ANÁLISE COMPUTACIONAL DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS DE FLOCULAÇÃO EM CORRENTES DE TURBIDEZ

Rodrigo Resende Alves

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil.

Orientadores: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho
Fernando Alves Rochinha

Rio de Janeiro
Setembro de 2013

ANÁLISE COMPUTACIONAL DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS DE FLOCULAÇÃO EM CORRENTES DE TURBIDEZ

Rodrigo Resende Alves

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM ENGENHARIA CIVIL.

Examinada por:

Prof. Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho, D.Sc.

Prof. Fernando Alves Rochinha, D.Sc.

Prof. Renato Nascimento Elias, D.Sc.

Prof. Fernando Pereira Duda, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ – BRASIL
SETEMBRO DE 2013

Alves, Rodrigo Resende

Análise computacional de Modelos Fenomenológicos de Floculação em Correntes de Turbidez/Rodrigo Resende Alves. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2013.

XIII, 51 p.: il.; 29, 7cm.

Orientadores: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho

Fernando Alves Rochinha

Dissertação (mestrado) – UFRJ/COPPE/Programa de Engenharia Civil, 2013.

Referências Bibliográficas: p. 50 – 51.

1. Floculação. 2. Fractais. 3. Sedimentos finos. 4. Método Multiescala Variacional. 5. Turbulência. I. Coutinho, Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Civil. III. Título.

Dedico essa conquista a meus pais, por todo carinho, educação e conselhos.

Agradecimentos

Gostaria de agradecer a todos que de alguma forma fizeram parte deste trabalho, em especial:

- Primeiro a Deus - Santo e generoso, puro e longânime; que nos concebeu o dom da vida.
- A minha mãe Maria Madalena Resende Alves, meu pai Sebastião Ferreira Alves, meu irmão Rafael Resende Alves e minha família pelo apoio, incentivo e compreensão em todos momentos da minha vida.
- Aos Professores e Orientadores Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho e Fernando Alves Rochinha, por terem acreditado em meu potencial para o desenvolvimento desta dissertação.
- Aos profissionais e amigos do Núcleo de Atendimento em Computação de Alto Desempenho (NACAD): Mara (quem nos mantém atualizados dos compromissos e salva das burocracias), Albino, Myrian e Orlando (por manter a rede e os computadores funcionando), D. Sandra (boa conversa e o cafezinho salvador) e os amigos Alane, Fábio, Igor, Letícia e Marcela (sempre dispostos a ajudar).
- A minha namorada Ana Regina por todo carinho, paciência e compreensão.
- Aos meus amigos de infância e da UFRuralRJ, por cada momento.
- Ao Centro Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro indispensável para a realização deste trabalho.

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

ANÁLISE COMPUTACIONAL DE MODELOS FENOMENOLÓGICOS DE FLOCULAÇÃO EM CORRENTES DE TURBIDEZ

Rodrigo Resende Alves

Setembro/2013

Orientadores: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho
Fernando Alves Rochinha

Programa: Engenharia Civil

A modelagem computacional de escoamentos que transportam sedimentos finos encontra aplicações em diversas áreas, entre outras, em projetos de portos e navegação próximos a estuários e na formação de bacias sedimentares através de correntes de turbidez. Situações estas que necessitam da compreensão do mecanismo de deposição de sedimentos. O fenômeno da floculação é um processo dinâmico que depende das taxas de agregação (junção) e desagregação (separação) dos flocos, que simula o escoamento turbulento transportando sedimentos em condições controladas.

Neste trabalho é implementado um método computacional unidimensional (1DV) de marcha no tempo, com o método dos elementos finitos para discretizar as equações de transporte e de floculação. Para a instabilidade numérica do modelo é usado o método multi-escala variacional baseado em resíduos (RB-VMS) que também introduz um modelo numérico de turbulência. Faz-se uso do método de Newton para resolver a não linearidade proveniente das equações.

Assim o modelo permite compreender melhor o processo de floculação, restringindo o cenário analisado com a imposição do escoamento, e resolvendo apenas as equações de transporte de sedimentos para duas grandezas em especial: a concentração (c) e o número de flocos (N).

