_f \approx 2.1$.

Uma síntese dos diferentes processos característicos de fractais pode ser encontrada em FRIEDLANDER (2000).

Mediante uma análise das propriedades fractais dos processos de agregação, KRANENBURG (1994), analisou a informação obtida por KRONE e propôs uma relação para τ_f em função da massa específica diferencial dos flocos e sua dimensão fractal n_f. A equação proposta é a seguinte

$$\tau_f \approx \Delta\rho_f^{\frac{2}{3-n_f}} \tag{2.48}$$

A proporcionalidade fica estabelecida por um coeficiente que deve dar conta das propriedades dos sedimentos e portanto deve ser determinado no laboratório. Na Figura 2.8 se apreciam as duas isolinhas traçadas por KRANENBURG indicando o intervalo de dimensões fractais ($D=n_f$) que compreendiam as tensões ($\sigma_y=\tau_f$) determinadas experimentalmente, segundo a massa específica dos flocos ($\Delta\rho_a=\Delta\rho_f$).

A dimensão fractal será obtida neste trabalho a partir da equação (2.49), sugerida por KRANENBURG (1994), uma vez calculada ρ_f de forma independente.

$$\Delta\rho_f = \Delta\rho_s\left(\frac{d_p}{d_f}\right)^{3-n_f} \tag{2.49}$$

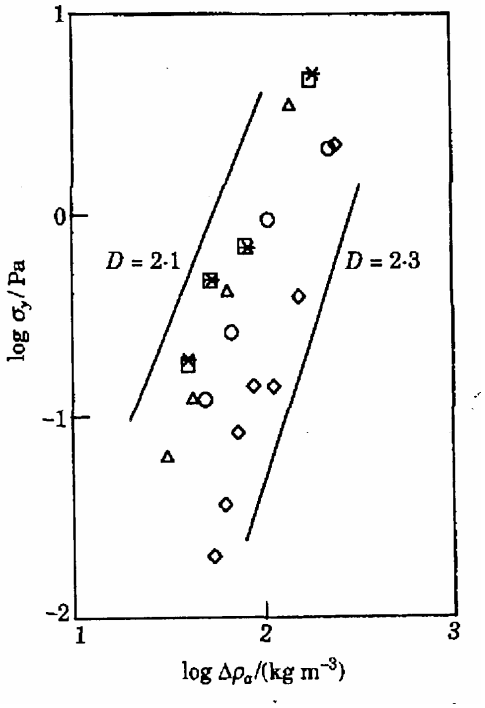


Figura 2.8: Resultados experimentais obtidos por KRONE. Os símbolos representam cinco sedimentos diferentes. As linhas retas representam a equação (2.48) com $D=n_f$= 2.1 e 2.3. (Reproduzido de KRANENBURG, 1994).

De acordo a WINTERWERP (2000), o número de flocos gerados pela desagregação depende dos tamanhos dos flocos e das partículas originais, das tensões turbulentas do escoamento e das tensões resistentes dos flocos, que se enunciam em:

$$\frac{1}{N}\frac{dN}{dt} \propto \frac{1}{T_v} F\left(\frac{d_f}{d_p}, \frac{\tau_b}{\tau_f}\right) \tag{2.50}$$

com N a concentração em número de flocos. Seguindo a esse autor, a função F é da forma:

$$\frac{1}{N}\frac{dN}{dt} \propto \frac{1}{T_v} \alpha \left(\frac{d_f - d_p}{d_p}\right)^p \left(\frac{\tau_b}{\tau_f}\right)^q \tag{2.51}$$

com α, p e q coeficientes experimentais e T_v a escala de tempo dos turbilhões que os flocos podem resistir.

As tensões devidas à viscosidade, τ_v que atua sobre os flocos, dependem de variáveis de ordem da microescala de Kolmogorov e portanto pode ser parametrizada com as variáveis υ, ν e η, a viscosidade cinemática, a velocidade e o comprimento característicos da microescala da turbulência respectivamente. De acordo com os conceitos analisados no parágrafo 2.2.2, segundo SAFFMAN e TURNER (1956), o parâmetro de dissipação pode-se exprimir:

$$G^2 = \frac{\varepsilon}{\upsilon} = \frac{\upsilon^3 \eta^{-4}}{\upsilon} \tag{2.52}$$

De forma que $G = \upsilon / \eta^2$, e o gradiente de velocidade $\partial u/\partial z$ da tensão viscosa pode aproximar-se com ν/η, então τ_v resulta:

$$\tau_v = \mu \frac{\partial u}{\partial z} \approx \mu \frac{\nu}{\eta} = \mu G \tag{2.53}$$

mostrando desta maneira a taxa de dissipação G, como um gradiente de velocidades efetivo da microescala. É importante destacar que a partir da relação $G = \nu/\eta$, deduz-se que o valor temporal da microescala pode exprimir-se $t_f = G^{-1}$, sendo t_f então, a escala de tempo dos microflocos, que deveria ser a mesma na que atua a tensão resistente τ_f. A força de resistência dos flocos deve gerar-se em regime viscoso, assim como τ_b tem que depender de ε e portanto de G, como fica estabelecido na equação (2.16). A escala de tempo de τ_b está dada por l/u_*, com l a escala espacial da camada limite turbulenta (TENNEKES e LUMLEY, 1972), sendo também l a medida dos turbilhões grandes que dissipam a energia de macroescala da turbulência, também comparáveis à profundidade z=h. A partir da equação (2.14) obtém-se que:

$u_*^3 = O(\varepsilon l) = O\left(\frac{\nu^3}{\eta} l\right)$, com O que significa '*da ordem de*'.

Se adotamos $l = 10^3 \eta$, depois de operar fica: $u_* \approx 10\nu$. De acordo com NEZU e NAKAGAWA (1993), $W_s << w'$, sendo a flutuação da velocidade vertical w' da ordem de u_*. Então pode obter-se a escala de tempo para a velocidade de atrito:

$t_T = \frac{l}{u_*} = \frac{10^3 \eta}{10 \nu} = 10^2 \frac{\eta}{\nu} = 10^2 t_f$. Este valor é semelhante ao obtido por WINTERWERP(2000) para condições de turbulência homogênea a partir das equações de um modelo *k-ε*, com um coeficiente empírico $c_\mu = (\overline{uw}/k)^2 \approx 0.09$ de acordo com medições (ASCE, 1988) e a adoção da analogia de Reynolds, então a viscosidade de turbilhão é:

$$\upsilon_t = c_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \tag{2.54}$$

$$t_T \propto \frac{k}{\varepsilon} = \frac{\upsilon_T}{c_\mu k} \approx \frac{0.1 h u_*}{c_\mu 1.7 u_*^2} \approx 0.66 \frac{h}{u_*} \tag{2.55}$$

Concluindo-se que os flocos devem responder quase instantaneamente às mudanças introduzidas pela turbulência do escoamento médio.

Devido ao fato do que o tamanho dos flocos é uma incógnita do problema e que além disso está afetado por coeficientes de difícil quantificação pode-se exprimir na equação (2.57) o termo de desagregação só em função de τ_b e τ_f. Portanto, o coeficiente do modelo de FARLEY e MOREL que parametriza as tensões de cisalhamento, K_{sh}, pode ser expresso como o resultado da diferença entre um processo de agregação por colisões de partículas e outro de quebra dos flocos por tensões de cisalhamento.

$$K_{sh}(x,y,t) = \frac{G}{\pi} \qquad \text{para } \tau_f > \tau_b \tag{2.56}$$

$$K_{sh}(x,y,t) = \frac{G}{\pi} - \theta \left(\frac{\rho_w u_*^2}{\Delta \rho_f^{\frac{2}{3-nf}}} \right) \qquad \text{para } \tau_f \le \tau_b \tag{2.57}$$

Se como resultado da equação (2.57) obtém-se K_{sh} <0, faz-se K_{sh}=0, o qual equivale a supor que o efeito das tensões de cisalhamento sobre a agregação é neutro, e desse jeito, os efeitos de agregação por tensões compensam os de quebra de flocos. O coeficiente θ da equação (2.57) é só um coeficiente de escala em unidades (s^{-1}). A taxa

de dissipação G e as tensões de cisalhamento τ_b foram calculadas com as equações (2.16) e (2.17), respectivamente.

2.6 Conclusões

Foram explicados os fundamentos da teoria da agregação como foi formulada por Smoluchowski, incluindo as equações para as tensões turbulentas e a agregação diferencial.

Realizou-se uma resenha dos principais modelos matemáticos de floculação, apresentando a relação da velocidade de queda com as concentrações e o parâmetro de dissipação. Foi mostrado que o modelo de potência não leva em conta o efeito da desagregação e que si bem os modelos de WINTERWERP e o de potência considera esse efeito, não levam em conta os processos de floculação diferencial. Foi mostrado em particular o modelo de FARLEY e MOREL, adotado para o modelo numérico Lagrangeano, por considerar todos os processos de floculação. Devido na importância do mecanismo de desagregação como limitante do tamanho dos flocos, não incluído na teoria original do modelo de FARLEY e MOREL, se propõe uma equação de desagregação por tensões de cisalhamento, fundada na equação da tensão resistente dos flocos, que se utilizará no modelo Lagrangeano.

Foi explicado em detalhes o cálculo dos diâmetros dos flocos, a massa específica diferencial e outras variáveis próprias dos flocos, mediante um procedimento que permite contabilizar seus efeitos inerciais, importantes para o caso de macroflocos.

3. Experimentos com floculadores

3.1 Introdução

De acordo com o que foi discutido no parágrafo 2.1, em rios e estuários os principais mecanismos formadores de flocos são as tensões de cisalhamento do escoamento e a sedimentação diferencial. Ainda que ambos atuem simultaneamente, sua preponderância difere segundo o nível de turbulência local do escoamento. Com o propósito de analisar a formação de flocos segundo cada mecanismo por separado, medir W_s, determinar a variação temporal de d_f , analisar o efeito da salinidade e da concentração, calcular ρ_f e a dimensão fractal, foram construídos dois aparelhos no Laboratório de Dinâmica de Sedimentos Coesivos (LDSC): um floculador Couette e outro de disco. Com o primeiro se analisou a dinâmica de floculação quando o processo predominante foi governado pelas tensões de cisalhamento, enquanto que com o segundo aparelho se representou a dinâmica de floculação segundo a mecânica da sedimentação diferencial. Para tal efeito se utilizaram água salgada e sedimentos finos obtidos do leito do estuário do rio Paraíba do Sul.

Os sedimentos utilizados se secaram em estufa a 105 ºC, posteriormente foram passados pela peneira 230, o sedimento passante homogeneizado e foi determinada a sua granulometria mediante difração laser com um aparelho Malvern. As amostras foram dispersas com hexametafosfato de sódio. Na Figura 3.1 se mostra a distribuição granulométrica dos sedimentos. O diâmetro d_{50} (o diâmetro correspondente à mediana, para o qual a metade da amostra é mais fina) foi 16.8 μm, com 10% correspondente às argilas (até 2 micrômetros), 88.1 % aos siltes (2 a 62 micrômetros) e uma fração menor a 2% às areias finas. Com base na amostra padrão se prepararam outras amostras de diferentes concentrações, as quais foram posteriormente introduzidas nos floculadores. A composição mineralógica foi determinada por difração de raios X (DRX) mediante o uso de um difractômetro Rigaku Denki modelo D/Max II-C com um sistema computadorizado para o tratamento de dados. Apresentou 85% de caolinita e 15 % de ilita, com fases predominantes de muscovita, quartzo e dois minerais do grupo das

cloritas (clinocloro e sepiolita). Os minerais argilosos podem adsorver e intercambiar cátions por outros mais ativos do seu entorno; essa propriedade é expressa na denominada capacidade de intercâmbio de cátions (CEC), definida como o número de cátions que podem ser trocados na dupla camada ao redor das partículas cristalinas, cujas unidades estão dadas em meq $(100g)^{-1}$ de argila. A CEC se situa no intervalo 3-15 para a Caolinita, 10-40 para Ilita, 24-45 para a Clorita e 80-150 para Smectita (Montmorillonita) (MCANALLY e MEHTA, 2001). De acordo com esta classificação os sedimentos do Paraíba do Sul exibem um grau moderado de coesão.

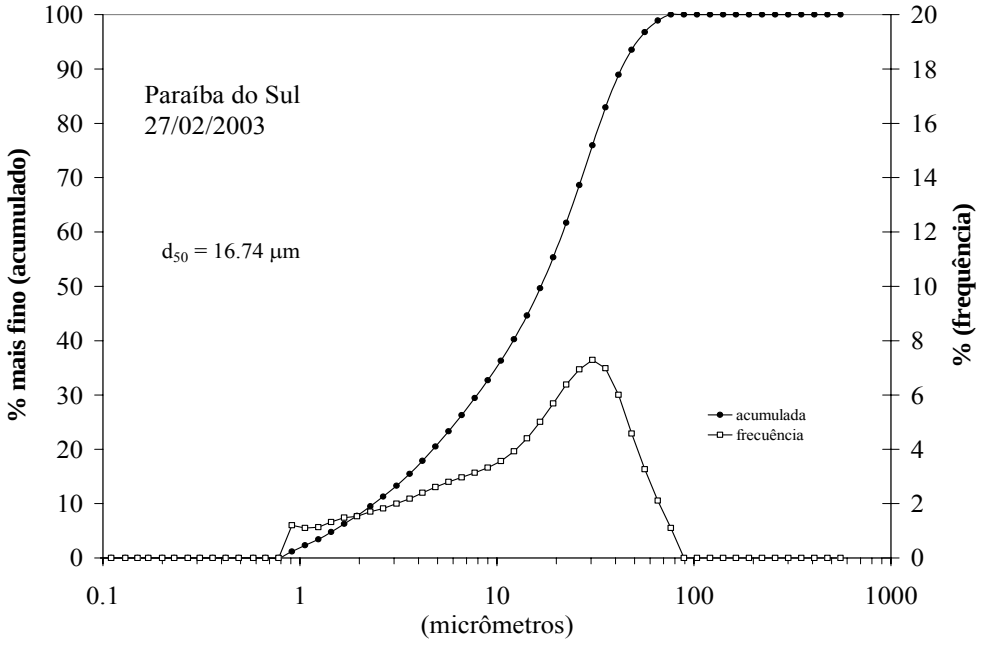


Figura 3.1: Distribuição granulométrica da amostra padrão, obtida no estuário do rio Paraíba do Sul (fevereiro, 2003).

3.2 Floculador de Disco

O floculador de disco foi construído seguindo um desenho semelhante ao proposto por LICK *et al.* (1993). É composto de dois discos de acrílico transparente de 50 cm de diâmetro, separados 30 mm, contemdo um volume de 6500 cm^3 de suspensão (Figura 3.2). O movimento é proporcionado por um motor elétrico de 30 W mediante uma correia de transmissão no eixo dos discos. A suspensão é introduzida por um orifício de

10 mm de diâmetro, enroscado, com tampa, localizado na largura da separação. Pelo mesmo também se extraem as amostras com uma pipeta.

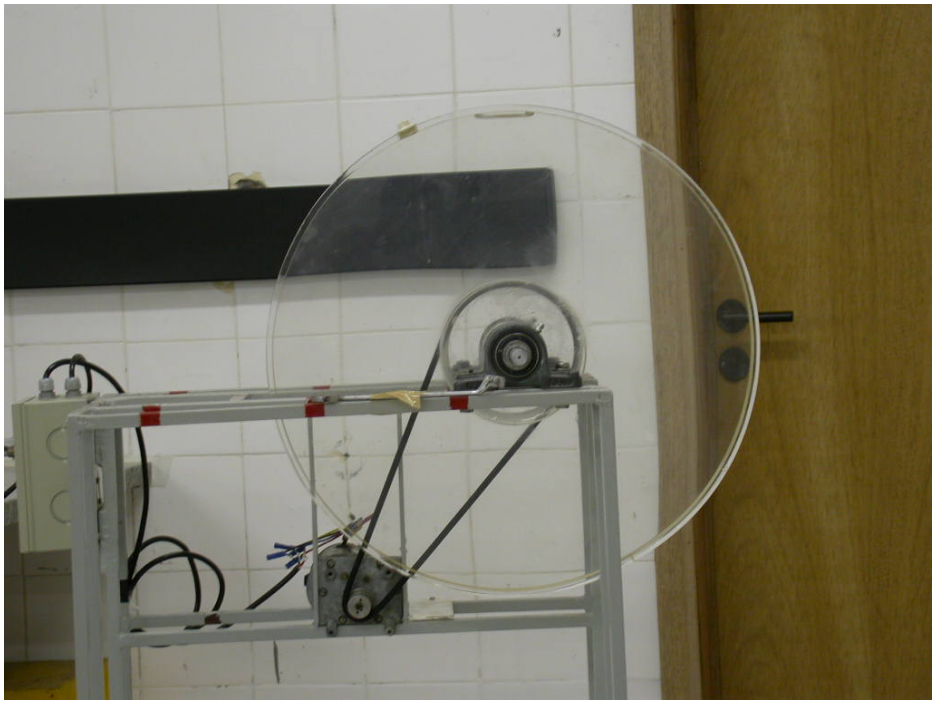


Figura 3.2: Floculador de disco.

3.2.1 Metodologia de trabalho com floculador de disco

Os experimentos consistiram em submeter a mistura de água-sedimento inicialmente dispersa, a um movimento rotacional semelhante ao de um corpo rígido, livre de tensões de cisalhamento no fluido. Para isso o disco foi girado a uma velocidade angular ω constante de 2 rpm. Os sedimentos, depois de uma fase transciente inicial de poucos minutos, seguiram o movimento dos discos, formando flocos principalmente por sedimentação diferencial. A velocidade angular pequena foi fundamental para que a força centrífuga fosse reduzida e portanto se minimize o efeito de parede, de tal modo que a floculação ocorrese por colisão somente entre partículas e não entre as partículas e a parede dos discos. Todas os experimentos se realizaram a 2 rpm, a uma temperatura de entre 25.3 e 26.1 ºC e pH=6.5. As outras variáveis dos experimentos são indicadas na Tabela 3.1 com as respectivas unidades, sendo C a concentração de sedimentos, S a salinidade, T a temperatura da água, CE a condutividade específica.

Tabela 3.1. Variáveis dos experimentos efetuadas com o floculador de disco.

ω	*C*	*S*	*T*	*CE*
rpm	mgl^{-1}	psu	ºC	$\mu S\ cm^{-1}$
2	100	0.0	25.6	22.9
2	200	0.0	25.5	31.8
2	335	0.0	25.3	38.2
2	100	31.0	25.9	47500
2	200	32.6	25.5	49500
2	335	29.8	26.1	45800

A amostragem foi realizada em intervalos predeterminados, em volumes de aproximadamente 3 cm³. Em todos os casos foram usadas pipetas de 4 mm de diâmetro para evitar ou minimizar a ruptura de flocos (GIBBS e KONWAR, 1982, 1983). Em cada amostragem o motor foi detido por um lapso de tempo não superior a 45 s. As amostras foram imediatamente observadas com um microscópio de 30 aumentos e fotografadas com uma máquina digital Nikon Coolpix 4500 de 4 mega pixels. Utilizou-se como base para depositar as amostras uma folha de plástico sobre a que foi desenhada uma malha realizada com linhas eqüidistantes de 1 mm.

Uma vez fotografados os flocos, a mistura foi cuidadosamente posta sobre a parte superior de um tubo de sedimentação de acrílico transparente de 34 cm de altura e 4 cm de diâmetro cheio de água com as mesmas propriedades (salinidade, pH, temperatura) que a do floculador. A distância percorrida pelos flocos foi medida sobre uma escala graduada, aderida na parede do tubo, no percurso entre os 10 e 25 cm. O tempo de cada percurso foi medido e se calculou a velocidade média de sedimentação W_s. O tubo foi iluminado com uma lâmpada fluorescente apenas em cada intervalo de medição dos flocos e depois apagado, para evitar o aumento de temperatura do líquido. A medição de velocidades de sedimentação não se realizou para todas as extrações do floculador pela dificuldade em visualizar os flocos muito pequenos no tubo de sedimentação.

As fotografias foram processadas com um software gráfico, determinando-se a quantidade de flocos e seus tamanhos. Para isso primeiro se determinou a escala de cada foto medindo a distância média entre diferentes linhas da malha. Depois foram medidas

as dimensões características de cada floco. Nos flocos muito irregulares foi calculado o médio dos tamanhos. A etapa seguinte consistiu em obter um médio de todos os flocos, seus tamanhos máximo, mínimo e desvio padrão. Na Figura 3.3 e na Figura 3.4 são mostrados flocos obtidos para diferentes concentrações em água salgada e doce.

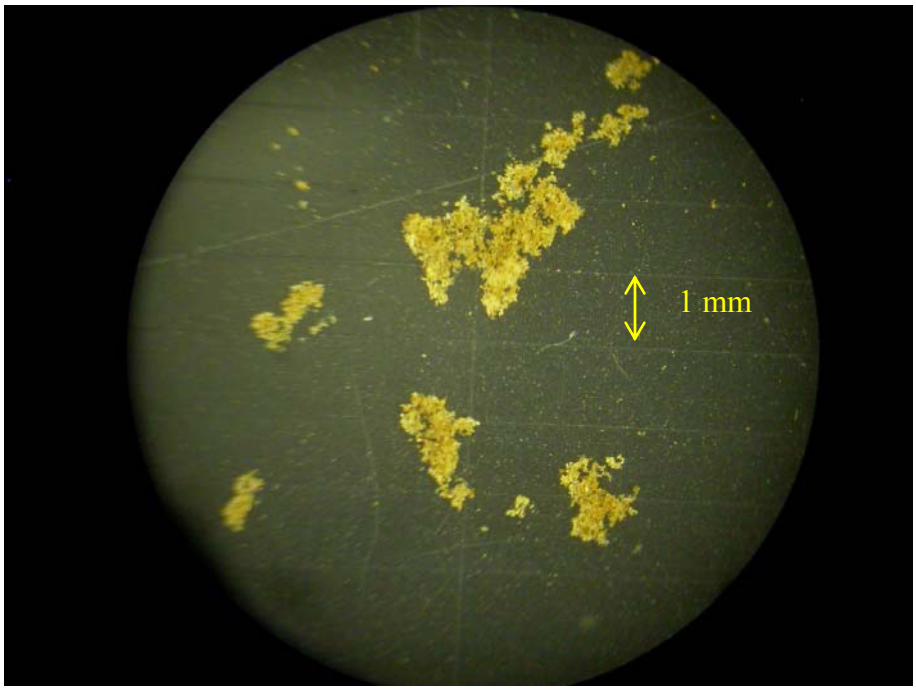


Figura 3.3: Flocos do floculador de disco em água doce com C= 100 mg l^{-1}.

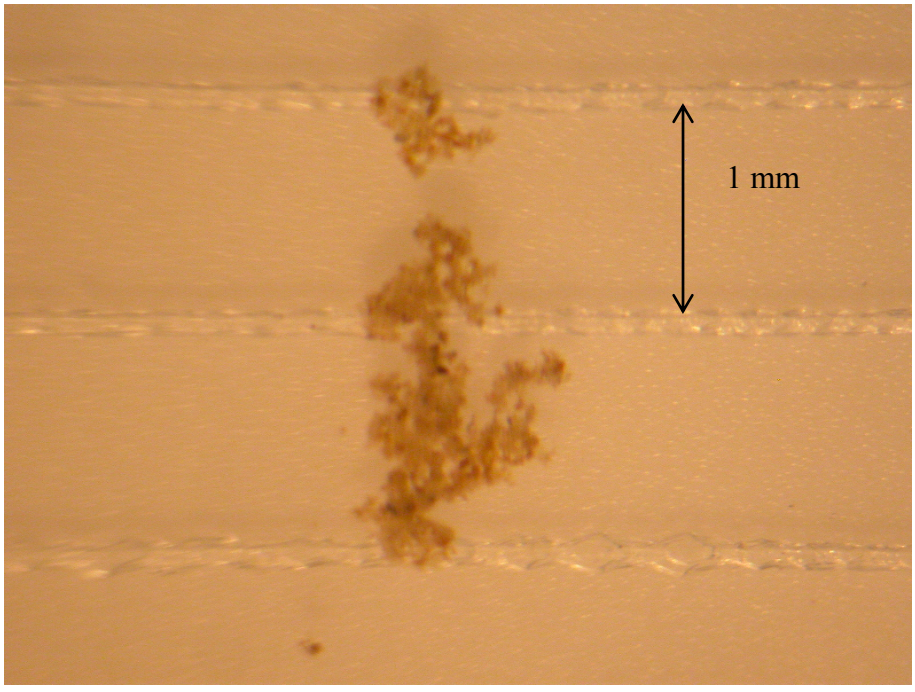


Figura 3.4: Flocos do floculador de disco em água salgada com C= 200 mgl^{-1}

3.3 Floculador Couette

As propriedades hidráulicas dos aparelhos Couette foram estudadas por RAYLEIGH, TAYLOR e outros (VAN DUUREN, 1968). TAYLOR (1936) demonstrou que os escoamentos bidimensionais eram estáveis a velocidades relativamente altas quando estava em rotação somente o cilindro exterior, enquanto que quando só girava o interior era estável a baixas velocidades. O primeiro trabalho conhecido da utilização de um viscosímetro Couette para estudar processos de floculação foi realizado por VAN DUUREN (1968), que propôs estudar a colisão de partículas pela ação de gradientes de velocidades em um escoamento laminar bidimensional. No seu trabalho VAN DUUREN realizou uma detalhada análise dos antecedentes da utilização deste aparelho assim como das equações que permitem calcular o gradiente de velocidades G a uma distância radial r:

$$G = \frac{dv_t}{dr} - r = -\frac{2(\omega_1 - \omega_2)}{R_2^2 - R_1^2}\frac{R_2^2\, R_1^2}{r^2} \tag{3.1}$$

e um gradiente médio:

$$G_m = \frac{1}{R_2 - R_1}\int_{R_1}^{R_2} G\, dr = \frac{2\omega_2\, R_1\, R_2}{R_2^2 - R_1^2} \tag{3.2}$$

com v_t a velocidade tangencial em r, ω_1 e ω_2 as velocidades angulares dos cilindros interior e exterior respectivamente, R_1 e R_2 os raios respectivos. VAN DUUREN demonstrou, com base nos experimentos de TAYLOR (1936), que a velocidade limite do cilindro exterior, ω_{2lim} , para que o escoamento seja laminar era dada pela equação:

$$\omega_{2\,lim} = \frac{3.16\,10^5\, \nu(R_2 - R_1)^{0.7}}{R_2^{2.7}} \tag{3.3}$$

e que uma vez ultrapassado esse valor de ω_{2lim} o escoamento se tornava turbulento. O autor verificou a bidimensionalidade do escoamento e o funcionamento geral de acordo aos propósitos do estudo, no entanto não informou sobre outros resultados mais específicos com sedimentos. IVES E BOHLE (1973) construíram dois aparelhos

similares ao de VAN DUUREN, ambos com dois cilindros horizontais concêntricos, o interior fixo e o exterior móvel. A diferença consistiu em que o cilindro interior de um deles foi de diâmetro variável para incrementar a diferença anular em direção do escoamento. A tensão cisalhante τ foi calculada com $\tau = \mu G_m$ (TSAI *et al*., 1987).

BOADWAY (1978) construiu um aparelho com o cilindro interior fixo e o exterior móvel, de dimensões parecidas ao aparelho de VAN DUUREN, de eixo vertical com o propósito de evitar possíveis perturbações de bolhas e observar a sedimentação de flocos enquanto eram submetidos a tensões de cisalhamento. Montou uma câmara fotográfica em posição horizontal a altura média com uma resolução limitada a tamanhos superiores a 25 μm. Trabalhou com suspensões de argila e alumínio. Desenvolveu uma equação para a massa específica dos flocos e um modelo matemático simplificado para floculação.

Com o objetivo de estudar as distribuições de medidas das partículas agregadas segundo a teoria da coagulação por movimento Browniano e tensões de cisalhamento, HUNT (1982) utilizou um floculador de eixo vertical (diâmetro do cilindro interior =7.5 cm e abertura de 0.63 cm), com G no intervalo entre 0.5 a 32 s^{-1}, para uma suspensão de argilas cuja concentração em volume foi inferior a 0.1 % em água salgada. Experimentalmente observou instabilidade no fluido para G=32 s^{-1}, que atribuiu à rugosidade do cilindro.

O floculador Couette do LDSC foi construído seguindo um desenho semelhante ao proposto por TSAI *et al*., (1987). Consiste basicamente de dois cilindros coaxiais horizontais de acrílico transparente, de 25 cm de comprimento e diâmetros exterior e interior de 5.80 e 5.40 cm respectivamente, com um volume de 88 cm^3. O único cilindro em rotação foi o exterior, produzindo-se desta maneira um gradiente de velocidades entre ambos. Os cilindros têm uma tampa em cada extremidade, e em uma delas se dispôs uma engrenagem que transmite a energia de um motor mediante uma correia dentada. O motor conta com um dispositivo redutor de velocidades que lhe permite girar até 375 rpm, com uma capacidade de regulação de 1 rpm, que se pode digitar a partir de um painel de controle. Uma imagem do floculador é mostrada na Figura 3.5.

Figura 3.5: Floculador Couette, motor e regulador de giros.

3.3.1 Metodología de trabalho com floculador Couette

A suspensão é introduzida por uma válvula localizada em uma das extremidades e as amostras são extraídas por uma das quatro mangueiras plásticas de 3 mm de diâmetro, localizadas com esse propósito em diferentes distâncias das extremidades. Estas quatro mangueiras estão instaladas por dentro do eixo de aço ao qual os cilindros estão fixados e se conectam com a suspensão só através do cilindro interior imóvel. O modo de extrair a amostra é a única diferença importante com respeito ao desenho de TSAI *et al.* (1987), pois nesse aparelho a amostra deve ser extraída por uma das extremidades do floculador depois de desarmá-lo. No floculador do LDSC essa manobra prolongada e complicada não é necessária, só é preciso deter o floculador, extrair os 2 cm^3 da suspensão contida na mangueira de amostragem, volume que é descartado por esse motivo, e a seguir obter a amostra cuidadosamente, repor o volume de suspensão extraído e continuar o experimento.

A suspensão com uma concentração predeterminada foi introduzida pela válvula, realizando-se a tomada de amostras em intervalos prefixados, em volumes de aproximadamente 3 cm^3, com uma seringa conectada a uma das mangueiras plásticas de 3 mm de diâmetro. Em cada amostragem o motor foi detido por um lapso de tempo não superior a 50 s. O volume extraído foi reposto imediatamente com outra seringa

utilizada somente para esse fim. Para isso se dispôs de um volume adicional de amostra que foi continuamente agitado antes da reposição. A cada seqüência de três amostras consecutivas extraídas, o floculador foi detido, esvaziado e o processo foi recomeçado com uma amostra nova desde t=0 até realizar a primeira extração no intervalo seguinte ao da última. Desse modo se conseguiu reduzir a descontinuidade no experimento.

As amostras foram imediatamente observadas com um microscópio e fotografadas com uma máquina digital Nikon Coolpix 4500. A determinação de tamanhos e medição de W_s foi realizada do mesmo modo que o descrito no parágrafo 3.2.1. Na Tabela 3.2 são mostradas as variáveis utilizadas em cada experimento e na Figura 3.6 são mostrados flocos obtidos em água salgada.

Tabela 3.2: Variáveis dos experimentos efetuadas com o floculador Couette.

ω	C	τ	G_m	S	T	CE
rpm	mgl^{-1}	Nm^{-2}	s^{-1}	psu	ºC	$\mu S\ cm^{-1}$
150	100	0.179	200	0.0	25.0	16.0
150	200	0.179	200	0.0	25.1	25.6
150	100	0.179	200	31.4	25.2	47900
150	200	0.179	200	32.2	25.0	49200
150	335	0.179	200	32.2	25.2	49200
75	200	0.090	100	0.0	25.1	25.0
38	200	0.045	50	0.0	25.1	25.0

Foram avaliados os possíveis efeitos de parede presentes nos experimentos. Para tal fim se calculou a aceleração centrífuga máxima para diferentes ω: 75, 150 e 300 rpm com os resultados que são mostrados na Tabela 3.3 As acelerações centrífugas para 75 e 150 rpm estiveram abaixo da aceleração da gravidade g, no entanto, para ω =300 rpm quase triplicaram a g, com o qual não podem descartar-se efeitos importantes de parede. No floculador utilizado por TSAI *et al.* (1987) para as mesmas tensões de cisalhamento, as relações a respeito de g foram de 16%, 63% e 252% respectivamente.

Tabela 3.3: Cálculo de G_m e porcentagem da aceleração da gravidade.

ω rpm	ω rps	ω $rads^{-1}$	centrífuga ms^{-2}	% de g	v_t ms^{-1}	G_m s^{-1}	τ Nm^{-2}
75	1.25	7.854	1.80	18.	0.229	100.	0.090
150	2.50	15.708	7.20	73.	0.459	200.	0.179
300	5.00	31.416	28.82	294.	0.917	400.	0.359

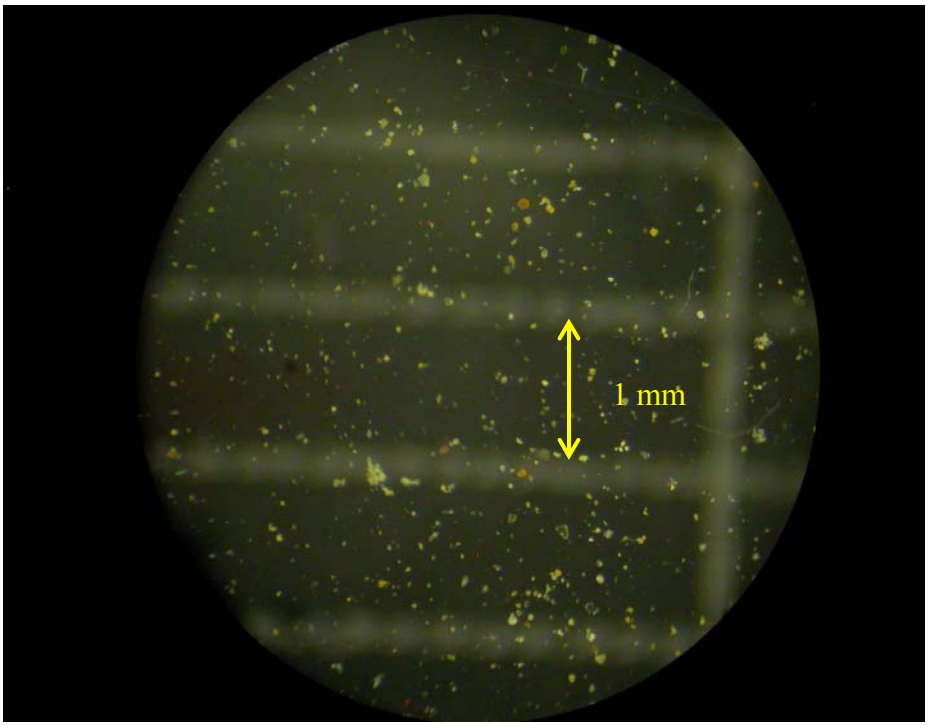


Figura 3.6: Flocos do floculador Couette em água salgada com C= 335 mgl^{-1}.

3.4 Determinação do diâmetro de equilíbrio

Todos os ensaios começaram a partir de uma suspensão dispersa e foram conduzidos até observar tamanhos médios constantes dos flocos. As curvas que ajustam os diâmetros de flocos em função do tempo são mostradas da Figura 3.7 até a Figura 3.12, para ambos floculadores. Os diâmetros de equilíbrio d_e correspondem ao percurso da

curva de ajuste em que os tamanhos se mantêm constantes. Os d_e e os desvios médios $\bar{s}$ para cada concentração são mostrados para o floculador de disco na Tabela 3.4 e a Tabela 3.5. Observa-se que a igualdade de concentrações, para as amostras de água salgada (identificadas com a letra *S* nas figuras), foram obtidas d_e maiores em todos os casos, com relação às amostras de água doce, (identificadas com a letra *D)*. A diferença mínima para d_e foi de 6 % para C=100 mgl^{-1}, não obstante se haja registrado o maior desvio para a amostra de água doce, com o qual a diferença poderia ter sido menor se se houvessem sido determinados mais flocos, tirando de tal modo importância às diferenças de salinidade. A taxa temporal de crescimento dos flocos foi superior para as amostras de água salgada, especialmente para C=100 e 200 mgl^{-1}. Na Figura 3.8 e na Figura 3.9 são mostrados em detalhe os tamanhos medidos para água salgada e doce, respectivamente.

Tabela 3.4. Número de fotos analisadas, de flocos, d_e e desvio médio $\bar{s}$ por cada *C* do disco.

Amostras em água salgada					
C (mgl^{-1})	Nº Fotos	Nº Flocos	d_e (μm)	$\bar{s}$ (μm)	*Te* (s)
100	22	4023	96	52.1	1200
200	22	4233	125	51.5	840
335	20	2678	145	49.2	1620

Amostras em água doce					
C (mgl^{-1})	Nº Fotos	Nº Flocos	d_e (μm)	$\bar{s}$ (μm)	*Te* (s)
100	24	651	90	66.9	1320
200	27	1250	95	63.8	1440
335	18	1087	105	60.3	1320

Para o floculador Couette, os diâmetros de equilíbrio d_e obtidos para água salgada e doce foram apresentados na Figura 3.10. Na Figura 3.11 são mostrados em detalhe os tamanhos medidos e na Figura 3.12 são comparadas as curvas obtidas para a mesma *C* sob diferentes condições. Os tamanhos de equilíbrio dos flocos gerados por

cisalhamento foram marcadamente menores do que obtidos com o disco devido a um efeito limitante das tensões de cisalhamento sobre os flocos. Os d_e maiores corresponderam às C maiores, tanto em água salgada como doce, o qual está de acordo com a teoria da agregação e a resultados encontrados tanto por SERRA e CASAMITJANA (1998) com um floculador Couette, como por MANNING e DYER (1999), STONE e KRISHNAPPAN (2003) em ambos canais anulares. Quanto à tendência inversa obtida por TSAI *et al.* (1987), BURBAN *et al.* (1989), LICK *et al.* (1993), cabe destacar que estes autores mediram os tamanhos de flocos com um aparelho Malvernsize, o qual tende a quebrar os flocos por agitação e portanto a diminuir seus tamanhos quando passa pelo sensor de medição (EISMA *et al.*, 1996). Estaria claro então que a origem das discrepâncias não pode dever-se a diferenças de regime, senão possivelmente a técnicas de laboratório e/ou problemas na medição de tamanhos de flocos.

Tabela 3.5: Número de fotos, de flocos, d_e e desvio médio $\bar{s}$ por cada C do Couette.

Amostras em água salgada						
C (mgl^{-1})	ω (rpm)	Nº Fotos	Nº Flocos	d_e (μm)	$\bar{s}$ (μm)	Te (s)
100	150	27	2181	34.0	18.9	420
200	150	30	534	40.0	23.8	510
335	150	20	1556	44.0	15.4	360
Amostras em água doce						
C (mgl^{-1})	ω (rpm)	Nº Fotos	Nº Flocos	d_e (μm)	$\bar{s}$ (μm)	Te (s)
100	150	15	450	31.5	19.0	420
200	150	18	866	36.3	18.0	660
200	75	21	1267	45.0	16.0	870
200	38	23	1372	46.5	21.9	600

Quando foi reduzido o valor de ω os d_e aumentaram em relação inversa, justamente pela formação de agregados de maior tamanho (Figura 3.11 e Figura 3.12). Isso

aconteceu pois foram menores as tensões cisalhantes e portanto os efeitos de quebra de flocos. Dependendo de qual dos dois fenômenos prevaleça, agregação por colisão ou quebra por tensões, serão obtidos flocos maiores ou menores respectivamente. O parâmetro que dá conta desse processo antagônico é a eficiência de colisão α_{sh}. A ascensão da linha de ajuste para a amostra C= 200 mgl^{-1} a ω =75 rpm deveu-se ao desajuste da correia do motor desde o começo da experimento que originou a diminuição de ω, as conseqüências foram um aumento dos diâmetros dali em diante.

As curvas t vs. d_f se caracterizam por terem um primeiro trecho com um gradiente positivo bem definido para dd_f/dt , e um segundo trecho no qual $dd_f/dt \approx 0$. Para cada amostra se calcularam os tempos de equilíbrio, T_e, que caracterizam o tempo que cada teste demanda para alcançar o tamanho de equilíbrio, e constitui um parâmetro de escala para os experimentos. Calculou-se T_e como o ponto de interseção dos segmentos de reta que prolongam cada percurso. No tramo inicial dos experimentos não foi possível obter a suficiente quantidade de amostras para determinar de forma certa os tempos de equilíbrio, T_e e a taxa de crescimento dos flocos. O critério empregado para calcular a taxa de crescimento foi tomar o diâmetro médio da primeira mostra em cada experimento como referência. No floculador de disco a primeira amostragem foi aos 10 minutos e no floculador Couette aos 5 minutos. Em t=0 se considerou o d_{50} da amostra padrão: 16.7 μm. Em quase todos os casos (a não ser para C=335 mgl^{-1} no disco) se verifica que as amostras em água salgada alcançam mais rapidamente o equilíbrio que para água doce, tanto para um como para outro floculador, podendo quantificar então o efeito da salinidade em quanto à floculação.

A incidência das maiores tensões de cisalhamento em água salgada produziu um T_e menor, seguramente pelo fato de o maior número de colisões por unidade de tempo permitiu alcançar mais rápido o equilíbrio em cada processo. No entanto, em água doce não foram observadas as mesmas relações, provavelmente devido ao baixo número de amostras no período inicial. De outro modo se verificou que para valores iguais de C, T_e aumenta com a diminuição de ω pois são necessárias mais colisões para formar um agregado estável. Os T_e são quase o triplo para as amostras do floculador de disco pois a escala de tempo dos flocos corresponde a G^{-1} enquanto que os do disco se correlacionam com ω^{-1}.

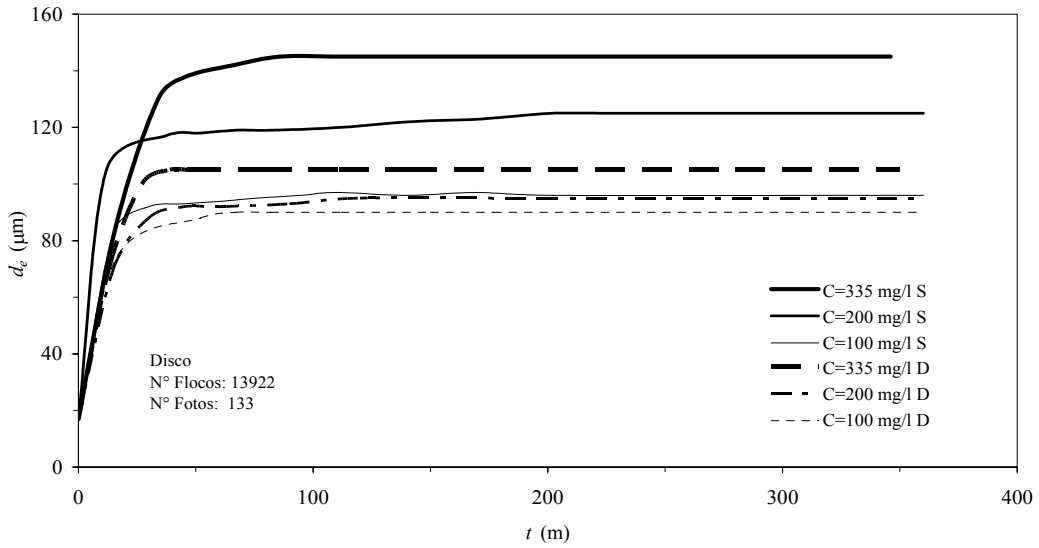


Figura 3.7: Determinação de d_e para água doce e salgada no floculador de disco.

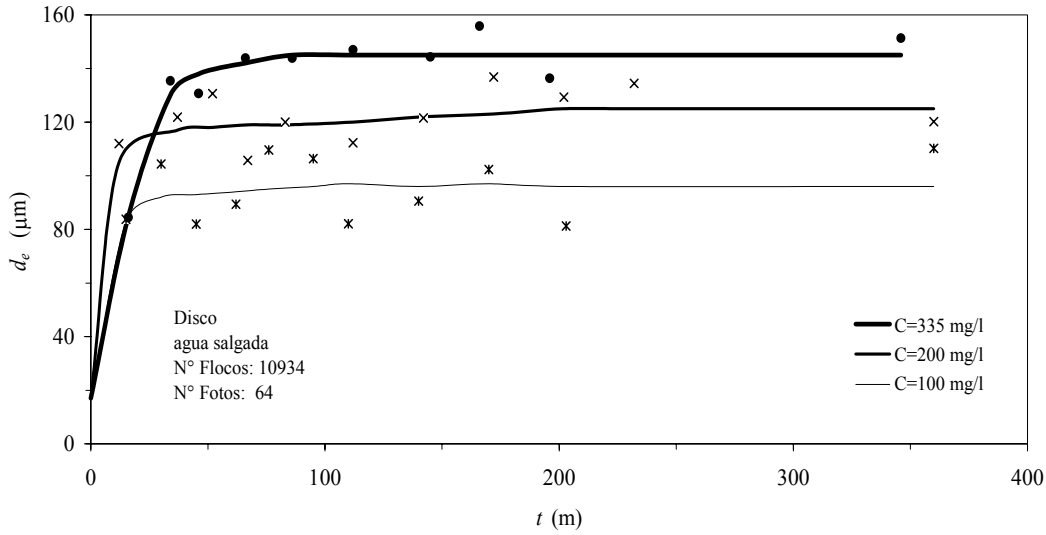


Figura 3.8: Determinação de d_e para água salgada em cada tempo de amostragem no floculador de disco,

• C=335 mgl^{-1}, × C=200 mgl^{-1}, ∗ C=100 mgl^{-1}.

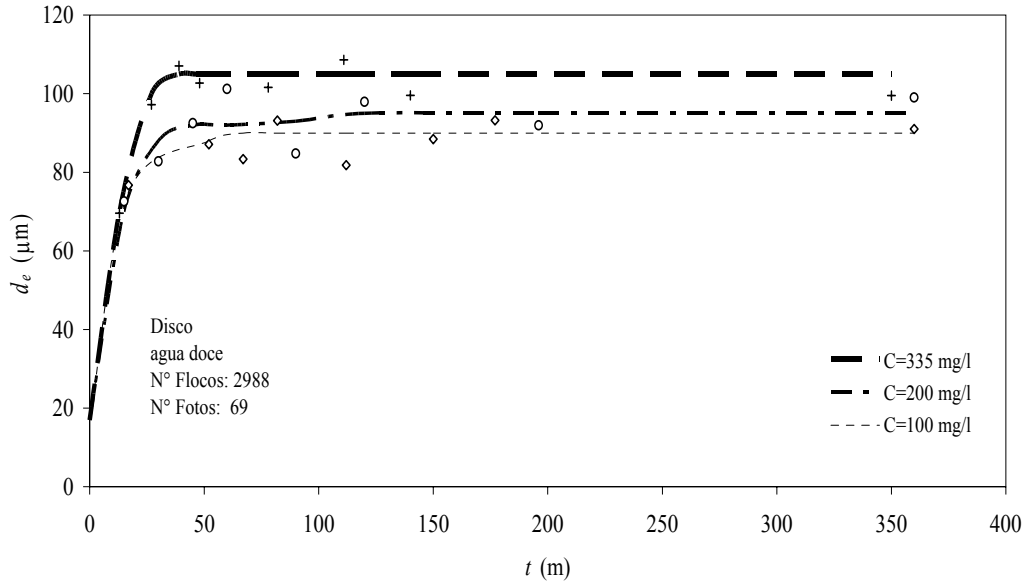


Figura 3.9: Determinação de d_e para água doce em cada tempo de amostragem no floculador de disco, + C=335 mgl^{-1}, o C=200 mgl^{-1}, ◊ C=100 mgl^{-1}.

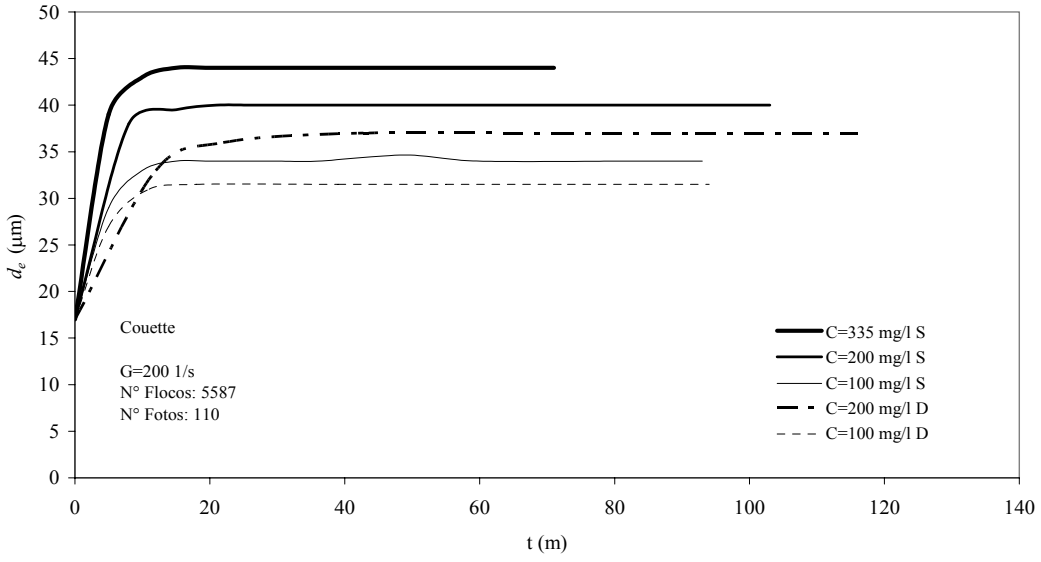


Figura 3.10: Determinação de d_e para água doce e salgada no floculador Couette.