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

COMPUTATIONAL ANALYSIS OF A PHENOMENOLOGICAL MODEL FOR FLOCCULATION IN TURBIDITY CURRENTS

Rodrigo Resende Alves

September/2013

Advisors: Alvaro Luiz Gayoso de Azeredo Coutinho
Fernando Alves Rochinha

Department: Civil Engineering

The computational modeling of flows carrying fine sediments finds applications in several areas, such as ports and navigation projects near estuaries and the formation of sedimentary basins by turbidity currents These situations require the understanding of the mechanism of sediment deposition. One of the important sediment deposition mechanisms is the phenomenon of flocculation. Flocculation is a dynamic process that depends on the rate of aggregation (junction) and breakdown (separation) of the flocs, which impact turbulent flow carrying fine sediments under controlled conditions. Turbulence is an important driver of flocculation.

In this work, it is implemented a one-dimensional computational method to solve the equations of transport and flocculation by the finite element method. Since these equations are predominantly advective, we use the residual-based variational multi-scale (RB-VMS), which also introduces a numerical model for turbulence. The resulting system of equations is time-dependent and nonlinear. Therefore, we use Newton's method to solve the nonlinear systems at each time step.

Thus, the present computational model allows a better understanding of flocculation process. However, results are restricted to particular flow scenarios. In these scenarios, we consider only the sediment transport equation for two unknowns: the sediment concentration and the number of flocs.

Sumário

Lista de Figuras **ix**

Lista de Símbolos **xii**

1 Introdução **1**

2 Modelo Matemático para Transporte de Sedimentos Coesivos **7**

2.1 Equação governante: Modelo 1DV 8

2.2 Relação Fractal e Velocidade de Sedimentação . . . 9

2.3 Equações de Transporte e de Floculação 11

3 Formulação Matemática e Implementação Computacional **14**

3.1 Método Variacional Multi-escala (RB-VMS) 14

3.2 Formulação de Elementos Finitos, discretização temporal e evolução no tempo 17

4 Resultados e Discussões **25**

4.1 Desempenho Computacional do modelo Proposto 28

4.2 Simulação do processo de floculação 30

5 Conclusões **48**

Referências Bibliográficas **50**

Lista de Figuras

1.1 A primeira figura é uma corrente de turbidez nas margens dos continentes e bacias intra-continentais. Já a segunda é um esquema de uma corrente de turbidez mostrando a velocidade generalizada e o perfil da massa específica com base no comprimento e na altura da corrente de turbidez, $h = \frac{\int_0^\infty u\, dz}{\overline{u}}$ onde $\overline{u} = \frac{\int_0^\infty u^2\, dz}{\int_0^\infty u\, dz}$ como mostrado por MEIBURG e KNELLER [1]. 3

1.2 Esboço da estrutura hierárquica do floco em que 1- indica as partículas primárias, 2- as partículas secundárias e 3- as partículas terciárias [2]. 5

2.1 Esquema do domínio de interesse. 8

4.1 Perfil espacial da velocidade vertical 27

4.2 Distribuição temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes discretizações temporais. 28

4.3 Evolução temporal do número total de flocos da coluna para diferentes discretizações temporais. 29

4.4 Detalhe da evolução temporal do número total de flocos da coluna para diferentes discretizações temporais. 29

4.5 Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes discretizações espaciais. 30

4.6 Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes intensidade de w'. 31

4.7 Concentração mássica ao longo da coluna para diferentes instantes e $|w'| = 0.09\ m/s$. 31

4.8 Concentração mássica ao longo da coluna para diferentes instantes e $|w'| = 0.18\ m/s$. 32

4.9 Concentração mássica ao longo da coluna para diferentes instantes e $|w'| = 0.37\ m/s$. 32
4.10 Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 10\ s$ para diferentes intensidade de w'. 33
4.11 Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 35\ s$ para diferentes intensidade de w'. 33
4.12 Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 60\ s$ para diferentes intensidade de w'. 33
4.13 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos para diferentes instantes e $|w'| = 0.09\ m/s$. 34
4.14 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos para diferentes instantes e $|w'| = 0.18\ m/s$. 34
4.15 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos para diferentes instantes e $|w'| = 0.37\ m/s$. 34
4.16 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 10\ s$ para diferentes intensidade de w'. 35
4.17 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 35\ s$ para diferentes intensidade de w'. 35
4.18 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 60\ s$ para diferentes intensidade de w'. 36
4.19 Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes valores do parâmetros de agregação. 36
4.20 Concentração mássica ao longo da coluna para $t = 25\ s$ para diferentes parâmetros de agregação. 37
4.21 Concentração mássica ao longo da coluna para $t = 50\ s$ para diferentes parâmetros de agregação. 37
4.22 Concentração mássica ao longo da coluna para $t = 60\ s$ para diferentes parâmetros de agregação. 38
4.23 Evolução temporal do número total de flocos na coluna para diferentes valores do parâmetro de agregação. 38
4.24 Distribuição espacial e geométrica do número de flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de agregação. 39
4.25 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de agregação. 39

4.26 Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos. 40
4.27 Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 25\ s$ para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos. 40
4.28 Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 50\ s$ para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos. 40
4.29 Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 60\ s$ para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos. 41
4.30 Evolução temporal do número total de flocos para diferentes valores do parâmetro de ruptura do flocos. 41
4.31 Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes parâmetros de dissipação. 42
4.32 Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 25\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação. 42
4.33 Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 60\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação. 42
4.34 Evolução temporal do número total de flocos na coluna para diferentes valores do parâmetro de dissipação. 43
4.35 Detalhe da evolução temporal do número total de flocos na coluna para diferentes valores do parâmetro de dissipação. 43
4.36 Distribuição espacial e geométrica do número de flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação. 44
4.37 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação. 44
4.38 Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão com e sem RB-VMS. 45
4.39 Concentração mássica ao longo da altura da coluna sem RB-VMS em diferentes instantes. 45
4.40 Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 60\ s$ com e sem RB-VMS. 46
4.41 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 35\ s$ com e sem RB-VMS. 46
4.42 Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 60\ s$ com e sem RB-VMS. 47

Lista de Símbolos

a	Velocidade de advecção (m/s)
c	Concentração mássica (kg/m^3)
C	Concentração volumétrica (m^3/m^3)
D	Diâmetro da partícula (m)
D_p	Diâmetro da partícula primária (m)
D_s	Coeficiente de difusão molecular (m^2/s)
dt	Passo de tempo (s)
F_N	Função de Floculação (s^{-1})
f_s	Fator de forma
g	Aceleração da gravidade (m/s^2)
G	Parâmetro de dissipação pela turbulência (s^{-1})
k	Constante de Boltzman (J/K)
K_A	Coeficiente de agregação do modelo de floculação (m^2/kg)
K_B	Coeficiente de quebra de flocos no modelo de floculação $(s^{1/2}/m^2)$
L	Comprimento do domínio (profundidade, altura da coluna) (m)
N	Distribuição espacial e geométrica do número de flocos (m^{-3})
nel	Número de elementos da discretização espacial
nf	Dimensão fractal

p	Expoente empírico do modelo floculação
q	Expoente empírico do modelo floculação
Re_p	Número de Reynolds de uma partícula
t	Tempo (s)
w'	Componente vertical de velocidade (m/s)
w_{st}	Velocidade de sedimentação dos flocos (m/s)
z	Coordenada vertical (m)
α	Parâmetro de forma
β	Parâmetro de forma
T	Temperatura absoluta da água (K)
μ	Viscosidade dinâmica $(Pa.s)$
ν	Viscosidade cinética (m^2/s)
ρ_s	Massa específica de sedimento (kg/m^3)
ρ_w	Massa específica da água (kg/m^3)

Capítulo 1

Introdução

Este trabalho tem como objetivo principal a construção e implementação de um modelo computacional que descreva o transporte e a concentração de sedimentos coesivos (finos), o qual pode ter aplicações em diversas áreas, como por exemplo, em escoamentos particulados em projetos de portos e navegação próximos a estuários [3] e também na formação de bacias sedimentares através de correntes de turbidez [1]. A compreensão dos mecanismos de deposição de sedimentos finos constitui um elemento de grande importância nessas aplicações.