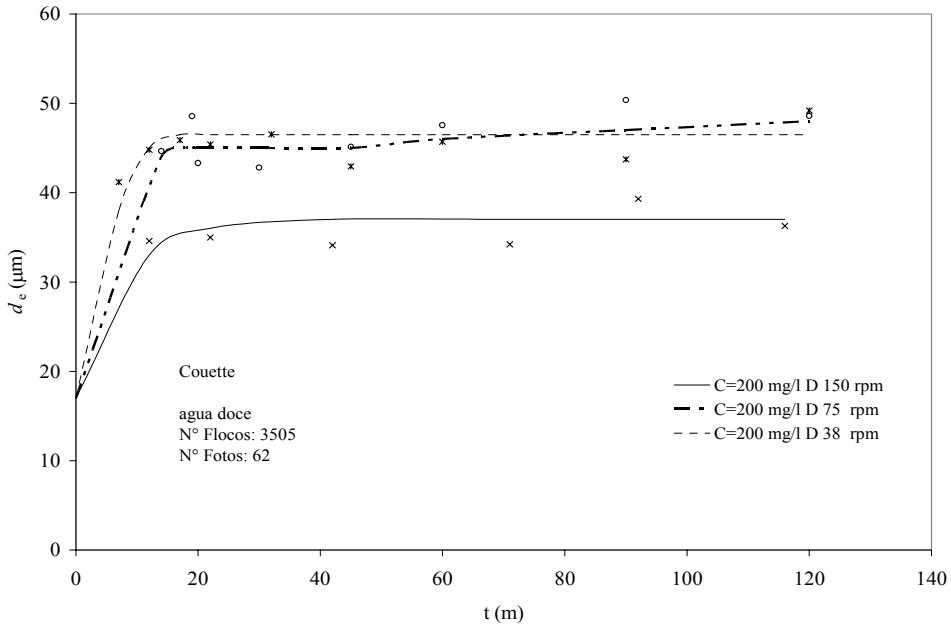


Figura 3.11: Determinação de d_e para água doce, para C=200 mg l^{-1} com ω=38, 75 e 150 rpm, × ω=150 rpm, ∗ ω=75 rpm, o ω=38 rpm.

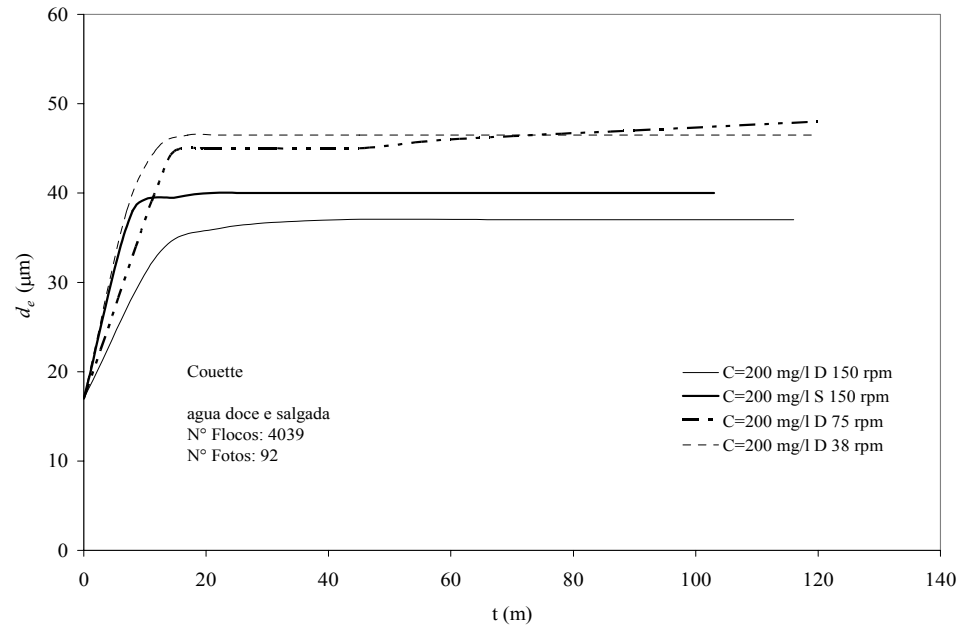


Figura 3.12: Determinação de d_e para água doce e salgada, para C=200 mg l^{-1} com ω=38, 75 e 150 rpm.

3.5 Medição de velocidade de sedimentação e cálculo da massa específica diferencial dos flocos

Na Figura 3.13 foram apresentadas as W_s medidas em função de d_f, e linhas de massa específica diferencial constante, calculadas com a lei de Stokes, equação (3.4). Adverte-se primeiramente que os agregados menores, gerados no floculador Couette, são também os mais lentos e mais densos em médio (estão localizados entre as linhas de massa específica maiores na Figura 3.13).

$$\Delta\rho_f = \frac{18\,\mu W_s}{g\,d_f^2} \tag{3.4}$$

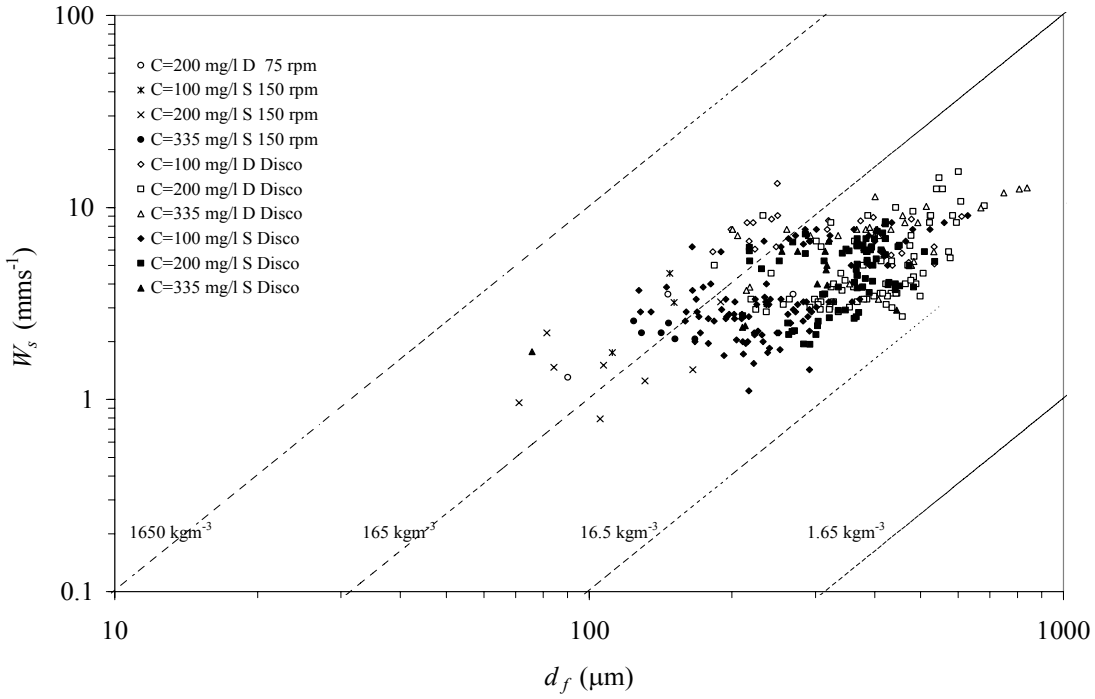


Figura 3.13: W_s medida em laboratório, em função do d_f para os floculadores de disco e Couette. As linhas de traços indicam $\Delta\rho_f$ constante, segundo a lei de Stokes.

Em geral, à medida que aumentam as C crescem os tamanhos e W_s, enquanto diminuem as massas específicas dos flocos. Os agregados gerados com o aparelho Couette a 150 rpm com C=100 mg l^{-1} foram os mais densos e lentos. Para a única amostra do floculador Couette com água doce em que foi possivel medir velocidades de queda, não se observaram diferenças significativas de W_s, com respeito às de água

salgada. Os flocos gerados no disco com água salgada registraram tamanhos e velocidades menores que os de água doce, verificando-se que os maiores, formados com C=200 e 335 mgl^{-1} , foram também os mais velozes, enquanto que os formados em água salgada com C=100 mg l^{-1} foram os mais lentos.

Quase todos os flocos medidos do disco tiveram velocidades no intervalo 1 a 10 mm s^{-1}, observando-se em geral, maiores velocidades para os flocos correspondentes às maiores concentrações e às menores W_s para a amostra de C=100 mgl^{-1} em água salgada. Somente três flocos gerados no Couette superaram o número de Reynolds, $Re=W_s\, d_f\, \upsilon^{-1}$ = 0.50, enquanto que inversamente, quase todos os flocos gerados no disco superaram esse valor de *Re,* (ver a Figura 3.14)*,* tendo que incluir efeitos inerciais não desprezíveis na hora de calcular os coeficientes de arrasto C_D.

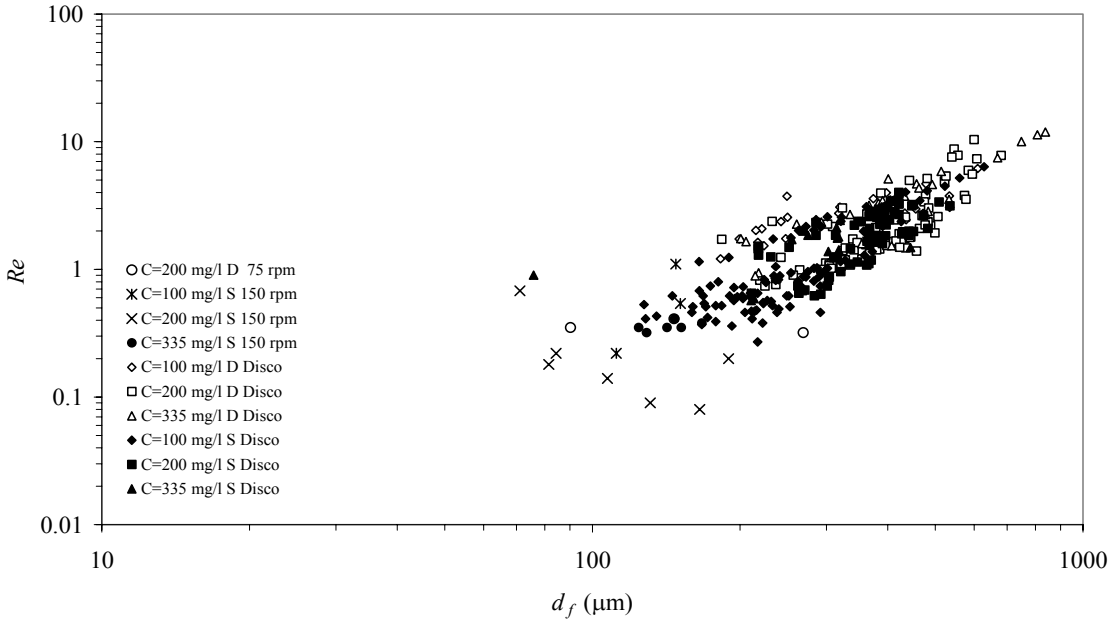


Figura 3.14: Número de *Re* para d_f.

Uma determinação correta do coeficiente é importante para calcular posteriormente a massa específica diferencial dos flocos. Para tal efeito se utilizaram as equações (2.44) e (2.45) (ver parágrafo 2.4) propostas por MASLIYAH e POLIKAR (1980) e o modelo de Brinkman (LEE *et al*., 1996) para a determinação da permeabilidade k. A seqüência de cálculo foi: calculo-se $\Delta\rho_f$ a partir da fórmula de Stokes, em seguida, determinaram-se sucessivamente as variáveis e, k_f, β, Ω, C_D e novamente $\Delta\rho_f$, nessa ordem, até que as diferenças entre dois $\Delta\rho_f$ consecutivos fossem menores do que um erro predeterminado.

Por último calcularam-se as demais variáveis. Na Figura 3.15 s se indica a seqüência de cálculo iterativa das variáveis $\Delta\rho_f$, e, k_f, β, Ω, C_D, em esse ordem, a partir dlãs medições de d_f e W_s, adotando $\Omega \neq 1$.

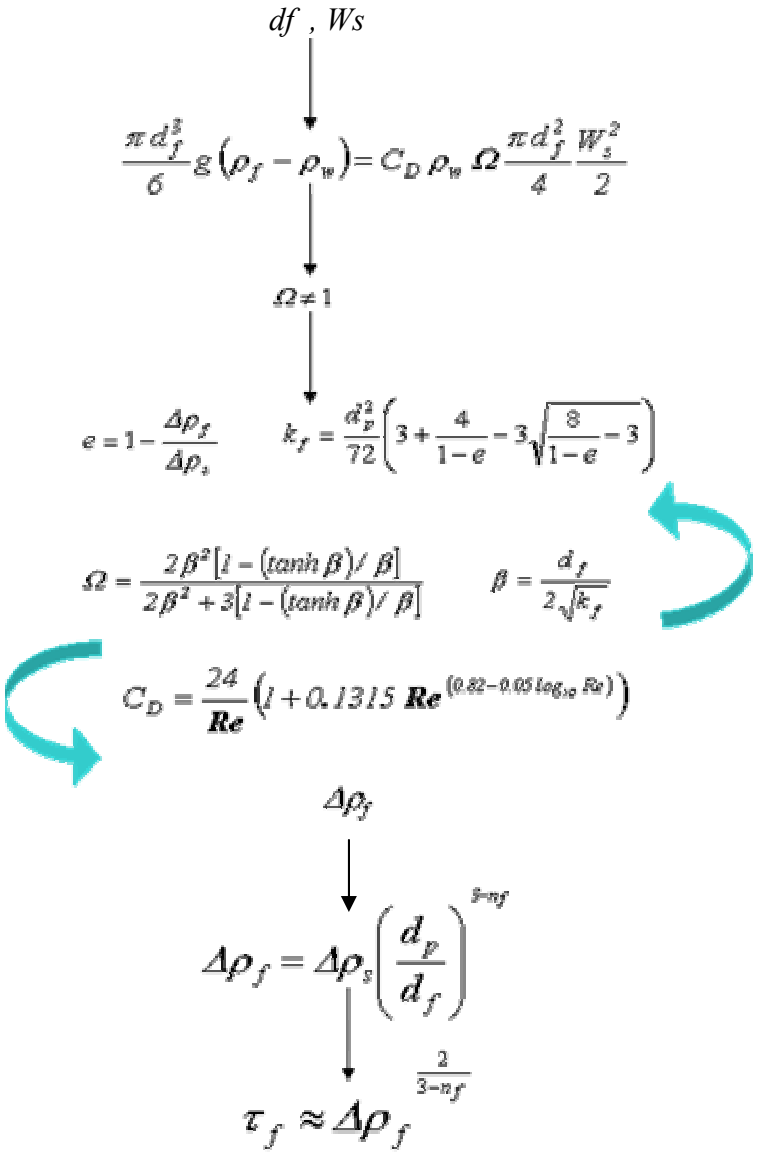


Figura 3.15: Seqüência iterativa para $\Delta\rho_f$, e, k_f, β, Ω, C_D.

Na Figura 3.16 se compararam os resultados obtidos para C_D calculados segundo Stokes e os corrigidos por efeitos inerciais, observando-se importantes diferenças para baixos valores de C_D, correspondentes aos flocos de maior tamanho (e maior W_s, para quem são mais importantes tais efeitos). A partir de C_D =20, as diferenças foram pouco significativas podendo-se aplicar C_D =24 Re^{-1}. As diferenças conseguidas para $\Delta\rho_f$ com

o esquema iterativo é de aproximadamente entre 14 e 41 % para as amostras do floculador Couette e entre 1 e 59 % para as amostras do floculador de disco.

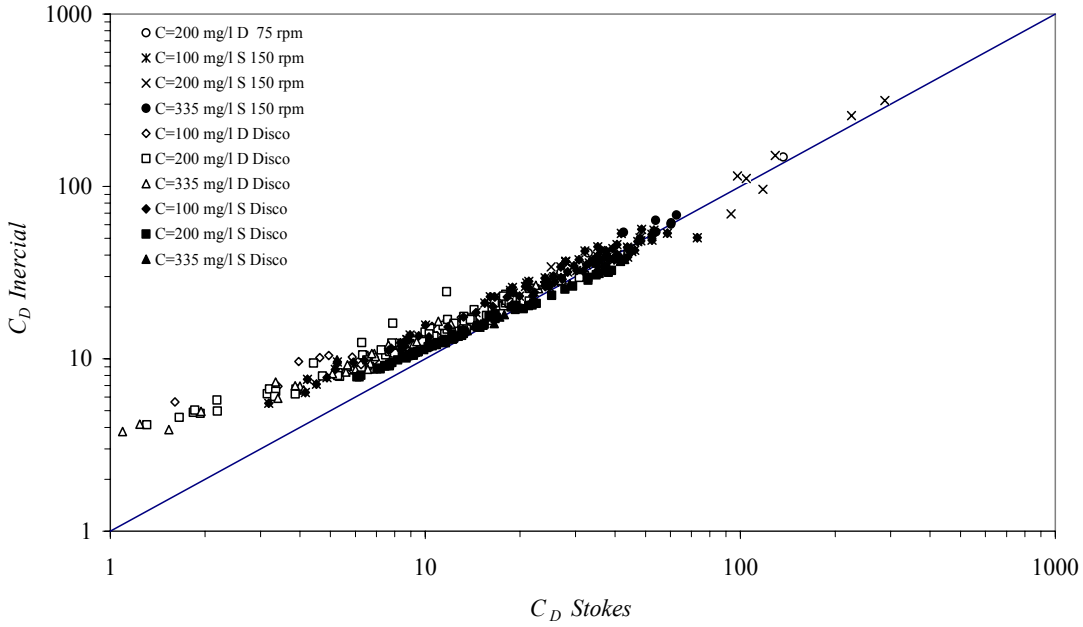


Figura 3.16: Relação C_D calculados com a fórmula de Stokes e o modelo matemático de MASLIYAH e POLIKAR (1980).

Na Figura 3.17 foram apresentadas as massas específicas de todos os flocos em função do d_f. Quanto aos agregados do floculador de disco, verificou-se que os mais densos foram gerados com as menores concentrações, C=100 mg l^{-1}, tanto para água salgada como doce, o qual se deve a uma menor taxa de agregação por contar com menos colisões, enquanto que seus tamanhos foram os menores. Os menos densos foram os gerados com C=200 mg l^{-1} e C=335 mg l^{-1} em água doce.

Pelo fato de que a massa específica diferencial está controlada pelas concentrações e as tensões de cisalhamento, calculou-se uma relação entre estas variáveis, que foram apresentadas na Figura 3.18. A qualidade do ajuste para as variáveis médias foi suficiente para estabelecer uma relação de utilidade para considerar massa específica variável de flocos no modelo Lagrangeano aplicado ao estuário do Paraíba do Sul. Deve-se advertir que a equação de ajuste só é válida para o intervalo de concentrações e tensões com a qual foi obtida: 0.100 a 0.335 mgl^{-1} e 0 a 0.179 Nm^{-2} respectivamente. Essas concentrações e tensões são próprias dos ambientes fluviais e de estuários, e o

intervalo de massa específica suficiente para cobrir a intervalo $100<\Delta\rho_f < 230$ kgm^{-3}. No entanto, as principais limitações consistem em: a) que a mínima massa específica dos flocos seria de 100 kgm^{-3}, e mesmo no trecho de estuário poderiam se desenvolver flocos de menor massa específica; b) o intervalo de tensões de cisalhamento é limitado e com desvios de até 150 kgm^{-3} para C=200 gl^{-1} e de 89 kgm^{-3} para C=100 gl^{-1}, como foram apresentados na figura, e c) as tensões de cisalhamento nulas do disco podem distorcer o ajuste. Poderia haver tentado outros ajustes, similares aos feitos por LICK *et al*. (1993) e MANNING e DYER (1999), FENNESSY *et al.* (1994), em função dos tamanhos dos flocos, no entanto, os escassos W_s medidos no Couette teriam posto em dúvida a qualidade do ajuste.

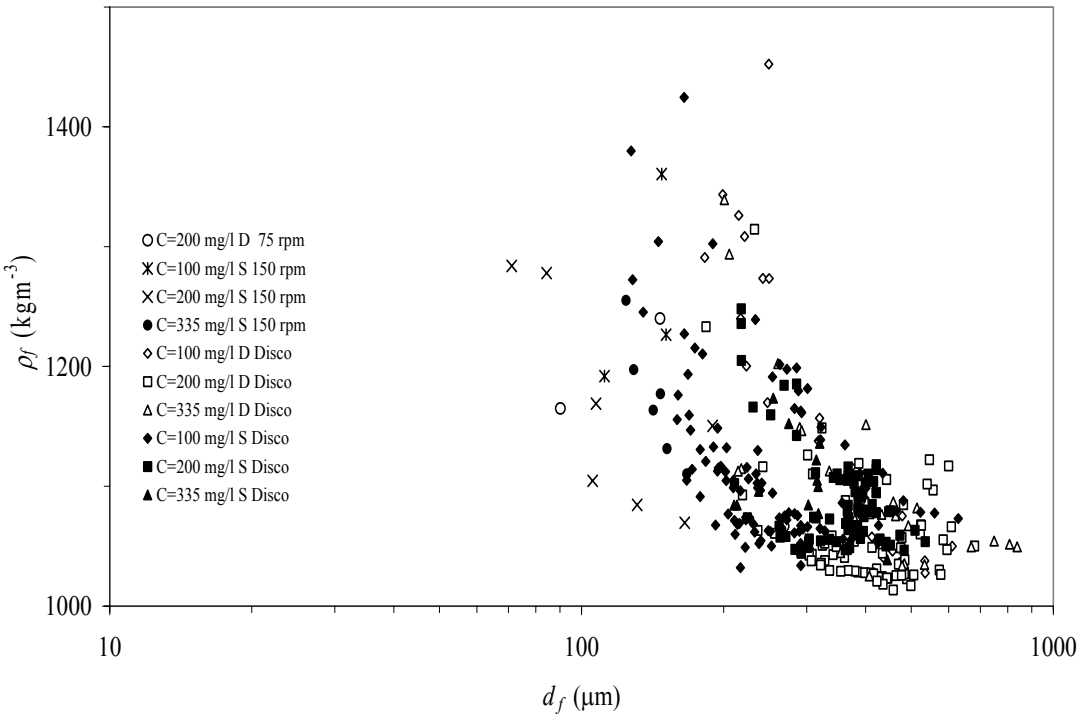


Figura 3.17: Variação da ρ_f segundo d_f, para os floculadores de disco e Couette.

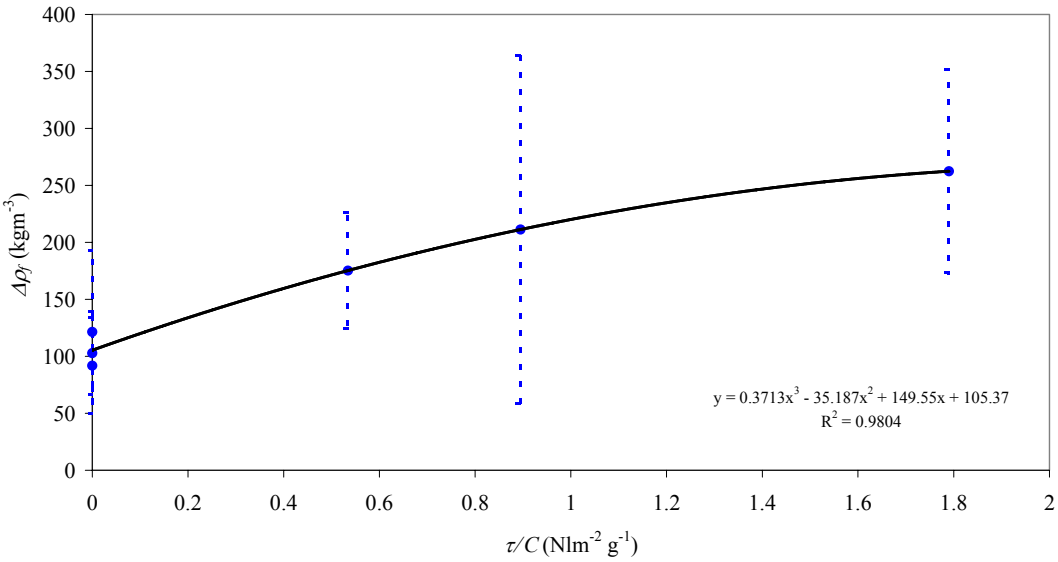


Figura 3.18: Relação entre $\Delta\rho_f$ e o produto τ/C, com base nos experimentos de laboratório (com os desvios em linhas verticais).

Em geral se adverte que os flocos gerados em água salgada têm um tamanho médio menor do que os de água doce, ainda assim esta diferença não se traduz em massas específicas significativamente diferentes. Mas se detectaram diferenças na porosidade, permeabilidade e fundamentalmente nos maiores coeficientes de arrasto calculados, que são mostrados na Tabela 3.6. Não foi possível verificar em laboratório se ocorreram escoamentos internos nos flocos devido a suas condições de permeabilidade como foi medido por TSOU *et al.* (2003) utilizando bolhas de hidrogênio, mas por outro lado se pode afirmar que os diferentes C_D calculados têm uma incidência direta sobre W_s e podem explicar as menores velocidades de queda registradas para as amostras em água salgada.

A diferença fundamental entre ambos grupos de amostras foi a água utilizada no floculador de disco, pois os sedimentos foram os mesmos, da mesma forma que as operações de laboratório e as condições ambientais. A água salgada foi obtida no estuário do Paraíba do Sul e armazenada no laboratório durante dois meses, enquanto a doce foi gerada em um destilador. De modo que, a presença de microorganismos em forma de filamentos, que foram observados com o microscópio repetidas vezes, na água salgada, podem ter tido um papel importante na gênesis dos flocos, impedindo-lhes de

desenvolver um tamanho maior. Enquanto aos flocos gerados no aparelho Couette, destacam-se pela sua massa específica elevada, em particular para C=100 mgl^{-1}. Uma síntese das variáveis médias é mostrada na Tabela 3.7 e na Tabela 3.8, onde a massa específica da água foi calculada com uma equação de estado em função da temperatura.

Tabela 3.6: Porosidade e permeabilidade para os flocos gerados no disco.

amostra	Porosidade	Permeabilidade (m^2)	C_D
S100	0.939	2.576E-10	29.3
S200	0.967	3.944E-10	12.8
S335	0.950	2.621E-10	18.3
D100	0.903	1.896E-10	11.4
D200	0.962	4.192E-10	14.2
D335	0.938	2.169E-10	10.5

Tabela 3.7: Variáveis médias dos flocos gerados no Couette para cada C.

amostra	C	d_f	W_s	$\Delta\rho_f$	Nº de flocos
	mgl^{-1}	μm	mms^{-1}	kgm^{-3}	
S100	100	137	3.20	262.5	3
S200	200	117	1.60	211.3	8
S335	335	143	2.30	175.3	6
D200	200	169	2.80	160.0	3

Tabela 3.8: Variáveis médias dos flocos gerados no disco para cada *C*.

amostra	C	d_f	W_s	$\Delta\rho_f$	Nº de flocos
	mgl^{-1}	μm	mms^{-1}	kgm^{-3}	
S100	100	259.	3.81	121.4	99
S200	200	361.	4.88	91.9	77
S335	335	316.	4.74	102.9	14
D100	100	355.	7.27	159.7	25
D200	200	407.	5.44	61.9	73
D335	335	427.	7.61	102.5	31

3.6 Cálculo da eficiência de colisão na agregação por tensões de cisalhamento

A taxa temporal de mudança da concentração em número de partículas *n*, quando a floculação é devida às tensões de cisalhamento adota como hipótese que todas as colisões têm êxito, ou o que é o mesmo, todas concluem em uma nova agregação, e portanto a eficiência é unitária. Uma forma de quantificar o fato de que nem todas as colisões resultam em agregação é através da inclusão da eficiência de colisão, já incluída no modelo de FARLEY e MOREL nos parâmetros α_{ds} e α_{sh} para os mecanismos de sedimentação diferencial e cisalhamento, respectivamente, cujo valor está no intervalo (0,1).

Considerando trabalhos prévios (EDZWALD *et al.*, 1974; GIBBS, 1983) desenvolvidos para um floculador tipo Couette e de paleta, onde a eficiência de colisão foi determinada a partir da expressão de Smoluchowski:

$$\frac{dn}{dt} = \frac{-4\alpha_{sh}\phi G n}{\pi} \tag{3.5}$$

onde α_{sh} representa a eficiência de colisões devido à ação das tensões, também chamada fator de estabilidade (EDZWALD *et al.*, 1974), ϕ é a concentração em volume das partículas coloidais por unidade de volume da suspensão. Este modelo matemático tem

a capacidade de descrever o estado inicial até que um determinado equilíbrio seja alcançado (LOGAN e KILPS, 1995), em *t=Te*.

A integração da equação (3.5) produz, supondo-se que ϕ e *G* sejam constantes:

$$ln\frac{n}{n_0} = \frac{-4\alpha_{sh}\,\phi\,G}{\pi}t \tag{3.6}$$

ϕ se calcula com a fórmula (IVES e BHOLE, 1977):

$$\phi = \frac{C}{\rho_s}\frac{(\rho_s - \rho_w)}{(\rho_f - \rho_w)} \tag{3.7}$$

Se expressa *n* em função de *C,* com d_p o diâmetro da partícula primária suposta esférica e n_0 a concentração inicial:

$$C = \frac{n_0\left(\frac{\pi}{6}\rho_s\, d_p^3\right)}{V} \tag{3.8}$$

Supõe-se que d_p é uma medida representativa da distribuição granulométrica inicial. Se em *t=Te* os processos de agregação de flocos estão balanceados com os de desagregação, o número total de flocos não muda significativamente. E se além disso se cumpre que todos os sedimentos estão floculados, com um diâmetro representativo d_f dos agregados (supostos esféricos), então:

$$C = \frac{n\left(\frac{\pi}{6}\rho_f\, d_f^3\right)}{V} \tag{3.9}$$

$$\frac{n}{n_0} = \frac{\rho_s}{\rho_f}\left(\frac{d_p}{d_f}\right)^3 \tag{3.10}$$

Logo, o coeficiente de eficiência de colisão, com C e ρ_s em (gl^{-1}), tem como resultado:

$$\alpha_{sh} = -\frac{\pi \rho_s}{4\ G\ Te\ C} \frac{\Delta\rho_f}{\Delta\rho_s} ln\left[\frac{\rho_s}{\rho_f}\left(\frac{d_p}{d_f}\right)^3\right] \tag{3.11}$$

restringida, em principio, a $\rho_f > \rho_s (d_p/d_f)^3$.

De acordo com a informação encontrada na literatura sobre os valores medidos de α_{sh}, EDZWALD *et al*. (1974) calcularam em laboratório $0.018<\alpha_{sh}<0.148$ com amostras do rio Pamlico em diferentes verticais do estuário; GIBBS (1983) trabalhou com floculadores Couette e um reator de paleta com amostras dos rios Amazonas (α_{sh}=0.69*)*, Yukón (α_{sh}=0.23*)* e Delaware (α_{sh}=0.077). Demonstrou que o efeito de recobrimento dos flocos com matéria orgânica produzia uma diminuição de α_{sh} para iguais condições de salinidade. LOGAN e KILPS (1995) determinaram $0.0023<\alpha_{sh}<0.24$ com um floculador a paleta. MCANALLY e MEHTA (2001) propuseram uma fórmula baseada em diferentes parâmetros: tamanhos, salinidade, temperatura, capacidade de intercâmbio de cátions, tensões de cisalhamento, velocidades e massas específicas. O parâmetro estava no intervalo $0.005<\alpha_{sh}<0.69$. Ainda que a fórmula inclua todos os fatores que intervêm, é de difícil aplicação em casos práticos.

Os tempos de equilíbrio, *Te,* se obtiveram dos testes de laboratório, entre o começo dos experimentos e o tempo em que se alcança o equilíbrio (ver Figura 3.7 e Figura 3.12). Os resultados (Figura 3.18) mostram uma correlação inversa da eficiência de colisão com as C para as três amostras trabalhadas em água salgada a ω=150 rpm. Quando C aumenta, crescem proporcionalmente a quantidade de partículas primárias por unidade de volume e por isto cresce também o número de colisões e d_e. No entanto, não o fazem com a mesma eficiência, pois também aumentam as tensões capazes de quebrar os flocos. O efeito resultante é, em médio, uma menor eficiência de colisão, resultados coincidentes aos obtidos por NEUMANN (2004). Para o caso de igualdade

de concentrações (C=200 mgl^{-1}) e diferentes ω, ocorrem menos colisões por tensões de cisalhamento com a velocidade angular menor (ω=75 rpm), o que limita o crescimento dos flocos. Simultaneamente, a ruptura de flocos por tensões ocorre a uma taxa menor obtendo-se flocos maiores, o que implica maior eficiência de colisão.

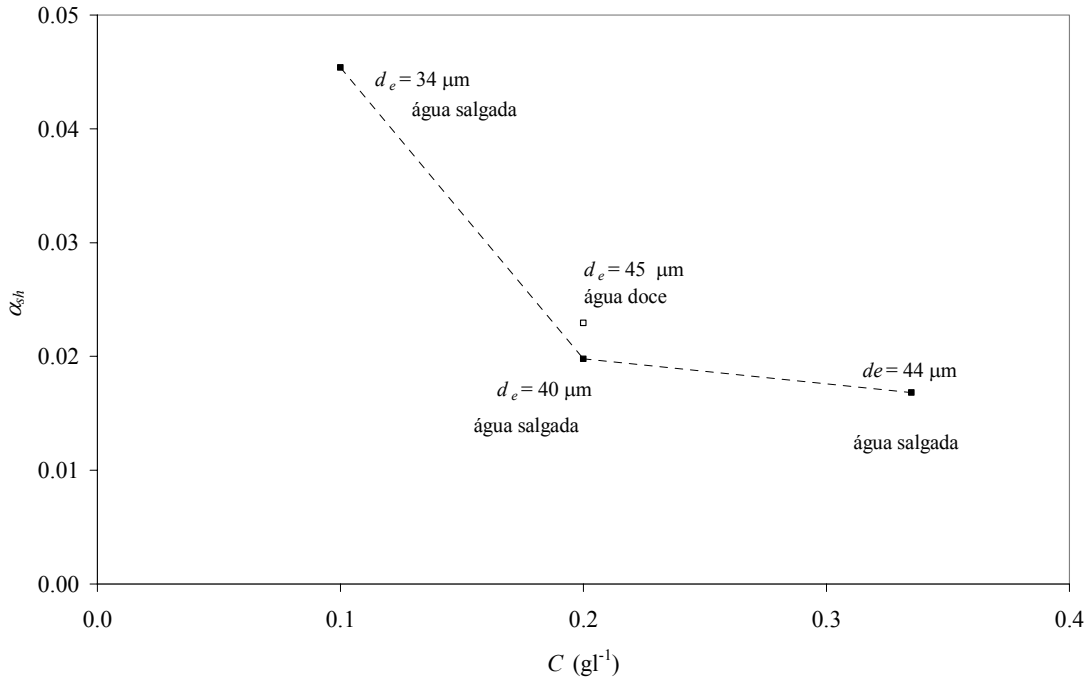


Figura 3.19: Eficiência de colisão calculada.

Deve ter-se em conta que as hipóteses formuladas para calcular α_{sh} se cumprem parcialmente, pois não se pode afirmar que: toda a suspensão se encontre floculada para T_e, a massa específica dos flocos seja constante e que o desvio dos diâmetros d_e e d_p seja o suficientemente pequeno para assegurar erros pouco significativos. Em tal sentido, o valor para α_{sh} calculado é uma média para todo o processo desde o inicio até T_e.

3.7 Análise do controle das tensões de cisalhamento e das concentrações sobre o tamanho dos flocos

No floculador Couette com escoamento laminar, procurou-se representar condições semelhantes às que ocorrem com os flocos nos vórtices do escoamento turbulento num rio ou estuário. No Couette os flocos não deveriam desenvolver-se além de um tamanho comparável ao da microescala de Kolmogorov. Por sua vez, nos experimentos com o

floculador Couette, o tamanho maior de vórtice deveria ser menor que a separação de 2 mm entre os dois cilindros, de modo tal que a cinética dos flocos se desenvolva inteiramente nos vórtices.

Na Figura 3.20 se comparam os diâmetros de equilíbrio da amostra, d_e e a escala de Kolmogorov, η, sendo que todos os diâmetros de estabilização são menores do que a microescala correspondente

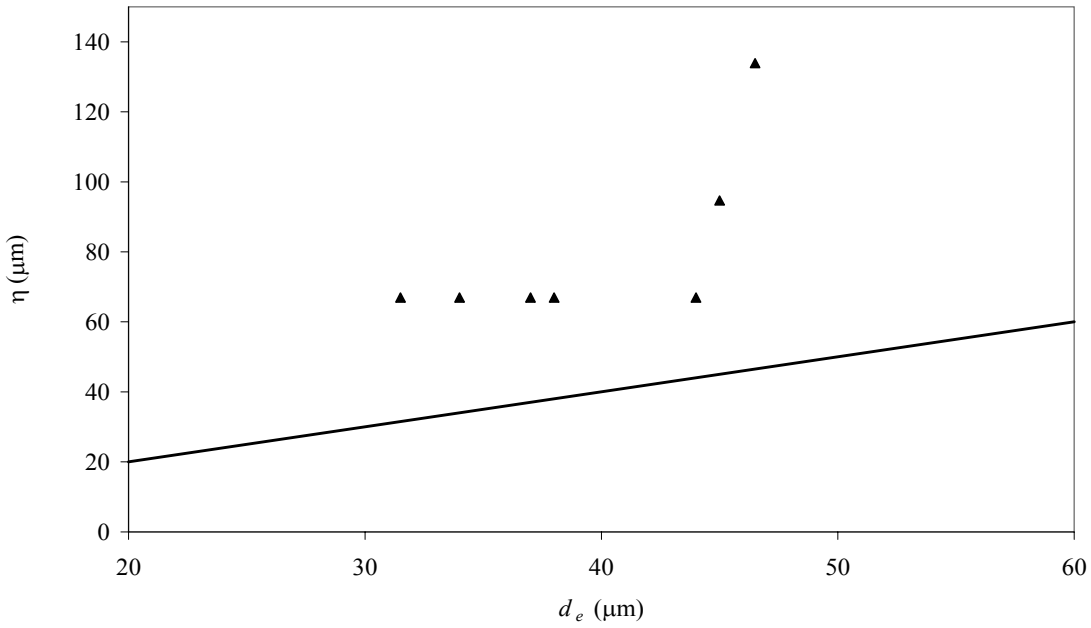


Figura 3.20: Relação entre d_e e η.

Com relação aos diâmetros máximos, definidos como o valor médio do 10% superior dos tamanhos medidos, d_{fmax}, observa-se na Figura 3.20 que os d_{fmax} estão em geral por baixo de η, exceto em dois casos (as amostras S100 e S200 a ω=150 rpm) que o superam apenas em 10 e 4 % respectivamente, em relação a η=67 μm. Estes resultados concordam qualitativamente com os obtidos num estudo experimental e de simulação hidrodinâmica em um floculador Couette, no qual se estudou a distribuição da microescala η e da taxa de dissipação da energia cinética ε entre as paredes do floculador (COUFORT, BOUYERT e LINÉ, 2005).

Pelo fato de que a tensão de cisalhamento controla o tamanho da microescala, e juntamente a C controlarem o diâmetro de estabilização, deveriam ser correlacionadas $d_f=f(C,\tau)$. Na Figura 3.22 se mostra a relação polinómica obtida, coerente com os

supostos adotados e útil para futuros experimentos, a fim de prever os resultados para d_e, segundo as condições de operação do floculador.

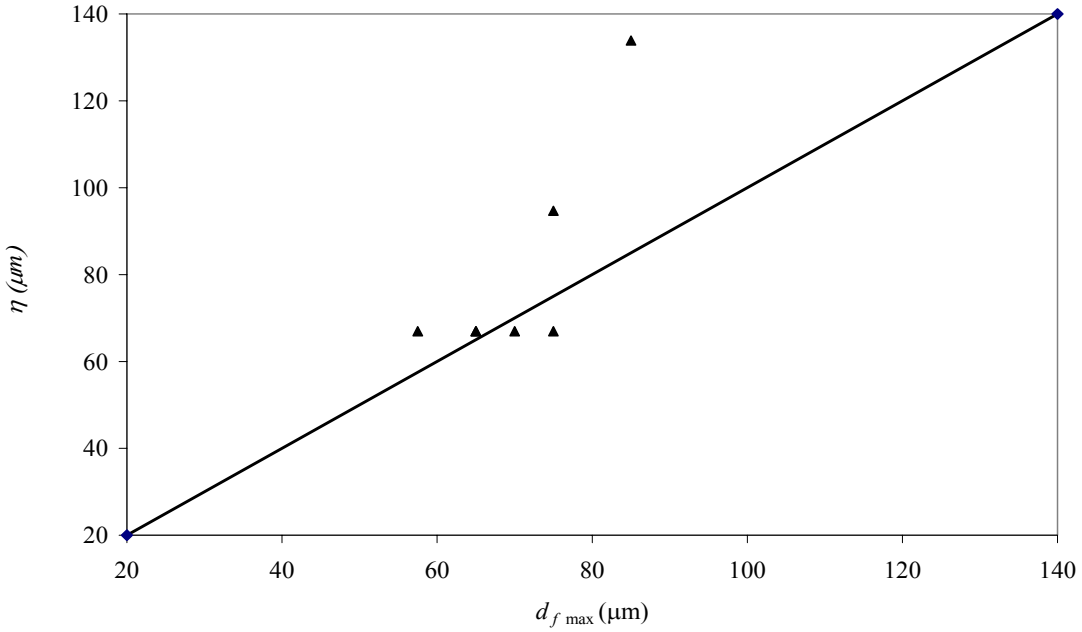


Figura 3.21: Relação entre $d_{f\,max}$ e η.

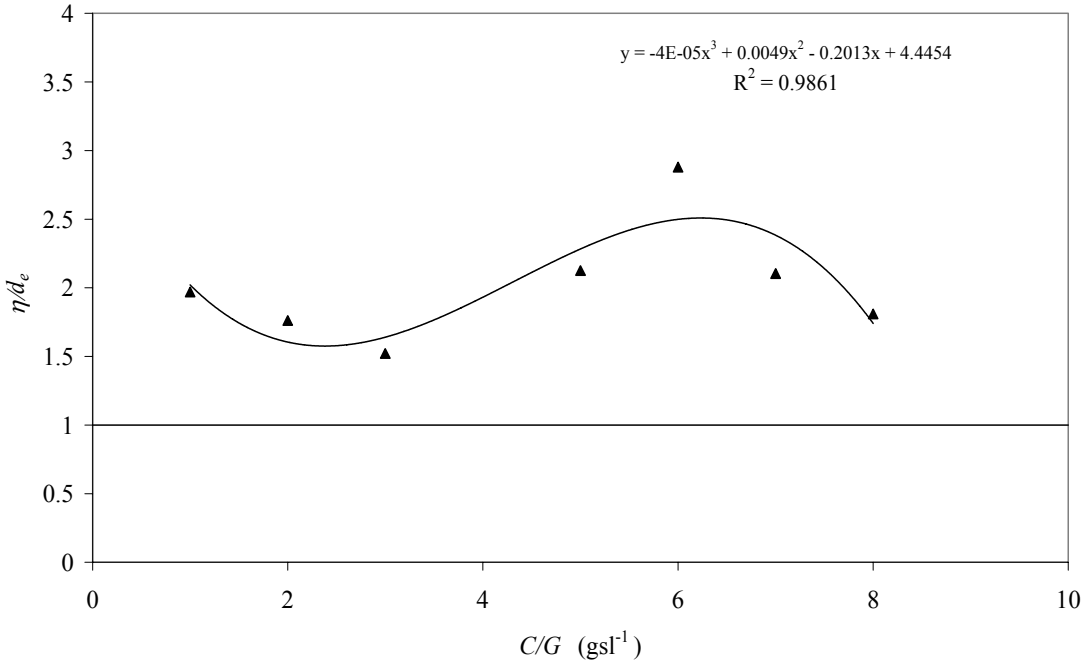


Figura 3.22: Correlação entre o produto C/G e η/d_e.

3.8 Determinação da tensão resistente dos flocos

O cálculo da tensão resistente dos flocos foi realizada a partir da equação (2.48): $\tau_f = \Delta\rho_f^{2/(3-n_f)}$, proposta por KRANENBURG (1994). Para isto foram utilizadas as massas específicas diferenciais anteriormente calculadas (parágrafo 3.5) e as dimensões fractais dos flocos (n_f) calculadas a partir da equação (2.49): $\Delta\rho_f = \Delta\rho_s\left(d_p/d_f\right)^{(3-n_f)}$. Os valores de n_f obtidos para o floculador Couette e de disco são mostradas nas Figura 3.23 e na Figura 3.24, respectivamente.

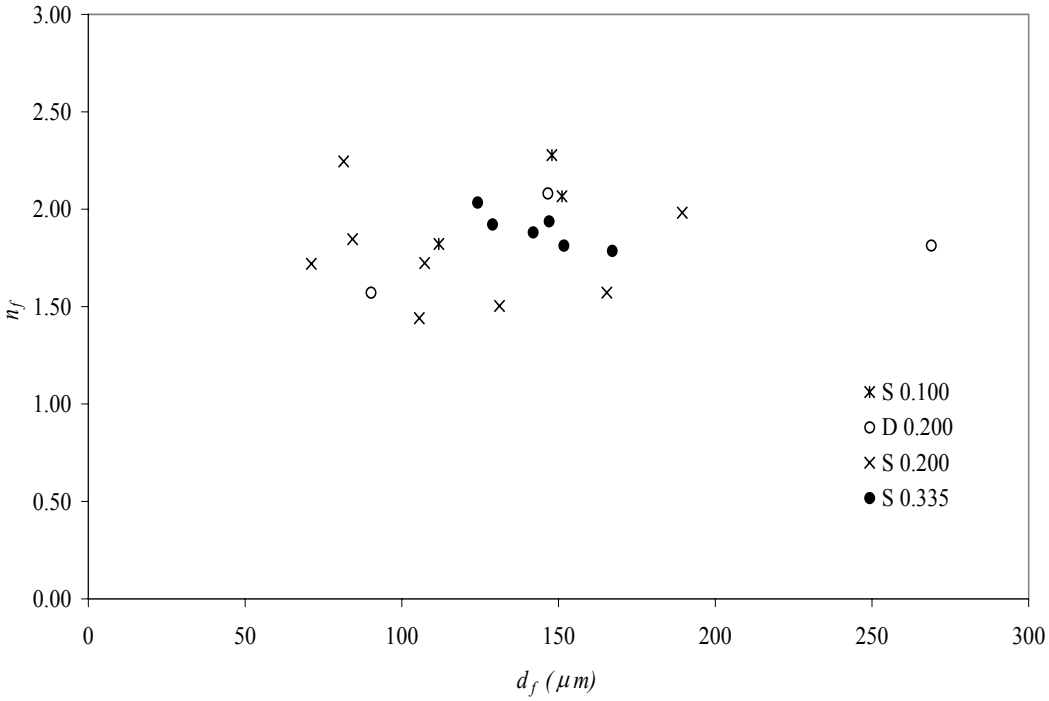


Figura 3.23: Dimensão fractal segundo d_f, para agregados formados no floculador Couette, para diferentes *C*.

Foram obtidas médias de n_f para cada amostra, com as quais se calcularam as tensões resistentes. Para isso se utilizou a equação (2.48), com os resultados que são mostradas na Figura 3.25, na qual se pode ver que no intervalo $2.0 < n_f < 2.3$ se encontram contidas todas as amostras. A maior tensão de cisalhamento correspondeu à amostra S100 (amostra de água salgada com C=0.100 gl^{-1}) do floculador Couette, enquanto que para as outras três amostras do Couette se obtiveram tensões resistentes da mesma ordem que

para as amostras do disco, o qual é contraditório por sua maior massa específica. A explicação está no valor da dimensão fractal obtida para o escasso número de flocos observados. Quando esse valor foi mudado para lograr um ajuste se obtiveram tensões mais de acordo com a realidade, (ver Figura 3.27).

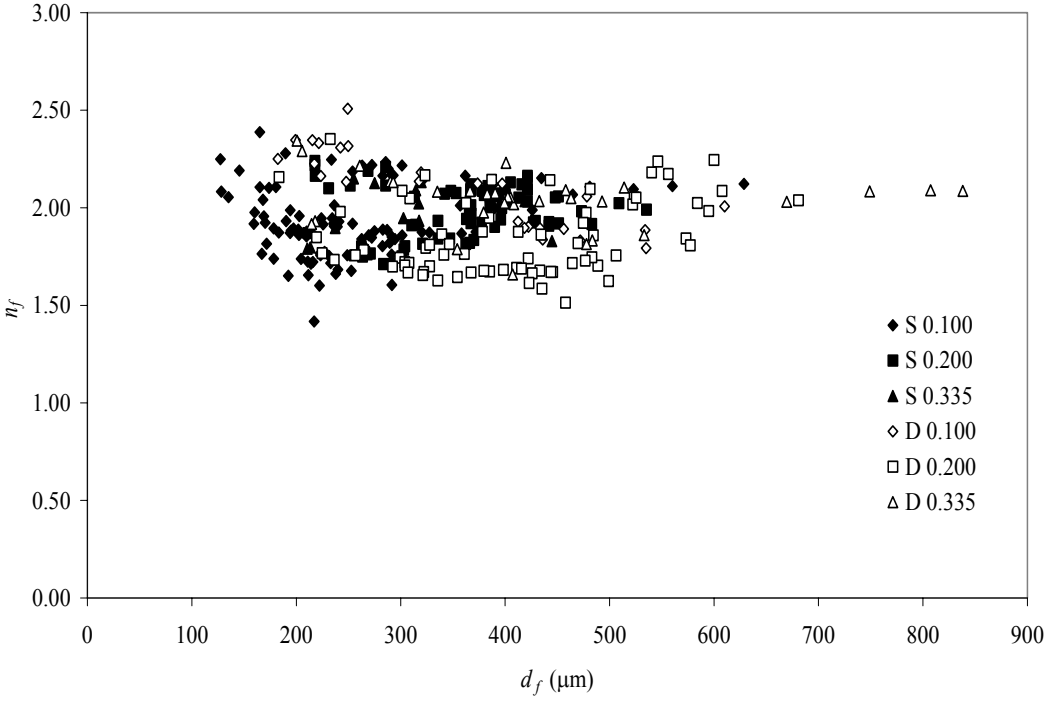


Figura 3.24: Dimensão fractal segundo d_f, para agregados formados no floculador de disco , para diferentes C.