O transporte e a concentração de sedimentos suspensos em estuários e áreas costeiras são afetados diretamente pela velocidade de sedimentação, que depende em grande parte dos efeitos de floculação [4]. A floculação e deposição de sedimentos coesivos são determinantes e responsáveis pela transparência da água (que incide na penetração de luz), pelas correntes de turbidez em estuários, pela demanda bioquímica de oxigênio e pelo transporte de metais pesados [5].

De uma forma geral, os escoamentos turbulentos impactam, significativamente, o transporte dos sedimentos e sua deposição, nesse cenário, ênfase especial deve ser dada a modelagem do fenômeno floculação. Fenômeno este que é um processo dinâmico que conduz a formação (ou desagregação) de flocos a partir de sedimentos coesivos.

Segundo WINTERWERP [4], a floculação é promovida por três mecanismos básicos:

- **Movimentos Brownianos:** partículas que experimentam movimentos microscópicos são levadas a colidir formando agregados (flocos);
- **Partículas com uma maior velocidade de sedimentação irão ultrapassar partículas com menor velocidade:** colisões entre estas partículas, em seu movimento de deposição, podem resultar em agregação (geralmente referida como deposição dificultada);
- **Escoamentos turbulentos:** as partículas podem colidir e formar novos flocos; por outro lado, a tensão de cisalhamento gerada pela turbulência pode causar rompimento dos flocos.

Ainda segundo WINTERWERP [4], dentre os três mecanismos do processo floculação, o primeiro e o segundo são geralmente insignificantes em estuários e ambientes costeiros. Portanto, neste trabalho direciona-se a atenção para o terceiro efeito do processo de floculação, que trata dos efeitos dos movimentos turbulentos na floculação de sedimentos finos. Em particular, a ênfase volta-se para o transporte de sedimentos por correntes de turbidez.

A turbulência é normalmente gerada pelo movimento de avanço da corrente ao longo do fundo do estuário ou oceanos sob a ação da gravidade e da diferença de massa específica entre a mistura do fluido com partículas e o fluido do ambiente. As correntes de turbidez são não conservativas, na medida em que as partículas podem deixar a corrente por deposição ou suspensão devido o arrasto [1].

Correntes de turbidez, no contexto de geofísica, são importantes tanto para o transporte de sedimentos em ambientes subaquáticos, como por exemplo: em lagos, estuários, águas profundas (oceanos) e de certa forma perto dos continentes. Geralmente esses sedimentos são constituídos de rochas ou fragmentos minerais desprendidos da superfície terrestre e transportados pelos rios para o litoral dos continentes, e nas águas profundas são agregados pelas correntes de turbidez. Correntes estas que somadas aos deslizamentos de terra submarinos, são os

principais meios pelos quais os sedimentos são transportados de águas mais rasas para águas mais profundas. Os mecanismos de transporte podem gerar depósitos que variam de algumas centenas de metros ou menos, à milhares de quilômetros no fundo do oceano segundo MEIBURG e KNELLER [1].

Correntes de turbidez são misturas compostas de água e sedimentos carregados pelo escoamento, que em grande parte ou totalmente são mantidos em suspensão devida à turbulência. Além do potencial de riscos ambientais que as correntes de turbidez podem acarretar, tais como, sedimentação de reservatório, dispersão de poluentes e deposição em águas portuárias, elas atraem interesse pelo fato dos sistemas turbidíticos serem responsáveis pela formação dos maiores reservatórios de hidrocarbonetos do mundo [6]. Na figura 1.1 pode-se observar o esquema de uma corrente de turbidez.

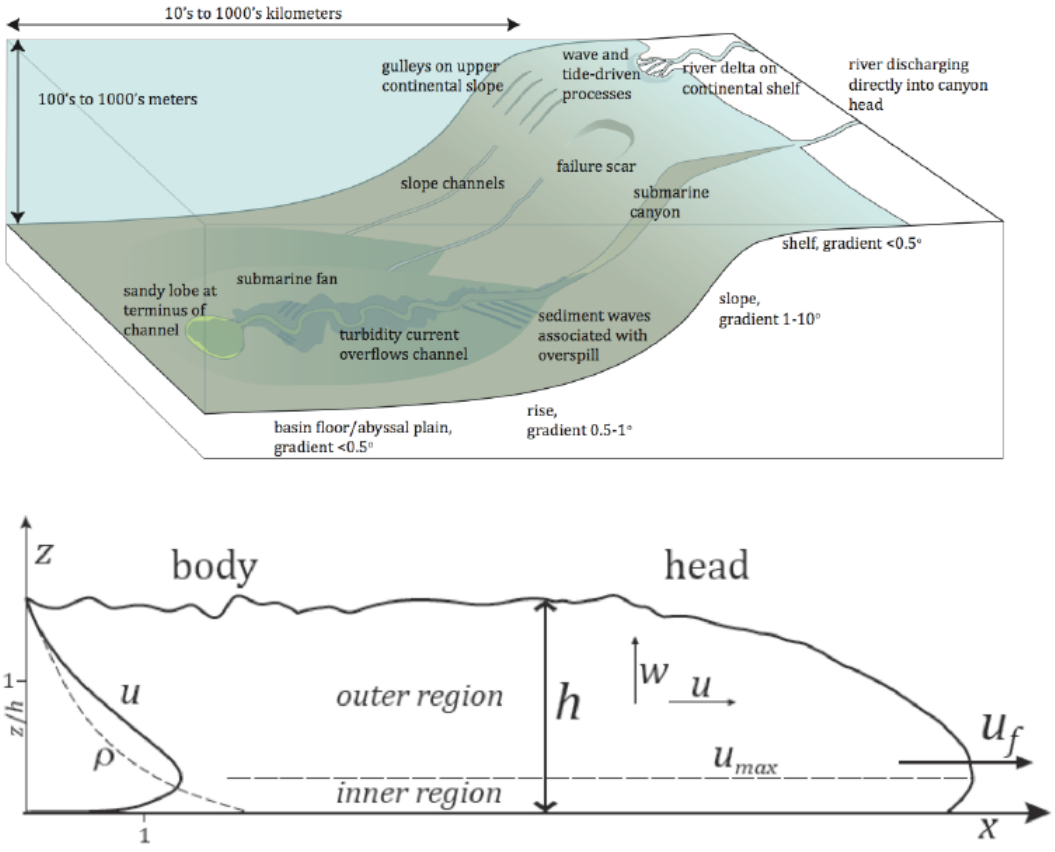

Figura 1.1: A primeira figura é uma corrente de turbidez nas margens dos continentes e bacias intra-continentais. Já a segunda é um esquema de uma corrente de turbidez mostrando a velocidade generalizada e o perfil da massa específica com base no comprimento e na altura da corrente de turbidez, $h = \frac{\int_0^\infty u\, dz}{\overline{u}}$ onde $\overline{u} = \frac{\int_0^\infty u^2\, dz}{\int_0^\infty u\, dz}$ como mostrado por MEIBURG e KNELLER [1].

A deposição de sedimentos no fundo do mar e em lagos profundos é em grande parte composta de turbiditos, que são como os depósitos de correntes de turbidez são conhecidos [7]. Durante períodos da ordem de 10^4 a 10^6 anos, estes depósitos conter um grande acumulo de sedimentos com volumes de até milhões de km^3 [1].