As maiores n_f calculadas correspondem, em geral, às amostras do floculador de disco (Tabela 3.9 e Tabela 3.10). De acordo com os dados do tabela nem parece existir uma relação clara entre n_f e C nem entre n_f e ρ_f. Para as amostras em água salgada se mediram 190 flocos com um intervalo de variação: $1.936 < n_f < 1.986$, enquanto que para as amostras em água doce, com 129 flocos medidos o intervalo foi $1.846 < n_f < 2.097$. Considerados na média, ambos grupos não parecem mostrar diferenças importantes para n_f, como tampouco haviam mostrado antes para a massa específica. Em caso de estender-se o procedimento a todo o universo de flocos medidos no tubo de sedimentação obtém-se a Figura 3.26, na qual se adverte que a maioria dos flocos (90%) se encontram contidos em um intervalo fractal entre 1.90 e 2.45. Alguns flocos ficaram fora desse intervalo, com tensões de cisalhamento que não possuem consistência física.

Tabela 3.9: n_f, ρ_f e τ_f médios para os flocos gerados no Couette.

amostra	C (mgl^{-1})	Nº Flocos	η_f	desvio	ρ_f (kgm^{-3})	τ_f (Nm^{-2})
S100	100	3	2.055	0.228	1259.6	0.492
S200	200	8	1.754	0.267	1208.5	0.295
S335	335	6	1.895	0.090	1172.5	0.190
D200	200	3	1.822	0.255	1162.2	0.175

Tabela 3.10: n_f, ρ_f e τ_f médios para os flocos gerados no disco.

amostra	C (mgl^{-1})	Nº Flocos	η_f	desvio	ρ_f (kgm^{-3})	τ_f (Nm^{-2})
S100	100	99	1.936	0.183	1118.6	0.080
S200	200	77	1.987	0.130	1074.6	0.028
S335	335	14	1.986	0.132	1105.0	0.066
D100	100	25	2.097	0.201	1156.9	0.153
D200	200	73	1.846	0.192	1059.1	0.016
D335	335	31	2.039	0.145	1099.7	0.054

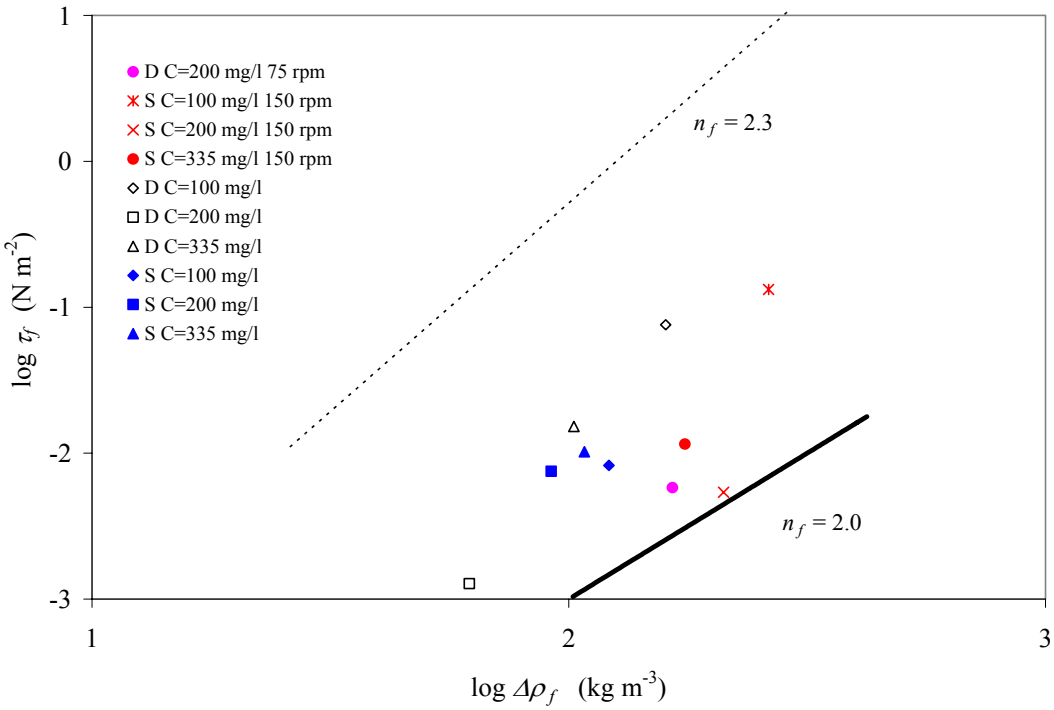


Figura 3.25: τ_f médio para cada amostra e intervalo de dimensões fractais.

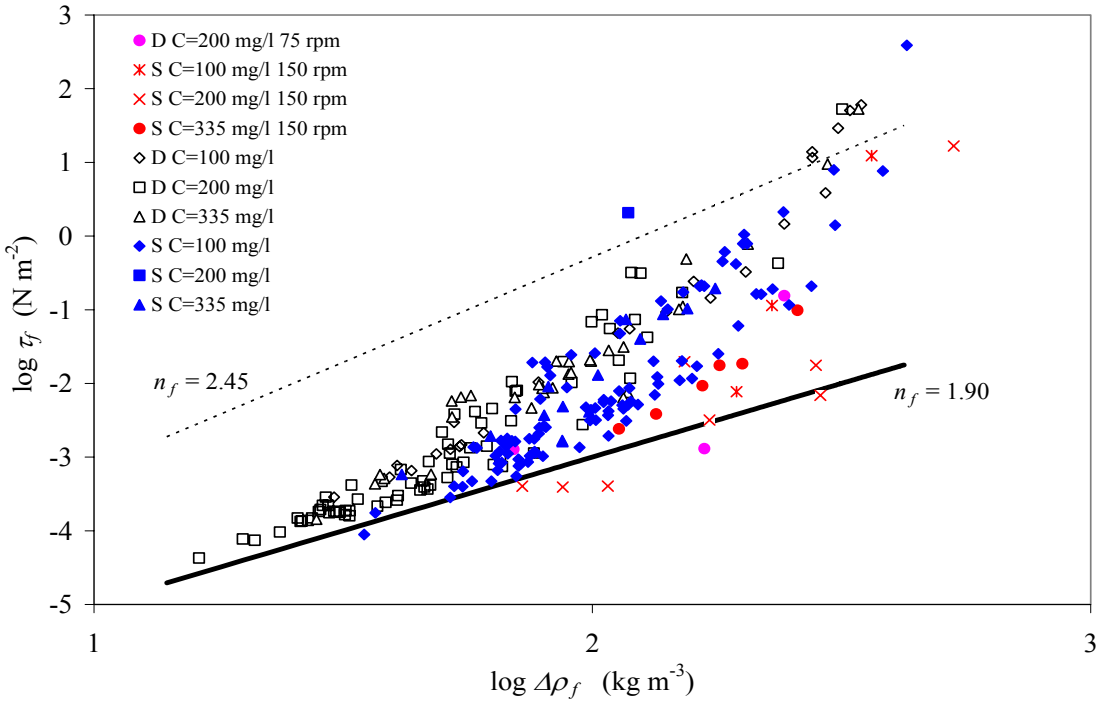


Figura 3.26: τ_f para cada floco e intervalo de dimensões fractais.

Com a finalidade de obter informação para o modelo de transporte de sedimentos foi gerada uma relação entre a massa específica dos flocos e as tensões resistentes, a partir do ajuste apresentado na Figura 3.27. Adotou-se um valor médio n_f=*2.15,* por simplicidade e um coeficiente de proporcionalidade de 10^{-6}, resultante dos dados de laboratório para o ajuste da equação (2.48). O coeficiente de proporcionalidade encontra-se dentro do intervalo sugerido por MCANALLY e MEHTA (2002). Na parte superior da curva estão os registros correspondentes às amostras do floculador Couette, começando pela de maior tensão de cisalhamento, S100, depois S200, S335 e D200. A continuação, na parte inferior da curva se alinham as amostras do disco, desde a amostra S100, como era esperável e ao final as S200 e D200. A equação de ajuste é:

$$\tau_f = 9.1910^{-6}\,\rho_f^2 - 0.019\,\rho_f + 9.8157 \qquad (3.12)$$

Em caso de extrapolar-se até ρ_f =1010 kgm^{-3} se obtém τ_f = 0.0004 N m^{-2}, demonstrando de tal modo sua validez em um intervalo o suficientemente amplo, como para ser utilizado no modelo numérico Lagrangeano.

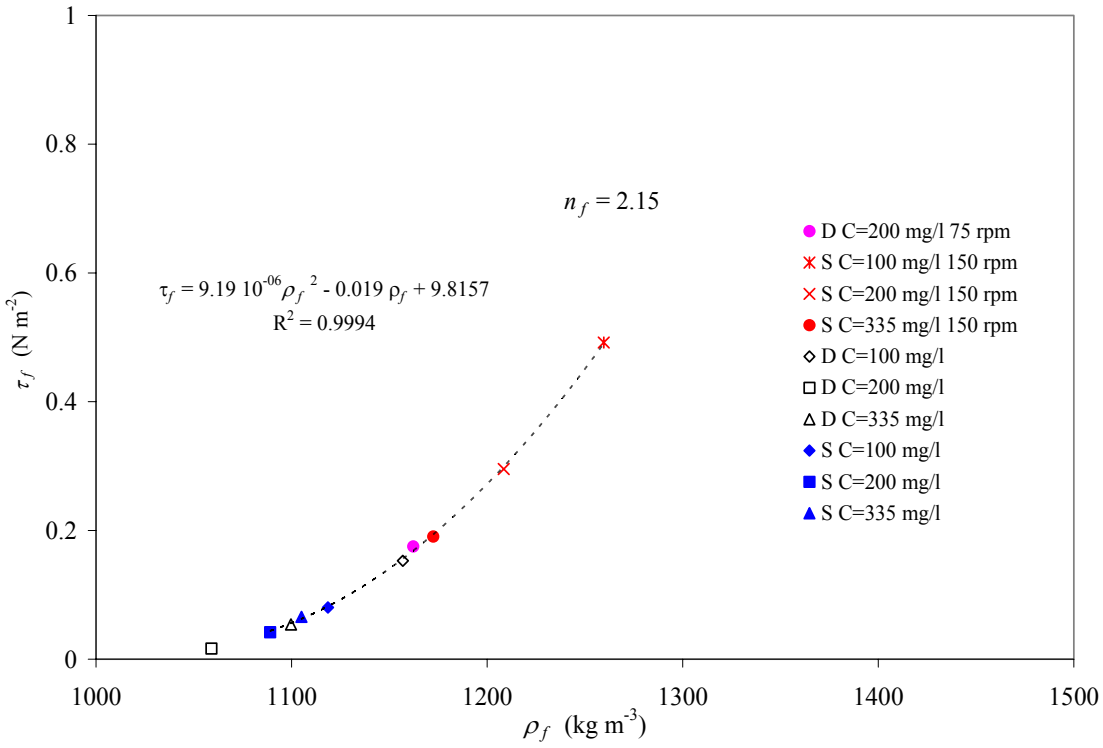


Figura 3.27: Relação entre p_f e tensão resistente para cada amostra obtida com n_f= 2.15.

3.9 Conclusões

Foram realizados experimentos com floculadores Couette e de disco utilizando sedimentos coesivos do rio Paraíba do Sul, tanto para água salgada como doce, para diferentes concentrações. Foram medidos os d_f de aproximadamente 22000 flocos no total e se mediu a W_s de 339 flocos. Foi possível demonstrar, como prediz a teoria da agregação para o intervalo de tensões de cisalhamento de trabalho, que os tamanhos dos flocos tendem a aumentar à medida que crescem as concentrações.

Quanto ao efeito da salinidade com respeito ao incremento da floculação, mostrou-se que os d_e são maiores em ambientes salinos, tanto para agregados formados por tensões de cisalhamento como por sedimentação diferencial. Não obstante, os resultados não permitiram estabelecer com clareza o valor limiar a partir do qual se acelera o processo de floculação. Para isso seriam necessários experimentos adicionais que não foram realizados por limitações operacionais.

Adverte-se primeiramente que os agregados menores, gerados no floculador Couette, são também os mais lentos e mais densos em médio. Em geral, à medida que aumentam as C crescem os tamanhos e W_s, enquanto diminuem as massas específicas dos flocos. Os agregados gerados com o aparelho Couette a 150 rpm com C=100 mg l^{-1} foram os mais densos e lentos. Para a única amostra do floculador Couette com água doce em que se puderam medir velocidades de queda, não se observaram diferenças significativas de W_s, com respeito às de água salgada. Os flocos gerados no disco com água salgada registraram tamanhos e velocidades menores que os de água doce, verificando-se que os maiores, formados com C=200 e 335 mgl^{-1} , foram também os mais velozes, enquanto que, os formados em água salgada com C=100 mg l^{-1} foram os mais lentos.

Destaca-se que a escala de tempo da velocidade de atrito t_T , calculada no parágrafo 2.5, é da mesma ordem de magnitude que os tempos de equilíbrio do floculador Couette, *Te,* calculados no parágrafo 3.4, Tabela 3.5, o que indica que os diâmetros de equilíbrio d_e calculados no floculador deveriam correlacionar-se com os d_f gerados em campo para tensões de cisalhamento semelhantes.

Calculou-se a massa específica diferencial dos flocos com o modelo de MASLIYAH e POLIKAR (1980) e a permeabilidade k com o modelo de BRINKMAN (LEE *et al*., 1996), logrando deste modo corrigir os coeficientes de arrasto por efeitos inerciais.

Demonstrou-se quantitativamente o modo em que as tensões de cisalhamento controlam a cinética de formação dos flocos no Couette, analisou uma fórmula para determinar a eficiência de colisão α_{sh} e se calculou o parâmetro temporal de escala T_e para ambos floculadores.

Calculou-se a massa específica dos flocos e após a dimensão fractal em base à relação proposta por KRANENBURG (1994) e as tensões de cisalhamento médias para as amostras de ambos floculadores, cobrindo a maior parte do espectro de tensões e verificando seu funcionamento nos extremos da curva, o qual permitirá utilizá-la no modelo Lagrangeano de partículas. Os desvios calculados para a massa diferencial dos flocos indicam a presença de desvios de até 50%, o que pode induzir erros significativos na hora de calcular o diâmetro e a tensão resistente dos flocos.

Ainda que os objetivos propostos nos trabalhos de laboratório foram sido atingidos, os resultados devem ser tomados com cuidado, devido às limitações operacionais dos procedimentos utilizados. Alguns parâmetros de escala são difíceis de representar, por exemplo *G*, que adquiriu valores muito superiores aos que se produzem naturalmente em estuários pela turbulência do escoamento, como já havia sido advertido por MILLIGAN e HILL (1998).

4. Modelo de Transporte de sedimentos

Existem numerosos antecedentes de modelos numéricos do transporte de sedimentos coesivos na literatura científica utilizados para aproximar-se da solução da equação em duas dimensões horizontais, integradas na vertical (2DH). Um dos primeiros modelos numéricos de transporte de sedimentos finos foi o realizado por ARIATHURAI (1974) e ARIATHURAI e KRONE (1976) em elementos finitos. Este modelo logo deu origem ao conhecido modelo SEDWES, com a velocidade de sedimentação calculada de maneira empírica. KAO *et al*. (1978) desenvolveram um modelo similar ao de ARIATHURAI que usa as mesmas equações para a erosão e deposição de sedimentos; COLE e MILES (1983) apresentaram um modelo 2DH com um esquema implícito em diferenças finitas, um modelo empírico para a velocidade de sedimentação, a equação de KRONE para a deposição e omitiram explicitamente o cálculo da erosão. A respeito, os autores destacaram a dificuldade de modelar a erosão com exatidão, pela variabilidade da tensão de cisalhamento crítica com respeito à massa específica do leito, variável no tempo. TEISSON e LATTEUX (1986) formularam um modelo baseado em um esquema implícito, que incorporou a erosão segundo a fórmula de ARIATHURAI que considerou o leito composto de camadas de diferentes resistências às tensões de cisalhamento. ODD e COOPER (1989) simularam a dinâmica dos sedimentos de fundo do estuário do rio Severn, considerando-a de massa específica uniforme. ZIEGLER e NISBET (1994) apresentaram o modelo SEDZL com as equações clássicas, calculando a velocidade média de sedimentação e o diâmetro de flocos com fórmulas empíricas verificadas em laboratório. O mesmo modelo foi aplicado para o cálculo de sedimentação em lagos e reservatórios (ZIEGLER e NISBET, 1995). WU e FALCONER (2000) apresentaram modelos de transporte de sedimentos finos em diferenças finitas com um esquema de terceira ordem, utilizando diferentes fórmulas empíricas para a velocidade média de sedimentação de acordo com as concentrações médias. JIANG e MEHTA (2001) desenvolveram um modelo de características similares às anteriores, com as clássicas equações de KRONE e ARIATHURAI para a deposição e erosão respectivamente, no qual se utilizou um esquema numérico Eulereano-Lagrangeano para resolver a equação governante. HAMRICK (2001) aplicou o modelo EFDC, que representa a hidrodinâmica, sedimentação, deposição,

ressuspensão de múltiplas classes de medidas de sedimentos coesivos e não coesivos, e um modelo de consolidação do leito. O modelo MIKE 21 MT tem um módulo para o transporte de sedimentos coesivos, que inclui todos os processos importantes, definindo a velocidade de queda com uma fórmula empírica (LUMBORG e PEJRUP, 2005).

Uma característica comum a esses modelos é a utilização de esquemas numéricos Eulerianos. Os modelos de trajetória de partículas estão incluídos na categoria dos modelos Lagrangeanos, em que o transporte de massa é conseqüência do movimento aleatório de um grande número de partículas discretas. Estão livres de oscilações tanto como de difusão numérica (HASSAN e MOHAMED, 2003; BODIN *et al.*, 2003), e também de concentrações negativas e perdas de massa. Estes problemas são freqüentes nos tradicionais métodos Eulerianos de diferenças finitas (FD) ou elementos finitos (FE), quando o transporte está dominado pela advecção, ou as fontes são pequenas em relação à malha hidrodinâmica (LABOLLE, FOGG e TOMPSON, 1996), ou nas proximidades da fonte ou quando existem fortes gradientes de concentrações. Nestes últimos casos o método de trajetória de partículas é muito apropriado (PERIAÑEZ e ELLIOT, 2002). A malha para o cálculo da concentração é independente da usada para resolver a hidrodinâmica, o que o torna particularmente apto para representar fontes em linha como as que se pretendem simular no estuário do rio Paraíba do Sul.

Em geral, todos os modelos de floculação utilizados são diretamente dependentes das concentrações médias na vertical. Por este motivo se destaca a importância de lograr representações corretas da concentração, se são levadas em consideração as conclusões de um recente estudo de comparação de modelos de floculação realizado por SPEARMAN e ROBERTS (2002); neste se destaca que foram obtidos resultados mais precisos com modelos empíricos relativamente simples para a velocidade de sedimentação W_s, por exemplo os que são regidos por uma lei potencial, que aqueles modelos com parâmetros fractais (WINTERWERP, 1998, 2002), (MCANALLY e MEHTA, 2002) e maior fundamentação teórica (KRANENBURG, 1999) descritos no capítulo 2. Em todos estes casos a velocidade de queda ou o diâmetro dependem da concentração, entre outras variáveis, e nenhum está livre da utilização de parâmetros empíricos de difícil quantificação.

4.1 Esquema numérico

Em um trabalho pioneiro, CHORIN (1973) utilizou o método de trajetória de partículas para o cálculo da vorticidade ao resolver as equações de Navier Stokes, para o escoamento bidimensional ao redor de um cilindro circular com alto número de Reynolds. Desde então os modelos de trajetória de partículas foram aplicados a uma ampla variedade de problemas de engenharia: fluxos em meios porosos com substâncias conservativas e reativas (AHLSTROM *et al.*, 1977; PRICKETT *et al.*, 1981; UFFINK, 1985; VALOCCHI e QUINODOZ, 1989; TOMPSON, 1993; HASSAN *et al.* , 2001) em sistemas heterogêneos (TOMPSON e GELLAR, 1990; LABOLLE *et al.*, 1996; ABULABAN e NIEBER, 2000); em meios subterrâneos fraturados (JAMES e CHRYSIKOPOULOS, 2001, 2003; MCKENNA *et al.*, 2003); em escoamentos turbulentos de massa e calor desde as paredes de um canal (PAPAVASSILIOU, 2002; SOMMERFELD, 2003); derramamentos de óleo no mar (KOROTENKO *et al.*, 2003; ELLIOT *et al.*, 1992, PROCTOR *et al.*, 1994); transporte de sedimentos coesivos em grandes cursos de água (VINZÓN, 1998, VINZÓN e PAIVA, 2002), no cálculo de ressuspensão de sedimentos do leito marinho (HILL, JONES e PRADLE, 2003); para simular o transporte de solutos em águas costeiras (AL-RABEH e GUNAY, 1992; PERIAÑEZ e ELLIOT, 2002); em modelos ecológicos marinhos (CROMEY *et al.*, 2002), em fluxos multiface em reatores (DUDOKOVIC, 2002). Da mesma maneira, foram desenvolvidos modelos 3D híbridos para simular o transporte no campo próximo e distante (DUNSBERGEN, 1994; ZHANG e ADAMS, 1999; KIM *et al.*, 2002).

Este método está incluído na categoria dos métodos Lagrangeanos, nos quais o transporte do contaminante dissolvido é disperso no escoamento como conseqüência do movimento aleatório de um grande número de partículas discretas passivas. Estão livres tanto de oscilações como de difusão numérica (HASSAN e MOHAMED, 2003; BODIN *et al.*, 2003), e portanto de concentrações negativas e de perda de massa, inconvenientes em geral encontrados nos tradicionais métodos em Diferenças Finitas (FD) e Elementos Finitos (FE) quando o transporte está dominado pela advecção (LABOLLE *et al.*, 1996). Estes métodos apresentam dificuldades nas proximidades das fontes, ou, de uma forma geral, onde são produzidos fortes gradientes de concentrações. Os modelos de partículas, no entanto, são muito apropriados para essa classe de problemas (PERIAÑEZ e ELLIOT, 2002). O cálculo de concentrações é realizado de forma

independente da malha numérica utilizada para a solução do cálculo de velocidades, motivo que também o faz apropriado para a representação de fontes pontuais e em linha. A principal desvantagem do método é que, se o número de partículas utilizadas, *NP*, fora insuficiente em relação ao tamanho da malha, a distribuição calculada pode não ser uma função suave, devido à natureza estocástica da etapa dispersiva (ZIMMERMANN *et al*., 2001). Não obstante, o aumento de *NP* pode resultar em um incremento significativo do tempo computacional.

Matematicamente, o processo de transporte pode ser expresso para um domínio unidimensional:

$$x^{n+1} = x^n + \left(U + \frac{dD}{dx} \right) \Delta t + z\sqrt{2\,D\,\Delta t} \tag{4.1}$$

Onde x^{n+1} e x^n são as posições nos intervalos de tempo $n+1$ e n, z é um número aleatório normalmente distribuído, com média zero e variância unitária, U é a velocidade do fluido e D é um coeficiente de difusão não homogêneo. O segundo termo do lado direito da equação (4.1) representa a soma dos deslocamentos, um por advecção da partícula ($U\,\Delta t$) e outro pela inclusão de um termo de 'deriva', próprio de condições de turbulência não homogênea, em que a variação espacial do coeficiente de dispersão é importante (KINZELBACH e UFFINK, 1991; LABOLLE *et al.,* 1996). Os detalhes da inclusão deste termo foram explicados por KITANIDIS (1994). O último termo indica o deslocamento aleatório da partícula. HATHHORN (1997) demonstrou a equivalência de resultados entre a utilização de uma variável z uniformemente distribuída *vs.* z normalmente distribuída que significa uma considerável economia de tempo computacional. Então o número aleatório z pode ser representado por uma variável aleatória independente estandardizada, com distribuição uniforme no intervalo (-0.5, 0.5), obtida com um gerador de números aleatórios de um computador, que fornece números r no intervalo (0,1), com média 0.5 e desvio $\sqrt{1/12}$. Então, a equação (4.1) pode expressar-se do seguinte modo:

$$x^{n+1} = x^n + \left(U + \frac{dD}{dx} \right) \Delta t + (2r - 1)\sqrt{6\, D\, \Delta t} \tag{4.2}$$

A presença de fontes se representa mediante a injeção de um número finito de partículas, *NP*, a uma taxa correspondente à descarga da substância simulada. A massa de cada partícula *i* se representa por uma quantidade de massa MP_i. As partículas são deslocadas de uma determinada distância em cada intervalo de tempo Δt, devido ao efeito combinado da advecção e da dispersão. Na escolha dos intervalos temporal e espacial se impõe a condição de que o máximo percurso de uma partícula não supere o tamanho da célula. Desta maneira cada partícula precisa mais de um intervalo de tempo para passar de uma célula de cálculo a outra, evitando extrapolar as velocidades da célula origem além das células vizinhas. Esta condição é importante, como se verá mais adiante, quando o campo de velocidades não é uniforme.

Para o caso de uma fonte contínua a massa é injetada em cada intervalo de tempo a uma taxa $M/\Delta t$ e para o caso de uma fonte instantânea toda a massa *M* é subministrada em $t=0$. A aplicação do método pode se estender a problemas em duas e três dimensões. As concentrações se calculam contando a quantidade de partículas em cada célula da malha, multiplicando pela massa de cada partícula, dividindo pelo volume da célula e atribuindo a concentração à coordenada do centro da mesma. Os fatores mais importantes a considerar para conseguir boas simulações da distribuição de concentrações são o número de partículas *NP*, o método de interpolação de velocidades e a definição das condições de contorno.

4.1.1 Cálculo das velocidades das partículas

Para o transporte de substâncias passivas, a advecção da partícula é considerada idêntica à velocidade da corrente no ponto onde se encontra a partícula. Por tal motivo, o algoritmo escolhido para a interpolação de velocidades em cada intervalo de tempo é uma parte chave do modelo (NARAYANAN *et al.*, 2002). A velocidade para cada partícula se obtém a partir das calculadas pelo modelo hidrodinâmico, nos nós da célula em que se encontra a partícula. PERIAÑEZ e ELLIOT (2002) afirmam que para

aplicações a casos reais, os esquemas de primeira ordem são adequados. HASSAN *et al.,* (2001) utilizaram diferentes esquemas de interpolação de velocidades (linear, bilinear, distância inversa) destacando que os resultados obtidos foram semelhantes. Por outro lado, segundo NARAYANAN *et al.* (2002) são necessários esquemas de terceira ordem ou maiores para garantir cálculos seguros da posição da partícula. Neste trabalho se implementaram interpolações lineares, bilineares e de segunda ordem baseados na expansão em série de Taylor. De acordo com o clássico teste de Molenkamp (JIN, 1993) se observaram vantagens na utilização da interpolação de segunda ordem com respeito ao esquema bilinear, enquanto que o método linear produz uma trajetória errática da partícula transportada.

4.1.2 Número de Partículas

Foram realizados dois experimentos numéricos para mostrar a relação entre *NP* e os erros na distribuição de concentrações. A primeira em um domínio unidimensional e a segunda para um domínio bidimensional, cujos parâmetros foram escolhidos para representar como caso de aplicação a dispersão de traçadores no Lago Setúbal (Argentina). A seguir se mostra o experimento 2D.

4.1.2.1 Experimento Bidimensional: Fonte em linha instantânea

Para a análise do *NP* no caso bidimensional foi considerada uma fonte vertical instantânea em linha, com turbulência homogênea e anisotrópica, fundo plano horizontal e escoamento estacionário e uniforme. A equação de governo é:

$$\frac{\partial C}{\partial t}+\frac{\partial UC}{\partial x}+\frac{\partial VC}{\partial y}=\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial x}\left(hD_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right)+\frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial y}\left(hD_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right) \tag{4.3}$$

onde $C=C(x, y, t)$ é a concentração do constituinte, função das variáveis x, y, t. U e V são as velocidades constantes nas direções x e y, D_{xx} e D_{yy} os coeficientes de difusão turbulentos nas direções longitudinal (paralela ao escoamento principal) e transversal respectivamente, considerados constantes. As condições iniciais são:

$$C(x_o, y_o, 0) = \frac{M}{\delta v} \tag{4.4}$$

$$C(x, y, 0) = 0 \qquad \forall \; x \neq x_0 \qquad , \qquad \forall \; y \neq y_0 \tag{4.5}$$

com x_0, y_0 as coordenadas do ponto de lançamento da massa.A solução analítica deste problema foi dada por HARLEMAN (1988):

$$C(x, y, t) = \frac{M}{4\pi H t \sqrt{D_{xx} D_{yy}}} exp - \left\{ \frac{[(x - x_0) - U t]^2}{4 D_{xx} t} + \frac{[(y - y_0)]^2}{4 D_{yy} t} \right\} \tag{4.6}$$

onde M é a massa subministrada em $t=0$. A fonte está localizada no ponto de coordenadas (x_0, y_0). O experimento numérico foi realizado segundo as seguintes condições: U = 0.10 m/s**,** V = 0.0 m/s, D_{xx} = 1.00 m^2/s, D_{yy} = 0.10 m^2/s, x_0 = 100 m, y_0 = 500 m, intervalo temporal Δt = 10 s e M=1000 g. As concentrações do modelo de partículas se obtiveram com intervalos espaciais Δx e Δy de 10 m. Os resultados para NP=100000 partículas no tempo 1200 segundos é mostrado na Figura 4.1.

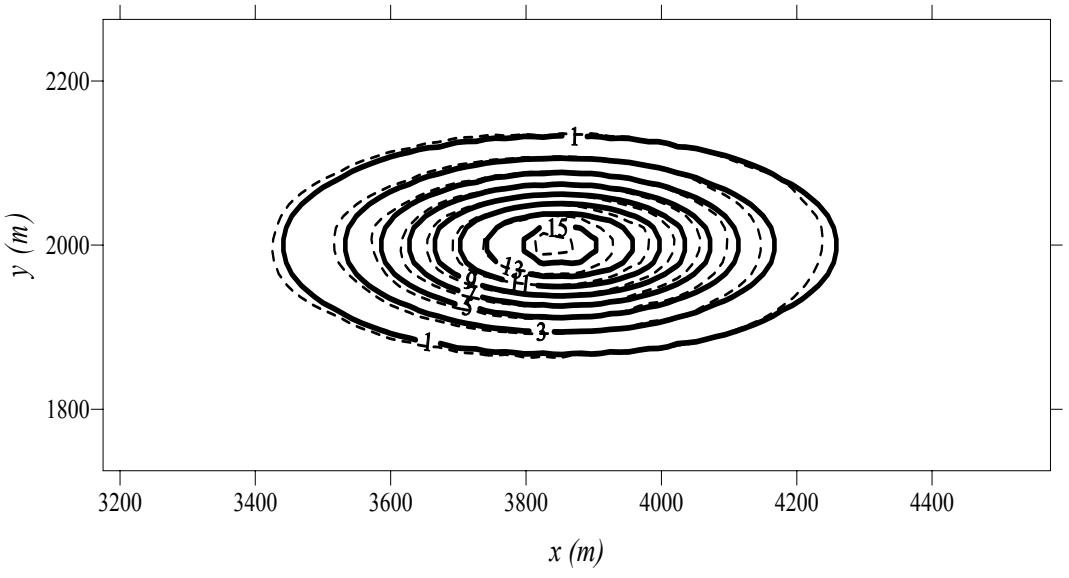


Figura 4.1: Isolinhas de concentração para a solução analítica (linha contínua) e o modelo de partículas (linhas de tracejadas), para NP=100000 partículas em t =1200 segundos.

Para o tempo atribuído ao experimento, as partículas não alcançaram os contornos. A análise de contorno se realizou em outro experimento, ver a respeito o parágrafo 4.1.3.

O erro relativo (ε_r) para cada nuvem se obteve segundo a equação (4.7), na que o numerador da fração é o erro médio quadrático (*rms*):

$$\varepsilon_r(\%) = \frac{\frac{1}{n}\sqrt{\sum_{i=1}^{n}\left(Ca_i - Cmp_i\right)^2}}{\frac{1}{n}\sum_{i=1}^{n} Ca_i} 100 \tag{4.7}$$

onde Ca_i é a concentração calculada com a solução analítica para cada coordenada x_i, Cmp_i é a concentração calculada com o modelo de partículas para a mesma coordenada e n é a quantidade de intervalos da malha. No gráfico da Figura 4.2, observa-se a relação entre o erro relativo *e* o número de partículas, *NP*. Os erros podem ser diminuídos mediante um aumento de *NP*. Como a redução de erros é não linear, como já foi destacado por HUNTER *et al.* (1993), ajustou-se uma lei quadrática, ou seja $rms \propto 1/\sqrt{NP}$. De forma análoga ao caso unidimensional, determinou-se o erro relativo ε_r com a equação (4.7) em base à adoção de diferentes *NP* para três testes, um com intervalos espaciais Δx e Δy de 10 m, o outro com Δx *e* Δy de 20 m e o outro com Δx *e* Δy de 50 m. Observa-se uma tendência similar à já registrada no experimento unidimensional, verificando-se uma relação linear entre o inversa da raiz quadrada de *NP* e *rm*s, com uma correlação R^2=0.989 para Δx e Δy de 10 m, R^2=0.993 para os intervalos espaciais de 20 m e R^2=0.974 para os intervalos espaciais de 50 m.

A adoção do valor de *NP* é um fator chave para a implementação correta do modelo pois, para um número menor do que o adequado, a distribuição de concentrações calculadas apresentará flutuações; para um número maior do que o adequado se utilizará tempo de processamento inutilmente.

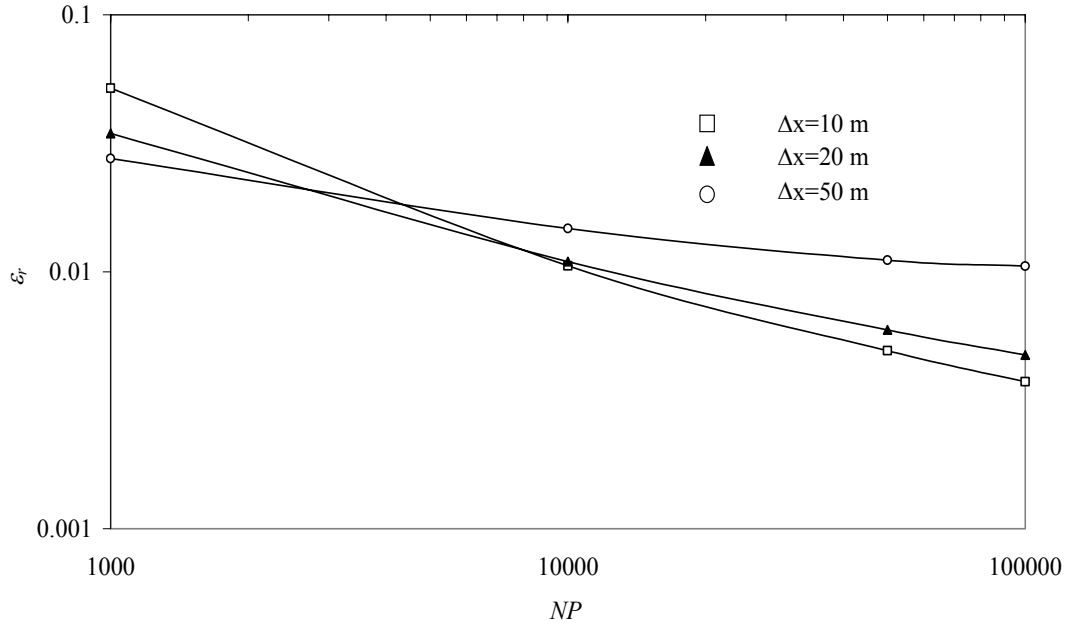


Figura 4.2: Relação entre o número de partículas *NP* e ε_r para o experimento bidimensional.

4.1.3 Condições iniciais e condições de contorno

A implementação do modelo requer condições de contorno e condições iniciais. As condições iniciais são dadas pela natureza do problema, por exemplo, para um material coesivo suspenso em um tubo de sedimentação, a condição inicial será dada por uma distribuição uniforme de partículas na vertical (VINZÓN, 1998). Enquanto que para uma fonte em linha de um traçador fluorescente, cuja massa se injeta em forma instantânea no corpo de água, a condição inicial estará dada pela concentração das *NP* partículas em um só ponto do espaço bidimensional e nenhuma partícula no resto do domínio.

Quanto à presença de contornos, quando estes são abertos, as partículas podem abandonar o domínio ,e portanto, deixam de ser consideradas no cálculo das concentrações. Ao passo que, quando os contornos são fechados ou impermeáveis podem: a) refletir-se completamente ó b) ser absorvidas pelos contornos. A natureza dos contornos e da substância transportada determina a escolha de a) ou b). Por exemplo, para o transporte vertical de sedimentos em um corpo de água livre, na superfície se adota uma condição a) (HILL *et al.*, 2003; VINZÓN e PAIVA, 2002), enquanto que no

leito uma condição b), salvo que condições que favoreçam a resuspensão retornem a partícula ao escoamento, nesse intervalo de tempo ou em outro (CROMEY *et al*., 2002). Para o caso em que as substâncias transportadas sejam bactérias, por exemplo, e os contornos sejam praias de areia, será possível adotar uma condição absorvente. A mesma condição foi adotada por PROCTOR *et al.* (1994) para as partículas que alcançavam a linha de costa ao simular o derramamento de óleo em Shetlands durante janeiro de 1993.

Foi realizada um experimento numérico que permitiu visualizar os efeitos no cálculo das concentrações, segundo a adoção de uma condição reflexiva ou absorvente, com base na solução analítica proporcionada por HOLLEY *et al.* (1972) com uma fonte contínua vertical em linha em um escoamento turbulento, solução baseada no método das imagens (FISCHER *et al.*, 1979). Os resultados mostraram um bom funcionamento do modelo com a adoção de condições reflexivas. Os detalhes estão no trabalho incluído no ANEXO 1.

4.2 Aplicação no Lagoa Setúbal

O modelo numérico desenvolvido foi aplicado primeiramente num estudo ambiental realizado sobre transporte de contaminantes na lagoa Setúbal (Argentina). Utilizaram-se traçadores fluorescentes para a determinação dos coeficientes de dispersão, e realizou-se uma simulação hidrodinâmica 2DH e uma aplicação do modelo de partículas para simular a evolução das nuvens de traçador. Detalhes desta aplicação estão no trabalho "Assessments on the Particle-Tracking Method Applied to Transport Problems" TRENTO, A.E., VINZON S.B., MASCARENHAS F.B. e ROLDAO J., submetido para publicação (ver ANEXO 1).

4.3 Parametrização de erosão e deposição

4.3.1 Erosão

No modelo de transporte, representado pela equação (2.1) no capítulo 2, é preciso especificar os fluxos de sedimentos para e desde o leito, indicados como taxa de erosão e taxa de deposição (MEHTA, 1989). Os parâmetros habitualmente utilizados para representar cada processo, τ_e e τ_d , não têm uma definição inequívoca e com freqüência

é difícil atribuir-lhes um valor com certeza. Cabe destacar que não existe um único modo de definir τ_e. Alguns pesquisadores a definem como a tensão na qual se inicia o movimento de partículas, outros como a tensão na qual ocorre um movimento significativo de partículas e outros por extrapolação ao ponto de transporte nulo. As diferenças podem dificultar a comparação de valores dos parâmetros. Uma descrição exaustiva das diferentes concepções para as fórmulas de erosão pode encontrar-se em SANFORD e MAA (2001). Existem diferentes formulações para a taxa de erosão dos sedimentos de fundo, m_e. Uma expressão geral que segue uma lei potencial (MAA *et al.*, 1998) se escreve do seguinte modo:

$$m_e = M' \left(\tau_b - \tau_e(z)\right)^n \tag{4.8}$$

onde M' é uma constante empírica, $\tau_e(z)$ é a tensão de cisalhamento crítica à profundidade z, n é uma constante empírica. Para o caso em que n=1 e os termos entre parênteses se adimensionalizam com τ_b, se obtém a conhecida expressão de ARIATHURAI (1974, 1978) que será utilizada neste trabalho:

$$m_e = M\left(\frac{\tau_b}{\tau_e} - 1\right) \qquad \text{para} \quad \tau_b > \tau_e \tag{4.9}$$

$$m_e = 0 \qquad \text{para} \quad \tau_b < \tau_e \tag{4.10}$$

onde M (kgm^{-2} s^{-1}) é uma constante nas mesmas unidades que m_e.

4.3.2 Deposição

Se a tensão de cisalhamento local τ_b é maior que a tensão crítica para deposição, os flocos não sedimentarão sobre o leito. KRONE (1962) postulou que a probabilidade, P, que os flocos alcancem o leito é: $P=(1 - \tau_b/ \tau_d)$ com a condição $\tau_b < \tau_d$. De tal modo, a taxa de deposição dos sedimentos suspensos m_d é:

$$m_d = W_s\, C_b P = W_s\, C_b \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_d}\right) \qquad \text{para } \tau_b < \tau_d \tag{4.11}$$

$$P = 0 \qquad \text{para } \tau_b > \tau_d \tag{4.12}$$

onde W_s é a velocidade de sedimentação média na vertical dos sedimentos ou flocos, τ_d é a tensão de cisalhamento limite abaixo da qual ocorre deposição, C_b é a concentração de sedimentos suspensos a uma curta distância do leito, calculada da forma $C_b = \beta\, C$, com um coeficiente $\beta > 1$ (JIANG e MEHTA, 2001). A equação principal governante, (2.1), escreve-se então do seguinte modo:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial UC}{\partial x} + \frac{\partial VC}{\partial y} = \frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial x}\left(hD_{xx}\frac{\partial C}{\partial x}\right) + \frac{1}{h}\frac{\partial}{\partial y}\left(hD_{yy}\frac{\partial C}{\partial y}\right) + \\ + R_e \frac{M}{h}\left(\frac{\tau_b}{\tau_e} - 1\right) - R_d \frac{W_s C_b}{h}\left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_d}\right) \tag{4.13}$$

Com R_e e R_d são funções que se definem do seguinte modo: $R_e=1$, $R_d=0$ quando $\tau_b > \tau_e$; $R_e=1$, $R_d=0$ quando $\tau_b < \tau_d$; $R_e=0$, $R_d=0$ quando $\tau_d \le \tau_b \le \tau_e$.

4.3.3 Cálculo do nível do leito

O leito de sedimentos coesivos se forma pela ação combinada de consolidação dos sedimentos depositados. Quando começam o processo de consolidação, os agregados depositados tendem a formar uma nova estrutura do leito. Durante a transição, o peso da suspensão de alta concentração é balanceado pelo escoamento ascendente de água dos poros dos sedimentos comprimidos. O processo de consolidação primária finaliza quando a pressão de água dos poros se dissipa. A consolidação secundária consiste na deformação plástica do leito (MEHTA, 1989) ao longo de semanas ou meses. A determinação da consolidação pode ser feita mediante fórmulas analíticas, métodos empíricos e modelos numéricos (CARGILL, 1984). No presente trabalho este processo não será levado em consideração.

O cálculo das mudanças do nível do leito por erosão ou sedimentação, realiza-se a partir da determinação da espessura de sedimentação, $h_f=h_f(x,y,t)$, depois de n intervalos de tempo, calculado com a seguinte equação (JIANG e MEHTA, 2001):

$$h_f = \left[\frac{1}{\rho_D} \sum_{i=1}^{n} \left(m_d - m_e \right)_i \right] \Delta t \tag{4.14}$$

onde $\rho_D = \rho_D(x,e,t)$ é a massa específica seca do depósito, calculada em forma empírica (VANONI, 1975).

$$h_f = \left\{ \frac{1}{\rho_D} \sum_{i=1}^{n} \left[R_e \frac{M}{h} \left(\frac{\tau_b}{\tau_e} - 1 \right) - R_d \frac{W_s C_b}{h} \left(1 - \frac{\tau_b}{\tau_d} \right) \right] \right\} \Delta t \tag{4.15}$$

4.4 Fluxograma do modelo numérico

Na Figura 4.3e na Figura 4.4 se apresentan o esquemas de funcionamento do modelo mediante diagramas de fluxo:

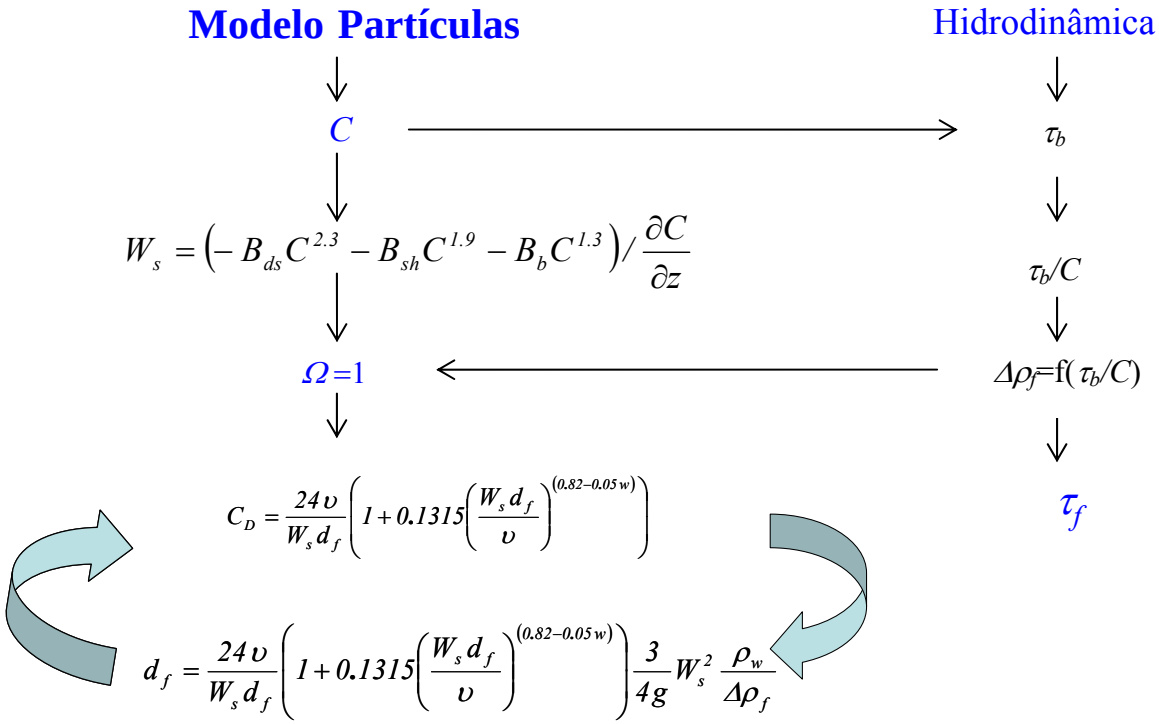


Figura 4.3: Seqüência iterativa para C_D e d_f.

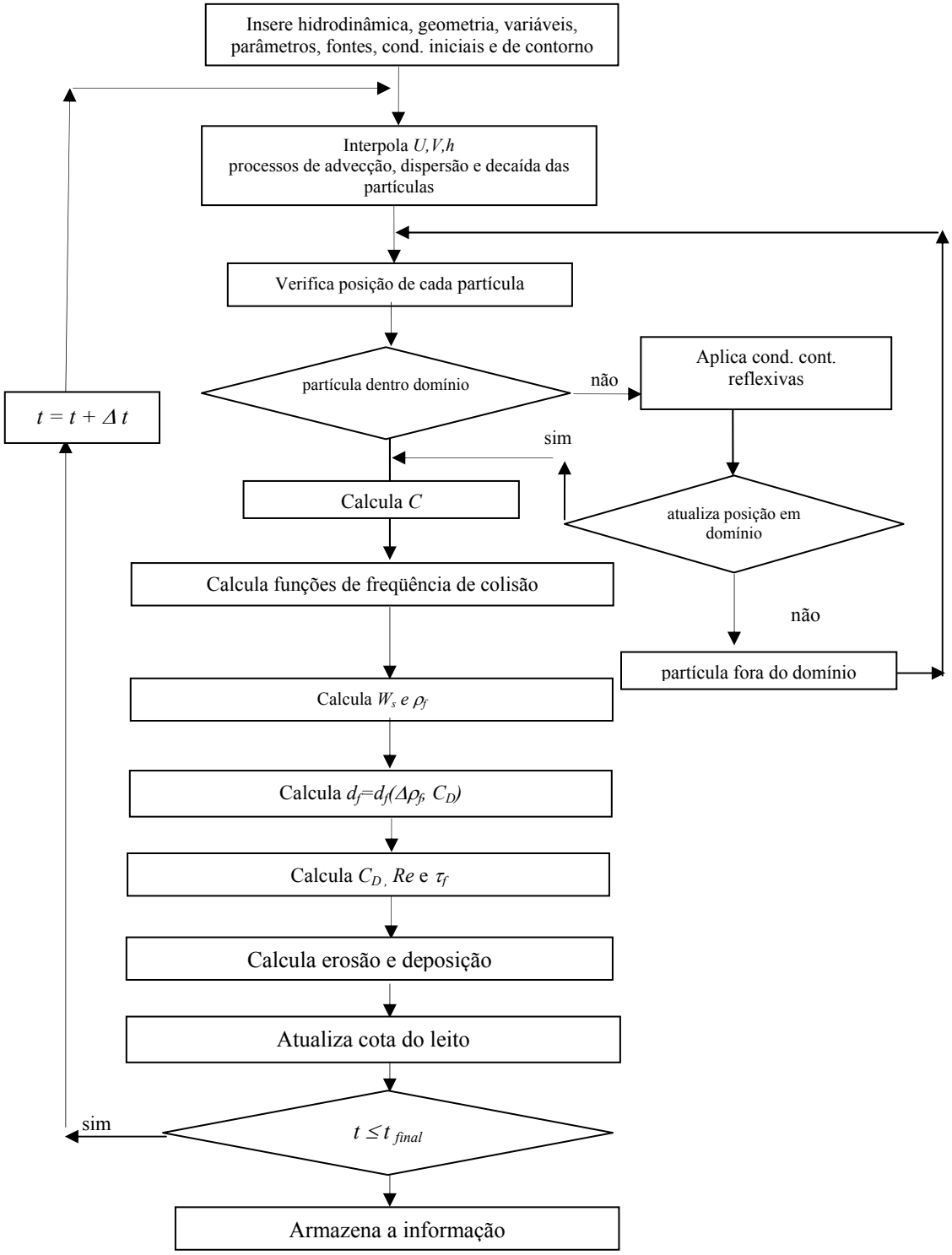


Figura 4.4: Esquema do funcionamento do modelo de partículas.