Os sedimentos finos são transportados por correntes de turbidez, a qual pode formar ou quebrar flocos (ou partículas) dando origem ao processo de floculação. Atualmente, há diversos estudos voltados para os efeitos do fenômeno floculação, onde a concentração e a distribuição do tamanho dos flocos suspensos são fatores importantes. Muitos problemas ambientais estão relacionados com o transporte de sedimentos finos, os quais geralmente são constituídos por um conjunto que contém argilas, com propriedades coesivas, cujos diâmetros são menores que 2 a 4 μm [5]. Segundo MEIBURG e KNELLER [1], as concentrações de partículas geralmente são baixas (entre 0,1 % - 7 % em volume), tornando pequeno o efeito das interações partícula-partícula na manutenção da suspensão.

Segundo WINTERWERP e VAN KESTEREN [2], KRONE [8] foi um dos primeiros a estudar as propriedades físicas dos flocos de sedimentos coesivos em função da sua estrutura, com a hipótese de que os flocos são construídos de uma forma hierárquica, resultando em uma estrutura ordenada de flocos. Isto está representado na figura 1.2, que mostra três ordens de agregação. As partículas primárias são formadas por coagulação, no fim, essa agregação pode conter centenas ou milhares de partículas de argila. As partículas secundárias e terciárias não serão abordadas neste trabalho.

Em WINTERWERP [9], foi apresentado um modelo de floculação promovido por turbulência em que foi incorporado a formação e separação dos flocos. O modelo considera que agregação (ou desagregação de flocos) estabelece uma relação geométrica fractal entre eles. Este modelo demonstra claramente a importância da inclusão do processo de floculação em modelos de transporte de sedimentos.

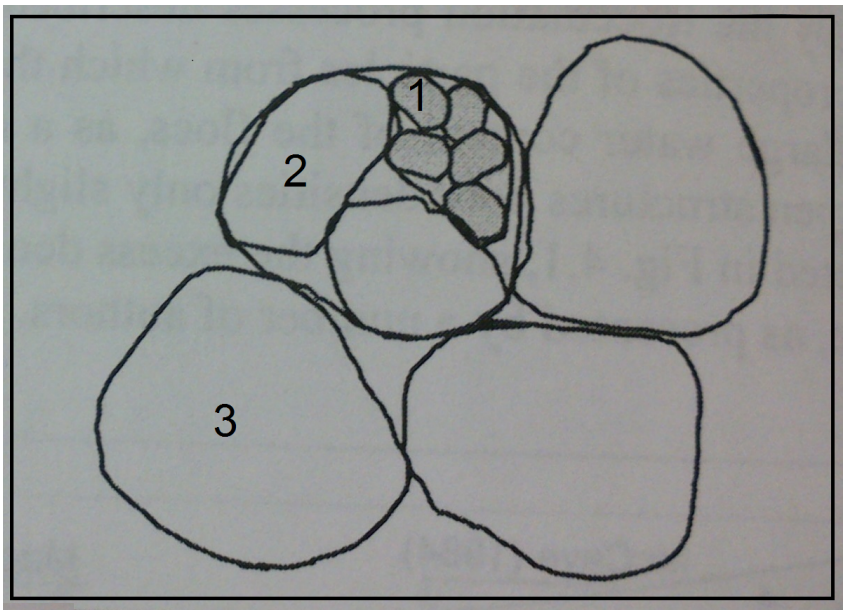

Figura 1.2: Esboço da estrutura hierárquica do floco em que 1- indica as partículas primárias, 2- as partículas secundárias e 3- as partículas terciárias [2].

O presente trabalho tem o objetivo de avançar no entendimento do processo de floculação em escoamentos turbulentos através da construção e implementação de um modelo computacional que associa o modelo físico proposto em [4] com um método estabilizado de elementos finitos [10]. O restante desta dissertação é organizada em capítulos como descrito em seguida.

No capítulo 2 são apresentadas as equações governantes do modelo de floculação, a equação de transporte e de floculação, bem como aspectos fenomenológicos que envolvem a formação de flocos e sua relação fractal. E também é apresentado o modelo unidimensional para uma coluna vertical de fluido, submetido a uma corrente de turbidez horizontal, isto é, um modelo 1DV [4].