4.5 Conclusões

Foram expostos os fundamentos matemáticos dos modelos de partículas e se verificaram seus resultados para um experimento bidimensional. Analisaram-se diferentes esquemas numéricos para a interpolação de velocidades e profundidades. Verificou-se a conhecida relação linear entre a inversa da raiz quadrada de *NP* e o erro médio quadrático, *rm*s. Explicaram-se em detalhe as condições de contorno e iniciais implementadas. Constatou-se o funcionamento do modelo para um caso de aplicação com traçadores fluorescentes, que se apresenta completo no ANEXO 1.

A análise dos processos de transporte de sedimentos finos se completou com os de erosão, e deposição, fundamentais para completar a sua dinâmica em rios e estuários.

5. Ensaios numéricos preliminares

Neste capítulo se descrevem experimentos numéricos destinados a analisar a sensibilidade dos parâmetros do modelo de floculação. No parágrafo 5.1 são apresentados os experimentos considerando o algoritmo correspondente ao crescimento dos flocos e no parágrafo 5.2 considerando a tensão resistente dos flocos e o processo de limitação de crescimento dos flocos pela tensão de cisalhamento do escoamento. No parágrafo 5.3 se apresentam os resultados correspondentes a ensaios numéricos que reproduzem o esquema conceitual de DYER de variação de tamanhos dos flocos com a concentração e a tensão de cisalhamento.

O modelo de partículas foi aplicado a um canal ideal bidimensional de 7300 m de comprimento, por onde escoa uma vazão de 400 m^3s^{-1}, cuja geometria é mostrada na Figura 5.1. A seção transversal tem uma largura constante de 240 m. O canal tem um primeiro trajeto de profundidade constante de 3 m entre as progressivas 0 e 3700 m, e um segundo com profundidades linearmente variáveis, até 15 metros no final. O primeiro trecho corresponderia a um cenário fluvial, enquanto que o segundo a um estuário. Na seção de saída do canal atua uma oscilação do nível com período de 12 horas, uma amplitude de 0.70 m e uma velocidade máxima de 0.30 ms^{-1}, que produz uma variação gradual de velocidades no comprimento do canal. A simulação efetuada corresponde a uma aproximação do escoamento fluvial que descarrega em um estuário submetido a uma maré semi-diurna, semelhante à configuração do estuário do rio Paraíba do Sul, caso de aplicação desta tese.

Adotaram-se $\Delta x=\Delta y$=60 m, Δt=60 s e coeficientes de dispersão longitudinal calculados segundo ELDER (1959). As tensões de cisalhamento críticas para erosão e deposição foram τ_e=0.30 Nm^{-2} e τ_d=0.10 Nm^{-2}, respectivamente. O ingresso dos sedimentos no sistema foi simulado mediante quatro fontes em linha localizadas no extremo de águas acima do trajeto fluvial, fornecendo cada 100 partículas por Δt, equivalente a uma condição de contorno C=0.075 gl^{-1}. Nos contornos laterais adotaram-se condições refletivas.

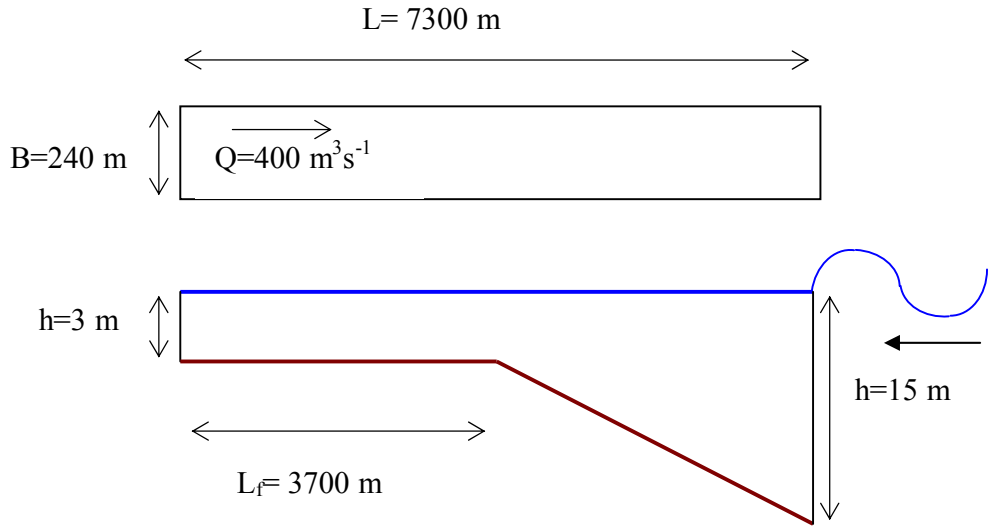


Figura 5.1: Geometria do canal.

5.1 Sensibilidade à variação dos parâmetros do modelo numérico

Analisaram-se as variações de d_f e W_s segundo mudanças em:

- as eficiências de colisão de cada mecanismo, α_b, α_{sh}, α_{ds},
- a massa específica diferencial dos flocos, ρ_f,
- a concentração, $C(0,t)$,
- a temperatura da água, T.

Nesta análise de sensibilidade foi considerado o algoritmo correspondente ao crescimento dos flocos. O tempo total de simulação foi de 24 horas. Após 8 horas os sedimentos atingem o contorno de saída. Na Tabela 5.1 mostram-se os valores dos parâmetros empregados e cujos resultados se analisam a seguir.

Os resultados variando o parâmetro α_{sh} segundo os processos 1 ao 5, mantidos os outros constantes, são mostrados na Figura 5.2 e na Figura 5.3, onde os d_f e W_s

desenhados são valores médios em cada trecho. Na primeira se adverte o processo de crescimento para d_f à medida que cresce o número de colisões pelo aumento de α_{sh}. Como não foi incluído o algoritmo de rompimento de flocos, os tamanhos crescem ilimitadamente à medida que cresce a eficiência, independentemente do parâmetro de dissipação. De tal maneira, que a taxa de crescimento é maior no trajeto fluvial, com maior G, que no estuário onde G cai rapidamente (ver a Figura 5.4), então o efeito resultante é uma queda do crescimento de d_f no trecho de estuário. As curvas se cruzam no primeiro trajeto, pois no estuário predomina a sedimentação diferencial pelo efeito combinado dos menores α_{sh} (<0.4) e G decrescente. Deve-se ter em conta também, que de acordo com a definição das funções de freqüência de colisão B_{sh} e B_{ds} do modelo de FARLEY e MOREL (equações (2.32) e (2.33) e Tabela 2.2) o aumento da profundidade provoca uma diminuição para B_{sh} e um acréscimo para B_{ds}. As diferenças entre B_{sh} e B_{ds} são de até uma ordem de magnitude neste caso.

Tabela 5.1: Variáveis utilizadas para a análise de sensibilidade.

Processo	α_b	α_{sh}	α_{ds}	S	ρ_f	$C(0,t)$	T
	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	psu	kgm^{-3}	kgm^{-3}	ºC
1	0.15	0.05	0.10	0.0	1200	0.075	27.0
2	0.15	0.25	0.10	0.0	1200	0.075	27.0
3	0.15	0.50	0.10	0.0	1200	0.075	27.0
4	0.15	0.75	0.10	0.0	1200	0.075	27.0
5	0.15	1.00	0.10	0.0	1200	0.075	27.0
6	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
7	0.15	0.25	0.50	0.0	1200	0.075	27.0
8	0.15	0.25	0.75	0.0	1200	0.075	27.0
9	0.15	0.25	1.00	0.0	1200	0.075	27.0
10	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
11	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
12	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
13	0.15	0.25	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
14	0.15	0.25	0.25	0.0	1600	0.075	27.0
15	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.150	27.0
16	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.300	27.0
17	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.600	27.0
18	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	1.000	27.0
19	0.50	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
20	1.00	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
21	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	23.0
22	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	30.0

As diferenças entre ambas funções de freqüência atenuam-se só quando G é relativamente grande. A parametrização do modelo é compatível com a teoria de agregação. Quando a freqüência de colisão e governada por tensões de cisalhamento, esta varia com a terceira potência do diâmetro dos flocos, equação (2.13); quando predomina a sedimentação diferencial, a freqüência de colisão varia com a quarta potência do diâmetro do floco (equação (2.20)).

Como seria de esperar, com W_s acontece um processo similar ao dos d_f, crescendo a uma taxa maior no trecho fluvial porque segue a taxa de incremento do diâmetro do floco, que com uma massa específica constante, só fica afetado pelas variações de α_{sh}.

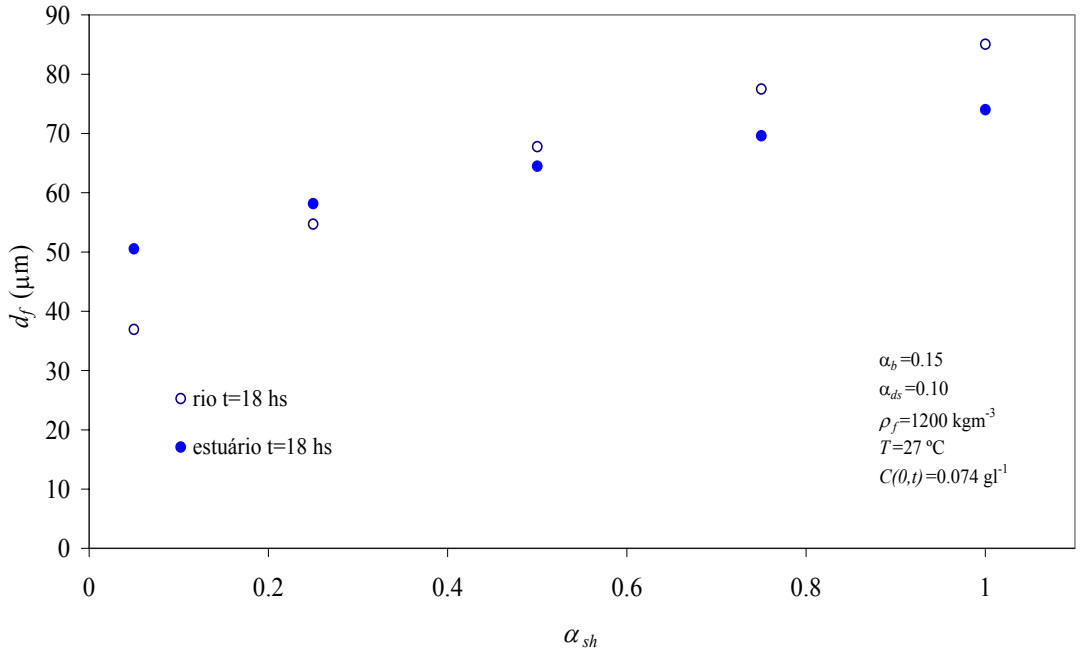


Figura 5.2: Variações de d_f segundo α_{sh} para o tramo fluvial e o estuário.

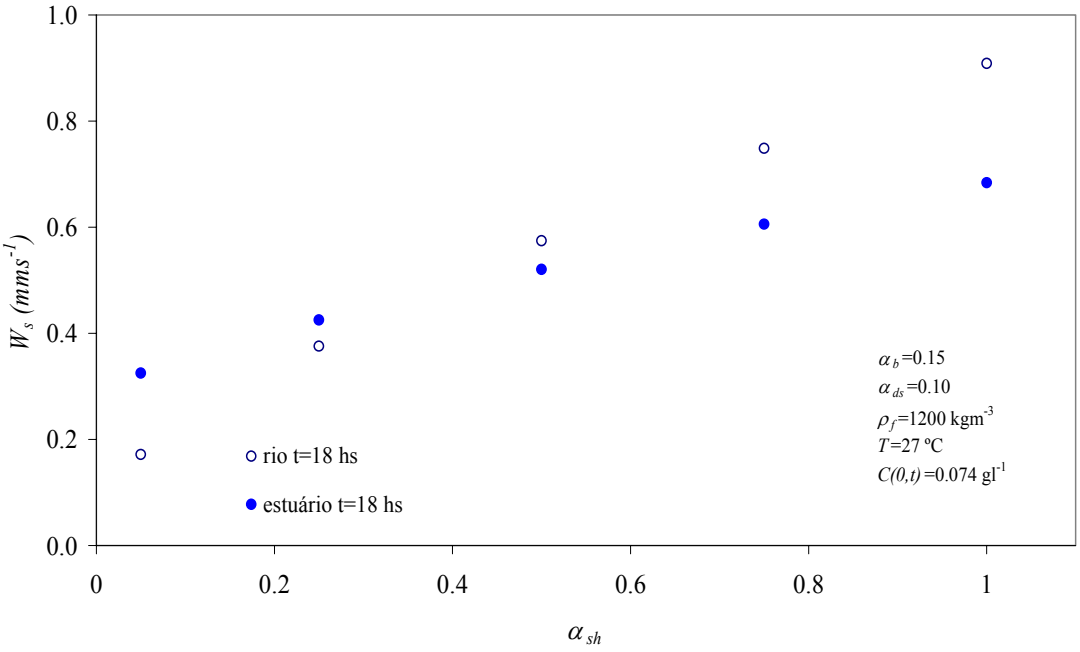


Figura 5.3: Variações de W_s segundo α_{sh} para o tramo fluvial e para o estuário.

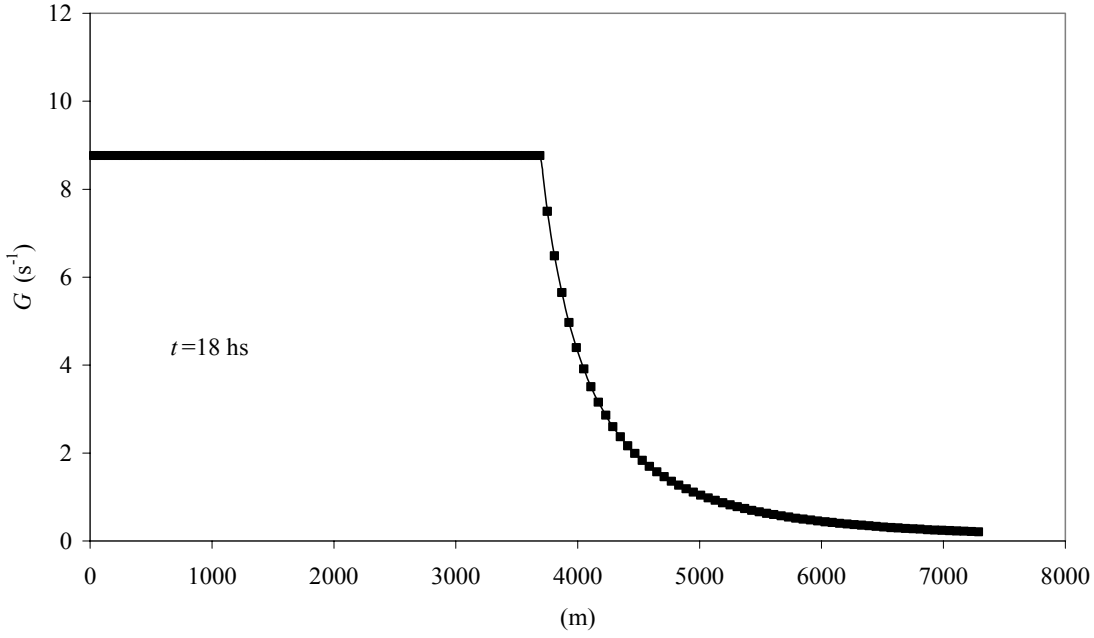


Figura 5.4: Perfil do parâmetro de dissipação G no trecho fluvial e para o estuário.

No segundo experimento variou-se α_{ds} segundo os valores da Tabela 5.1 (processos 2, 6, 7, 8 e 9). Na Figura 5.5 e na Figura 5.6 desenharam-se as mudanças para d_f e W_s. Neste experimento a taxa de crescimento para o diâmetro dos flocos depende da sedimentação diferencial pois α_{sh} se mantém constante. O efeito resultante é um forte

crescimento no trecho de estuário e um aumento mais lento no rio, pois ainda que ali G seja constante, a eficiência não. Neste caso, a queda de G no estuário não afeta a cinética dos flocos, pois o processo dominante é a sedimentação diferencial. Devido ao fato de W_s depende do tamanho, cresce fortemente no estuário. Os d_f são quase iguais para α_{ds}=0.1 pois G e α_{sh}=0.25 compensam a incidência da maior profundidade do estuário. Assim, o aumento de α_{ds} explica o crescimento dos flocos no estuário.

No terceiro experimento modificou-se o parâmetro ρ_f segundo os valores dos processos 11 ao 14 (ver a Tabela 5.1, a Figura 5.7 e a Figura 5.8). A cinética para d_f depende, neste caso, de qual seja o processo dominante. É claro que no trecho fluvial dominam as tensões de cisalhamento, e portanto da mesma forma que ρ_f, os flocos devem ser menores, e mais densos que no trecho do estuário. Mais uma vez, W_s acompanha o crescimento dos diâmetros.

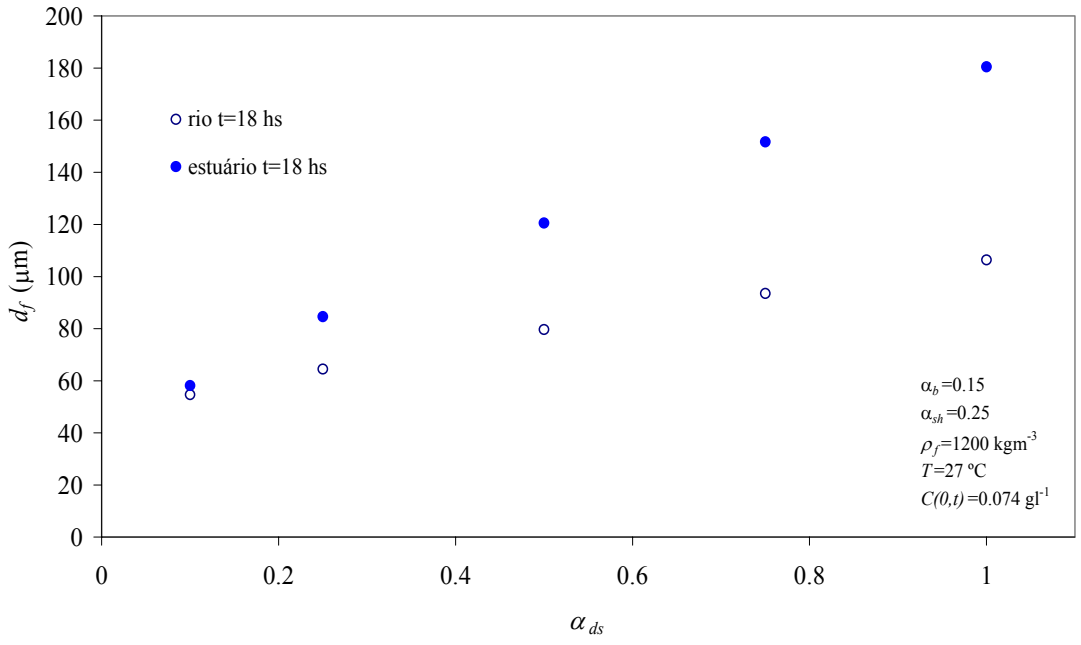


Figura 5.5: Variações de d_f segundo α_{ds} para o tramo fluvial e o estuário.

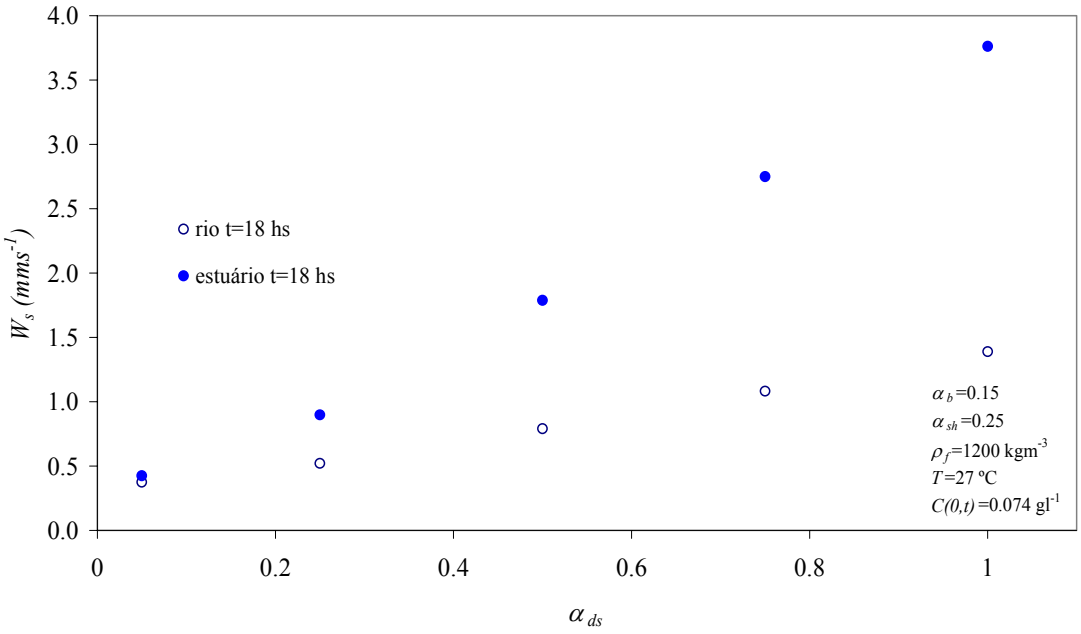


Figura 5.6: Variações de W_s segundo α_{ds} para o tramo fluvial e o estuário.

No quarto experimento variou-se a $C(0,t)$, segundo os valores dos processos 15 ao 19 (ver Tabela 5.1) e desenharam-se os resultados na Figura 5.9 e na Figura 5.10. Em primeiro lugar se adverte o crescimento dos diâmetros em ambos ambientes, compatível com a teoria da agregação, como já foi discutido no Capítulo 3. Com igualdade de concentrações (também de eficiências e massa específica diferencial) os diâmetros crescem mais rapidamente no estuário porque o acréscimo de profundidades não é compensado por um maior G no rio, e então os d_f crescem mais rapidamente no estuário devido à sedimentação diferencial.

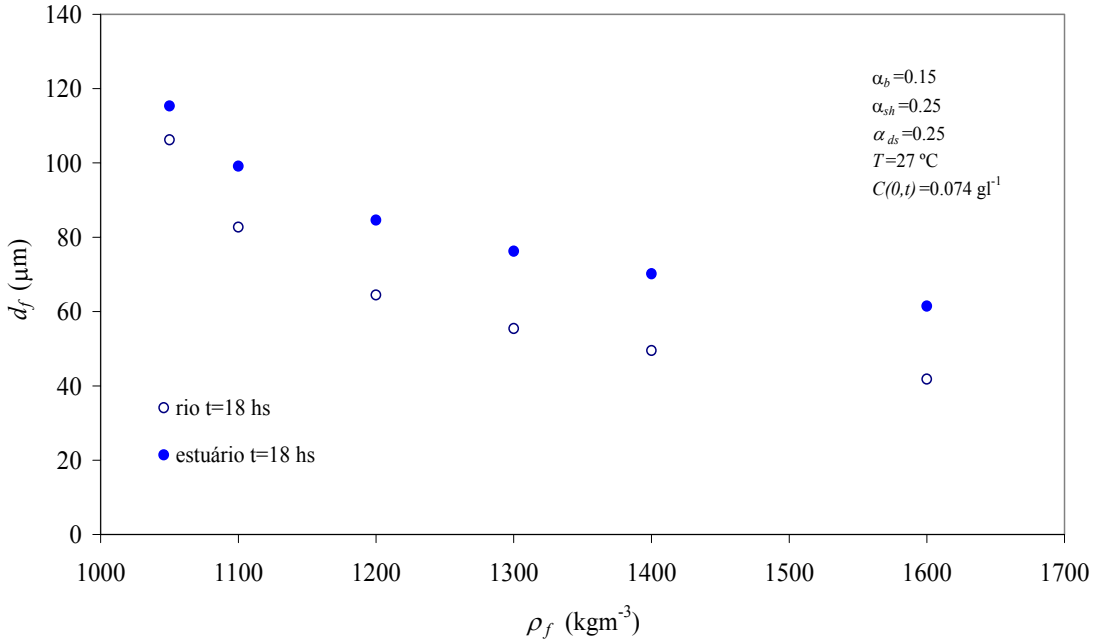


Figura 5.7: Variações de d_f segundo ρ_f para o trecho fluvial e para o estuário.

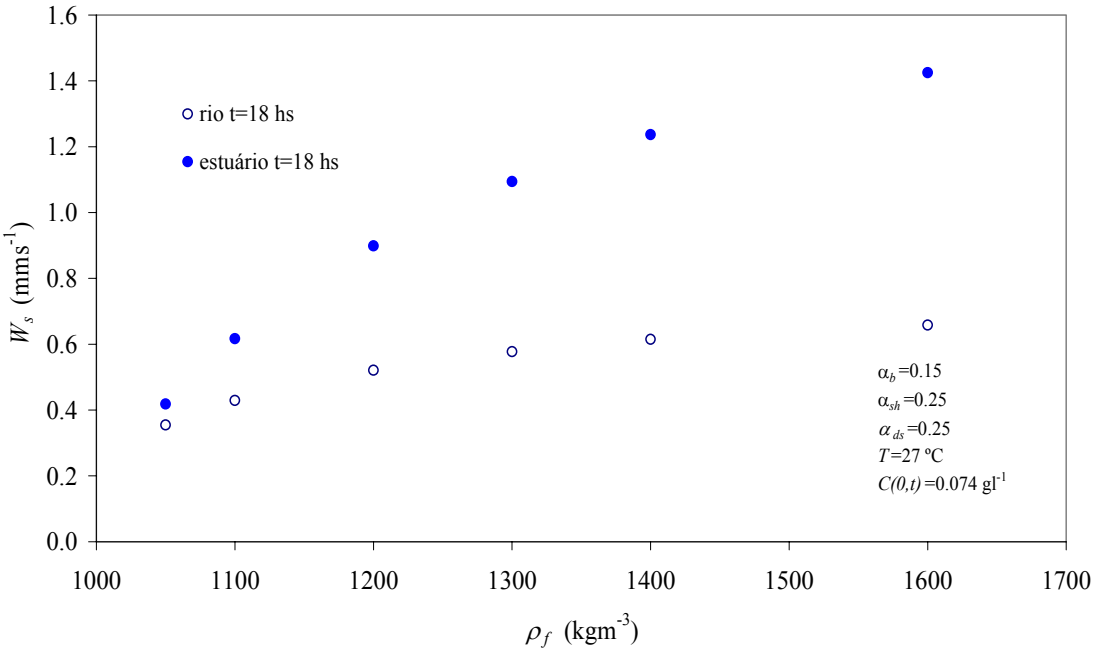


Figura 5.8: Variações de W_s segundo ρ_f para o trecho fluvial e para o estuário.

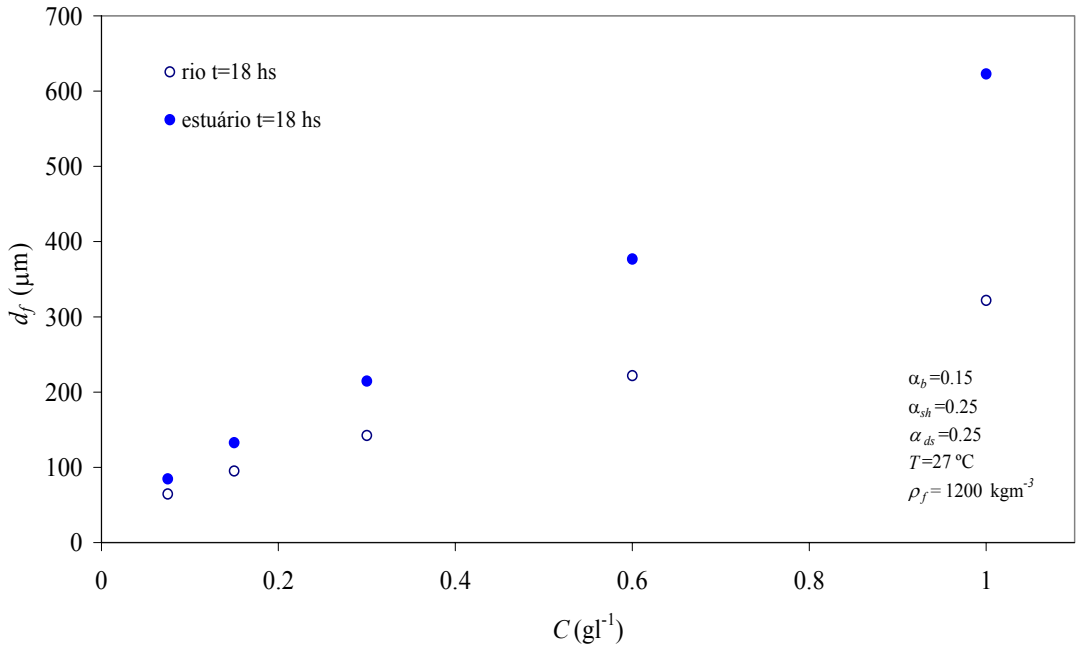


Figura 5.9: Variações de d_f segundo C para o trecho fluvial e o estuário.

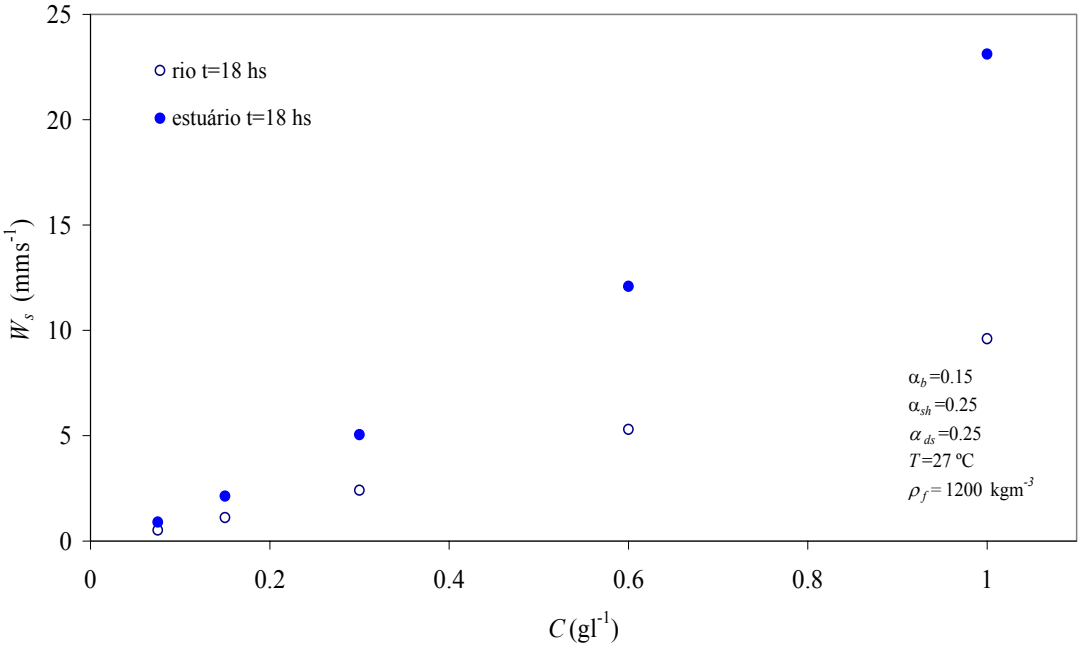


Figura 5.10: Variações de W_s segundo C para o trecho fluvial e para o estuário.

A análise realizada dos experimentos 5 e 6 para variações de α_b (experimento 5, processos 18 a 20, Tabela 5.1) e a temperatura da água (experimento 6, processos 20 a 22, Tabela 5.1) indicam no primeiro caso que as variações para d_f e W_s foram de 12% e

de 24%, respectivamente. Para o segundo caso, quando o parâmetro foi a temperatura, d_f variou na ordem do 1% em ambos ambientes e W_s por volta de 10%. Devido à pouca sensibilidade com respeito a estes dois parâmetros, ambos foram considerados constantes na implementação do modelo para o rio e estuário do Paraíba do Sul.

A sétimo experimento, relacionada com a primeira e a terceira, consistiu em analisar as mudanças em d_f e W_s para variações simultâneas de ρ_f e α_{sh}. O objetivo foi verificar o funcionamento do algoritmo que calcula os d_f. Na Tabela 5.2 detalham-se os parâmetros utilizados em cada processo.

Na Figura 5.11 adverte-se que no trecho fluvial d_f tende a aumentar junto com a massa específica e a eficiência, a uma taxa maior que no trecho do estuário (ver a Figura 5.12). A taxa de crescimento de d_f é inversamente proporcional à massa específica dos flocos. Este processo é produzido com G, α_{ds} e h constantes, portanto não são os fatores determinantes deste comportamento diferenciado, nem parece sê-lo também o W_s, calculado antes. O fator responsável é o crescimento mantido de α_{sh}. As variações de d_f no estuário mostram-se na Figura 5.12, apreciando-se tendências mais amortecidas quanto ao crescimento dos diâmetros, devido ao menor G e ao crescimento de h.

Tanto na Figura 5.13 como na Figura 5.14 aprecia-se que as W_s acrescentam segundo a massa específica dos flocos, não segundo o tamanho, sendo os menores e mais densos os mais rápidos em ambos cenários. As W_s são maiores no estuário pela diminuição de G e pela importância da maior massa específica. Destaca-se que nos experimentos de laboratório não foi registrado que os flocos menores e mais densos, os gerados no floculador Couette (comparáveis aos flocos do trecho fluvial), sejam os mais rápidos a cair. Pelo contrário, os mais velozes foram os formados no disco (comparáveis aos flocos do trecho de estuário) caracterizados por serem de maior tamanho e menor massa específica (ver Tabela 3.7, Tabela 3.8 e Figura 3.13). Neste caso acontece que os d_f são muito menores, em geral, que os flocos de laboratório e portanto as massas específicas altas cobram preponderância ainda que sua relação seja linear com W_s .

Tabela 5.2: Variáveis implementadas para a análise de sensibilidade do sétimo experimento.

Processo	α_b m^3s^{-1}	α_{sh} m^3s^{-1}	α_{ds} m^3s^{-1}	S psu	ρ_f kgm^{-3}	$C(0,t)$ kgm^{-3}	T ºC
26	0.15	0.05	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
10	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
27	0.15	0.50	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
28	0.15	0.75	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
29	0.15	1.00	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
30	0.15	0.05	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
11	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
31	0.15	0.50	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
32	0.15	0.75	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
33	0.15	1.00	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
46	0.15	0.05	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
47	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
48	0.15	0.50	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
49	0.15	0.75	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
50	0.15	1.00	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
34	0.15	0.05	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
12	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
35	0.15	0.50	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
36	0.15	0.75	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
37	0.15	1.00	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
38	0.15	0.05	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
13	0.15	0.25	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
39	0.15	0.50	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
40	0.15	0.75	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
41	0.15	1.00	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
42	0.15	0.05	0.25	0.0	1600	0.075	27.0
14	0.15	0.25	0.25	0.0	1600	0.075	27.0
43	0.15	0.50	0.25	0.0	1600	0.075	27.0
44	0.15	0.75	0.25	0.0	1600	0.075	27.0
45	0.15	1.00	0.25	0.0	1600	0.075	27.0

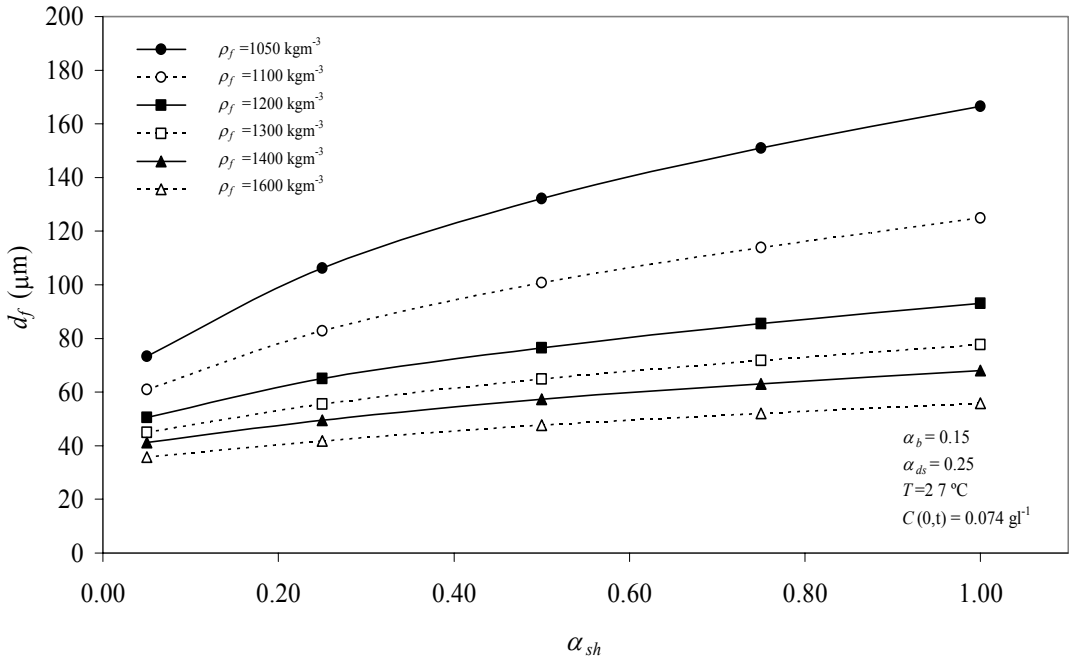


Figura 5.11: Variações de d_f segundo α_{sh} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial.

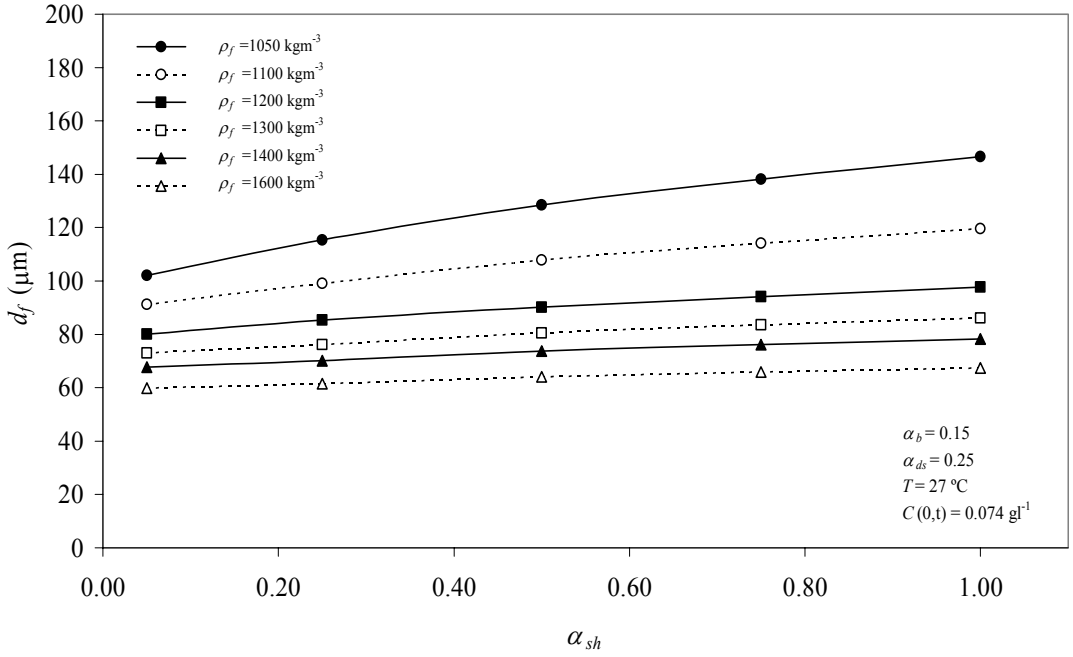


Figura 5.12: Variações de d_f segundo α_{sh} com diferentes ρ_f para o trecho de estuário.

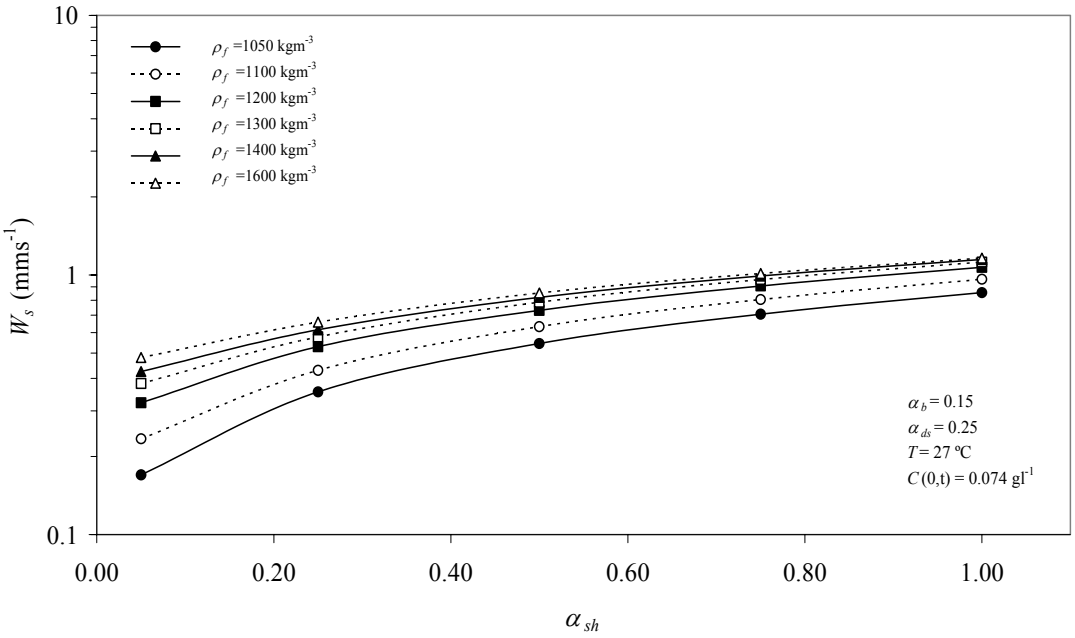


Figura 5.13: Variações de W_s segundo α_{sh} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial.

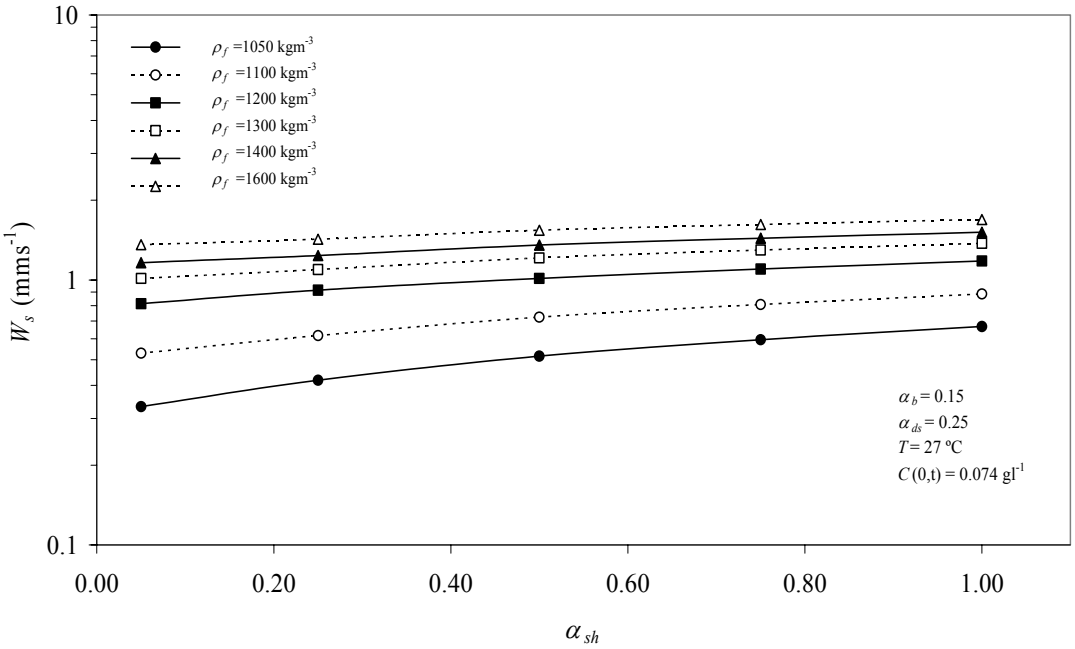


Figura 5.14: Variações de W_s segundo α_{sh} com distintas ρ_f para o trecho de estuário.

A oitavo experimento, relacionado com a segundo e a terceiro, consistiu em analisar as mudanças em d_f e W_s de acordo a modificações em ρ_f e α_{ds}. Na Tabela 5.3 detalham-se os parâmetros utilizados em cada processo.

Tabela 5.3: Variáveis implementadas para a análise de sensibilidade do oitavo experimento.

Processo	α_b	α_{sh}	α_{ds}	S	ρ_f	$C(0,t)$	T
	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	psu	kgm^{-3}	kgm^{-3}	ºC
51	0.15	0.25	0.10	0.0	1050	0.075	27.0
10	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0
52	0.15	0.25	0.50	0.0	1050	0.075	27.0
53	0.15	0.25	0.75	0.0	1050	0.075	27.0
54	0.15	0.25	1.00	0.0	1050	0.075	27.0
55	0.15	0.25	0.10	0.0	1100	0.075	27.0
11	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0
56	0.15	0.25	0.50	0.0	1100	0.075	27.0
57	0.15	0.25	0.75	0.0	1100	0.075	27.0
58	0.15	0.25	1.00	0.0	1100	0.075	27.0
2	0.15	0.25	0.10	0.0	1200	0.075	27.0
6	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0
7	0.15	0.25	0.50	0.0	1200	0.075	27.0
8	0.15	0.25	0.75	0.0	1200	0.075	27.0
9	0.15	0.25	1.00	0.0	1200	0.075	27.0
59	0.15	0.25	0.10	0.0	1300	0.075	27.0
12	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0
60	0.15	0.25	0.50	0.0	1300	0.075	27.0
61	0.15	0.25	0.75	0.0	1300	0.075	27.0
62	0.15	0.25	1.00	0.0	1300	0.075	27.0
63	0.15	0.25	0.10	0.0	1400	0.075	27.0
13	0.15	0.25	0.25	0.0	1400	0.075	27.0
64	0.15	0.25	0.50	0.0	1400	0.075	27.0
65	0.15	0.25	0.75	0.0	1400	0.075	27.0
66	0.15	0.25	1.00	0.0	1400	0.075	27.0
67	0.15	0.25	0.10	0.0	1600	0.075	27.0
14	0.15	0.25	0.25	0.0	1600	0.075	27.0
68	0.15	0.25	0.50	0.0	1600	0.075	27.0
69	0.15	0.25	0.75	0.0	1600	0.075	27.0
70	0.15	0.25	1.00	0.0	1600	0.075	27.0

Os d_f no trecho fluvial e no estuário aumentam com a eficiência α_{ds} à medida que diminui a massa específica dos flocos, da mesma forma que no experimento anterior. A diferença fundamental é que neste caso a taxa de crescimento dos d_f foi maior no estuário, enquanto que no experimento anterior foi no trecho fluvial. Isto se explica pela incidência das respectivas eficiências de colisão em cada trecho, α_{sh} no fluvial, e α_{ds} no estuário.

A W_s cresce neste caso também segundo a massa específica dos flocos, não segundo o tamanho, sendo os menores e mais densos os mais rápidos em ambos cenários. A igualdade de massa específica, o maior tamanho dos flocos no estuário em relação à experimento anterior (ver a Figura 5.17 e na Figura 5.18) traduz-se num notável acréscimo de velocidades, de até 3 vezes para as massas específicas maiores. Destaca-se então a importância de estabelecer cuidadosamente este parâmetro, ρ_f, na implementação do modelo.

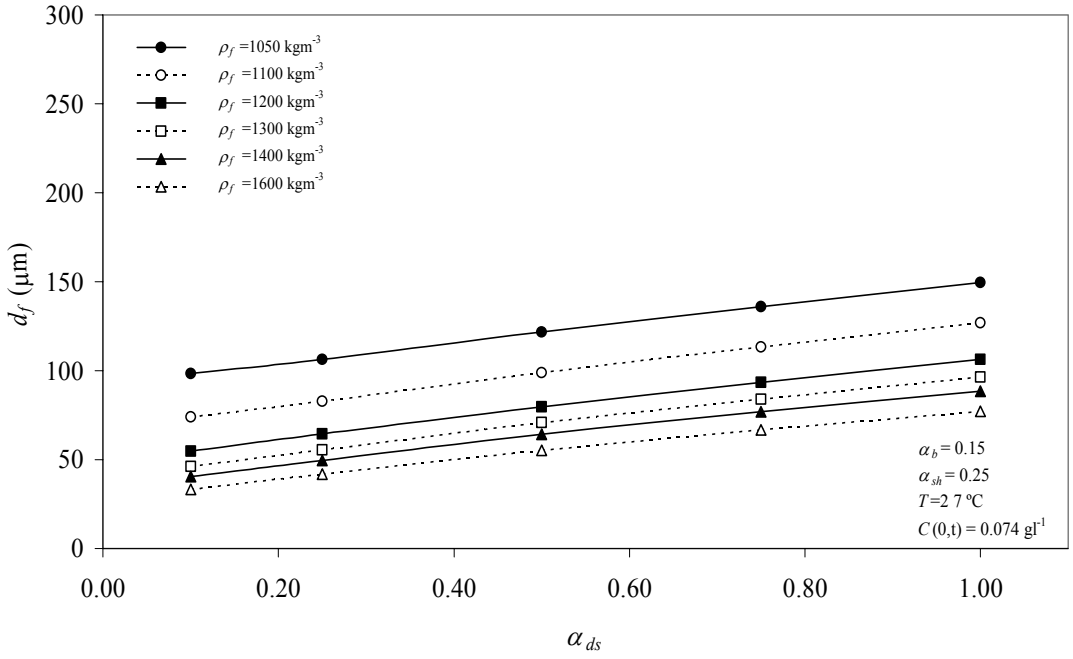


Figura 5.15: Variações de d_f segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial.

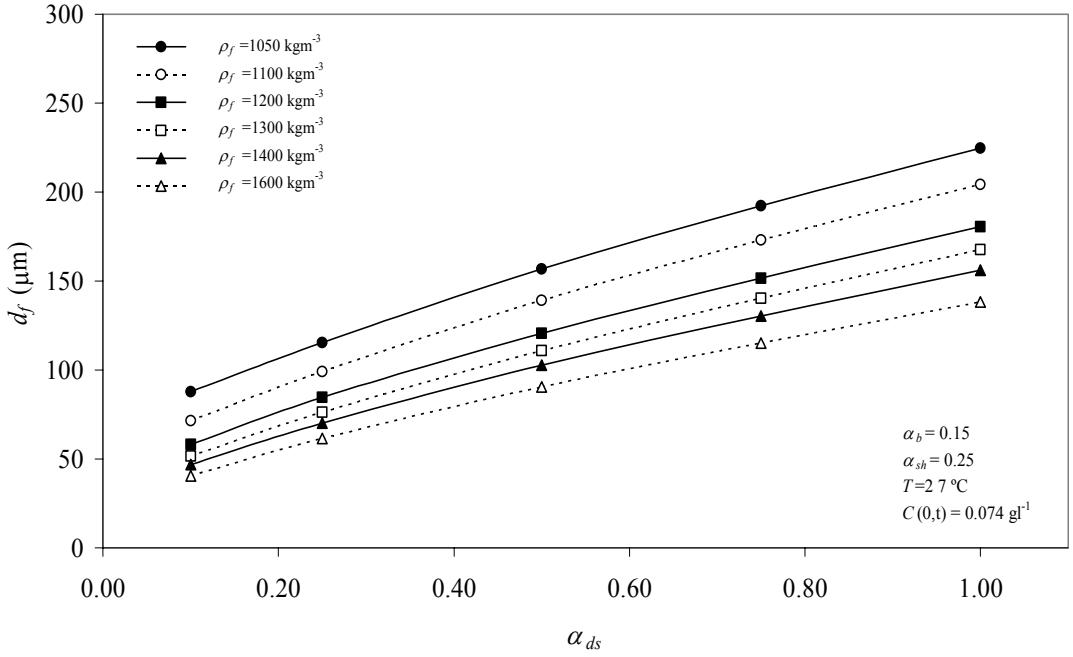


Figura 5.16: Variações de d_f segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho de estuário.

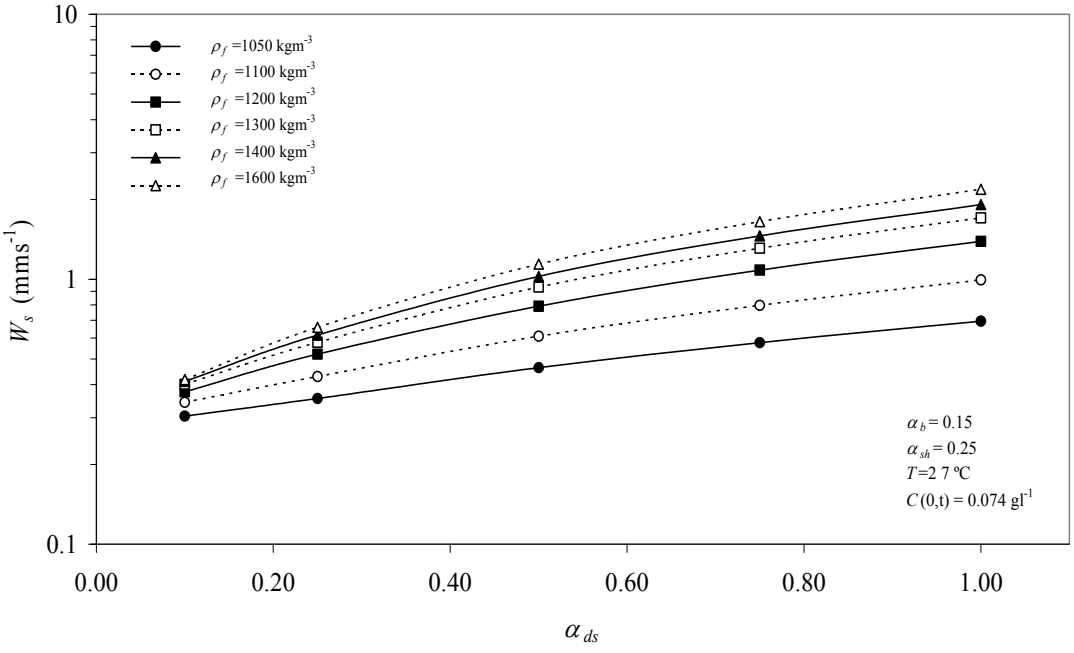


Figura 5.17: Variações de W_s segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho fluvial.

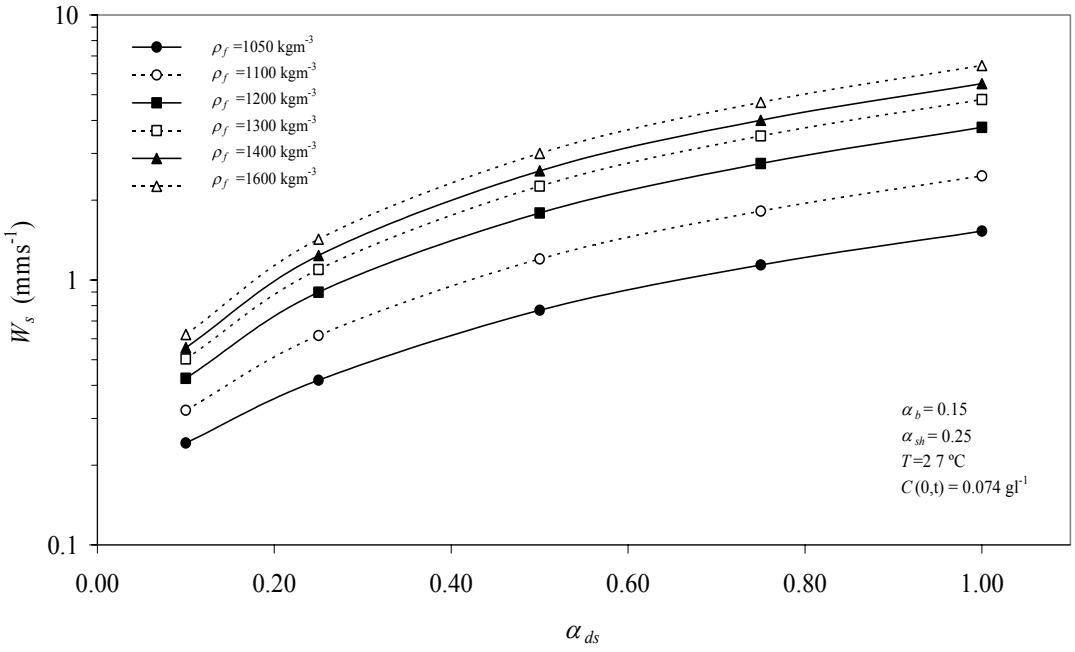


Figura 5.18: Variações de W_s segundo α_{ds} com diferentes ρ_f para o trecho de estuário.

Neste caso acontece algo semelhante ao que ocorre no experimento anterior, onde as W_s acrescentam segundo a massa específica dos flocos, não segundo o tamanho, em ambos cenários. Também sucede neste caso que para uma dada massa específica adotada do floco, os d_f calculados do experimento numérico são menores que os flocos de laboratório, e portanto a W_s fica assim determinada pela massa específica diferencial. Alem disso, há diferenças morfológicas e de regime na queda dos flocos do laboratório, que são diferentes daquelas consideradas no modelo numérico.

5.2 Análise do algoritmo para a tensão resistente de flocos τ_f.

A inclusão de um experimento que considera a tensão resistente dos flocos fecha a análise da sensibilidade dos parâmetros do modelo. O objetivo principal do experimento foi verificar a ocorrência da diminuição de tamanhos de flocos por efeito da desagregação por tensões cortantes para o intervalo $0 < \tau_f \leq 0.30$. Na Tabela 5.4 detalham-se os parâmetros empregados em cada processo.

Implementou-se o modelo de floculação de FARLEY e MOREL (ver parágrafo 2.3.4), modificando-se o coeficiente K_{sh} devido às tensões de cisalhamento (definido na

Tabela 2.2) segundo definido na equação (2.57): $K_{sh} = G/\pi - \theta\left(\tau_b/\tau_f\right)$, para incluir o efeito de desagregação para os casos em que $\tau_f \leq \tau_b$, onde o segundo termo do membro direito representa a desagregação por tensões de cisalhamento τ_b, sendo θ um coeficiente (s^{-1}). A tensão de resistência que os flocos desenvolvem variou de forma independente de ρ_f. Destaca-se que, tanto K_{sh} como G, são funções das variáveis espaciais e do tempo, ao contrario do exemplo de aplicação do parágrafo 2.3.4.1: experimento de laboratório realizado em uma coluna de sedimentação, em que ambos parâmetros foram constantes. O gradiente de concentrações $\partial C / \partial z$ na equação (2.30) parametrizou-se com C/h, que representa um gradiente médio de concentração de sedimentos finos na vertical. O coeficiente θ, que atua como um parâmetro de escala, fixou-se em 1.0 s^{-1}.

As tensões de cisalhamento do escoamento no trecho fluvial foram τ_b=1.8 Nm^{-2}, enquanto que no estuário seguiram a variação que é mostrada na Figura 5.19. A análise efetuada para ambos trechos, cujos resultados desenharam-se na Figura 5.20 e na Figura 5.21, evidencia a importância de incluir no modelo o efeito de desagregação por tensões de cisalhamento. Em ambas figuras são comparados os d_f obtidos para a situação hipotética de agregação pura (terceiro experimento, ver Figura 5.7 e Figura 5.8) com os conseguidos para diferentes τ_f e massas específicas de flocos.

No trecho fluvial ficaram balanceados os efeitos de agregação com os de quebra de flocos por efeito das tensões de cisalhamento, portanto todos os d_f superpõem-se para cada ρ_f em forma independente das tensões resistentes. Estes resultados mostram também o pouco efeito de agregação por sedimentação diferencial no trecho fluvial. No trecho de estuário, em alguns casos, as τ_b foram superadas pelas tensões resistentes (a partir da progressiva 4600 m), como pode observar-se na Figura 5.19. Neste caso, as diferenças de massas específicas dos flocos têm importância ao prevalecer o mecanismo de agregação sobre o de ruptura de flocos, e além disso o processo de sedimentação diferencial, obtendo-se desse modo maiores tamanhos de flocos a maior τ_f. Por esta razão, os d_f calculados se aproximam mais da curva de agregação pura (na qual τ_f é infinito e $K_{sh}=G\pi^{-1}$), para o estuário que para o rio. Observe-se que a aproximação à curva ocorre no sentido das τ_f crescentes.

As diferenças em d_f para ambos cenários advertem-se nas W_s, que resultaram maiores no rio devido a seu maior tamanho (ver Figura 5.22 e Figura 5.23). Põe-se de manifesto então que, as conseqüências de uma incorreta parametrização do efeito de ruptura de flocos podem levar a uma super-estimação da taxa de sedimentação no rio.

Tabela 5.4: Variáveis implementadas na análise de sensibilidade do nono experimento.

Processo	α_b	α_{sh}	α_{ds}	S	ρ_f	$C(0,t)$	T	τ_f
	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	psu	kgm^{-3}	kgm^{-3}	ºC	Nm^{-2}
71	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0	0.05
72	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0	0.05
73	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.05
74	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0	0.05
75	0.15	0.25	0.25	0.0	1500	0.075	27.0	0.05
76	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0	0.10
77	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0	0.10
78	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.10
79	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0	0.10
80	0.15	0.25	0.25	0.0	1500	0.075	27.0	0.10
81	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0	0.15
82	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0	0.15
83	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.15
84	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0	0.15
85	0.15	0.25	0.25	0.0	1500	0.075	27.0	0.15
86	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0	0.20
87	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0	0.20
88	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.20
89	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0	0.20
90	0.15	0.25	0.25	0.0	1500	0.075	27.0	0.20
91	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0	0.25
92	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0	0.25
93	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.25
94	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0	0.25
95	0.15	0.25	0.25	0.0	1500	0.075	27.0	0.25
96	0.15	0.25	0.25	0.0	1050	0.075	27.0	0.30
97	0.15	0.25	0.25	0.0	1100	0.075	27.0	0.30
98	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.30
99	0.15	0.25	0.25	0.0	1300	0.075	27.0	0.30
100	0.15	0.25	0.25	0.0	1500	0.075	27.0	0.30

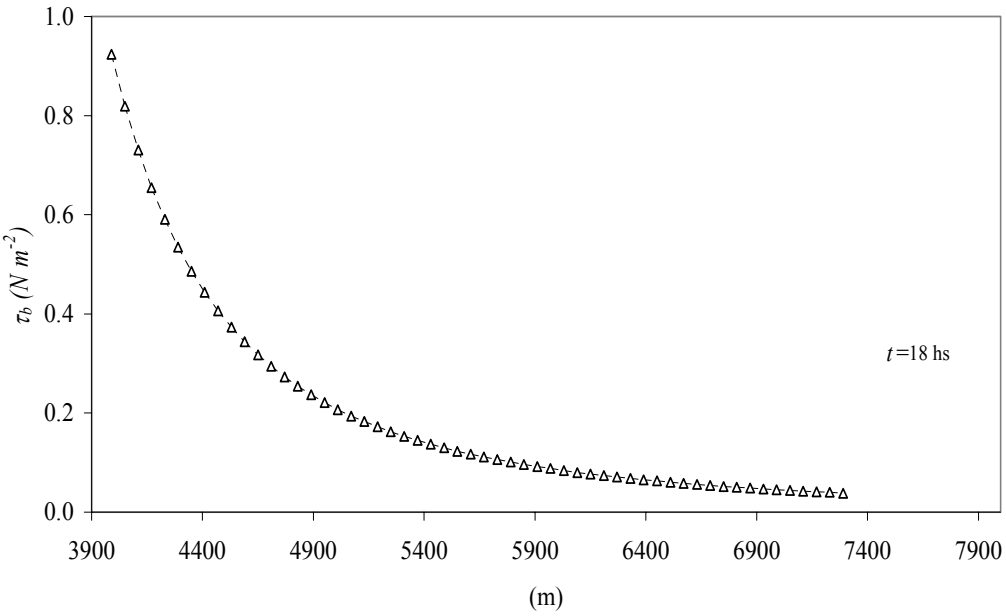


Figura 5.19: Perfil espacial de τ_b no trecho de estuário.

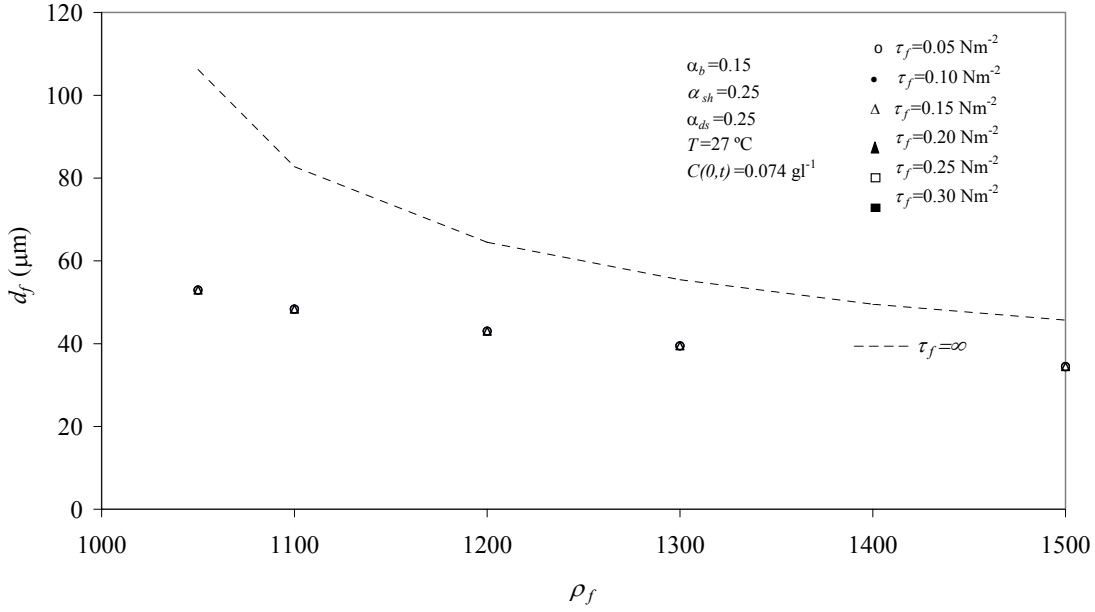


Figura 5.20: Variações de d_f com diferentes ρ_f para o trecho fluvial.

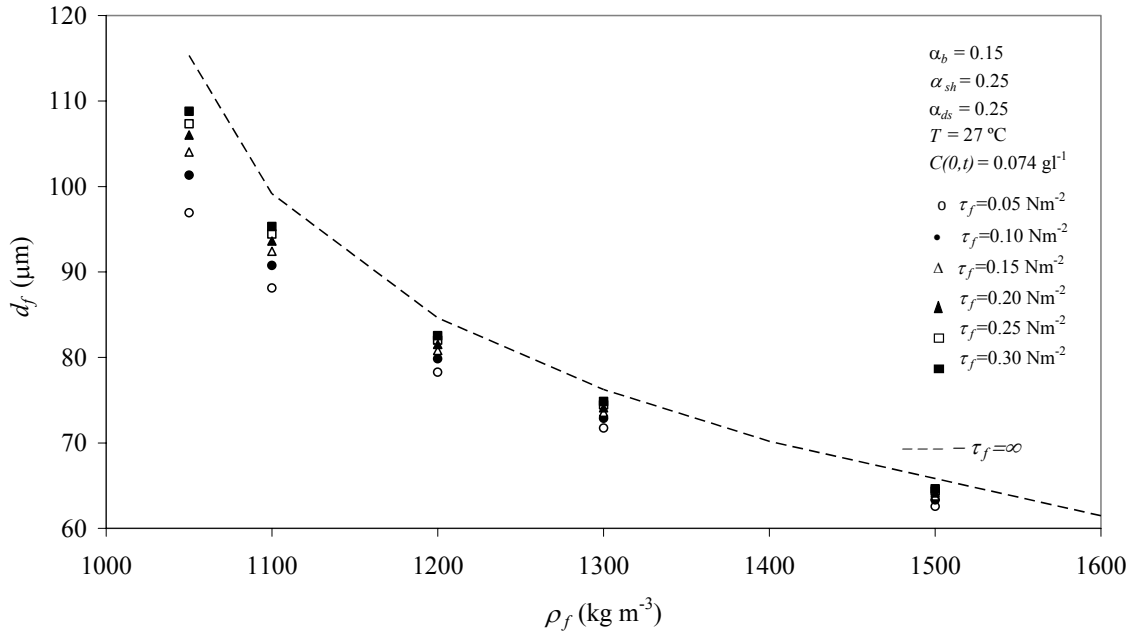


Figura 5.21: Variações de d_f com distintas ρ_f para o trecho de estuário.

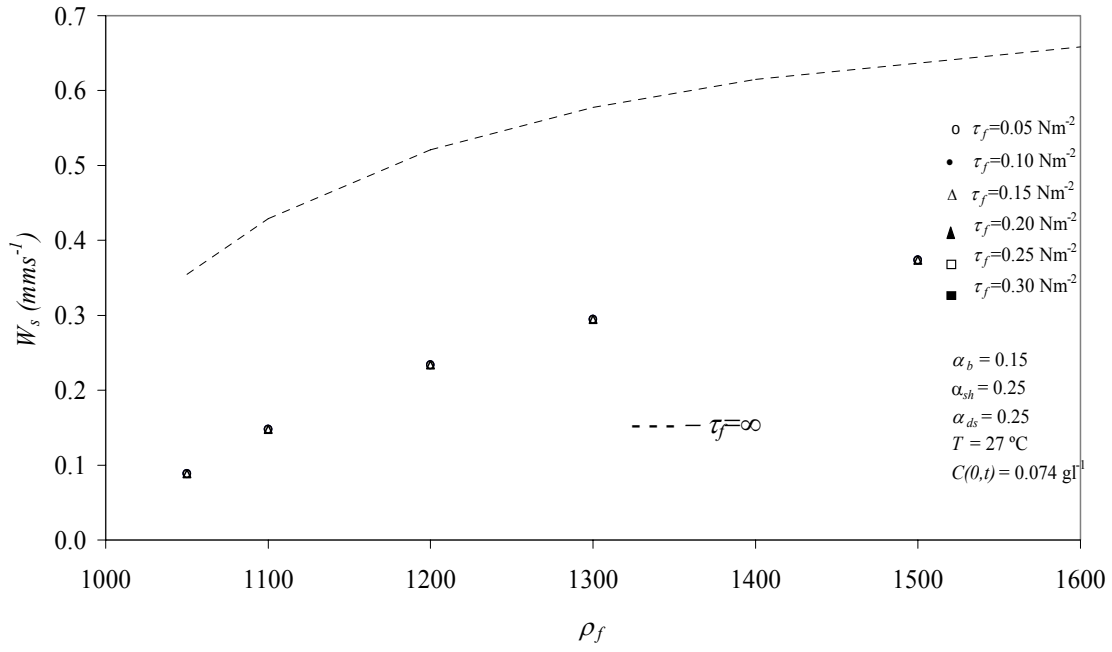


Figura 5.22: Variações de W_s com diferentes ρ_f para o trecho fluvial.

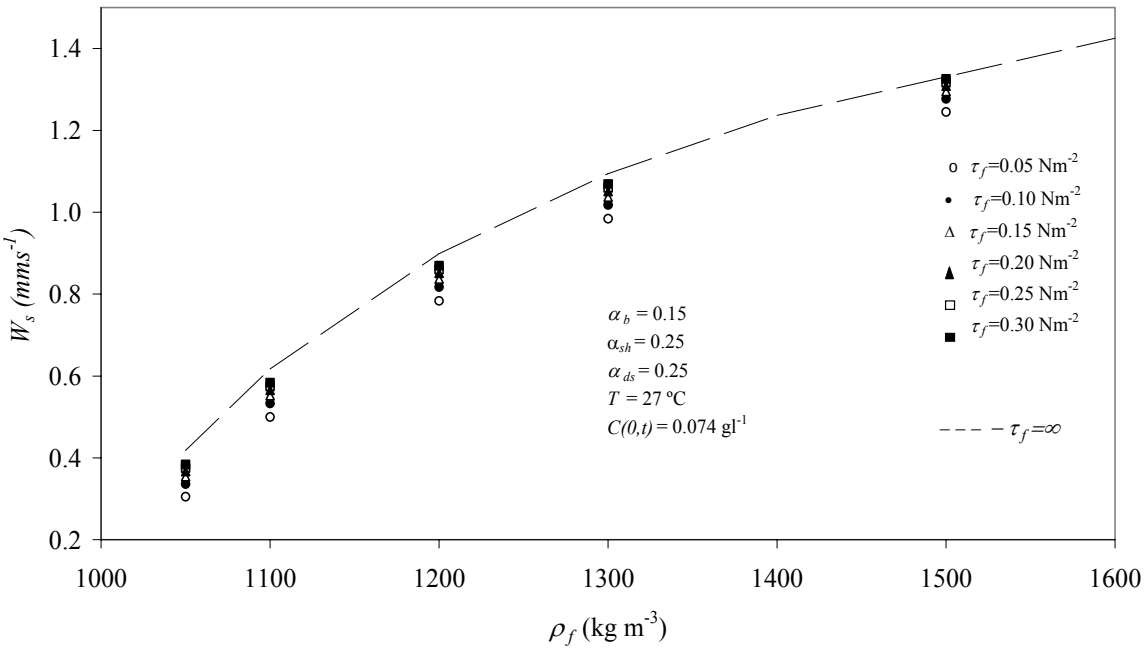


Figura 5.23: Variações de W_s com diferentes ρ_f para o trecho de estuário.

5.3 Representação do diagrama conceitual de DYER

As relações entre concentrações de sedimentos, tensões de cisalhamento e tamanho médio dos flocos foram desenhadas por DYER (1989) em um esquema conceitual que é mostrado na Figura 5.24. No diagrama observa-se que para baixas concentrações o tamanho médio dos flocos é pequeno, mas incrementa-se quando cresce a probabilidade de colisões à medida que aumenta a taxa de tensões de cisalhamento.

Uma vez superada uma determinada tensão de resistência dos flocos, por exemplo a equação (2.48), desagregam-se em flocos menores. A concentrações maiores formam-se flocos também maiores, menos resistentes, propensos a quebrar por pequenas tensões. Um aspecto chave da velocidade de queda de flocos é sua massa específica, essencial para determinar, entre outras variáveis, sua capacidade para resistir às tensões de cisalhamento da turbulência. Os flocos maiores podem ser menos densos, e conhecer sua massa específica é importante para calcular a massa de sedimentos que se deposita sobre o leito. Os flocos pequenos, muito mais numerosos que os macro-flocos, têm maior massa específica, e são mais importantes de um ponto de vista ambiental, por sua

grande superfície de contato com o escoamento, que lhes permite ser agentes de transporte de substâncias tóxicas e de matéria orgânica.

Simulou-se o diagrama conceitual de DYER com o objetivo de verificar a capacidade do modelo, para representar os processos básicos de floculação para diferentes tensões de cisalhamento, concentrações e tamanhos dos flocos. Para a representação do diagrama conceitual adotaram-se os seguintes valores:

Tabela 5.5: Variáveis implementadas para representar o esquema conceitual.

Processo	α_b	α_{sh}	α_{ds}	S	ρ_f	$C(0,t)$	T	τ_f
	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	m^3s^{-1}	psu	kgm^{-3}	kgm^{-3}	ºC	Nm^{-2}
83	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.075	27.0	0.15
101	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.150	27.0	0.15
102	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.200	27.0	0.15
103	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.300	27.0	0.15
104	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.250	27.0	0.15
105	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.100	27.0	0.15
106	0.15	0.25	0.25	0.0	1200	0.050	27.0	0.15

Na Figura 5.25 mostram-se os resultados do modelo para um intervalo de tensões de cisalhamento entre 0.038 e 1.89 Nm^{-2}, para concentrações entre 0.050 e 0.300 gl^{-1}. O tamanho menor do floco calculado foi de 17 μm (para C=0.05 gl^{-1} e τ_b=1.889 Nm^{-2}) e o maior de foi de 261 μm (para C=0.30 gl^{-1} e τ_b=0.0389 Nm^{-2}). A comparação com o esquema conceitual (e qualitativo) de DYER permite afirmar que obteve-se uma razoável representação da dinâmica de formação de agregados. Em relação a W_s, a maior foi W_s=6.95 mms^{-1} para C=0.30 gl^{-1} e τ_b=0.039 Nm^{-2} e a mínima W_s=0.14 mms^{-1} para C=0.05 gl^{-1} e τ_b=1.889 Nm^{-2}.

Destaca-se que a inclusão do termo de quebra de flocos na equação (2.57) foi fundamental para uma simulação correta, do contrário teria sido obtida uma configuração de crescimento dos flocos de maior tamanho (d_f > 300 μm) devido à agregação por colisões sem restrições por tensões de cisalhamento do escoamento.

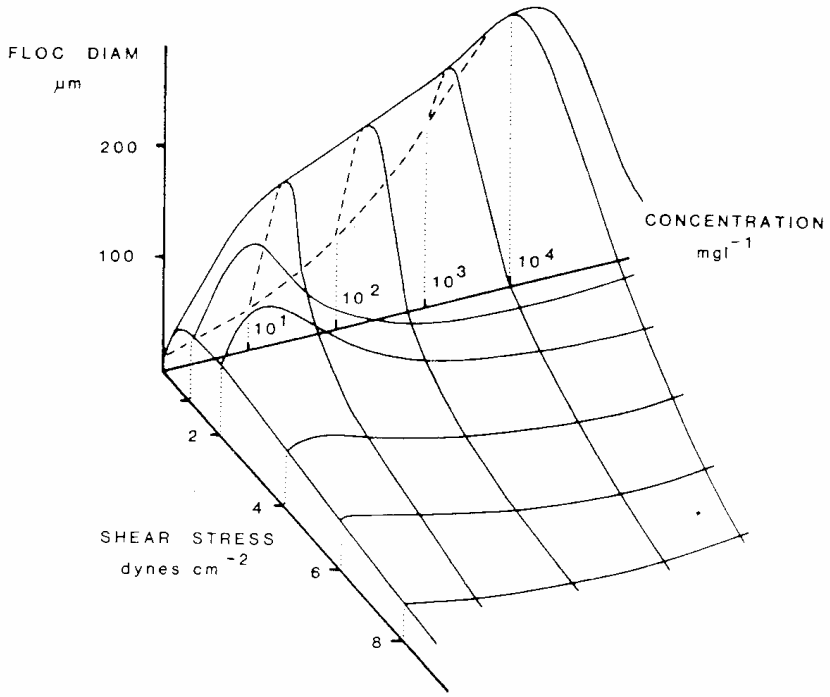


Figura 5.24: Diagrama conceitual de DYER que representa qualitativamente as relações entre as tensões de cisalhamento, a concentração e o tamanho dos flocos (Reproduzido de DYER, 1989).

Na Figura 5.26 mostra-se a representação numérica do esquema conceitual, obtida por MANNING e DYER (1999) com uma fórmula de regressão múltipla, elaborada segundo experimentos de laboratório em um canal anular. Para a figura se extrapolaram as tensões de cisalhamento com respeito às utilizadas (de 0.1 a 0.6 Nm^{-2}, equivalentes a 12 a 45 s^{-1}), conseguindo um d_f superior ao máximo medido ($\cong$ 200 μm). A comparação com a Figura 5.25 permite comprovar o funcionamento conceitualmente correto do modelo Lagrangiano, ainda que os resultados correspondem a cenários diferentes.

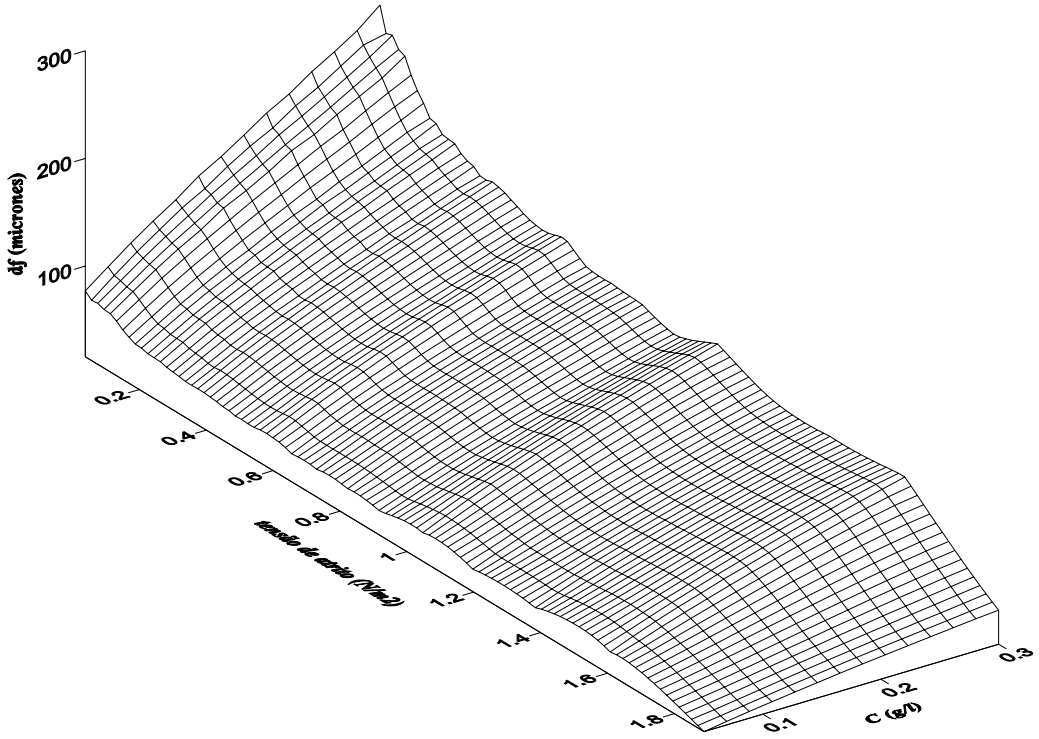


Figura 5.25: Resultado da aplicação do modelo de floculação para simular o diagrama conceitual de DYER (1989).

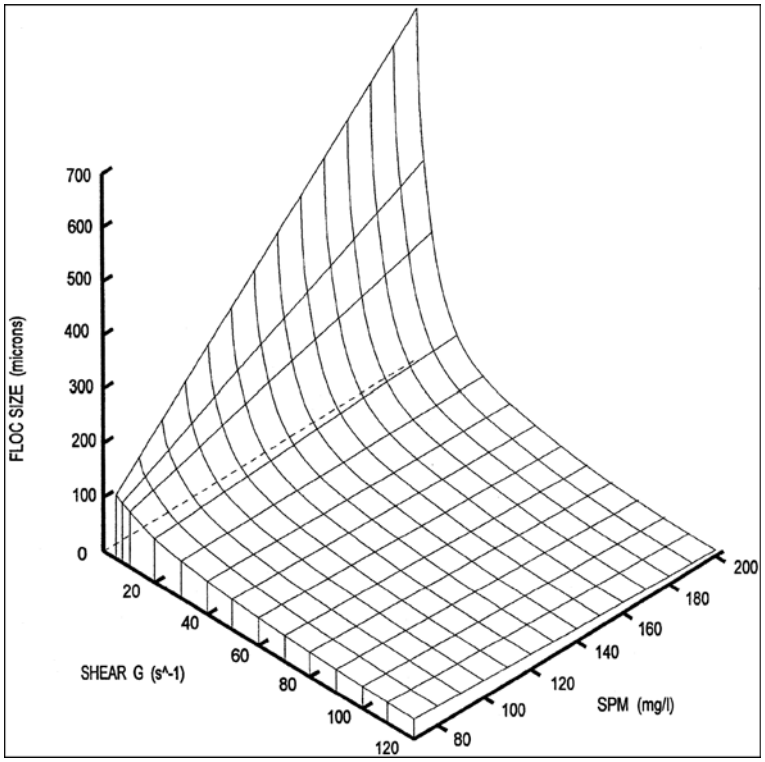


Figura 5.26: Representação do esquema conceitual com base em experimentos de laboratório (Reproduzido de MANNING e DYER, 1999).

5.4 Conclusões

Realizou-se a análise de sensibilidade de parâmetros mediante uma série de dez experimentos numéricos nos quais se analisaram resultados para variações de todas as eficiências de agregação, a massa específica dos flocos, a concentração de sedimentos, a temperatura da água, tanto para o ambiente fluvial como para o estuário. O modelo foi implementado em um domínio simplificado, que, no entanto, guardou apreciável semelhança geométrica e hidrodinâmica com o trecho principal onde o rio Paraíba do Sul se conecta com o mar.

Os resultados foram satisfatórios enquanto permitiram verificar o correto funcionamento do modelo de FARLEY e MOREL para o cálculo das W_s, assim como do algoritmo iterativo que calcula os diâmetros dos flocos. A limitação no crescimento dos flocos por efeito das tensões de cisalhamento turbulentas efetuou-se segundo a modificação do coeficiente K_{sh}. Os resultados permitem apreciar a importância de uma correta parametrização do modelo, para evitar erros importantes no cálculo da sedimentação e no transporte de sedimentos em geral.

A incidência da salinidade não foi simulada, pois a informação disponível de laboratório não permitiu estabelecer com clareza o valor limite a partir do qual se acelera o processo de floculação.

6. Implementação do modelo no estuário do rio Paraíba do Sul

Neste capítulo se descreve uma implementação preliminar do modelo de transporte de sedimentos no estuário do rio Paraíba do Sul. Foram calculadas as concentrações (C), os diâmetros dos flocos (d_f) e a velocidade média de sedimentação dos flocos (W_s). Os resultados do modelo foram contrastados com: a) medições de d_f e C efetuadas no próprio estuário durante o trabalho de campo de janeiro de 2004 e W_s calculados a partir dos perfis de concentrações.

O rio Paraíba do Sul tem 1145 km de comprimento, drena a área de uma bacia hidrográfica de 55400 km^2 , parte dos três estados mais industrializados do Brasil (Minas Gerais, São Paulo e Rio de Janeiro). É o principal aporte de água para a população da cidade do Rio de Janeiro, mas também é usado para descarregar efluentes de numerosas indústrias ao longo do seu curso (CARVALHO *et al.*, 2002). Os principais tributários são os rios Paraibuna, Pomba e Muriaé, o regime de marés regional é semidiurno. O estuário se localiza no litoral norte de Rio de Janeiro, (21° 36' S e 41° 05' O), observando-se na imagem da Figura 6.1 a planície aluvial do rio e a região do estuário.

Figura 6.1: Imagem de satélite do rio Paraíba do Sul (www.cdbrasil.cnpm.embrapa.br).

O regime hidrológico do rio Paraíba do Sul é relativamente regular, sendo suas maiores descargas no verão, entre novembro e janeiro, devido às precipitações pluviométricas tropicais, e menores no inverno, entre junho e agosto. As vazões médias do período úmido se situam entre 700 e 1.300 m^3s^{-1}, e os do período seco entre 400 e 500 m^3s^{-1}. De acordo com a informação proporcionada pela Agência Nacional de Água do Brasil (ANA), no período 1992-2002, a máxima vazão medida na estação de Campos foi de 5304 m^3s^{-1} e a mínima de 234 m^3s^{-1}, com uma média de 642 m^3s^{-1}. Segundo SCHETTINI *et al*., (2004) pode-se afirmar que o estuário do Rio Paraíba do Sul é de micromaré, dominado pelo regime fluvial, com uma vazão média suficiente para não permitir a entrada de água marinha ao interior do sistema, e que não se verificam condições de estratificação vertical no estuário.

Consideraram-se marés astronômicas com as 14 constantes harmônicas de maior amplitude, sendo M2 a principal com uma amplitude de 0.39 m. As fases foram obtidas de uma estação maregráfica próxima (Fundeio 1 Norte-Oceânica, 22º 06´00´´ S, 40º 01´00´´ W) e se interpolaram ao longo do contorno.

O efeito do vento conquanto é importante, não foi considerado no modelo para simplificar sua aplicação.

O domínio de modelação completo é mostrado na Figura 6.2 junto com a batimetria da área com base da carta náutica 1403 (DIRETORIA DE HIDROGRAFIA E NAVEGAÇÃO, 2000) e medições realizadas.

6.1 Trabalhos de campo

Foram realizados dois trabalhos de campo no estuário do Rio Paraíba do Sul, o primeiro em fevereiro de 2003, de caráter exploratório, e o segundo em janeiro de 2004, em condições de maré de quadratura, no que se mediram variáveis em 14 verticais (Figura 6.3). As verticais 2 a 6 foram medidas no dia 27 de janeiro entre as 10.40 h e as 15.15 h, e as verticais 7 a 15 no dia 28 de janeiro entre as 12.40 e as 17 h.

O instrumental utilizado foi uma sonda Ndp Nortek de 1500 kHz para medição de perfil de velocidades em duas direções horizontais perpendiculares e fornecendo informação de profundidade local; uma sonda Ctd SensorData^{TM} SD202$^{®}$. para determinação de turbidez, oxigênio dissolvido, salinidade, profundidade e temperatura em cada vertical, com intervalos de 50 cm entre pontos de medição; uma sonda Lisst 25 para a determinação *in situ* do tamanho dos flocos; uma garrafa Wildco de 2.2 litros para a coleta de amostras de sedimentos suspensos; um condutivímetro Orion 110A para salinidade, condutividade, e temperatura; um aparelho Valeport para a determinação de granulometria de sedimentos suspensos e um amostrador para sedimentos de fundo. Foram coletadas 27 amostras para sedimentos suspensos, 72 para o aparelho Valeport, 27 para a determinação granulométrica com um aparelho Malvern na COPPE, e amostras de sedimentos de fundo.

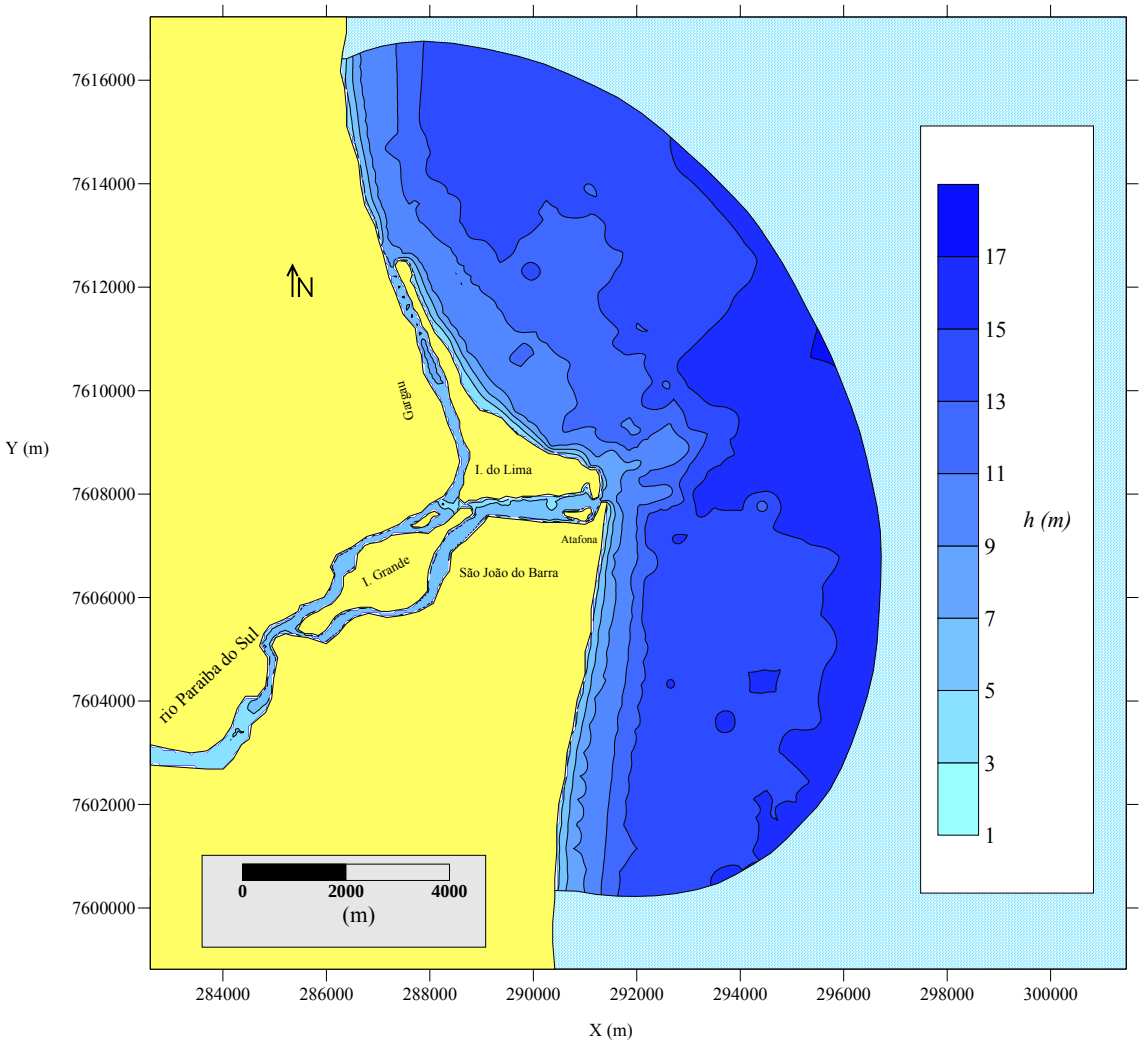


Figura 6.2: Domínio do modelo e batimetria da área em estudo.

Para a calibração do turbidimetro foram utilizadas 27 amostras de sedimentos suspensos (Figura 6.4).

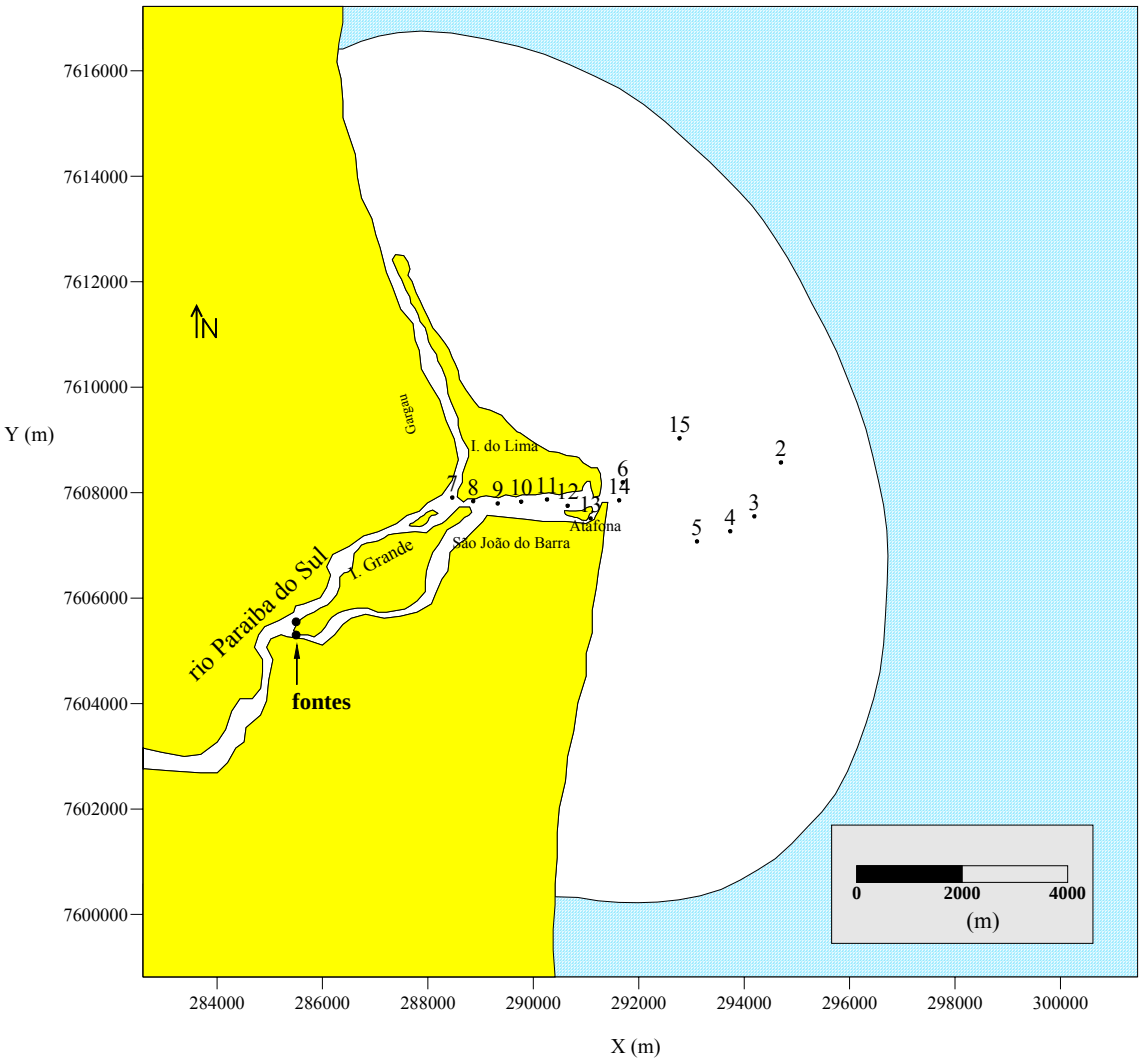


Figura 6.3: Localização de fontes e de verticais de amostragem de sedimentos suspensos, de medição de velocidades da corrente, no trecho fluvial e estuarino, na campanha de janeiro de 2004.

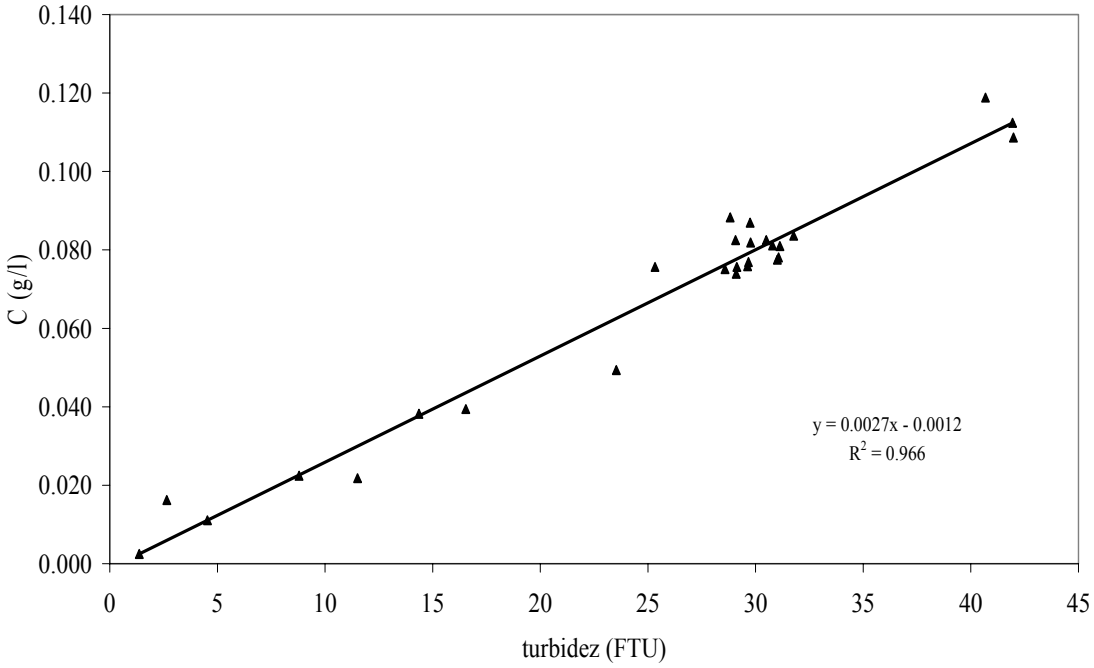


Figura 6.4: Calibração do turbidimetro.

6.2 Simulação Hidrodinâmica

O sistema computacional empregado foi o SisBAHIA (Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental) que é um conjunto de modelos, hidrodinâmicos e de transporte, desenvolvidos por ROSMAN (1987, 2000) e que vem sendo continuamente aperfeiçoado. Tem sido utilizado em diversas aplicações realizadas na Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica do Programa de Engenharia Oceânica da UFRJ, e portanto, é um modelo amplamente avaliado e testado em todos os seus módulos. No desenvolvimento deste trabalho utilizou-se o módulo hidrodinâmico bidimensional horizontal (2DH), com as seguintes características principais: são resolvidas a equação da conservação de massa integrada ao longo da vertical (6.1) e as equações de quantidade de movimento (Navier-Stokes) com a aproximação de águas rasas (pressão hidrostática) para escoamentos homogêneos integrados na vertical, na direção x e na direção y, equações (6.2) e (6.3) respectivamente:

$$\frac{\partial z}{\partial t} + \frac{\partial U(H+z)}{\partial x} + \frac{\partial V(H+z)}{\partial y} = 0 \qquad (6.1)$$

$$\frac{\partial U}{\partial t}+U\frac{\partial U}{\partial x}+V\frac{\partial U}{\partial y}-U2\phi\, sen\theta=$$
$$-g\frac{\partial z}{\partial x}+\frac{1}{\rho_0(H+z)}\left(\frac{\partial\left((H+z)\tau_{xx}\right)}{\partial x}+\frac{\partial\left((H+z)\tau_{xy}\right)}{\partial y}+(\tau_x^S-\tau_x^B)\right) \quad (6.2)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t}+U\frac{\partial V}{\partial x}+V\frac{\partial V}{\partial y}+V2\phi\, sen\theta= \quad (6.3)$$
$$-g\frac{\partial z}{\partial y}+\frac{1}{\rho_0(H+z)}\left(\frac{\partial\left((H+z)\tau_{xy}\right)}{\partial x}+\frac{\partial\left((H+z)\tau_{yy}\right)}{\partial y}+(\tau_y^S-\tau_y^B)\right)$$

onde x e y são as direções principais, longitudinal e transversal, respectivamente, U e V são as componentes das velocidades promediadas na vertical nas direções x e y , z é a elevação acima de um nível de referência; H é a profundidade média abaixo do nível de referência; g é a aceleração da gravidade; ρ_o é uma massa específica de referência; τ_{xx}, τ_{xy}, τ_{yy} são as tensões turbulentas promediadas na vertical; τ_x^B, τ_y^B são as tensões de atrito no fundo nas direções x e y; τ_x^S, τ_y^S são as tensões de atrito na superfície nas direções x e y; ϕ é a velocidade angular de rotação da Terra no sistema de coordenadas local; θ é o ângulo de latitude em radianes.

O tratamento da turbulência é baseado na técnica de filtragem (ROSMAN, 1987) e é auto-ajustável na escala submalha. Modificações nos termos de filtragem (ROSMAN e GOBBI, 1990) permitem o uso de escalas de largura de filtragem local não homogêneas nas três dimensões (x, y, t) no cálculo das tensões turbulentas; o coeficiente de atrito é dependente da rugosidade equivalente de fundo sendo variável no tempo e espaço.

A discretização espacial no plano horizontal x-y do modelo é feita mediante elementos finitos Lagrangeanos subparamétricos. As variáveis do escoamento e os parâmetros do domínio são definidos por polinômios Lagrangeanos quadráticos e empregando malha quadrangular, neste caso (com 9 nós, sendo necessários valores nos vértices, no meio de cada lado do elemento e um nó no centro do elemento) (ROSMAN, 2000). Na discretização temporal são aplicados esquemas de diferenças finitas de

segunda ordem, utilizando-se o esquema de Crank-Nicholson nos termos lineares e uma fatorização implícita de segunda ordem nos termos não lineares (ROSMAN, 2000).

6.2.1 Implementação do modelo hidrodinâmico

A malha foi composta por 482 elementos quadráticos e 2229 nós (Figura 6.5 e Figura 6.6). Para as condições de contorno na seção de entrada foram impostas condições de velocidades, compatíveis com as vazões medidas na seção de controle da cidade de Campos (ANA, 2004).

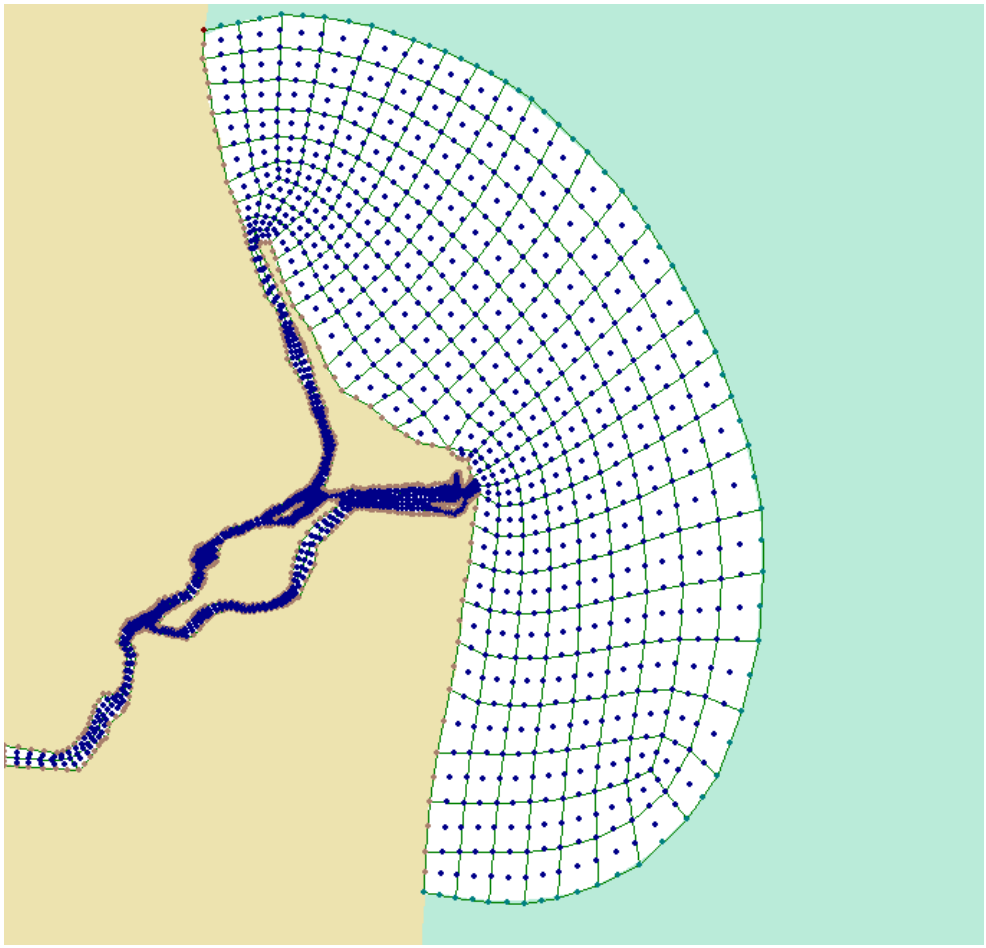


Figura 6.5: Malha completa do modelo hidrodinâmico.

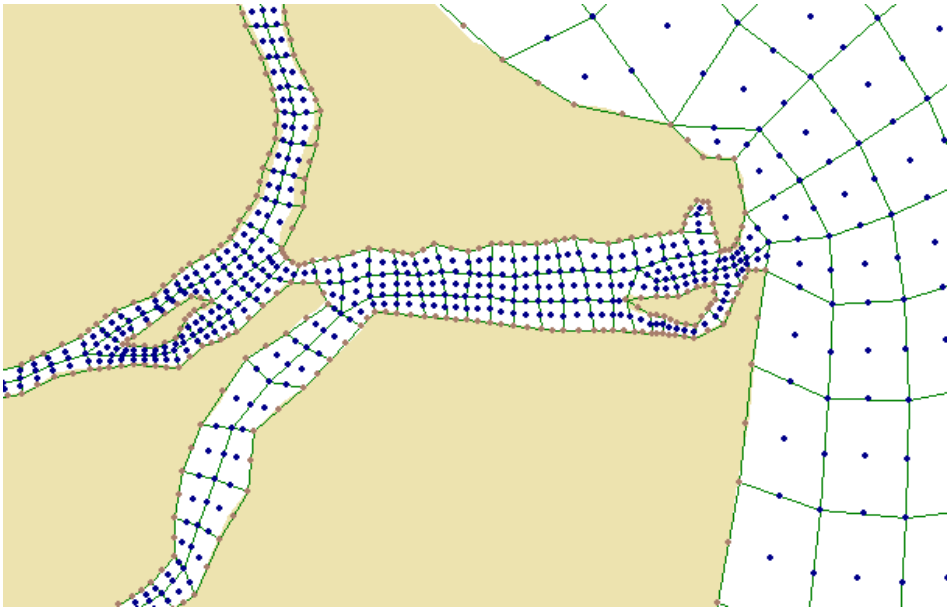


Figura 6.6: Vista ampliada da malha para o trecho de estuário.

A simulação foi realizada para um período de 10 dias, para obter as velocidades e níveis simulados próprios do período de quadratura, durante o qual se realizaram as medições em campo.

Na Figura 6.7 foram comparados os registros obtidos a partir do marégrafo da localidade de Atafona na boca do estuário (extrapolados pela falta do funcionamento do marégrafo a partir do dia 27 de janeiro), com os resultados de níveis da água, indicando-se a posição relativa à maré, das verticais 7 e 13. O campo de velocidades foi calculado com um coeficiente n de Manning de 0.03 e um intervalo temporal Δt=60 s

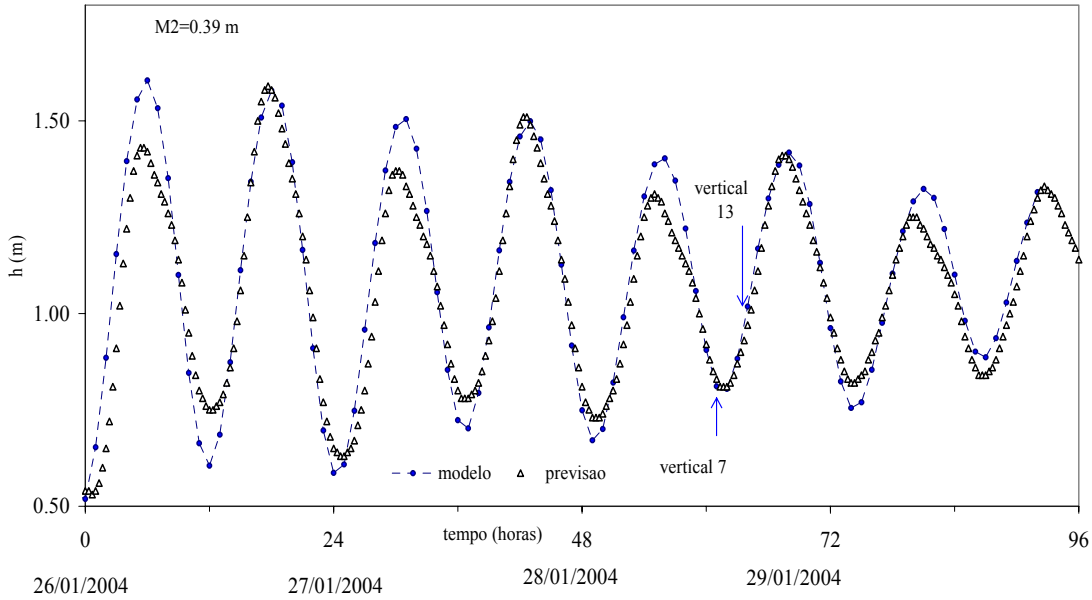


Figura 6.7: Comparação da previsão de maré obtida a partir de dados de marégrafo de Atafona com resultados do modelo hidrodinâmico no mesmo local.

6.3 Resultados do modelo de transporte de sedimentos

6.3.1 Condições de implementação

Implementou-se o modelo de partículas no domínio definido na Figura 6.5, simulando-se a variação de concentrações de sedimentos suspensos, tamanhos de flocos e velocidades de sedimentação. Para o cálculo da concentração foram adotados intervalos espaciais de 100 m e temporal de 120 s. A malha de cálculo teve 11821 nós. Os coeficientes de dispersão longitudinal D_{yy} e transversal D_{xx} foram determinados segundo ELDER (1959). As tensões de cisalhamento críticas para erosão e deposição foram adotadas em τ_e=0.20 Nm^{-2} e τ_d=0.07 Nm^{-2}, respectivamente. Para o cálculo de deposição foi adotado o coeficiente β=1 na equação $C_b=\beta C$, segundo conceitos do ponto 4.3.2, tendo em conta a uniformidade dos perfis de concentrações no estuário (ver Figura 6.10).

A entrada de massa de sedimentos finos ao sistema foi simulada mediante duas fontes em linha permanentes, localizadas em cada braço do rio, no extremo oeste da ilha Grande (ver Figura 6.3). As localizações das fontes tiveram um impacto neutro nos resultados do

modelo, e sua localização obedeceu somente à economia de tempo de processamento. Em cada fonte i ingressam a cada Δt um número de partículas $NP_i=Q\ C(x_{fi},y_{fi},t)\Delta t/MP$, com MP a massa de cada partícula, x_{fi} e y_{fi} as coordenadas espaciais da fonte i, resultando desta forma numa condição de concentração de sedimentos constante no contorno de montante, $C(x_{fi},y_{fi},t)$=0.074 gl^{-1}, para a vazão afluente.

A massa específica diferencial dos flocos foi calculada com a equação ajustada de acordo com os resultados dos experimentos com floculadores descritos no Capítulo 3, Figura 3.18, enquanto que a tensão resistente dos flocos foi calculada segundo o ajuste mostrado na Figura 3.27, obtida em função da massa específica diferencial dos flocos. Quando a relação τ_b/C foi maior ao limite superior do intervalo com o qual se traçou a curva, adotou-se a massa específica diferencial constante, correspondente ao máximo τ_b/C, isto é $\Delta\rho_f$=262kgm^{-3}. Em definitiva, ambas variáveis, $\Delta\rho_f$ e τ_f, dependem então da relação τ_b/C, com a concentração calculada pelo modelo de partículas e a tensão τ_b com a hidrodinâmica gerada pelo modelo SisBAHIA.

Os diâmetros dos flocos foram calculados segundo o algoritmo de Newton Raphson, que é mostrado no ANEXO 2. No modelo de floculação, a temperatura da água e a floculação devida ao movimento Browniano não foram consideradas relevantes, de acordo com os resultados dos experimentos numéricos do parágrafo 5.1.

É adotada como hipótese que a origem dos sedimentos para todo o domínio de modelação se deve unicamente às duas fontes escolhidas, fixando-se então a condição inicial $C(x,y,0)=0$. Esta condição permite isolar o sistema de fontes externas de sedimentos, no entanto não é realista, porque de tal modo não se considera o transporte por correntes litorais ou, a presença de sedimentos do mesmo estuário gerados em situações antecedentes.

6.3.2 Resultados e Discussão

Os diâmetros dos flocos foram medidos com o aparelho Lisst segundo seqüências de 5 medições de 20 segundos cada uma por ponto da vertical, em oito verticais a diferentes profundidades, obtendo-se os registros desenhados na Figura 6.8 (com z medido a partir da superfície). Adverte-se que os d_f tenderam a aumentar com a profundidade e também em direção à foz de saída do estuário, desde as verticais 10 a 13, encontrando-se todos os

tamanhos no intervalo 23-40 μm. A exceção foi registrada na vertical 15, localizada no mar dentro da nuvem de sedimentos, a aproximadamente 1800 m da foz do estuário. Nessa vertical foram medidos tamanhos de flocos de 100 e 120 μm perto da superfície, enquanto que entre os 3 e 7 metros de profundidade foram medidos tamanhos entre 11 e 14 μm, os quais não corresponderiam a flocos senão a partículas individuais, pois o d_{50} da amostra de sedimentos de fundo foi de 11 μm. A formação dos flocos na vertical 15 será discutida ao final do parágrafo.

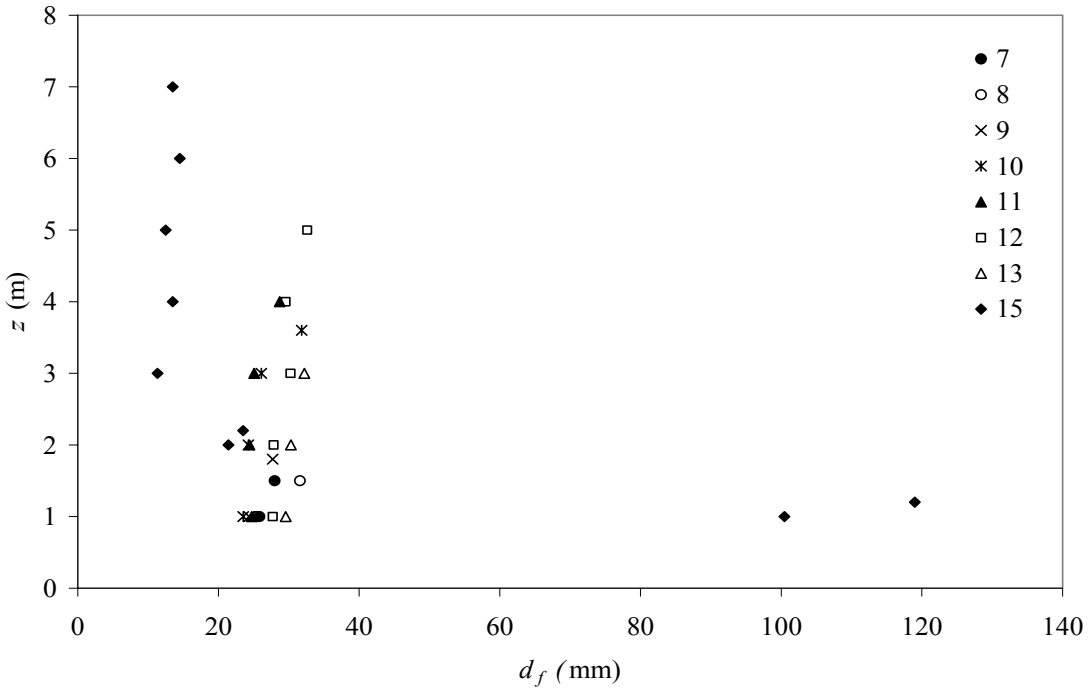


Figura 6.8: Tamanhos de flocos a diferentes profundidades nas verticais 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 e 15.

Na Figura 6.9 se comparam, por um lado, d_f calculados vs. d_f medidos, e por outro, diâmetros d_{50} das partículas individuais das mesmas amostras. A progressiva 288500 corresponde à vertical 7 e a 291500 à saída do estuário, perto da vertical 6 (ver Figura 6.3).

Os tamanhos dos flocos foram mais do dobro do d_{50} da distribuição granulométrica medida em laboratório por difração laser com um aparelho Malvern. Os d_{50} se localizaram no intervalo 8.4 μm (vertical 5) a 12 μm (vertical 7), sendo uma exceção a amostra da vertical 2, com d_{50}=23.5 μm. Os d_f calculados no estuário variam no intervalo (21.9 μm, 27.1 μm) representando bem os d_f medidos com o aparelho Lisst, conquanto na verticais

12 e 13 o modelo subestima levemente as d_f. O maior d_f foi calculado na vertical 9 (Figura 6.9).

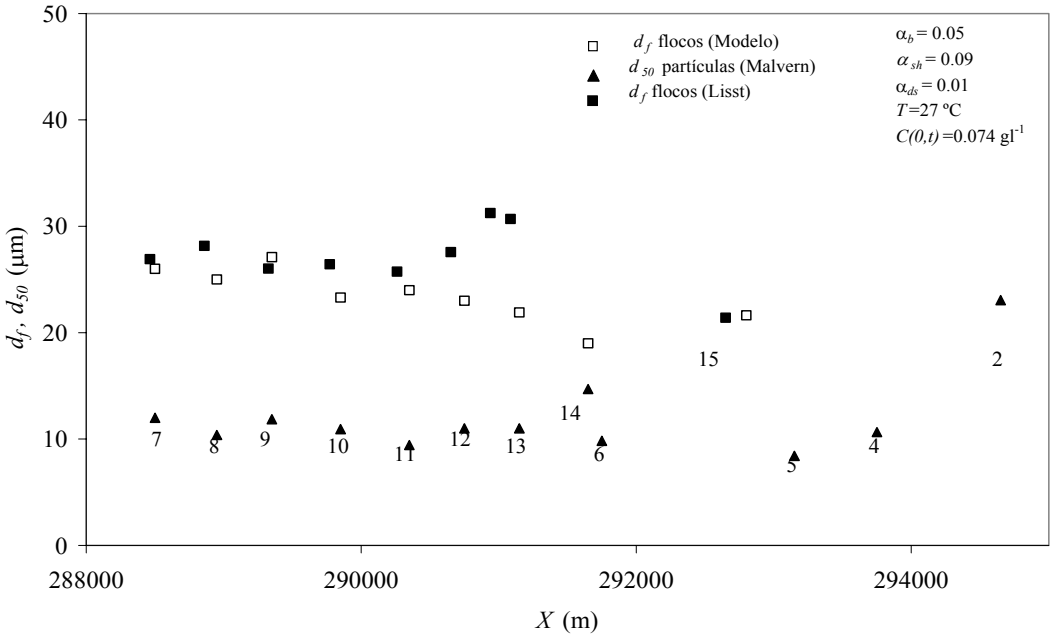


Figura 6.9: d_f calculados e medidos com Lisst 25, e diâmetros de partículas medidas com Malvern, nas diferentes verticais.

As concentrações medidas no estuário foram uniformes na vertical, próprias de águas bem misturadas, ao redor de um valor médio de 80 mgl^{-1} como pode ver-se na Figura 6.10. O modelo estima no tramo interior do estuário (verticais 7 a 13) as concentrações C no intervalo 70-81 mgl^{-1}, em correspondência geral com as medições (ver Figura 6.11), salvo na vertical 13. A subestimação de C nessa vertical explica a subestimação de d_f.

O modelo prediz uma queda significativa de concentrações médias no mar, como pode ser observado na Figura 6.11. A presença no mar de uma maior quantidade de sedimentos finos comparada com a calculada pode dever-se a que dez dias antes do trabalho de campo se registraram altas vazões na estação de medição de Campos, com um máximo de 3137 m^{3}s^{-1} no 18 de janeiro de 2004, quatro vezes maior do que a vazão da simulação, como indicado na Figura 6.12, e vazões superiores a 2200 m^{3}s^{-1} durante 4 dias consecutivos (16 a 19 de janeiro). De modo que os sedimentos amostrados nas verticais 2, 3, 4 e 5 podem corresponder a uma situação precedente.

Na Figura 6.13 e na Figura 6.14 podem observar-se as diferentes configurações das nuvens dos sedimentos em uma situação e em outra. Na primeira, com uma vazão semelhante ao trabalho de 27 e 28 de janeiro de 2004, as nuvens de sedimentos estão próximas à costa, e na segunda, mais semelhante às vazões medidas dez dias antes do trabalho de campo, as nuvens de sedimentos estão bem separadas da costa. Neste contexto devem ser analisados os perfis observados de concentração medidas em mar aberto da Figura 6.18, destacando-se a não uniformidade com respeito aos medidos no estuário e às concentrações próximas ao leito nas verticais 3, 4 e 5, de 252, 454 e 221 mgl^{-1}, respectivamente, notoriamente superiores às do estuário. A presença de tais concentrações não pode ser explicada pela erosão do leito, pois τ_b não chegou a superar 0.004 Nm^{-2} no momento das medições, portanto é muito provável que os sedimentos presentes correspondam a um nível energético do escoamento remanescente de uma situação anterior, como a descrita acima.

Os resultados obtidos com o modelo foram conseguidos com α_{sh}=0.09, α_{ds}=0.01 e α_b=0.50. A eficiência por sedimentação diferencial α_{ds}=0.01, se adotou considerando as conclusões do trabalho de KIM e STOLZENBACH (2004) relativas à baixa eficiência na sedimentação diferencial, para condições semelhantes as simuladas. O primeiro cálculo para a eficiência de colisão por tensões de cisalhamento, efetuou-se com a fórmula desenvolvida no parágrafo 3.6, equação (3.11), adotando-se d_p=17 μm, d_f=26 μm, $\Delta\rho_f$=150 kgm^{-3}, $\Delta\rho_s$=1650 kgm^{-3}, *Te=800* s, *C*=0.150 gl^{-1} e *G*= 3.5 s^{-1}, obtendo-se α_{sh}=0.121, sendo uma boa aproximação para o parâmetro finalmente adotado.

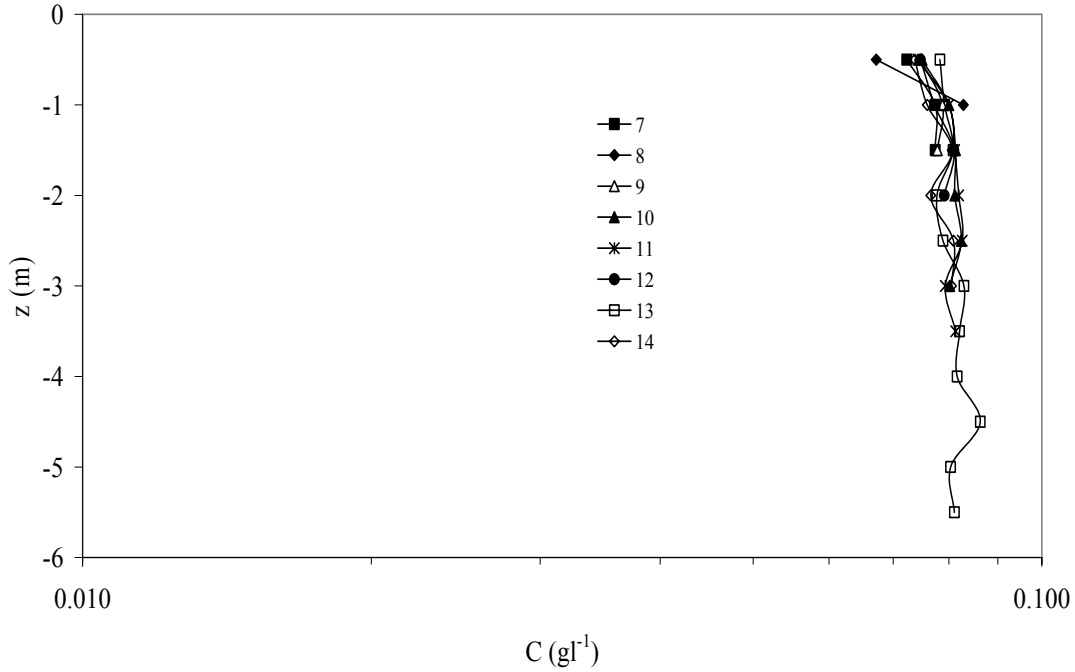


Figura 6.10: Perfis de concentrações medidas nas verticais 7, 8, 9, 10, 11, 12, 13 e 14, no interior do estuário (ver Figura 6.3).

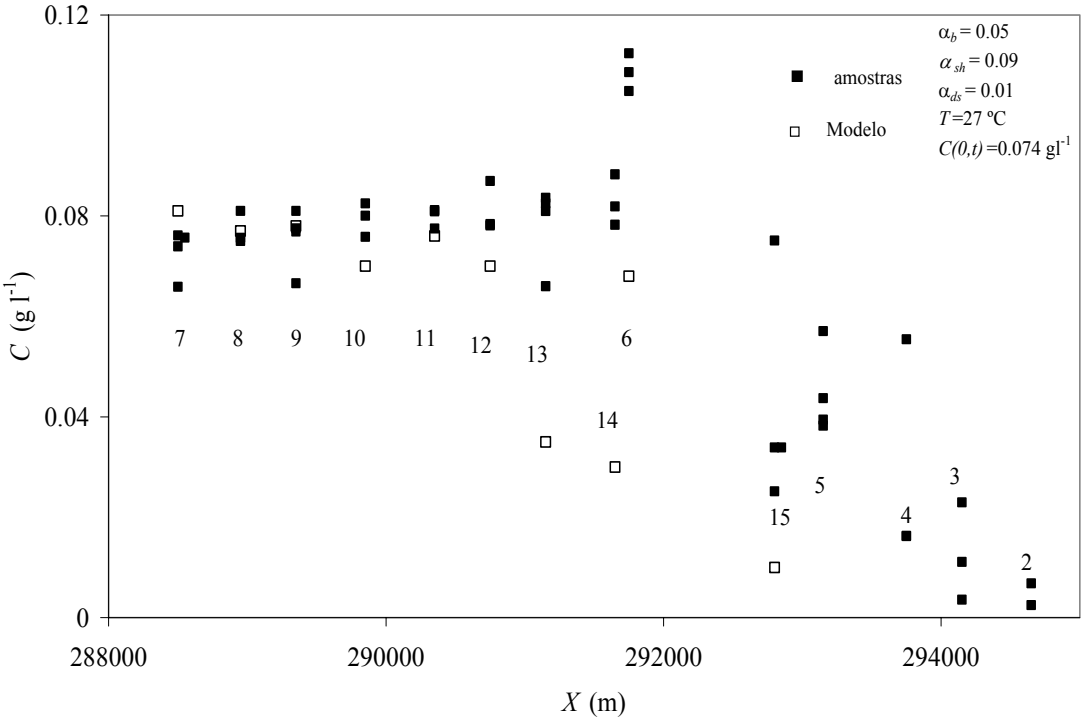


Figura 6.11: Concentrações calculadas e das amostras coletadas em diferentes profundidades, em cada vertical .

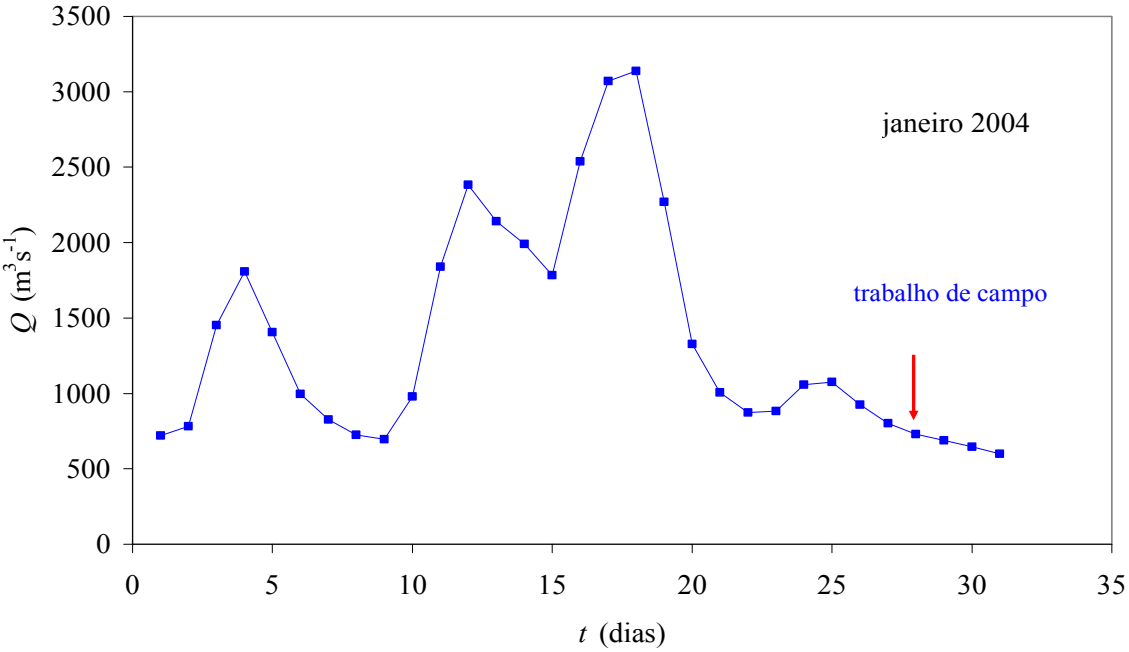


Figura 6.12:Vazões medidos na estação do Campos (RJ), dados da ANA.

Figura 6.13: Imagem do satélite do estuário do rio Paraíba do Sul, correspondente ao 3 de março de 1995 com Q≈ 700 m^3s^{-1}.

Figura 6.14: Imagem do satélite do estuário do rio Paraíba do Sul, correspondente ao 14 de janeiro de 1996 com Q≈ 2500 m^3s^{-1}.

Na Figura 6.15 foram desenhadas as mudanças temporais dos d_f, do parâmetro *G,* da velocidade *U* e a altura da onda *z* com respeito ao nível médio, na vertical 9. Mostram-se também o d_f médio, medido *in situ* com o Lisst. Observa-se ao longo de cada ciclo de maré que o parâmetro *G* apresenta dois picos, um maior e outro menor, com máximos de 2.20 s^{-1} e 0.20 s^{-1}. O primeiro está associado ao escoamento do rio para o mar e o segundo no sentido inverso. Durante o trecho ascendente de *G* maior, os tamanhos de flocos crescem desde $d_f \approx 25$ μm até $d_f \approx 32$ μm em $G \approx 1$, simultaneamente cresce *U*, que alcança o máximo junto com *G*, o que não faz mais que representar a definição dada pela equação (2.28). No tempo em que *G* é máximo, a altura da onda *z* se encontra no ponto médio do seu trecho vertical, com tendência descendente e d_f flutua em torno a 30 μm. No trecho decrescente de *G* os d_f diminuem do tamanho até 24 μm. O aumento de tamanhos dos flocos volta a começar com o ingresso de água do mar, que ocorre a uma velocidade da ordem de 0.05 ms^{-1}. Este escoamento é suficiente para aumentar *G* desde o mínimo de 0.04 a 0.20 s^{-1}, que contribui a aumentar primeiro e logo a manter a $d_f \approx 30$

µm. Este processo cessa assim que o sentido do escoamento se inverte novamente, os d_f continuam crescendo para retomar o mesmo ciclo. Na vertical 9 foram medidos d_f a duas profundidades: 1m e 1.8 m, obtendo-se tamanhos de 24.3 e 27.7 µm respectivamente, na Figura 6.15 foi desenhado um d_f médio de 26 µm. Os resultados para d_f médios medidos com o Lisst concordam quantitativamente com os obtidos nos testes de laboratório com o floculador Couette, resumidos na Tabela 3.5. Ainda que nesses testes G tenha sido pelo menos uma ordem de magnitude maior que no estuário, a tensão de cisalhamento do floculador (G=200 s^{-1} e τ_b=0.179 Nm^{-2} para ω=200 rpm, Tabela 3.2) esteve na mesma ordem que a gerada pelas condições hidrodinâmicas no Paraíba do Sul, o que pode explicar o tamanho relativamente pequeno dos microflocos observados. Por exemplo, na vertical 9, τ_b varia no intervalo 0.01-0.15 Nm^{-2}. Os tempos de equilíbrio calculados no ponto 3.4 (Tabela 3.5), entre 6 e 14 minutos, podem estar completamente compreendidos dentro do tempo de duração das τ_b do estuário ao longo do ciclo de maré.

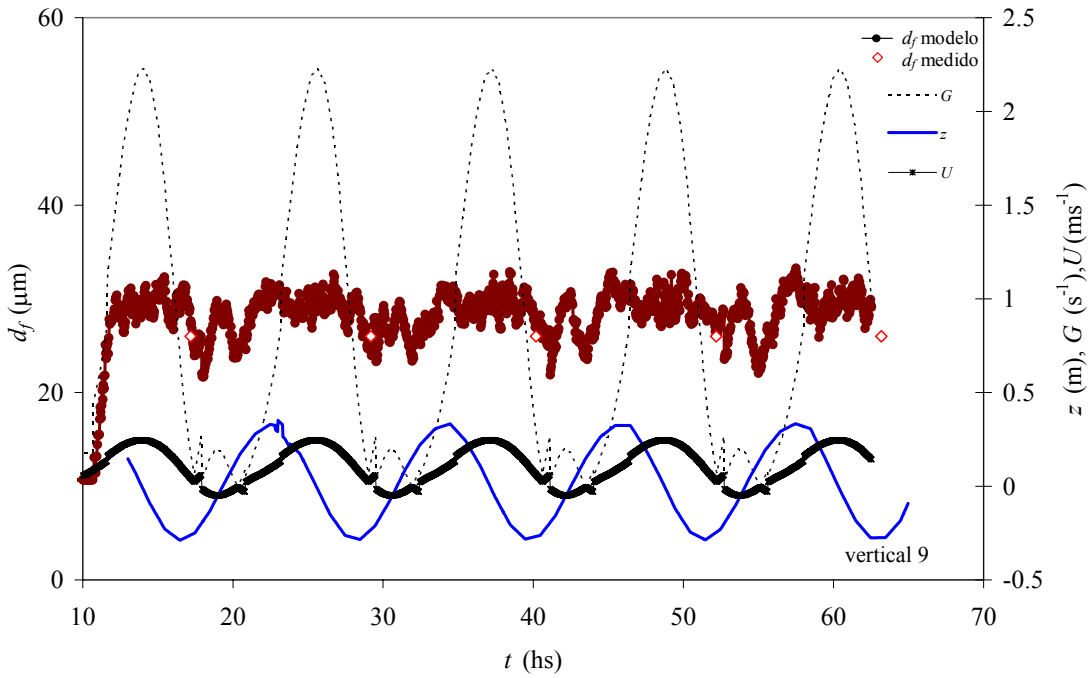


Figura 6.15: d_f calculados e medido, z, G e U, na vertical 9.

As W_s calculadas, desenhadas na Figura 6.16, encontram-se no intervalo 0.04-0.17 mms^{-1}, estando em fase com a variação do parâmetro de dissipação G, e os diâmetros

dos flocos $d_{f,}$ como esperado em relação as hipóteses do modelo e às condições de implementação.

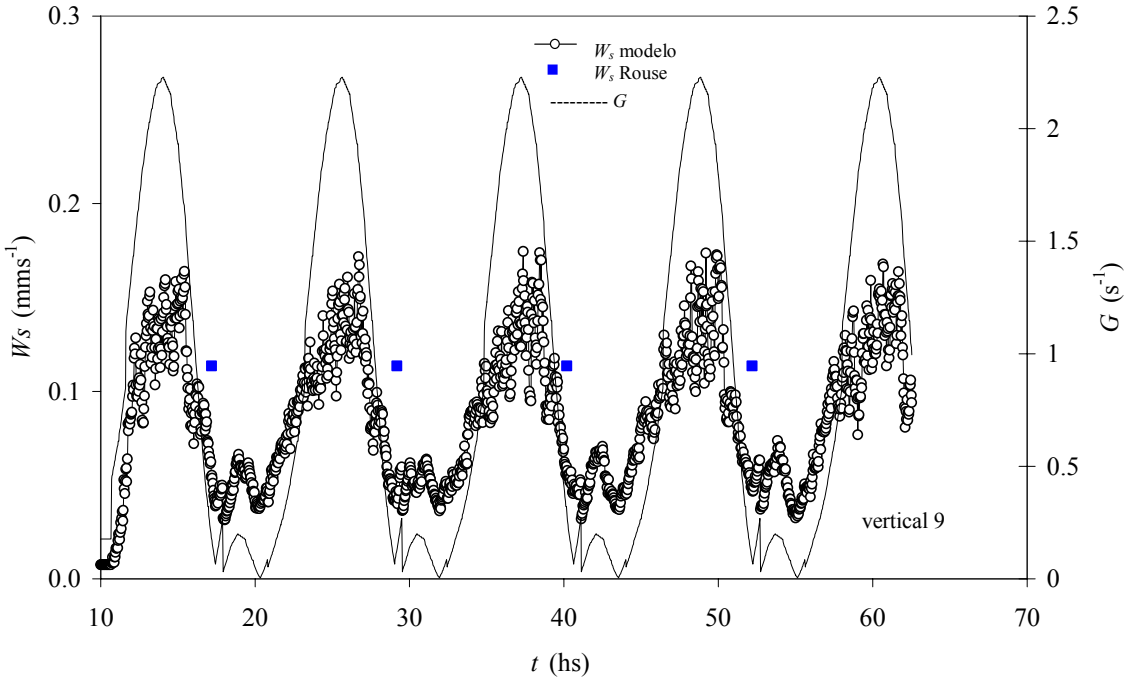


Figura 6.16: W_s e G calculados na vertical 9.

Na Figura 6.17 pode-se analisar os valores dos coeficientes do modelo de FARLEY e MOREL B_{sh} e B_{ds} para a vertical 9. O primeiro coeficiente relaciona-se com o mecanismo de agregação devido a tensões de cisalhamento e o segundo com o mecanismo de sedimentação diferencial. B_{sh} foi superior que B_{ds} em uma ordem de magnitude durante o escoamento de vazante e da mesma ordem de magnitude no período de enchente. As variações de d_f e W_s, mostradas na Figura 6.15 e na Figura 6.16 ficam em direta relação com B_{sh}, pondo assim em evidência que as tensões de cisalhamento governam a cinética da floculação no estuário, durante a maior parte do ciclo da maré, enquanto a sedimentação diferencial tem relevância no interior do estuário, apenas no breve período de enchente de maré. A maior tensão do escoamento τ_b no estuário foi na vertical 9 com 0.15 Nm^{-2} em relação com G = 2.20 s^{-1}. Na vertical 9 a tensão resistente dos flocos foi maior da tensão do escoamento ao longo do tempo de simulação.

No trecho exterior do estuário somente foi possível fazer comparações para as verticais 6 e 14, onde os maiores valores de G foram 0.28 s^{-1} e 0.61 s^{-1} respectivamente, sendo os coeficientes B_{sh} da mesma ordem da B_{ds}.

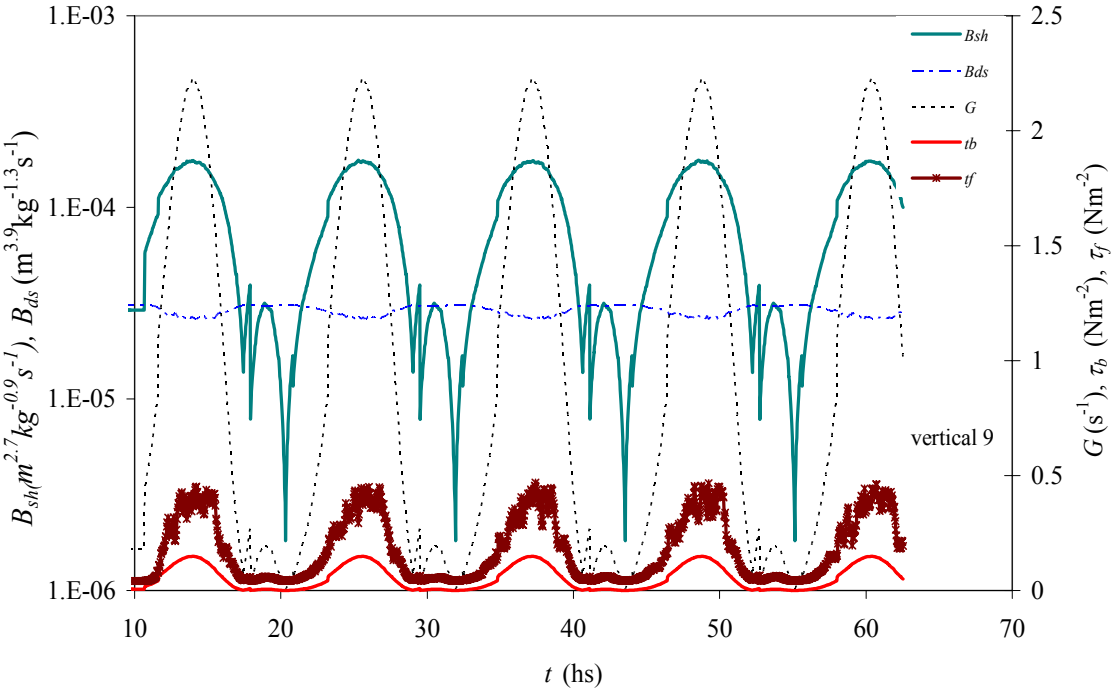


Figura 6.17: Coeficientes B_{sh} e B_{ds}, do modelo de FARLEY e MOREL para a vertical 9.

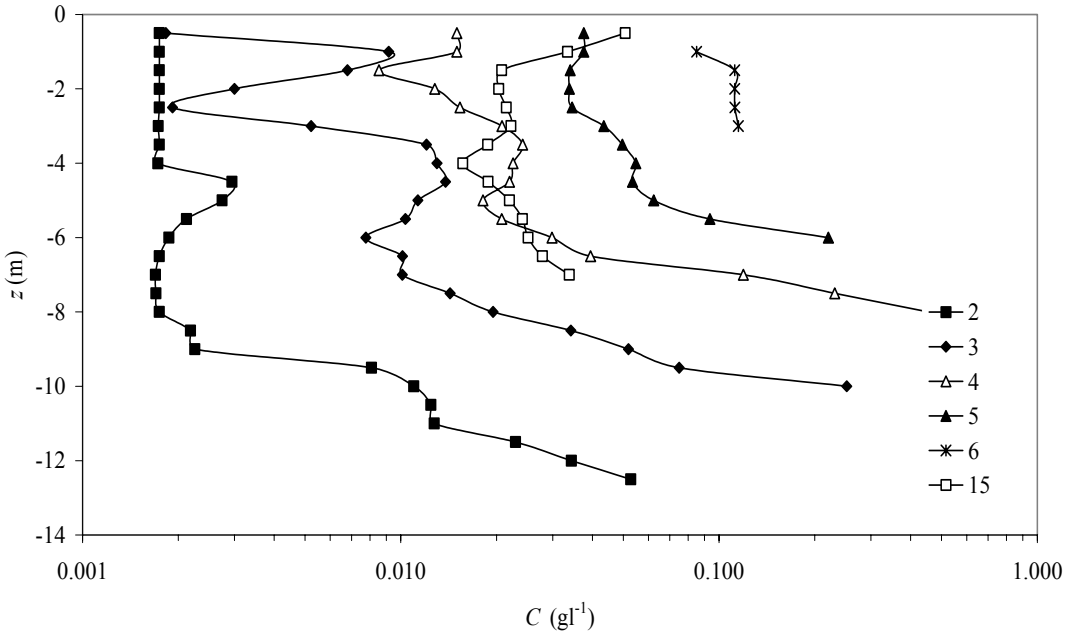


Figura 6.18: Perfis de concentrações medidas nas verticais 2, 3, 4, 5, 6 e 15, fora do estuário.

A formação de flocos maiores do que 100 μm medidos na vertical 15 (ver Figura 6.8) pode ser devido ao amortecimento da turbulência por estratificação (calculou-se G = 0.07 s^{-1} no primeiro metro de profundidade) e a um maior número de colisões pelo aumento da concentração em relação ao resto do perfil (ver a Figura 6.18). Este processo de formação de flocos na parte superior da coluna de água e quebra na parte inferior foi observado por VAN DER HAM e WINTERWERP (2001) no estuário de EMS/Dollard, processo atribuído à estratificação. A esse respeito se destaca que na vertical 15 foi registrada estratificação de temperatura, salinidade e sedimentos, pois até o primeiro metro de profundidade foram medidos 28 ºC, 9 psu e 33 mgl^{-1}, e por baixo dos 2 metros de profundidade, 22 ºC, 35 psu e concentrações variáveis (ver na Figura 6.19).

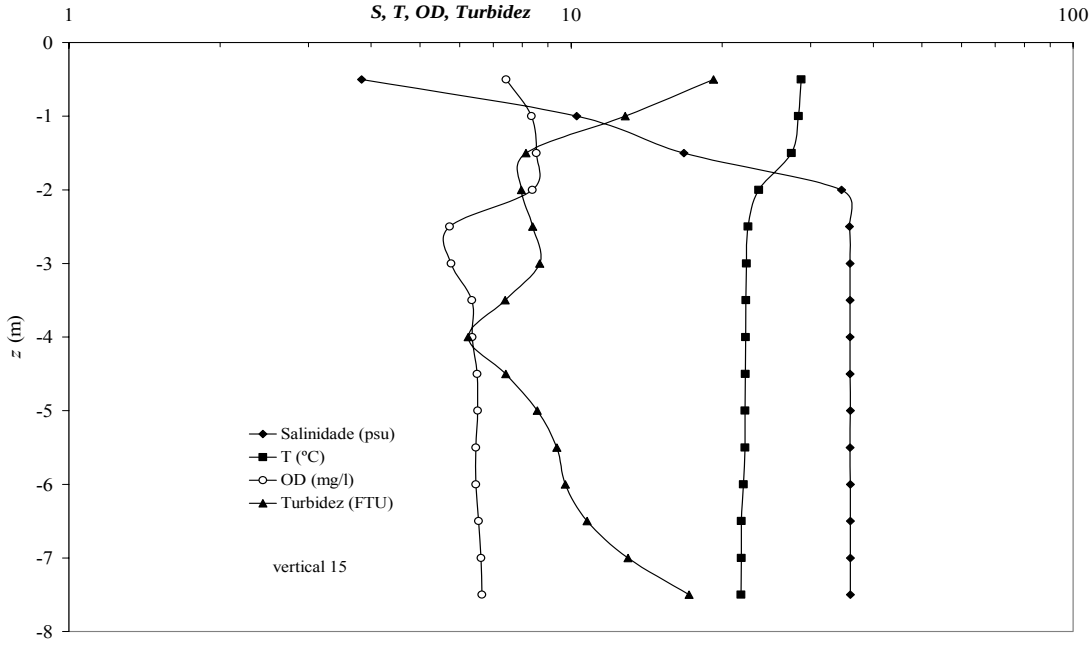


Figura 6.19: Perfis verticais de salinidade, temperatura, oxigênio dissolvido e turbidez na vertical 15.

Outra visão deste processo foi apresentada em um recente trabalho por DYER, CHRISTIE e MANNING (2004) com base em medições no rio Tamar (Inglaterra). Eles destacaram a contribuição às tensões de Reynolds de ondas internas sobre a lutoclina, devido à correlação entre as flutuações de velocidade u e w. Desenvolve-se estratificação, as flutuações das tensões turbulentas são atenuadas, e se incrementa a proporção de energia turbulenta na direção da componente longitudinal. No entanto, apresentam-se ondas

internas na interface, que para esta vertical estaria a 2.00 m de profundidade, a intensidade da turbulência aumentaria, e este processo poderia ocasionar, segundo a intensidade, a quebra (ou a agregação) de partículas por cima da interface. Segundo DYER *et al.,* as ondas internas poderiam incrementar a intensidade da turbulência por um fator de 2 a 2.5, tanto para baixas como altas concentrações. A 0.50 e 1.00 metros da superfície foram medidas concentrações pontuais de 0.051 e 0.033 gl^{-1}, as maiores de toda a vertical (C=0.025 gl^{-1} na vertical). No rio Paraíba do Sul não foram medidas flutuações de velocidade e, portanto, os parâmetros específicos que dão conta da existência de ondas internas não puderam ser calculados.

6.3.3 Cálculo de W_s

Durante o experimento de campo não foi possível medir *in situ* velocidades de queda, portanto, a partir do perfil de concentrações medido em cada vertical se calculou W_s com base na equação de Rouse (VANONI, 1975):

$$\frac{c}{c_a} = \left[\frac{h-z}{z} \frac{a}{h-a} \right]^{\frac{W_s}{ku}} \tag{6.4}$$

onde c_a é uma concentração de referência a uma altura a desde o leito, z a altura onde é medida a concentração média temporal c, k a constante de von Karman (=0.41), a expressão $z_*=W_s/ku_*$ é conhecida como o número de Rouse, que determina o grau de uniformidade da suspensão (quanto menor z_* mais uniforme o perfil). Esta equação foi deduzida segundo a hipótese de que o escoamento de sedimentos suspensos está balanceado com o escoamento ascendente de sedimentos resultante da difusão turbulenta, e que a difusividade de turbilhão K_s é da forma:

$$K_s = k\, u_* \, z \left(1 - \frac{z}{h} \right) \tag{6.5}$$

Se u_* é conhecido e se supõe que W_s é constante na vertical, o número de Rouse pode ser determinado mediante uma análise de regressão. As W_s calculadas, desenhadas na Figura 6.20, mostram uma diminuição desde a vertical 7 à 13, tanto para os resultados do modelo como para os calculados com a equação (6.4). Isto não pode ser atribuído às C nem tampouco aos d_f, senão à diminuição de u_* originado na penetração progressiva da maré, como já foi indicado na Figura 6.7. A maior W_s no estuário calculada com a equação

de Rouse, foi para a vertical 7 com W_s=0.22 mms^{-1}, caracterizada pela máxima u_*(=0.033 ms^{-1}) devido a que foi medida no momento em que ocorria a maior velocidade do rio (U=0.58 ms^{-1}), coincidente com a baixa-mar (ver Figura 6.7). Na vertical 8 a declividade da reta de regressão não foi calculada pois unicamente se contava com dois pontos e portanto esta W_s não pode ser considerada confiável. As W_s calculadas com o modelo mostram também uma diminuição progressiva águas abaixo da vertical 7 até a foz do estuário, variando entre 0.110 e 0.032 mms^{-1}, sendo levemente inferiores às calculadas com a equação de Rouse.

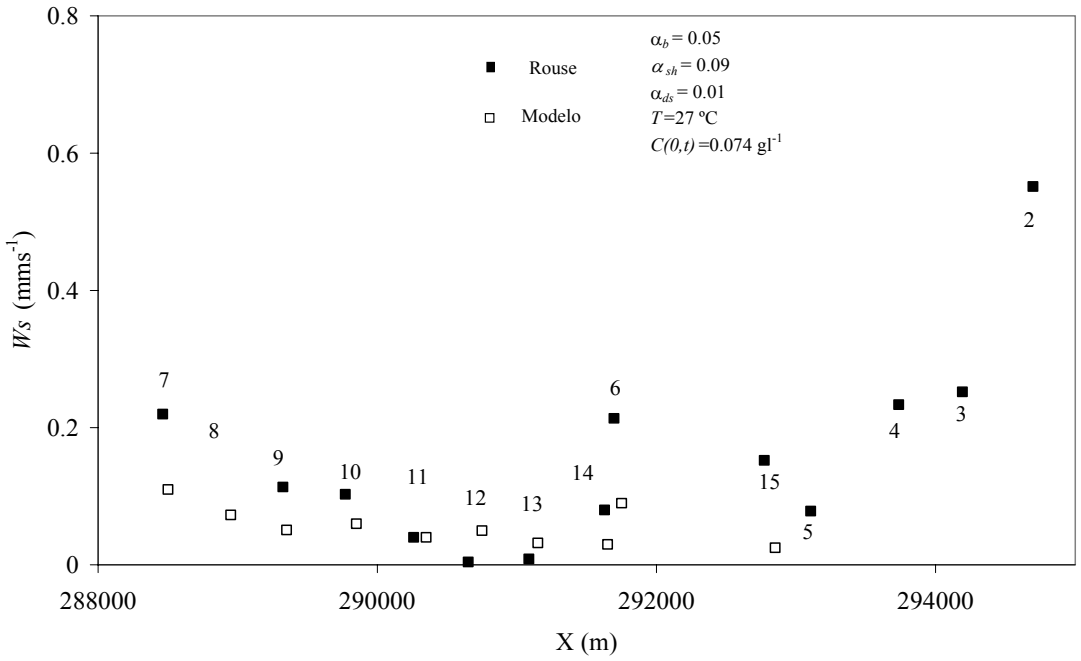


Figura 6.20: W_s medidas e calculadas, em cada vertical.

Fora do estuário as W_s se incrementaram devido a que os perfis de concentrações não tiveram a uniformidade das verticais 7 a 13, como é mostrado na Figura 6.18. A maior W_s no mar foi calculada para a vertical 2, com W_s= 0.55 mms^{-1}. Este valor, resultou bastante inesperado para um lugar situado fora da nuvem de sedimentos, com uma baixa concentração, c=0.007 gl^{-1} a partir da sonda Ndp, a 1 m de profundidade. A explicação se encontra na sua composição granulométrica, bimodal, com um d_{50}=23.5 μm, uma fração de finos de 65% e um d_{90} de 440 μm. Na vertical 4 (a 960 m ao sudoeste, dentro da nuvem de sedimentos), a amostra analisada com o aparelho Malvern, apresentou um tamanho máximo de 35.5 μm e d_{50}=10.6 μm, o qual demonstra uma composição granulométrica

completamente diferente. A W_s calculada na vertical 2 esta associada a um diâmetro nominal equivalente (SYVITSKI *et al*., 1995) de 23 μm, condizente com o d_{50}, o que indicaria que não existiu um processo de floculação nessa vertical. Ainda que na vertical 2 tenham sido medidas as maiores velocidades com respeito às outras verticais em ambiente marinho (ver a Figura 6.21), é muito pouco provável que a fração grossa provenha do leito, pois a análise de sedimentos de fundo mostrou que 99 % foram menores a 62 μm. Na vertical 3 essa porcentagem foi de 79 % e na 15 de 89 %. Essa porcentagem de sedimentos finos é compatível com os baixos valores de u_* na vertical 2 (0.003 ms^{-1} e G=0.091 s^{-1}). No trecho de estuário, a porcentagem de sedimentos finos foi de 61 % na vertical 12 e de 13 % na vertical 8.

A tendência calculada para W_s no trecho de estuário e em mar aberto, tanto com o modelo como com a equação de Rouse é compatível com as porcentagens de finos medidos no fundo. Não obstante, deve-se ter em consideração que a cheia ocorrida entre 16 e 19 de janeiro pode haver transportado muito material fino para o mar, como é acentuado por CARVALHO *et al.* (2002) para situações similares (por exemplo, em janeiro de 1996 mediram uma vazão de 2600 m^3s^{-1} e uma concentração de 193 mgl^{-1}). Ainda que para janeiro de 2004 não se conta com evidências claras dessa situação específica (medições de concentrações), a análise das % de água (peso de água/peso total) em sedimentos de duas amostras obtidas no trabalho de campo em janeiro de 2004, dos primeiros 40 cm do leito, amostras localizadas a 1240 m ao N.E. e a 1560 m a N.O. da vertical 15, mostram diferenças significativas. Na primeira, a mais próxima à costa, nos 20 cm superiores, ou seja, nos 20 cm mais próximos da superfície do leito, a % de água é 10 % superior à da outra amostra, enquanto que nos 20 cm inferiores praticamente não há diferenças entre ambas, como é advertido na Figura 6.22. As diferentes % na camada superior são indicativas de um menor nível de consolidação, que pode haver sido originada por uma deposição relativamente recente por sedimentos saídos do estuário, pela cheia ocorrida 10 dias antes do trabalho de campo.

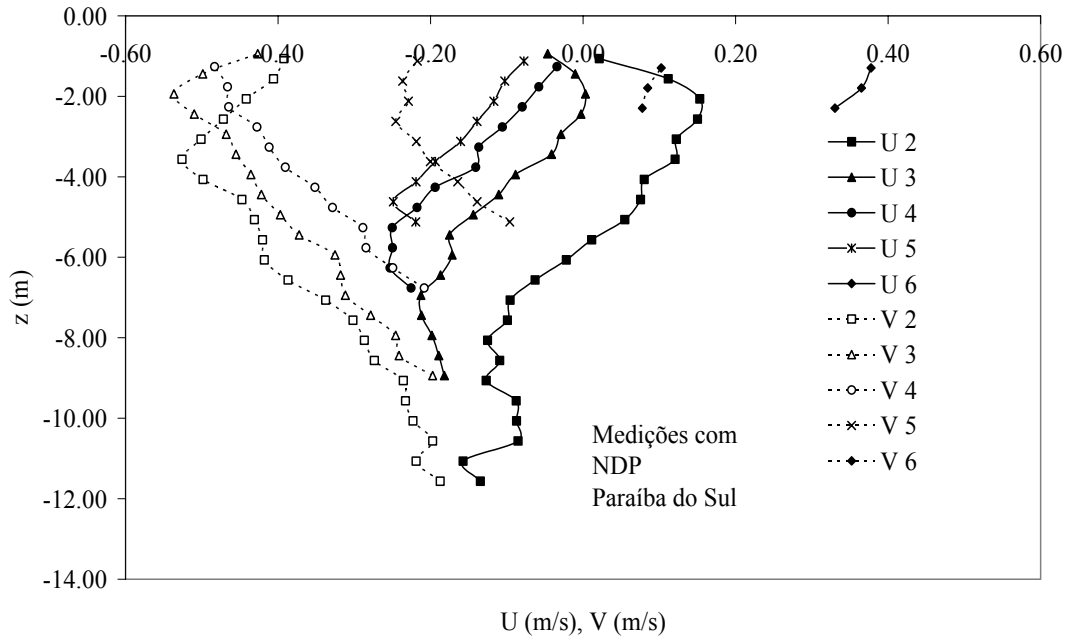


Figura 6.21: Velocidades *U* e *V* medidas nas verticais 2 a 6**.**

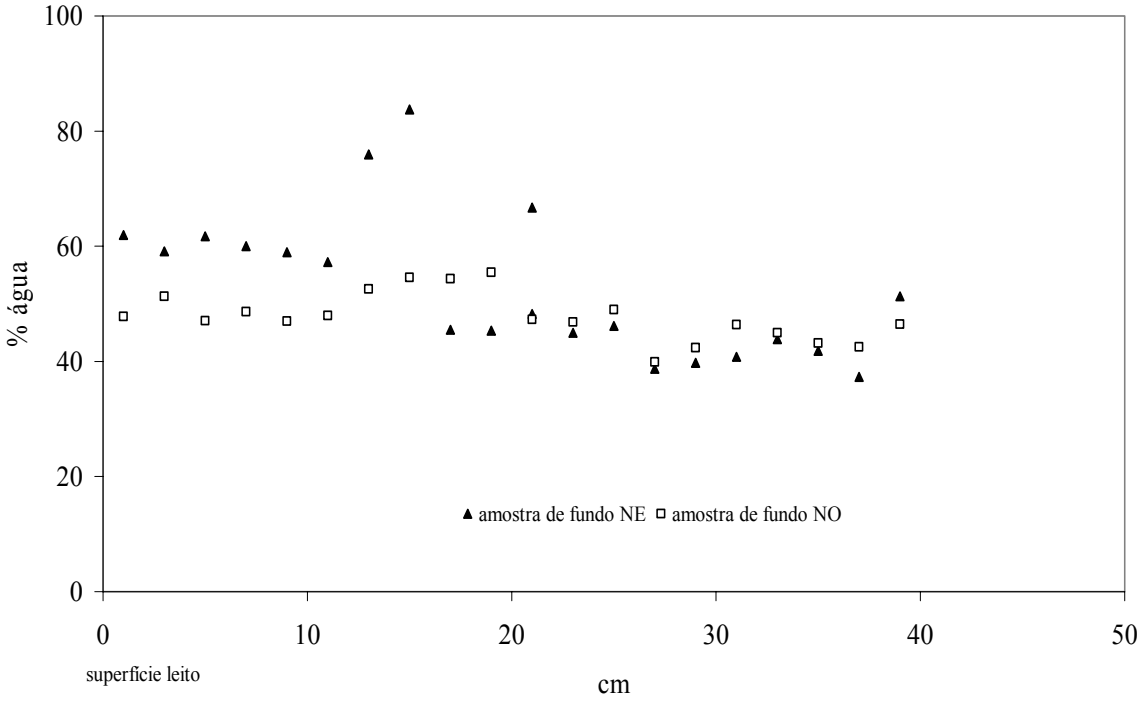


Figura 6.22: % de água em amostras de fundo N.E. e N.O.

As variáveis C e W_s se correlacionam de forma implícito na formulação do modelo matemático de FARLEY e MOREL enunciada na equação (2.30). Se é levado em

consideração que para o estuário se verifica $B_{sh}>>B_{ds}>>B_b$, e que o gradiente de concentrações $\partial C / \partial z$ parametrizou-se com C/h, então W_s é aproximadamente proporcional a C, relação que foi desenhada na Figura 6.23.

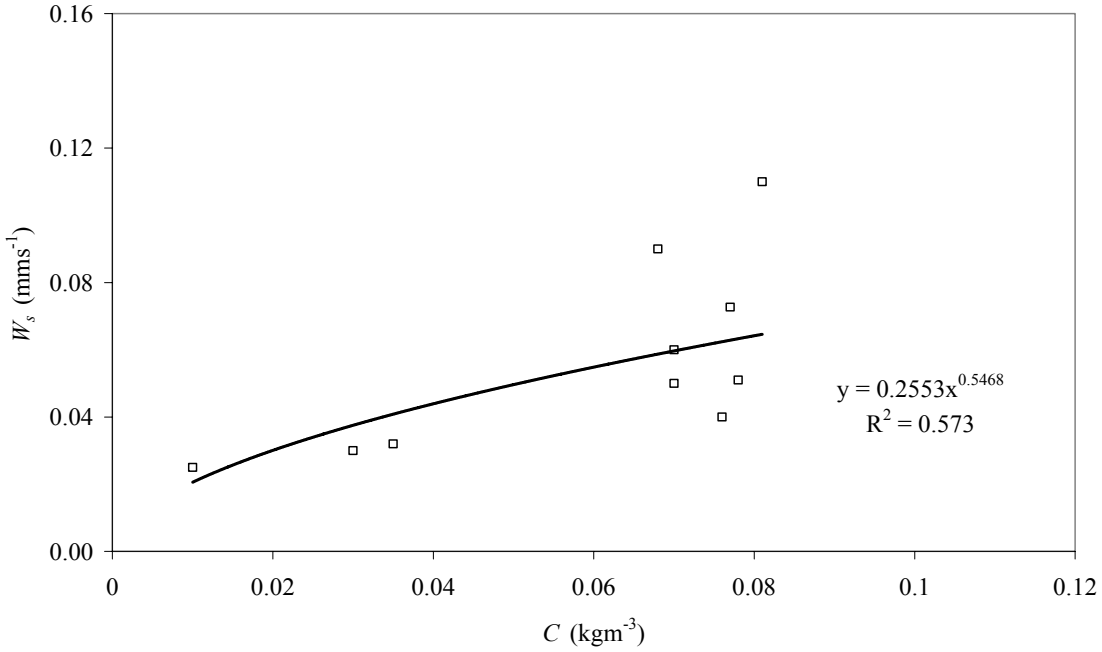


Figura 6.23: Relação C-W_s calculada com o modelo.

A massa específica diferencial dos flocos foi calculada em função dos resultados obtidos nos experimentos de laboratório, para o qual foi ajustada uma equação na relação τ_b/C-ρ_f, explicitada na Figura 3.18, segundo as considerações efetuadas no ponto 3.5. As ρ_f calculadas variam no intervalo 1110-1250 kgm^{-3}, não observando-se diferencias significativas entre verticais.

6.3.4 Transporte de sedimentos no trecho exterior do estuário

O processo de transporte dos sedimentos no trecho exterior do estuário se desenvolve ao longo da costa da ilha do Lima e além dela, segundo uma configuração em 'nuvens' cuja dinâmica é governada pelas condições periódicas de escoamento e refluxo da maré. As 'nuvens' de sedimentos, com forma de elipses de eixos maior e menor que medem aproximadamente 2000 e 700 m respectivamente (ver Figura 6.24), evoluem em uma faixa costeira de largura variável entre os 700 e os 1100 m.

Segundo as predições do modelo nessa faixa predomina a água doce do rio que se encontra completamente misturada em toda a vertical (ver Figura 6.25). Os d_f crescem até aproximadamente 60 μm no centro das 'nuvens' devido ao aumento de C até 0.25 gl^{-1} (ver Figura 6.26), que produz um incremento de colisões em um cenário dominado pela turbulência do escoamento com um valor limite de G=0.1 s^{-1}, segundo foi desenhado na Figura 6.27. Destaca-se que o parâmetro de dissipação G alcança valores entre 7 e 0.5 s^{-1} nos primeiros 200 m da costa, concluindo-se então que a sedimentação diferencial é um fator menos relevante para a formação de flocos na zona costeira, nas presentes condições.

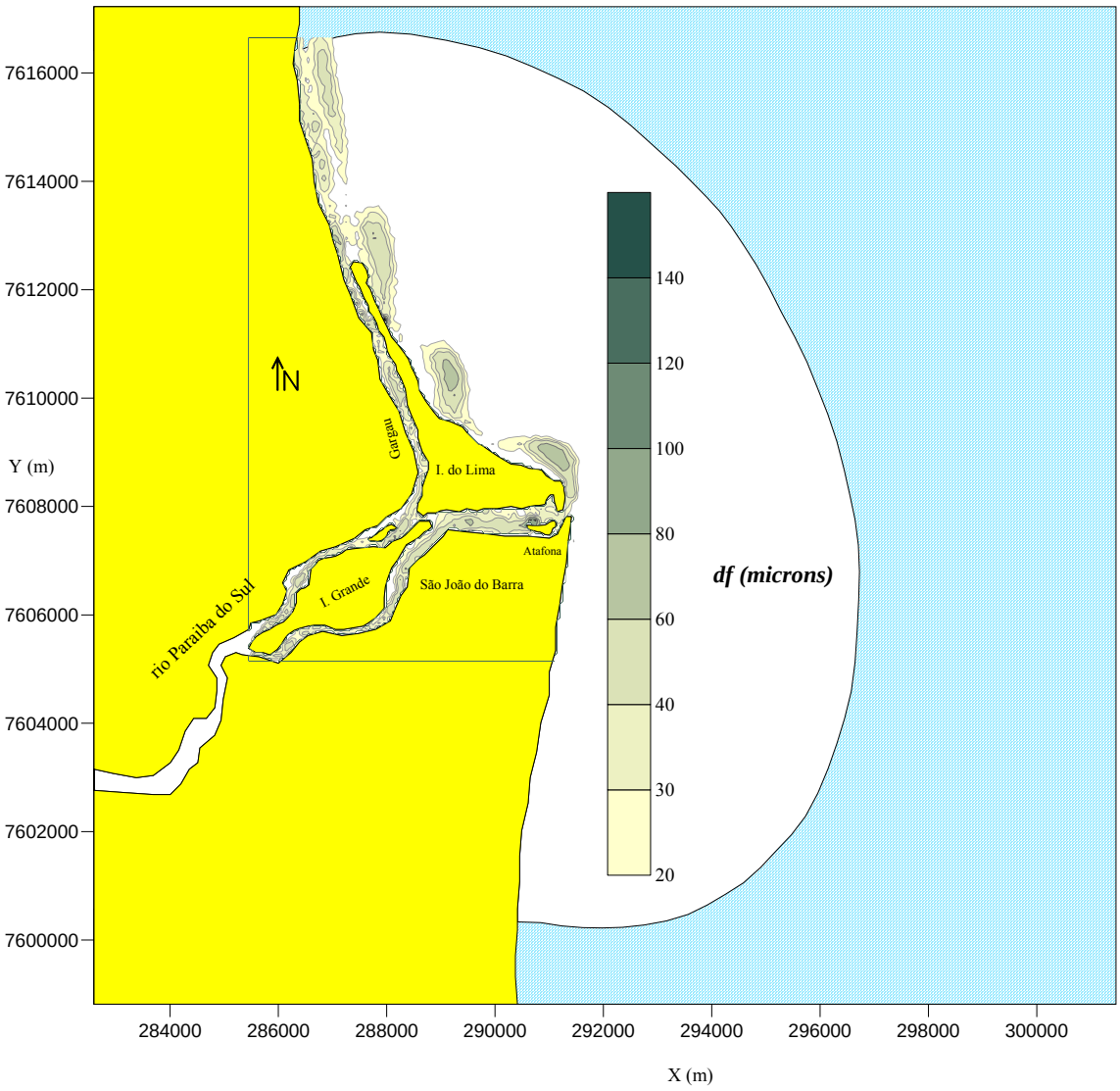


Figura 6.24: Isolinhas de diâmetros de flocos para t=65 horas.

A presença de matéria orgânica (MO) pode ter tido alguma influência enquanto ao crescimento dos flocos. Como não foram quantificadas em laboratório, as concentrações

de oxigênio dissolvido em níveis próximos à saturação (ver Figura 6.19 e Figura 6.25) e as observações em microscópio das amostras dos floculadores com água do estuário (parágrafo 3.5), são indícios de que a MO pode ser um fator a ser considerado em futuros estudos de floculação.

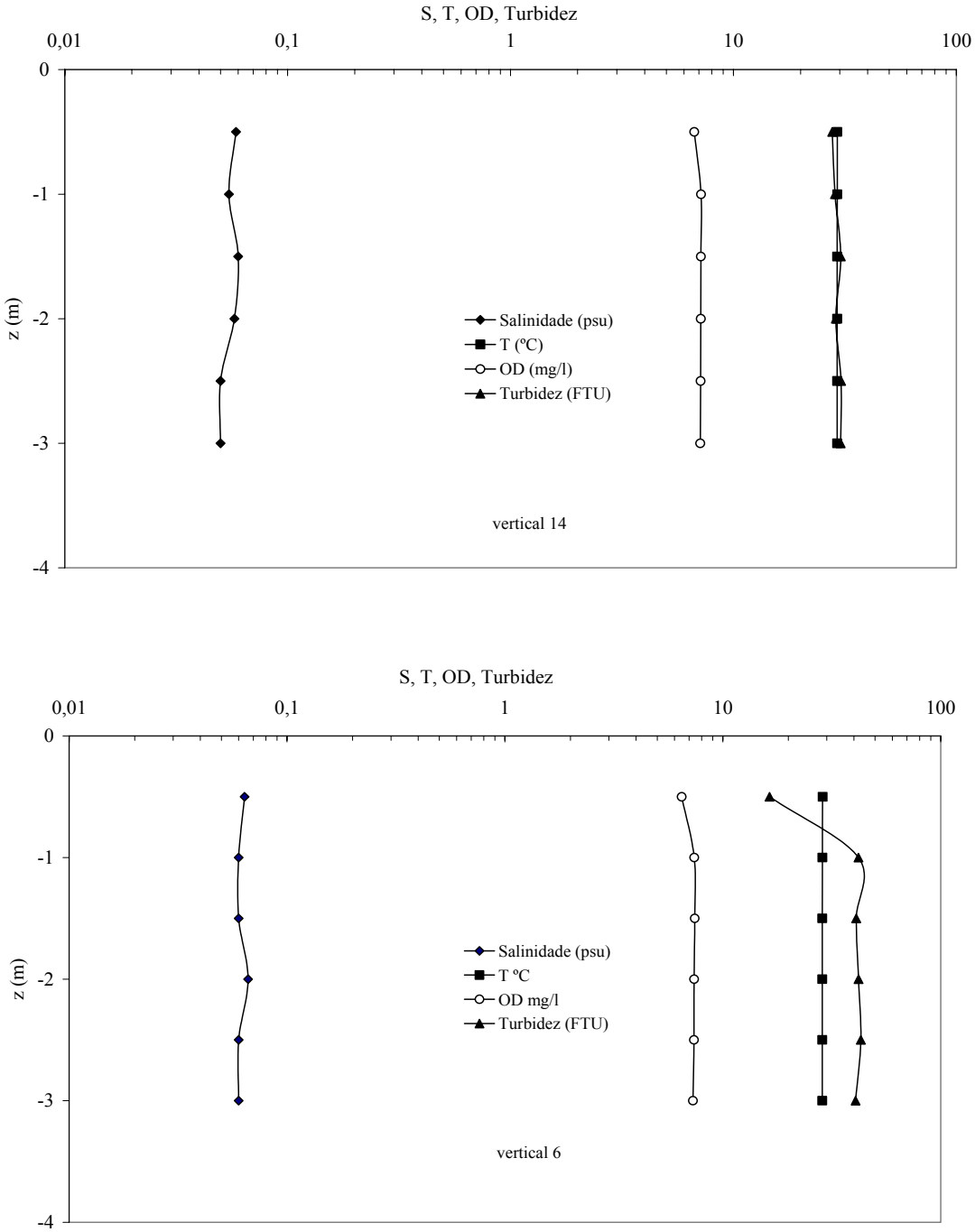


Figura 6.25: Perfis verticais de salinidade, temperatura, oxigênio dissolvido e turbidez na verticais 14 (acima) e 6 (abaixo).

Os resultados de laboratório com floculadores, ainda que valiosos, são parcialmente representativos devido à impossibilidade de representar os efeitos devidos à presença de matéria orgânica sobre a mecânica de agregação e desagregação de flocos, a escala da turbulência, a história de consolidação das camadas do leito (TORFS *et al.*, 1996), por mencionar os processos mais importantes (VAN RIJN, 1993). LICK *et al.*, (1993) demonstraram que a remoção de matéria orgânica dos sedimentos produz uma floculação mais rápida e flocos de diâmetros menores. Os fatores físico-químicos e biológicos foram conceitualizados por VAN LEUSSEN (1999) no parâmetro "capacidade de floculação" ('flocculation abbility'). No estuário do rio Ems, no percurso de água doce foram medidas velocidades de sedimentação iguais ou maiores que em águas salinas do mesmo estuário, diferenças que foram atribuídas aos fatores englobados nesse parâmetro e não à diferença de salinidade. O'MELIA (1980) demonstrou que a taxa de agregação de colóides depende fortemente da abundância de matéria orgânica. WALKER e BOB (2002) estudaram a estabilidade de agregados com adição de matéria orgânica (MO) em águas quietas, encontraram que a adição de ácidos húmicos fazia decrescer a taxa de coagulação dos pequenos agregados e tinha menor incidência nos maiores, presumivelmente por um incremento das forças de Van der Waals para os agregados maiores.

A velocidade de queda alcança até 0.5 mms^{-1} em conseqüência do aumento de concentrações na 'nuvem' mais próxima à foz do estuário e decresce até 0.3 no centro das outras 'nuvens', como foi desenhada na Figura 6.28. As W_s calculadas dentro das nuvens têm pelo menos o dobro do magnitude das do estuário, o que indica que a faixa costeira é uma zona de deposição de sedimentos finos, afirmação que resulta compatível com a composição granulométrica das amostras de fundo analisadas com o Malvern, à qual já referiu-se antes, no parágrafo 6.3.3.

A água salgada ingressa escassamente no estuário para a situação hidrodinâmica estudada. Uma simulação da penetração de água salgada no estuário, feita com o modelo Lagrangeano, mostrou que ocorre somente em um trecho de 400 m desde a desembocadura, durante não mais de três horas por ciclo de maré, resultado qualitativamente coincidente com as conclusões de SCHETTINI *et al*. (2004).

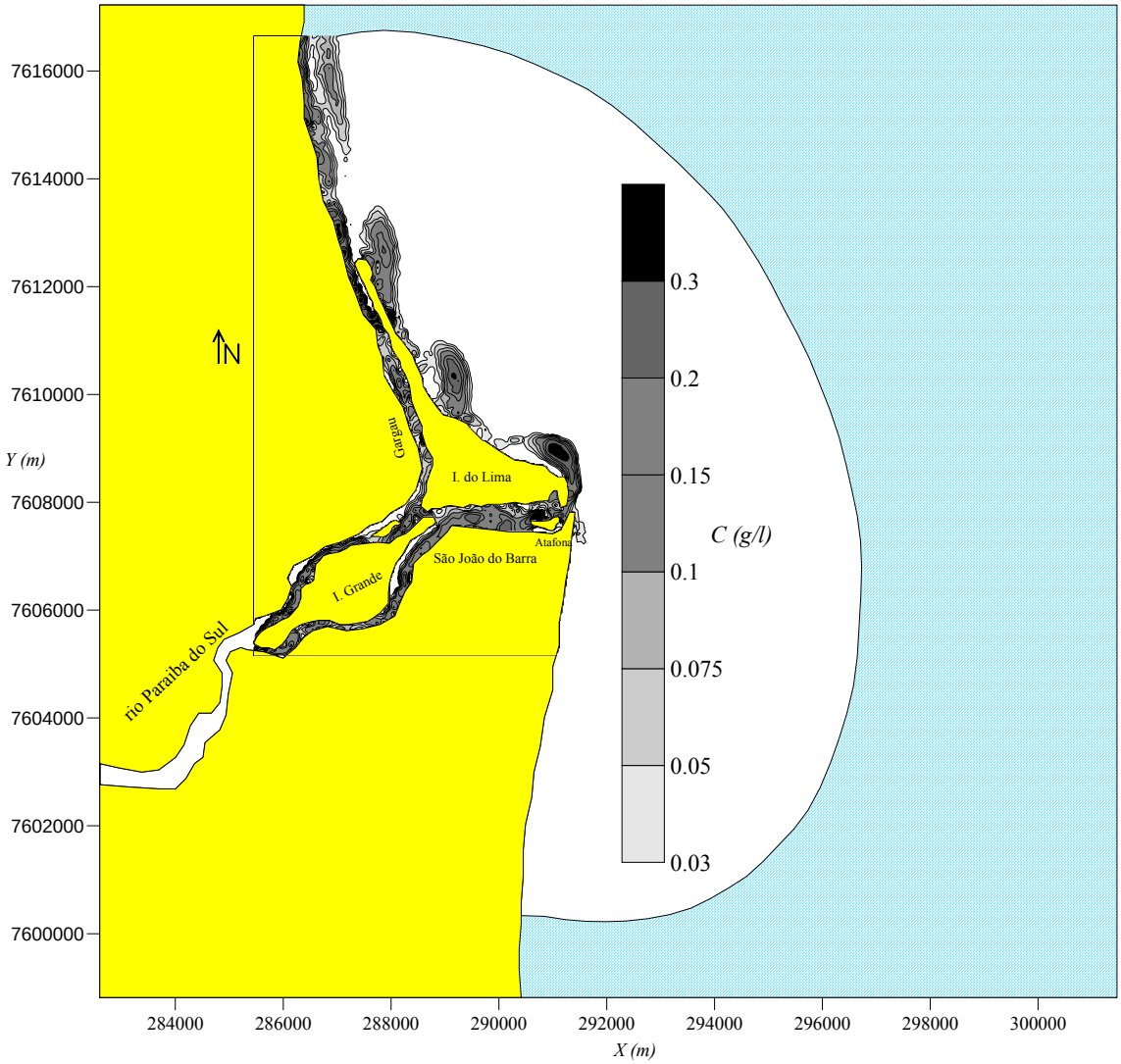


Figura 6.26: Isolinhas de *C* para *t*=65 horas.

O modelo matemático de transporte de sedimentos é 2DH e portanto não é capaz de representar corretamente os efeitos de estratificação salina como também o transporte de sedimentos quando não estão bem misturados na vertical, ambos processos que normalmente ocorrem em mar aberto. Na Figura 6.18 observa-se perfis de concentração não uniformes nas verticais em mar aberto, nos quais pode observar-se a não uniformidade das concentrações.

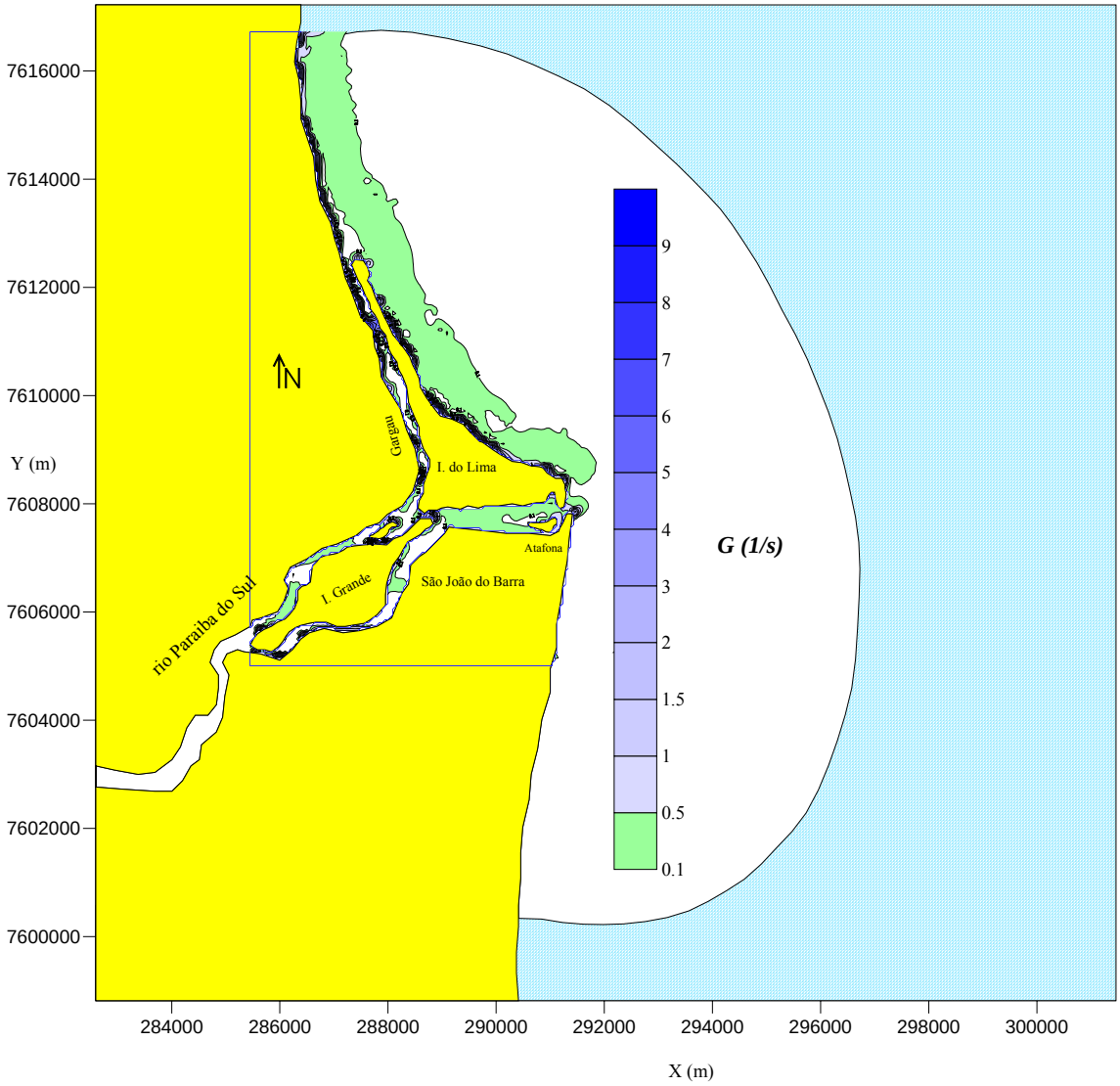


Figura 6.27: Isolinhas de *G* para *t*=65 horas.

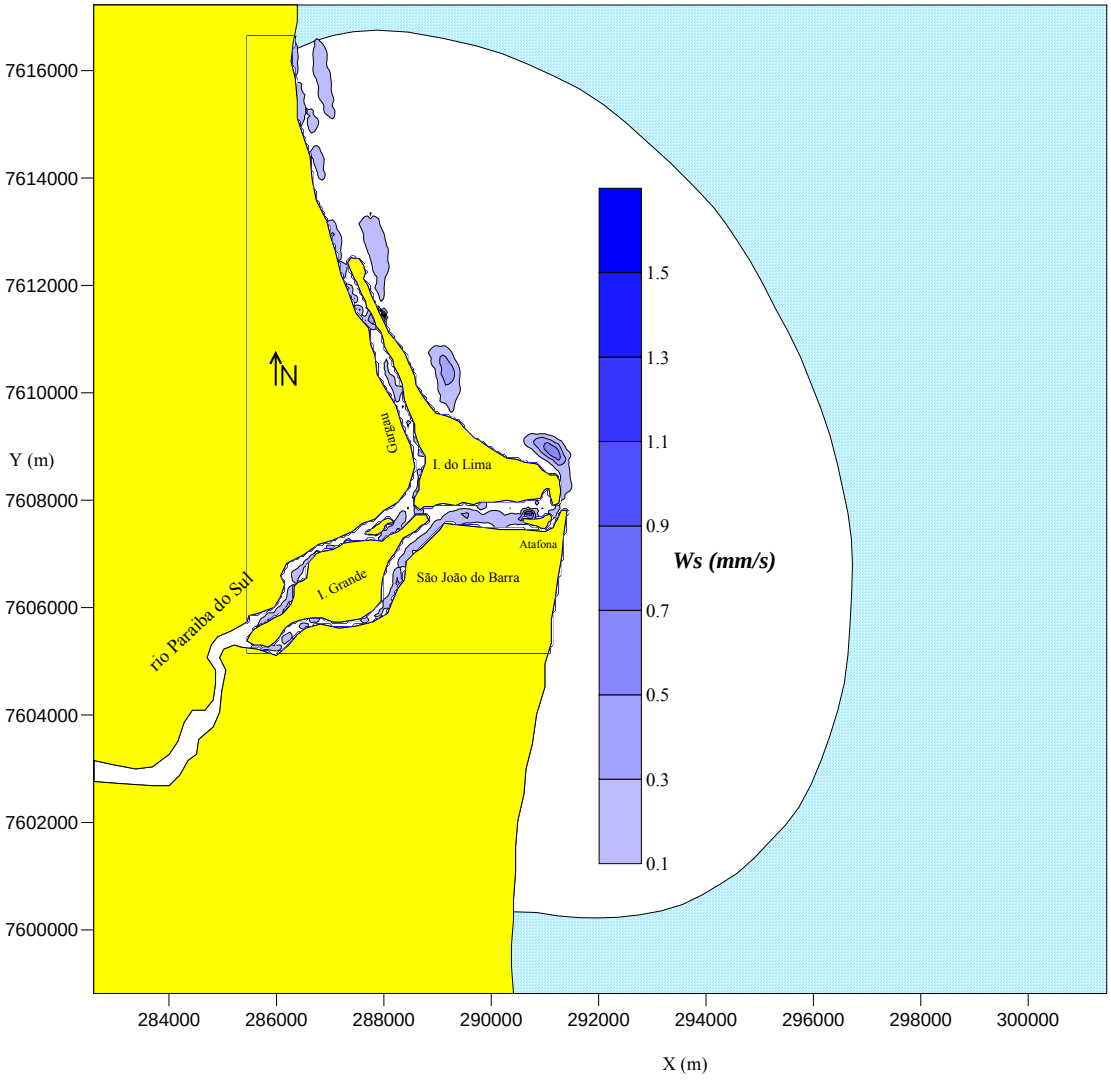


Figura 6.28: Isolinhas de W_s para t=65 horas.

6.4 Conclusões

Com as medições efetuadas em janeiro de 2004 no estuário do rio Paraíba do Sul em quatorze verticais se obteve importante informação da composição granulométrica dos sedimentos suspensos e de fundo, tamanhos de flocos medidos *in situ*, concentração de sedimentos suspensos, velocidades e profundidades da corrente. A análise dessa informação permitiu alcançar um nível de entendimento básico dos processos de agregação no estuário, verificar as condições de mistura completa nas verticais e implementar o modelo de trajetória de partículas.

O tamanho médio dos flocos medidos no estuário esteve entre 26 e 32 μm, ou seja, entre duas e quatro vezes o d_{50} das partículas de sedimentos. Os d_f se mantiveram quase constantes, com uma leve tendência a incrementar-se na direção da saída para o mar, à medida que diminuía o parâmetro de dissipação por incidência da maré. As concentrações medidas no estuário foram uniformes na vertical, próprias de águas bem misturadas, em torno de um valor médio de 80 mgl^{-1}, com uma tendência decrescente no mar.

Os d_f medidos no estuário foram muito semelhantes aos d_e calculados no floculador Couette, o que se explica pela semelhança entre as respectivas tensões de cisalhamento (τ_b e τ) e também entre os tempos característicos da velocidade de atrito, t_T , e os de equilíbrio, *Te*, para o floculador Couette. A máxima τ_b calculada para a vertical 9 foi de 0.15 Nm^{-2} e a τ para o floculador Couette no intervalo 0.045-0.179 Nm^{-2} para ω entre 38 -150 rpm respectivamente.

Implementou-se o modelo, com um prévio cálculo das condições hidrodinâmicas, para representar a dinâmica do transporte de sedimentos finos no estuário e entorno marinho para cinco ciclos consecutivos de marés semidiurnas. Os resultados obtidos da simulação numérica dos processos de agregação por colisões geradas pela turbulência e da sedimentação diferencial, indicam uma formação de microflocos no trecho de estuário, dominada pela turbulência do escoamento.

Os d_f calculados no estuário variam no intervalo (22 μm, 32 μm) representando bem os d_f medidos com o aparelho Lisst, conquanto nas verticais 12 e 13 o modelo subestima levemente as d_f. No mar o modelo prediz uma queda significativa de concentrações médias. Dentro do estuário a W_s calculada foi de aproximadamente 0.11 a 0.03 mms^{-1}, e á concentração media $C \approx 70$ mgl^{-1}.

O transporte dos sedimentos fora do estuário ocorreu, de acordo com o modelo, ao longo da costa da ilha do Lima para o norte, segundo uma configuração em 'nuvens' cuja dinâmica esteve governada pelas condições periódicas de escoamento e refluxo da maré. As 'nuvens' de sedimentos evoluíram em uma faixa próxima à costa, ocupada pela água doce do rio. No centro das 'nuvens' a W_s calculada foi de aproximadamente

0.5 mms^{-1}, $d_f \approx 60$ μm, e na maior concentração de $C \approx 200$ mgl^{-1}. A floculação ocorreu de maneira quase excludente em água doce dentro e fora do estuário.

A concentração de sedimentos correlacionou-se diretamente com W_s devido à própria formulação do modelo de FARLEY e MOREL. O diâmetro dos flocos também se correlacionou com C, só que previamente foi calculada a massa específica diferencial com a fórmula proposta (função de C e de τ_b) e logo d_f segundo o algoritmo de Newton Raphson. A massa específica diferencial dos flocos foi correlacionada diretamente com os d_f. Quando a tensão resistente dos flocos foi menor do que τ_b foi ativado o algoritmo limitador para as colisões por turbulência.

Quanto aos τ_b calculados não se registrou erosão no domínio de cálculo. Enquanto a deposição foi relevante no trecho exterior do estuario.

As concentrações de oxigênio dissolvido em níveis próximos à saturação são indicativas da presença de matéria orgânica, que deveria ter-se em consideração também para avaliar a floculação.

São necessárias mais medições para ajustar os coeficientes que definem as eficiências de colisão e então, compreender melhor a dinâmica dos processos de floculação para diferentes condições hidrodinâmicas do estuário. As concentrações calculadas se encontram dentro da mesma ordem que as medidas, com erros compatíveis com o baixo número de partículas utilizadas.

7. Conclusões e Recomendações

7.1 Conclusões

Esta tese trata da dinâmica de floculação de sedimentos finos em um cenário de estuário, desde uma dupla abordagem, uma experimental e outra de simulação numérica. Portanto, o produto final é um estudo integrado da mecânica de agregação de finos, segundo: a) resultados de variáveis e parâmetros obtidos com floculadores, medição de tamanhos de flocos, velocidades de queda, cálculo de massas específicas diferenciais, dimensões fractais e eficiências de colisão, e b) o desenvolvimento de um modelo numérico, com eixo em um esquema de trajetória de partículas, que integrou os principais resultados de laboratório. Com o modelo se estudou a dinâmica de agregação no cenário definido pelo estuário do rio Paraíba do Sul, mas os resultados têm validade geral para outros ambientes com condições semelhantes.

As conclusões estão agrupadas segundo sua relação com os testes de laboratório, ao desenvolvimento do modelo numérico e à análise de floculação no estuário do rio Paraíba do Sul .

7.1.1 Ensaios de Laboratório

Os tamanhos de equilíbrio (d_e) do Couette foram similares aos diâmetros dos flocos (d_f) medidos *in situ* no estuário, o que se deve a que as tensões (τ) de trabalho do Couette foram da mesma ordem que as tensões do escoamento (τ_b) do estuário. A determinação dos tempos de equilíbrio *Te* para os d_e, que se correlacionam com a escala dos tempos de duração dos τ_b no estuário para cada ciclo de maré, $t_T=0.66\ h/u_*$, permitem justificar essa semelhança de tamanhos. Estes resultados obtidos com o floculador Couette justificam a utilidade dos experimentos de laboratório, como correlato dos processos de floculação em campo, ainda que os respectivos *G* sejam de ordens diferentes.

Demonstrou-se, como prediz a teoria da agregação para o intervalo de tensões de cisalhamento de trabalho, que os tamanhos dos flocos tendem a aumentar à medida que

crescem as concentrações em água doce e em água salgada. Da mesma maneira acontece com os flocos gerados no disco para diferentes concentrações.

Os agregados gerados no floculador Couette foram os menores, os mais densos e também de menor W_s em médio, em comparação com os flocos gerados no floculador de disco. Verificou-se que à medida que aumentam as concentrações C, crescem os tamanhos e velocidades de sedimentação W_s, e diminuem as massas específicas dos flocos. Para a única amostra do floculador Couette com água doce na que se puderam medir velocidades de queda, não se observaram diferenças significativas de W_s, com relação às de água salgada. Estas evidências foram importantes na hora de analisar a informação de campo, pois quase todos os flocos medidos *in situ*, nos trechos interior e exterior do estuário, foram encontrados em água doce.

Quanto ao efeito da salinidade com relação ao incremento da floculação, mostrou-se que os diâmetros de equilíbrio d_e são maiores em ambientes salinos, tanto para agregados formados por tensões de cisalhamento como por sedimentação diferencial. Não obstante, os resultados não permitiram estabelecer com clareza o valor limite de salinidade a partir do qual se acelera o processo de floculação. Para isso, teriam sido necessários experimentos adicionais com salinidades crescentes que transcendiam o alcance desta tese.

A tensão resistente dos flocos foi correlacionada com ρ_f em um intervalo da dimensão fractal $2 \leq n_f \leq 2.3$, no nível das médias por amostra. No nível dos flocos individuais o intervalo esteve entre 1.9 e 2.45. Estes são n_f típicos encontrados na literatura para flocos em estuários e águas costeiras.

Foi demonstrada a importância de considerar os efeitos inerciais para calcular a massa específica dos flocos, fundamentalmente para os macroflocos. As diferenças conseguidas para $\Delta\rho_f$ com o esquema iterativo foi de aproximadamente entre 14 e 41 % para as amostras do floculador Couette e entre 1 e 59 % para as amostras do floculador de disco, com respeito a $\Delta\rho_f$ calculada com a lei de Stokes. Os desvios calculados para a massa diferencial dos flocos indicam a presença de desvios de até 50%, o que pode

induzir erros significativos na hora de calcular o diâmetro e a tensão resistente dos flocos.

A demonstração quantitativa do modo como as tensões de cisalhamento controlam a cinética de formação dos flocos no Couette, e a semelhança entre tensões de cisalhamento e tamanhos de flocos, para o floculador e o estuário, permite relativizar o questionamento aos resultados experimentais obtidos com floculadores (WINTERWERP, 2000; MILLIGAN e HILL, 1998).

7.1.2 Modelo de trajetória de partículas

O transporte de sedimentos foi simulado com base em um modelo Lagrangeano, que assegurou conservação de massa, no qual se observou ausência de concentrações negativas e capacidade de simular fortes gradientes de concentrações. Essas condições foram pré-requisitos básicos para desenvolver um modelo de floculação, que inclui o cálculo de velocidade de sedimentação W_s, massa específica ρ_f e diâmetro dos flocos d_f, sendo todas estas variáveis funções da concentração de sedimentos. Foram expostos os fundamentos matemáticos dos modelos de partículas para o transporte de escalares. Analisaram-se diferentes esquemas numéricos para a interpolação de velocidades e profundidades. Verificou-se a conhecida relação linear entre a inversa da raiz quadrada do número de partículas *NP* e o erro médio quadrático *rm*s. Explicaram-se em detalhe as condições de contorno e iniciais implementadas. Constatou-se o funcionamento do modelo para um caso de aplicação com traçadores fluorescentes, trabalho apresentado completo no ANEXO 1.

O modelo de floculação utilizado foi o proposto por FARLEY e MOREL, que pressupõe uma relação funcional simples entre C e W_s. O modelo numérico foi utilizado na sua versão original, desenvolvido para representar a velocidade de queda de sedimentos do rio Amazonas em um tubo de sedimentação, conseguindo representar adequadamente a relação funcional entre W_s e C, determinada antes em laboratório. O único processo simulado foi agregação por sedimentação diferencial.

O modelo matemático original não considera o efeito da quebra de flocos por tensões de cisalhamento da turbulência. Portanto foi modificado nesta tese, parametrizando o

processo de quebra em função das tensões resistentes dos flocos, calculadas antes segundo sua massa específica. O algoritmo foi verificado mediante a representação numérica do diagrama conceitual de DYER (1989). Os resultados obtidos podem ser considerados bons, em particular se são comparados com uma representação do mesmo MANNING e DYER (1999) com base em trabalhos de laboratório.

A análise de sensibilidade do modelo mostrou à importância de parametrizar a cinética de quebra de flocos por tensões de cisalhamento. A equação conseguida para τ_f em função da massa específica dos flocos cobre a maior parte do espectro de tensões e nas extremidades da curva é verificado seu correto funcionamento. A equação foi deduzida a partir da relação de KRANENBURG (1994) para a dimensão fractal dos flocos.

A importância do processo de desagregação por cisalhamento da turbulência foi posta em relevo em outro exemplo para condições fluviais e de estuário no parágrafo 5.2. O teste serviu para apreciar o funcionamento do algoritmo utilizado, assim como para quantificar os potenciais erros grosseiros no cálculo da sedimentação e no transporte de sedimentos em geral quando a cinética de desagregação é ignorada.

7.1.3 Resultados do trabalho de campo e do modelo no Paraíba do Sul

As medições mostram que os sedimentos foram transportados como microflocos de um tamanho médio entre 26 e 32 μm, duas e quatro vezes o d_{50} das partículas individuais. De acordo com os resultados das simulações hidrodinâmicas dos processos de floculação, a formação de microflocos no trecho de estuário obedeceu a um processo dominado pela turbulência do escoamento, sendo pouco importante à sedimentação diferencial.

As concentrações calculadas estiveram dentro da mesma ordem que as medidas, com diferenças pequenas, compatíveis com o baixo número de partículas utilizados. As concentrações medidas no estuário foram uniformes na vertical, próprias de águas bem misturadas, em torno de um valor médio de 80 mgl^{-1}. O modelo estima no estuário as C

no intervalo 70-81 mgl^{-1}, em correspondência geral com as medições, e prediz no mar uma queda significativa de concentrações médias.

A concentração de sedimentos, cujo cálculo depende da trajetória das partículas, foi correlacionada diretamente com W_s devido à própria formulação do modelo de FARLEY e MOREL. As W_s calculadas com a equação de Rouse estiveram dentro da mesma ordem que as calculadas com o modelo. O diâmetro dos flocos também se correlacionou com C, sem uma relação prescrita, pois antes foi calculada a massa específica diferencial (função de C e de τ_b) e logo d_f segundo o algoritmo de Newton Raphson. A massa específica diferencial dos microflocos se correlacionou inversamente com os d_f, como esperado.

No trecho de estuário predominaram as tensões resistentes dos microflocos sobre as τ_b. Quando a tensão resistente dos flocos foi menor a τ_b se ativou o algoritmo limitador para as colisões por turbulência e os d_f tiveram um mínimo de 18 μm.

O modelo prediz que o transporte de sedimentos fora do estuário ocorreu ao longo da costa da ilha do Lima para o norte, segundo uma configuração em 'nuvens' cuja dinâmica esteve governada pelas condições periódicas de escoamento e refluxo da maré. As 'nuvens' de sedimentos evoluíram em uma faixa próxima à costa, ocupada pela água doce saída do rio. A floculação ocorreu de maneira quase excludente em água doce dentro e fora do estuário. Pode-se afirmar então que a incidência da salinidade foi pouco relevante em todo o processo estudado.

São necessárias mais medições para ajustar os coeficientes que definem as eficiências de colisão, parâmetros principais do modelo, e então, compreender melhor a dinâmica dos processos de floculação para diferentes condições hidrodinâmicas do estuário.

7.2 Recomendações

O trabalho de laboratório com os floculadores permitiu obter importantes informações. No entanto, alguns procedimentos como a identificação de flocos e a

determinação dos seus tamanhos levaram muito tempo, pois foram realizados de forma manual. Seria conveniente, no futuro, utilizar software apropriado, por exemplo: processamento digital das imagens tomadas no microscópio, que permitam automatizar procedimentos, fazê-los mais precisos, velozes e independentes do observador.

De particular importância seria desenvolver uma técnica que permita avaliar de modo direto a relação entre as tensões resistentes de flocos e as variáveis da cinética de agregação, particularmente a massa específica diferencial, a taxa de dissipação G , o tamanho dos flocos e/ou os coeficientes de eficiência de colisões. Para a abordagem deste aspecto são necessários equipamento e técnicas de laboratório testadas, pois sua indeterminação gera um alto grau de incerteza nos resultados de qualquer modelo.

Apesar de terem sido levados em conta os processos de erosão e sedimentação, não se deu ênfase à interação dos flocos com o leito. Este aspecto, que merece mais atenção por sua importância ambiental e de transporte de sedimentos em geral, poderia ser abordado de forma experimental.

O modelo não contempla condições de sedimentação impedida nem o efeito de ondas enquanto às mudanças das concentração e às outras variáveis. Estes efeitos deveriam ser levados em consideração para futuras aplicações do modelo em cenários nos quais essas condições sejam relevantes.

Dispor de mais informação de campo é uma questão fundamental, pois constitui a melhor forma de saber quais são os processos de agregação dominante em cada cenário, e as taxas de mudanças espaciais e temporais dos principais indicadores, em particular dos tamanhos e velocidades de flocos *in situ*. A disponibilidade dessa informação é um requisito básico para abordar a simulação tridimensional de processos complexos, nos quais intervêm variáveis hidrodinâmicas, sedimentológicas e de qualidade de águas, para mencionar as mais relevantes.

O modelo numérico não foi otimizado, requerendo portanto, um tempo de processamento elevado. Apesar de o maior esforço computacional seja uma característica distintiva nos modelos Lagrangeanos, devem-se aumentar ao máximo os

recursos para fazê-lo mais eficiente do ponto de vista da economia de tempo de computador.

Uma hipótese básica do modelo foi a mistura completa na vertical. Apesar de essa condição ter sido registrada num trecho de estuário, não se verificou nas verticais de mar aberto. Para se considerar os efeitos de estratificação é preciso utilizar um modelo 3D baroclínico, também fora do alcance desta tese.

O modelo de floculação ainda requer validação, particularmente enquanto à verificação do mecanismo de desagregação de flocos devido às tensões de cisalhamento do escoamento.

Os coeficientes de eficiência de colisão, principais parâmetros do modelo de floculação são supostos constantes, quando na realidade deveriam ser funções das condições hidrodinâmicas e sedimentológicas locais. Esta questão merece ser analisada em maior detalhe.

A parametrização do transporte está restrita à dinâmica dos sedimentos finos. Dever-se-ia incorporar o transporte de sedimentos grossos e considerar seus efeitos separadamente quanto à sedimentação e erosão.

8. Referências Bibliográficas

ABULABAN, A., NIEBER, J. L. 2000, "Modeling the effects of nonlinear equilibrium sorption on the transport of solute plumes in saturated heterogeneous porous media", *Advances in Water Resources,* v. *23*, pp. 893-905.

ADACHI, Y. 1995, "Dynamic aspects of coagulation and flocculation, *Advances in Colloid and Interface Science"*, v. 56 , pp. 1-31.

AHLSTROM, S. W., FOOTE, H., ARNETT, R., *et al.*, 1977, "Multicomponent mass transport model: theory and numerical implementation", *Rep. BNWL 2127*, Battelle Pacific northwest Lab., Richland, Washington.

AL-RABEH, A. H., GUNAY, N., 1992, "On the application of a particle dispersion model", *Coastal Engineering,* v. 17, pp. 195-210.

ANA (AGÊNCIA NACIONAL DE ÁGUAS), 2004, Sistema de Informações Hidrológicas, www.ana.gov.br.

ARIATHURAI, R., ARULANANDAN, K., 1978, "Erosion Rates of Cohesive Soils", *Journal of Hydraulics Division*, v. 104, n. HY2, pp. 279-283.

ARIATHURAI, R., KRONE, R.B., 1976, "Finite Element Model for Cohesive Sediment Transport", ", *Journal of Hydraulics Division*, v. 102, n. HY3 , pp. 323-378.

ARIATHURAI, R., 1974, "A Finite Element Model for Sediment Transport in Estuaries", Ph. D. dissertation, Department of Civil Engineering, University of California, Davis.

ASCE (AMERICAN SOCIETY OF CIVIL ENGINEERING), 1988, "Task Committee on Turbulence Models in Hydraulic Computations, Turbulence Modelling of Surface Water Flow and Transport: Part I", *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 114, n. 9, pp. 970-991.

BERHANE, I., STERNBERG, R. W., KINEKE, G. C., *et al.,* 1997, "The variability of suspended aggregates on the Amazon Continental Shelf",*Continental Shelf Research,* v. 17, n. 3, pp. 267-285

BOADWAY, J. D., 1978, "Dynamics of Growth and Breakage of Alum Floc in Presence of Fluid Shear", *Journal of the Environmental Engineering*, v. 104, n. EE5, pp. 901-915.

BODIN, J, POREL, G., DELAY, F., 2003, "Simulation of solute transport in discrete fracture networks using the time domain random walk method", *Earth and Planetary Science letters,* v. 208, pp. 297-304.

BRENON, I., LE HIR, P., 1999, "Modelling the turbidity maximum in the Seine Estuary (France): Identification of formation processes", *Estuarine, Coastal and Shelf Science,* v. 49, pp. 525-544.

BURBAN, P.Y. XU, MCNEIL, J., LICK, W., 1990, "Settling speeds of flocs in fresh water and seawater", *Journal of Geophysical Research*, v. 95, pp. 18213-18220.

BURBAN, P.Y., LICK, W., LICK, J.,1989,"The Flocculation of Fine-Grained Sediments in Estuarine Waters", *Journal of Geophysical Research*, v. 94, n. C6, pp. 8323-8330.

BURD, A. B., MORAN, S.B., JACKSON, G. A., 2000, A coupled adsorption-aggregation model of the POC/^{234}Th ratio of marine particles, *Deep-Sea Research Part I: Oceanographic Research Papers*, v. 47, n.1, pp. 103-120.

BURD, A. B., JACKSON, G. A., 1997, Predicting particle coagulation and sedimentation rates for a pulsed input, *Journal of Geophysical Research*, v. 102, n. C5, pp. 10545-10562.

BUSHELL G., 2005, "Forward light scattering to characterize structure of flocs composed of large particles", *Chemical Engineering Journal*, em prensa.

CARGILL, K. W.,1984, "Prediction of Consolidation of Very Soft Soil", *Journal of Geotechnical Engineering*, v. 110, n. 6, pp. 775-795.

CARVALHO, C. E. V., SALOMÃO, M. S. M., MOLISANI, M. M., REZENDE C. E., LACERDA, L. C., 2002, "Contribution of a medium-sized tropical river to the particulate heavy-metal load for the South Atlantic Ocean", *The Science of the Total Environment*, Elsevier, v. 284, pp. 85-93.

CHORIN, A. J., 1973, "Numerical study of slightly viscous flow", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 57, n.4, pp. 785-796.

COLE P., MILES G., 1983, "Two-dimensional model of mud transport", *Journal of Hydraulic Engineering,* v. 109, n. 1, pp. 1-12.

COUFORT C., BOUYERT D., LINÈ A., 2005, "Flocculation related to local hydrodynamics in a Taylor-Couette reactor and in a jar", *Chemical Engineering Science*, v. 60, pp. 2179-2192.

CROMEY, C., NICKELL, T., BLACK, K., 2002, "DEPOMOD-modelling the deposition and biological effects of waste solids from marine cage farms", *Aquaculture,* v. *214*, pp. 211-239.

DIRETORIA DE HIDROGRAFIA E NAVEGAÇÃO, 2000, "Catálogo de cartas e publicacações", 11ª Edição, Brasil.

DUDOKOVIC, M. P., 2002, "Opaque multiphase flows:experiments and modeling", *Experimental Thermal and Fluid Science*, v. 26*,* pp. 747-761.

DUNSBERGEN, D. W., 1994, *Particle models for transport in three-dimensional shallow water flow*, Ph. D. dissertation, Report 94-8, Communications on Hydraulic and Geotechnical Engineering, Delft University of Technology, Delft.

DYER, K. R., CHRISTIE, M. C., MANNING, A. J., 2004, "The effects of suspended sediment on turbulence within an estuarine turbidity maximum", *Estuarine, Coastal And Shelf Science*, v. 59, pp. 237-248.

DYER, K.R., BALE A. J., CHRISTIE M.C., FEATES N., JONES S., MANNING A.J., 2002, "The Turbidity Maximum in a Mesotidal Estuary, The Tamar Estuary, UK: I. Dynamics of Suspended Sediment", In: *Proceedings. Fine Sediment Dynamics in the Marine Environment In Marine Science*, v. 5, Ed. J. Winterwerp & C. Kranenburg, Elsevier, pp. 203-218.

DYER, K.R., BALE A. J., CHRISTIE M.C., FEATES N., JONES S., MANNING A.J., 2002, "The Turbidity Maximum in a Mesotidal Estuary, The Tamar Estuary, UK: II. Dynamics of Suspended Sediment", In: *Proceedings. Fine Sediment Dynamics in the Marine Environment In Marine Science*, v. 5, Ed. J. Winterwerp & C. Kranenburg, Elsevier, pp. 219-232.

DYER, K. R., 1989, "Sediment Processes in estuaries: Future research requeriments", *Journal of Geophysical Research*, v. 94, n.C10, pp. 14327-14339.

EDZWALD, J. K., UPCHURCH, J. B., O´MELIA, C. R., 1974, "Coagulation in Estuaries", *Environmental Science & Technology*, v. 8, n. 1, pp. 58-63.

EISMA, D., BALE, A. J., DEARNALEY, M.P., FENNESSY, M. J., VAN LEUSSEN, W. MALDINEY, M. -A.,PFEIFFER, A., WELLS, J. T., 1996, "Intercomparison of in situ suspended matter (floc) size measurements", *Journal of Sea Research*, v. 36(1-2), pp. 3-14.

ELDER, J. W., 1959, "The dispersion of marked fluid in turbulent shear flow", *Journal of Fluid Mechanics*, v. 5, n.4, pp. 544-560.

ELLIOT, A., DALE A. C., PROCTOR R., 1992, "Modelling the movement of pollutants in the UK Shelf Seas", *Marine Pollution Bulletin*, v. 24, n.12, pp. 614-619.

FARLEY, K. J., MOREL, F. M. M., 1986, "Role of coagulation in the kinetics of sedimentation", *Environmental Science Technology*, v. 20, pp. 187-195.

FENNESSY, M. J., DYER, K. R., HUNTLEY, D. A., 1994, " INSSEV: An instrument to measure the size and settling velocity of flocs in situ", *Marine Geology*, v. 117, pp. 107-117.

FISCHER, H. B., LIST E. J., KOH, R. C., IMBERGER, J., BROOKS, N. H. , 1979, *Mixing in inland and coastal waters*, Academic Press, New York.

FOX, J. M., HILL P. S., MILLIGAN, T. G., BOLDRIN, A., 2004, "Flocculation and Sedimentation on the Po River Delta", *Marine Geology*, v. 203, pp. 95-107.

FRIEDLANDER, S. K., 2000, *Smoke, dust and haze:Fundamentals of aerosol behaviour*. Wiley-Interscience.

GIBBS, R. J., 1985, "Estuarine flocs: their size, settling velocity and density", *Journal of Geophysical Research*, v. 90, n.C2, pp. 3249-3251.

GIBBS, R. J., 1983, "Effect of Natural Organic Coatings on the Coagulation of Particles", *Environmental Science & Technology*, v. 17, n. 4, pp. 237-240.

GIBBS, R.J., KONWAR L., 1983, "Sampling of mineral flocs using Niskin bottles", *Environmental Science & Technology*, v. 17, pp. 374-375.

GIBBS, R. J., KONWAR L. N., 1982, "Effect of Pipetting on Mineral Flocs", *Environmental Science & Technology*, v. 16, n. 2, pp.119-121.

HAMRICK, J., 2001*, EFDC1D, A One Dimensional Hydrodynamic and Sediment Transport Model for River and Stream Networks - Model Theory and Users Guide*, Tetra Tech, Inc., Fairfax, Virginia.

HARLEMAN, D. R. F., 1988, *Transport Processes in Environmental Engineering, lecture notes*, Parsons Hydrodynamics Lab., Masachusetts Inst. of Technology, Cambridge, USA.

HASSAN, A., MOHAMED, M., 2003, "On using particle tracking methods to simulate transport in single-continuum and dual continua porous media", *Journal of Hydrology,* v. *275*, pp. 242-260.

HASSAN, A., ANDRICEVIC, R., CVETKOVIC, V., 2001, "Computational issues in the determination of solute discharge moments and implications for comparison to analytical solutions". *Advances in Water Resources,* v. 24, pp. 607-619.

HATHHORN, W., 1997, "Simplified approach to particle tracking methods for contaminant transport", *Journal Hydraulic Engineering*, ASCE, v.123, n. 12, pp.1157-1160.

HAYTER, E. J., PAKALA, C. V., 1989, "Transport of inorganic contaminants in estuarial waters", *Journal of Coastal Research*, v. SI 5, pp. 217-230.

HILL, T. G., JONES, S. E., PRANDLE, J. D., 2003, "Derivation of sediment resuspension rates from acoustic backscatter time-series in tidal waters", *Continental Shelf Research,* v. 23, pp. 19-40.

HOLLEY, E. R., SIEMONS, J., ABRAHAM, G., 1972, "Some aspects of Analysing transverse diffusion in rivers", *Journal of the Hydraulics Research*, v.10(1), pp. 27-57.

HONEYMAN, B. D., SANTSCHI, P.H., 1989, "A Brownian-pumping model for oceanic trace metal scavenging Evidences from Th isotopes", *Journal of Marine Research*, v. 47, pp. 951-992.

HUANG H., 1994, "Fractal properties of flocs formed by shear and differential settling", *Physical Fluids*, v. 6, n. 10, pp. 3229-3236.

HUNT, J. R., 1982, "Self-similar particle-size distributions during coagulation: theory and experimental verification", *Journal of Fluids Mechanics*, v. 122, pp.169-185.

HUNTER, J. R., CRAIG, P. D., PHILLIPS, H. D., 1993, "On the use of random walk models with spatially variable diffusivity", *Journal of Computacional Physics,* v. 106, pp. 336-376.

IVES, K. J., BHOLE, A. G., 1977, "Study of Flowthrough Couette Flocculators - II. Laboratories Studies of Flocculation Kinetics", *Water Research*, v. 11, pp. 209-215.

IVES, K. J., BHOLE, A. G., 1973, "Theory of Flocculation for Continuous Flow System", *Journal of the Environmental Engineering*, v. 99, n. EE1, pp.17-34.

JAMES, S., CHRYSIKOPOULOS, C. V., 2003, "Effective velocity and effective dispersion coefficient for finite-sized particles flowing in a uniform fracture", *Journal of Colloid and Interface Science,* v. 263, pp. 288-295.

JAMES, S., CHRYSIKOPOULOS, C. V., 2001, "An efficient particle tracking equation with specified spatial step for the solution of the diffusion equation", *Chemical Engineering Science,* v. 56, pp. 6535-6543.

JIANG, J., MEHTA, A. J., 2001, "Fine-Grained Sedimentation in a Shallow Harbor", *Journal of Coastal Research*, v.17, n. 2, pp. 389-393.

JIN, X. Y., 1993, *Quasi Three-Dimensional Numerical Modelling of Flow and Dispersion in Shallow Water*, Ph. D. dissertation, Department of Civil Engineering, Delft Univ. of Technology.

KAO, A., NICHOLS, M., LEWIS, J., 1978, *Modelling sediments movement in the turbidity maximum of un estuary*, In: Bull. 111, Virginia Water Resources Research Center.

KIM, A. S., STOLZENBACH, K. D., 2004, "Aggregate formation and collision efficiency in differential settling", *Journal of Colloid and Interface Science,* v. 271, n. 1, pp. 110-119.

KIM, Y. D., SEO, I. W. S., KANG, W., OH, B. C., 2002, " Jet integral-particle tracking hybrid model for single buoyant jets", *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 128, n. 8, pp. 753-760.

KINZELBACH, W., UFFINK, G., 1991, "The random walk method and extensions in groundwater modeling, Transport processes in Porous Media, edited by J. Bear and M. Corapcioglu, Kluwer Academic, Norwell, Mass., pp. 761-787.

KITANIDIS, P., 1994, "Particle-tracking equations for the solution of the advection-dispersion equation with variable coefficients", *Water Resources Research*, v. 30, n.11, pp. 3225 – 3227.

KOROTENKO, K. A., MAMEDO,V, R. M., KONTAR, A. E., *et al.*, 2003, "Particle tracking method in the approach for prediction of oil slick transport in the sea: modelling oil pollution resulting from river input ", *Journal of Marine Systems,* v. 48, n. 1-4, pp. 159-170.

KRANENBURG, C., 1999, "Effects of flocs on viscosity and deposition of cohesive sediment suspensions", *Continental Shelf Research*, v. 19, pp.1665-1680.

KRANENBURG, C.,1994, "The fractal structure of cohesive sediment aggregates", Estuarine, *Coastal and Shelf Science*, v. 39, pp.451-460.

KRONE, R. B., 1963, *A study of rheological properties of estuarial sediments*, In: Report Nº 63-8, Hydraulic Engineering Laboratory and Sanitary Engineering Lab., University of California, Berkeley, CA.

KRONE, R. B., 1962, *Flume studies of the transport of sediment in estuarial shoaling process*, In: Final Report, Hydraulic Engineering Laboratory and Sanitary Engineering Lab., University of California, Berkeley, CA.

LABOLLE, E., FOGG, G., TOMPSON, A. 1996, "Random-walk simulation of transport in heterogeneous porous media: Local mass-conservation problem and implementation methods". *Water Resources Research*, v. 32, n. 3, pp. 583-593.

LEE, D. J., CHEN, G. W., LIAO, Y.C., HSIEH, C. C., 1996, "On the free-settling test for estimating activated sludge floc density",*Water Research*, v. 30, n. 3, pp. 541-550.

LICK, W., HUANG, H., JEPSEN, R., 1993, "Flocculation of Fine-Grained Sediments Due to Differential Settling", *Journal of Geophysical Research*, v. 98, n. 6, pp. 10279-10288.

LICK, W., LICK, J., 1988, "Aggregation and Disaggregation of Fine-Grained Lake Sediments", *Journal Great Lakes Research*, v.14, n. 4, pp. 514-523.

LOGAN B., KILPS J.R., 1995, "Fractal dimensions of aggregates formed in different fluid mechanical environments", *Water Research*, v. 29, n.2, pp.443-453.

LUMBORG U., PEJRUP M., 2005, "Modelling of cohesive sediment transport in a tidal lagoon-an annual budget", *Marine Geology*, v. 218, pp. 1-16.

MAA, J.P.-Y., SANFORD, L., HALKA, J.P., 1998, "Sediment resuspension characteristics in Baltimore Harbor, Maryland", *Marine Geology* , v.146, pp.137-145.

MANNING, A. J., DYER, K, R., 1999, "A laboratory examination of floc characteristics with regard to turbulent shearing", *Marine Geology*, v. 160, n. 1-2, pp. 147-170.

MASLIYAH, J. H., POLIKAR, M., 1980, "Terminal velocities of porous spheres", *Canadian Journal Chemical Engineering*, v. 58, pp. 299-302.

MCANALLY, W.H., MEHTA, A. J., 2002, "Significance of Aggregation of Fine Sediment Particles in their Deposition", *Estuarine, Coastal and Shelf Science*, v. 54, pp. 643-653.

MCANALLY, W. H., MEHTA, A. J., 2001, "Collisional Agregation of Fine Estuarial Sediment", In: Coastal and *Estuarine Fine Sediment Processes*, W.H. McAnally and A.J. Mehta editors, Elsevier Science B.V.

MCKENNA, S., WALKER, D., ARNOLD, B., 2003, "Modeling dispersion in three-dimensional heterogeneous fractured media at Yuca Mountain", *Journal of Contaminant Hydrology,* v. 62-63, pp. 577-594.

MEHTA, A. J., 1989, "On estuarine cohesive sediment behaviour", *Journal of Geophysical Research*, v. 94, n.C10, pp. 14303-14314.

MEHTA, A.J., HAYTER, E., PARKER, W.R., *et al.*, 1989, "Cohesive Sediment Transport. I: Process Description", *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 115, n. 8, pp. 1076-1093.

MEHTA, A. J., PARTHENIADES, E., 1975, "An investigation of the depositional properties of flocculated fine sediments", *Journal of Hydraulic Research* v. 13, n. 4, pp. 361-381.

MIKES , D., VERNEY R., LAFITE R., BELORGEY, M., 2004, Controlling factors in estuarine flocculation processes experimental results with material from the Seine Estuary, Northwestern France, *Journal of Coastal Research*, v. Special Issue 41.

MILLIGAN, T. G., HILL, P. S., 1998, "A laboratory assessment of the relative importance of turbulence, particle composition, and concentration in limiting maximal floc size and settling behaviour", *Journal of Sea Research,* v. 39, pp. 227–241.

NARAYANAN, C., LAKEHAL, D., YADIGAROGLU, G., 2002, "Linear stability analysis of particle-laden mixing layers using Lagrangian particle tracking", *Powder TechnologyI,* v. 15*,* pp. 122-130.

NEALE, G., EPSTEIN, N., NADER, W., 1973, "Creeping flow relative to permeable spheres", *Chemical Engineering Science*, v. 28, pp.1865-1874.

NEUMANN, L. E., 2004, Modelling of Flocculation and Settling of suspended sediments using Population Balances, Ph.D. dissertation, University of Queensland.

NEZU, I., NAKAGAWA, H., 1993, "Turbulence in open-channel flows", *International Association for Hydraulic Research,* Monograph Series, Balkema, Rotterdam.

NEZU, I., RODI, W., 1986, "Open-Channel flow measurements with a Laser Doppler Anemometer", *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 112, n. 5, pp. 335-355.

ODD, N., COOPER, A., 1989, "A two-dimensional model of the movement of fluid mud in a high energy turbid estuary", *Journal of Coastal Research*, v. SI, n. 5, pp. 185-193.

OLES, V., 1992, "Shear induced aggregation and breakup of polyestirene latex particles", *Journal Colloid Interface Science*, v. 154, pp. 351-358.

O´MELIA, C. R., 1980, "Aquasols: the behaviour of small particles in aquatic systems", *Environmental Science and Technology*, v. 14, n. 9, pp. 1052-1060.

PAPAVASSILIOU, D., 2002, "Turbulent transport from continuous sources at the wall of a channel", *International Journal of Heat and Mass Transfer,* v. 45*,* pp. 3571-3583.

PARTHENIADES, E., 1993, Turbulence, flocculation, and cohesive sediment dynamics. *Nearshore and Estuarine Cohesive Sediment Transport*, v. 42. Coastal and Estuarine Studies, A. J. Mehta, ed. A., Geophys. Union, Washington, DC, pp. 40-59.

PARTHENIADES E., 1965, "Erosion and deposition of cohesive soils", *Journal of the Hydraulics Division*, ASCE, v. 91, n. HY1, pp. 105-139.

PERIAÑEZ R., ELLIOT, A. A., 2002, "Particle-tracking method for simulating the dispersion of non-conservative radionuclides in coastal waters", *Journal of Environmental Radioactivity*, v. *58,* pp. 13-33.

POSTMA, H., 1967, Sediment transport and sedimentation in the estuarine environment. In, Estuaries, edited by G.H. Lauff, AAAS, Washington, pp. 158-179.

PRICKETT, T. A., NAYMIK, T. G., LONQUIST, C. G., 1981, "A Random Walk solute transport model for selected groundwater quality evaluations". *Bulletin Illinois State Water Survey*, v. 65.

PROCTOR R., ELLIOT, A., FLATHER, R., 1994, "Forecast and Hindcast Simulations of the Braer Oil Spill", *Marine Pollution Bulletin*, v. 28, n. 4, pp. 219-279.

ROSMAN, P. C. C, 2000, *SisBAHIA – Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental*, *Documentação de Referência Técnica*, Área de Engenharia Costeira e Oceanográfica, Universidade Federal do Rio de Janeiro (COPPE-PEnO/UFRJ), Rio de Janeiro.

ROSMAN, P. C. C., GOBBI, E.F, 1990. “A Self-Adjusting Subgrid "Turbulence” Model for Shallow Water Flow”. *XI Ibero American Congress on Computational Methods in Engineering*, Rio de Janeiro, Brasil.

ROSMAN, P. C. C., 1987, *Modeling Shallow Water Bodies via Filtering Techniques*, Ph.D. Thesis, Dept. of Civil Engineering, Massachusetts Institute of Technology, Massachusetts, USA.

SAFFMAN, P. G., TURNER, J. S., 1956, “On the collision of drops in turbulent clouds”, *Journal of Fluid Mechanics*, v. 1, pp.16-30.

SANFORD, L. P., MAA J. P. Y., 2001, “A unified erosion formulation for fine sediments”, *Marine Geology,* v. 179, pp. 9-23.

SCHETTINI, C. A. F., TRUCCOLO, E. C., CARVALHO, C. E. V. DE, 2004, “Caracterização hidrodinâmica da passagem sul do estuário do rio Paraiba do Sul”, Congresso Brasileiro de Oceanografia ´2004 e XVI Semana Nacional de Oceanografia, Libro de Resumos, Itajaí, Santa Catalina, Brasil.

SERRA, T., CASAMITJANA, X., 1998, “Effect of the shear and volume fraction on the aggregation and breakup of particles”, *AIChE Journal,* v. 44, n. 8, pp.1724-1730.

SOMMERFELD, M., 2003, “Analysis of collision effects for turbulent gas-particle flow in a horizontal channel: Part I. Particle transport”, *International Journal of Multiphase Flow*, v. 29, pp. 675-699.

SPEARMAN, J. R., ROBERTS, W., 2002, “Comparison of flocculation models for applied sediment transport modelling”, In: *Proceedings. Fine Sediment Dynamics in the Marine Environment In Marine Science*, v. 5, Ed. J. Winterwerp & C. Kranenburg, Elsevier, pp. 277-293.

STONE, M., KRISHNAPPAN, B. G., 2003, “Floc morphology and sizes distributions of cohesive sediment in steady-state flow”, *Water Research*, v. 37, pp. 2739-2747.

SYVITSKI, J. P. M., ASPREY, K. W., LEBLANC, K. W., 1995, “In situ characteristics of particles settling within a deep-water estuary”, *Deep Sea Research II*, v. 42, n. 1, pp. 223-256.

TAMBO, N., WATANABE, Y., 1979, “Physical Characteristics of Flocs-I. The Flocs Density Function and Aluminium Floc”, *Water Research*, v. 13, pp. 409-419.

TAYLOR, G. I., 1936, “Fluid friction between rotating cylinders. Part I. Torque measurements”. *Proc. Royal Society London,* v. A157, pp. 546-564.

TAYLOR, G. I., 1935, "Statistical theory of the turbulence". *Proc. Royal Society London,* v. A151, pp. 429.

TEISSON, CH., LATTEAUX, B., 1986, "A Depth-Integrated Bidimensional Model of Suspended Sediment Transport", In: *Third International Symposium on River Sedimentation*, March 31-April 4, 1986.

TENNEKES, H., LUMLEY, J. L., 1972, *A First Course in Turbulence*, Harper Collins Publishers.

THILL, A., MOUSTIER, S., GARNIER, J. M., *et al.*, 2001, "Evolution of particle size and concentration in the Rhône river mixing zone: influence of salt flocculation", *Continental Shelf Research*, v. 21, pp. 2127-2140.

TOMPSON, A. F. B., 1993, "Numerical simulation of chemical migration in physically and chemically heterogeneous porous media", *Water Resource Research*, v. 29, n. 11, pp. 3709-3726.

TOMPSON, A. F. B., GELHAR, L. W., 1990, "Numerical simulation of solute transport in three-dimensional, randomly heterogeneous porous media", *Water Resource Research*, v. 26, n. 10, pp. 2541-2562.

TORFS, H., MITCHENER, H., HUYSENTRUYT, H., TOORMAN, E.., 1996, "Settling and consolidation of mud/sand mixtures", *Coastal Engineering,* v. 29, pp. 27-45.

TRENTO, A.E., VINZON S.B., MASCARENHAS F.B. e ROLDAO J., "Assessments on the Particle-Tracking Method Applied to Transport Problems" submetido para publicação.

TRENTO, A., VINZÓN, S., 2002, "Velocidade de Sedimentación de los Flocos", In: 5º Encontro Nacional de Engenharia de Sedimentos, ENES, São Paulo, Brasil, pp. 285-293.

TSAI, C. H., IACOBELLIS, S., LICK, W., 1987, "Flocculation of Fine-Grained Lake Sediments Due to a Uniform Shear Stress", *Journal Great Lakes Research*, v. 13, n. 2, pp.135-146.

TSOU, G. W., WU, R. M., YEN, P. S., *et al.*, 2003, "Advection flow through sludge flocs", *Advances in Environmental Research*, v. 7 , pp. 733–737.

UFFINK, G., 1985, "A random walk model for the simulation of macrodispersion in a stratified aquifer", IAHS Publ. 146, pp.103-114.

UNCLES, R. J., STEPHENS, J.A., BARTON, M. L., 1984, "Observations of fine-sediments concentrations and transport in the turbidity maximum region of an estuary". Coastal and Estuarine Studies. Dynamics and exchanges in estuaries and the coastal zone (Prandle D., ed.) American Geophisical Union, pp. 255-276.

VALOCCHI, A. J., QUINODOZ, A. M., 1989, "Application of the random walk method to simulate the transport of kinetically adsorbing solutes", *Groundwater Contamination*, IAHS Publ., v. 185, pp. 35-42.

VAN DER HAM, R., WINTERWERP, J. C., 2001, "Turbulent exchange of fine sediments in a tidal channel in the Ems/Dollar estuary. Part II. Analysis with a 1DV numerical model", *Continental Shelf Research*, v. 21, pp. 1629-1647.

VAN DUUREN, A., 1968, "Defined Velocity Gradient Model Flocculator", *Journal of the Sanitary Engineering Division*, v. 94, n. SA4, pp. 671-682.

VANONI, V.A., 1975, *Sedimentation Engineering*, American Society of Civil Engineers, New York.

VAN LEUSSEN, W., 1999, "The variability of settling velocities of suspended fine-grained sediment in the Ems estuary", *Journal of Sea Research*, v. 41, pp. 109-118.

VAN RIJN, L. C, 1993, *Principles of sediment transport in rivers, estuaries and coastal seas*, The MIT Press.

VINZÓN, S., PAIVA, A. M., 2002, "Modeling the Sediment Concentration Profiles at the Amazon Shelf", In*: Fine Sediment Dynamics in the Marine Environment, Proc. Marine Science*, 5, edited by J. Winterwerp and C. Kranenburg, Elsevier.

VINZON, S. B., 1998, *Uma Contribuição ao Entendimento da Dinâmica de Sedimentos na Plataforma Continental do Amazonas*, Ph. D. dissertation, PEnO/ COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro.

WALKER, H. W., BOB, M. M., 2001, "Stability of particle flocs upon addition of natural organic matter under quiescent conditions", *Water Research*, v. 35, n. 4, pp. 875-882.

WIESNER, M. R., 1992, "Kinetics of aggregate formation in rapid mix", *Water Research*, v. 26, n. 3, pp. 379-387.

WINTERWERP, J. C., VAN KESTEREN, W. G. M., 2004, *Introduction to the Physics of Cohesive Sediment in the Marine Environment*, Editor T. Van Loon, Elsevier.

WINTERWERP, J. C., 2002, “On the flocculation and settling velocity of estuarine mud”, *Continental Shelf Research*, v. 22, pp. 1339-1360.

WINTERWERP, J. C., 2000, *On the dynamics of highconcentrated mud suspension*, Ph.D. dissertation, Technische Universiteit Delft.

WINTERWERP, J. C., 1998, “A simple model for turbulence induced flocculation of cohesive sediment”, *Journal of Hydraulic Research*, v. 36, n. 3, pp. 309-326.

WU, Y., FALCONER, A., 2000, “A mass conservative 3-D numerical model for predicting solute fluxes in estuarine waters”, *Advances in Water Resources*, v. 23, pp.531-543.

WU, Y., FALCONER, R. A., UNCLES, R. J., 1998, “Modelling of water flows and cohesive sediment fluxes in the Humber Estuary, UK”, *Marine Pollution Bulletin*, v. 37, n. 3-7, pp. 182-189.

WU, R. M., LEE, D. J., 1998, “Hydrodynamic drag force exerted on a moving floc and its implication to free-settling tests”, *Water Research*, v. 32, n. 3, pp. 760-768.

ZHANG, X. Y., ADAMS, E. E., 1999, “Prediction of near field plume characteristics using far field circulation model”, *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 125, n.3, pp. 233-241.

ZIEGLER, C. K., NISBET, B. S., 1995, “Long-Term simulation of fine-grained sediment transport in large reservoir”*, Journal of Hydraulic Engineering*, v. 121, n. 11, pp. 773-791.

ZIEGLER, C. K., NISBET, B. S., 1994, “Fine-grained sediment transport in Pawtuxet River, Rhode Island”*, Journal of Hydraulic Engineering*, v. 120, n. 5, pp. 561-576

ZIMMERMANN, S., KOUMOUTSAKOS, P., KINZELBACH, W., 2001, “Simulation of pollutant transport using a particle method”, *Journal of Computation Physics*, v. 173, pp. 322-347.

ANEXO 1: “Assessments on the Particle-Tracking Method Applied to Transport Problems”

Trento, A.E., VINZON S.B., MASCARENHAS F.B. e ROLDAO J., enviado à revista Applied Mathematical Modelling em março de 2005.

ANEXO 2: Cálculo de d_f pelo método de Newton Raphson

O modelo de FARLEY e MOREL (Capítulo 2) permite calcular W_s, no entanto não dá informação a respeito de d_f, que se calculará pelo método de Newton Raphson que se descreve a seguir. O balanço de forças para um floco caindo em forma estacionária num meio infinito pode descrever-se com a seguinte equação (WU e LEE, 1998; NEALE *et al*., 1973):

$$\frac{\pi d_f^3}{6} g\left(\rho_f - \rho_w\right) = C_D \rho_w \Omega \frac{\pi d_f^2}{4} \frac{W_s^2}{2} \tag{1}$$

com C_D o coeficiente de arrasto, d_f o diâmetro dos flocos e Ω a relação de resistência experimentada por um floco relativa à de uma esfera sólida, que se suporá igual a um. No parágrafo 2.4 se comentam as considerações efetuadas para as diferentes variáveis. A expressão para a massa específica diferencial é:

$$\Delta\rho_f = \rho_f - \rho_w \tag{2}$$

$$d_f = C_D \frac{\rho_w}{\Delta\rho_f} \frac{3}{4g} \frac{W_s^2}{2} \tag{3}$$

Para esferas com 0.1 < *Re* < 120, MASLIYAH e POLIKAR (1980) propuseram as seguintes fórmulas para C_D:

Tabela A1: Cálculo de C_D em função do *Re*

C_D	Intervalo de *Re*	
$\frac{24}{\boldsymbol{Re}}\left(1 + 0.1315\,\boldsymbol{Re}^{(0.82-0.05\,w)}\right)$	$0.1 < Re \leq 7$	(4)
$\frac{24}{\boldsymbol{Re}}\left(1 + 0.0853\,\boldsymbol{Re}^{(1.093-0.105\,w)}\right)$	$7 < Re < 120$	(5)

Com $w = \log_{10} Re$.

No intervalo $0.1 < Re \leq 7$ são válidas as relações:

$$C_D = \frac{24\upsilon}{W_s d_f}\left(1 + 0.1315\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^{(0.82-0.05w)}\right) \tag{6}$$

$$d_f = \frac{24\upsilon}{W_s d_f}\left(1 + 0.1315\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^{(0.82-0.05w)}\right)\frac{3}{4g}W_s^2\,\frac{\rho_w}{\Delta\rho_f} \tag{7}$$

$$d_f^2 = \frac{18\mu}{g}\frac{W_s}{\Delta\rho_f}\left(1 + 0.1315\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^{\left(0.82-0.05\log_{10}\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)\right)}\right) \tag{8}$$

$$A = \left(0.82 - 0.05\log_{10}\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)\right) \tag{9}$$

$$f(x) = f(d_f) = d_f^2 - \frac{18\mu}{g}\frac{W_s}{\Delta\rho_f}\left(1 + 0.1315\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^{A}\right) \tag{10}$$

$$\frac{\partial f(d_f)}{\partial d_f} = \tag{11}$$
$$= 2d_f - \frac{18\mu}{g}\frac{W_s}{\Delta\rho_f}0.1315\left(0.82 - 0.05\log_{10}\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)\right)\left(\frac{W_s}{\upsilon}\right)\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^{A}$$

Para o intervalo $7 < Re < 120$ se repete o procedimento, obtendo-se:

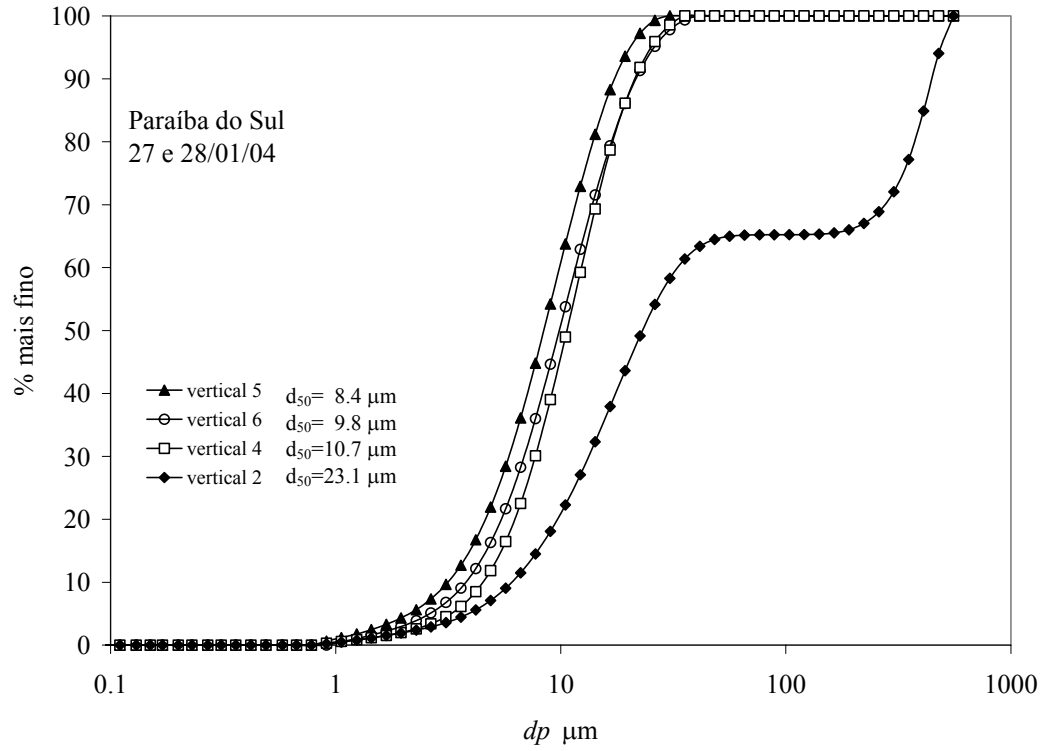
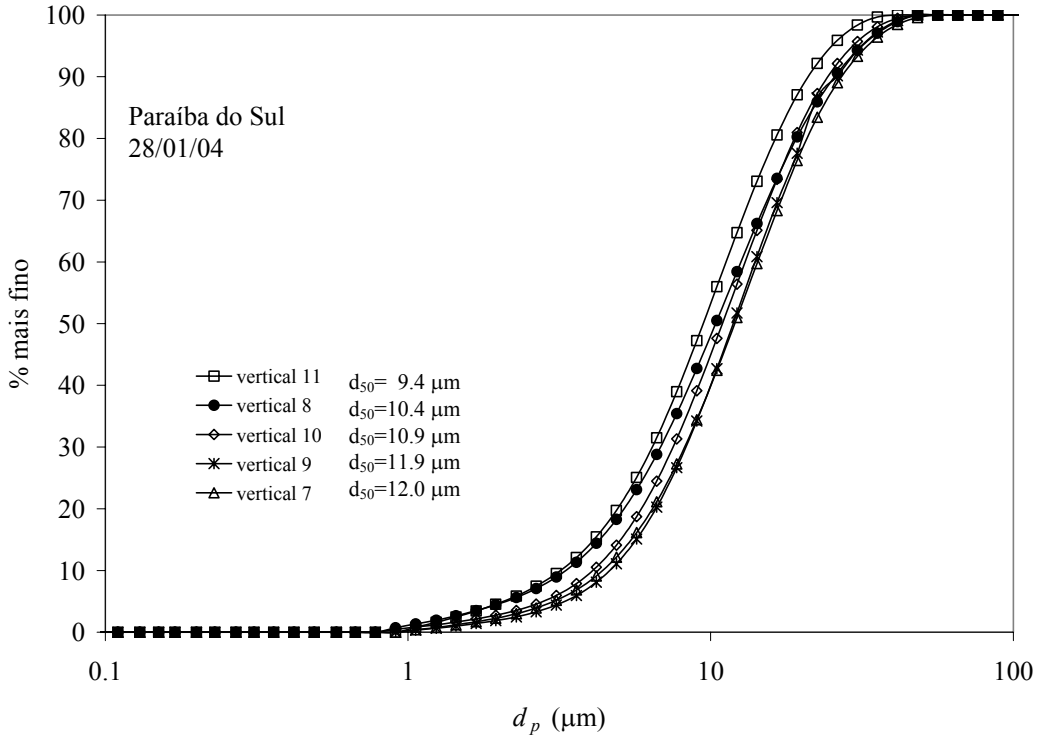
$$f(x) = f(d_f) = d_f^2 - \frac{18\mu}{g}\frac{W_s}{\Delta\rho_f}\left(1 + 0.0853\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^{\left(1.093 - 0.105 log_{10}\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)\right)}\right) \tag{12}$$

$$B = \left(1.093 - 0.105 log_{10}\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)\right)$$

$$\frac{\partial f(d_f)}{\partial d_f} == 2d_f - \frac{18\mu}{g}\frac{W_s}{\Delta\rho_f}0.0853\left(1.093 - 0.105 log_{10}\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)\right)\left(\frac{W_s}{\upsilon}\right)\left(\frac{W_s d_f}{\upsilon}\right)^B \tag{13}$$

Finalmente se resolve para d_f com o método de Newton-Raphson

$$d_{f(i+1)} = d_{f(i)} - \frac{f(d_f)}{\frac{\partial f(d_f)}{\partial d_f}} \tag{14}$$

ANEXO 3: Determinação granulométrica dos sedimentos suspensos.

Verticais 2, 4, 5, 6, 7, 8, 9, 10 e 11 (rio Paraíba do Sul, Janeiro 2004). Efetuada na COPPE, por difração laser com um equipamento Malvern.