No capítulo 3 são apresentadas as formulações matemáticas e as formulações do método dos elementos finitos. É implementado o Método Variacional Multi-escala baseado em Resíduos (RB-VMS - do inglês *Residual-based variational multiscale method*) [10] que, simultaneamente, é responsável por gerar uma formulação numérica estável e introduzir um modelo para turbulência. Para resolver o problema não-linear proveniente das equações de transporte e de floculação faz-se uso do método de Newton [11]. É implementado um código computacional para o modelo 1DV, que simula o escoamento turbulento transportando sedimentos em condições controladas.

No capítulo 4 são apresentados os resultados do modelo proposto e desenvolvido ao longo deste trabalho.

Finalmente, no capítulo 5 são apresentadas conclusões do estudo e propostas para trabalhos futuros.

Capítulo 2

Modelo Matemático para Transporte de Sedimentos Coesivos

Neste capítulo são apresentadas as equações governantes do transporte de sedimentos coesivos (equação de momento, equação de transporte e equação de floculação), assim como a relação fractal entre flocos de diferentes diâmetros, apenas abordando os aspectos essenciais e considerados por WINTERWERP [4].

O modelo matemático do processo de floculação a ser apresentado combina observações experimentais e de campo com princípios físicos básicos. Tais princípios essenciais representam o balanço de massa e a evolução da distribuição espacial e geométrica do número de flocos que resultam na equação de transporte e na equação de floculação, a serem apresentadas neste capítulo. Apresenta-se, também, a dinâmica do escoamento de fluidos em movimento.

2.1 Equação governante: Modelo 1DV

A equação governante do modelo [4] é apresentada a seguir, a qual é aplicada para o movimento do fluido:

$$\frac{\partial u}{\partial t} + \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial \top xz}{\partial z}\right) = 0 \tag{2.1}$$

onde u é a velocidade do fluido na direção horizontal, t é o tempo, p é a pressão hidrostática, x é a coordenada do eixo horizontal, z é a coordenada do eixo vertical, ρ é a massa específica do fluido e $\top xz$ é a componente da tensão cisalhante.

A partir da equação (2.1) tem-se as seguintes hipóteses básicas do modelo 1DV: o escoamento é no plano (xz): $u = (u,\ v,\ w')$; $\ v = 0$, w' é a componente vertical de velocidade, o desenvolvimento do escoamento é predominante na direção x. Na figura 2.1 segue o esquema explicitando o domínio de interesse $[0,\ L]$ do modelo 1DV, onde L é o tamanho da altura da coluna vertical e g é a aceleração da gravidade.

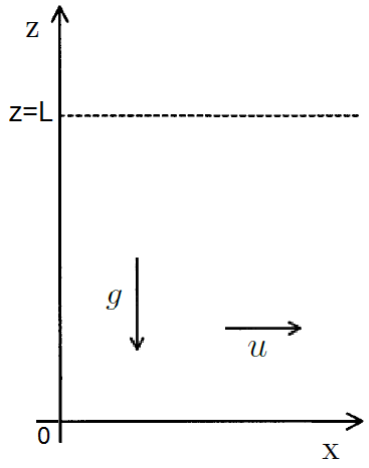

Figura 2.1: Esquema do domínio de interesse.

A equação do movimento (2.1) é sujeita as seguintes condições de contorno de Dirichlet:

$$u(z = L) = 0 \qquad \text{e} \qquad u(z = 0) = 0 \tag{2.2}$$

E a condição inicial:

$$u(z, 0) = u_0 \tag{2.3}$$

2.2 Relação Fractal e Velocidade de Sedimentação

Uma das hipóteses centrais abordadas na construção do modelo é que os flocos formados guardam uma relação fractal com os grãos primários. Partindo da equação proposta por WINTERWERP [4], esta hipótese é introduzida no modelo matemático pela equação abaixo:

$$\frac{c}{\rho_s}\left[\frac{D}{D_p}\right]^{3-nf} = f_s N D^3 \tag{2.4}$$

onde c é a concentração mássica do sedimento, ρ_s é massa específica do sedimento, D é o diâmetro da partícula, D_p é o diâmetro da partícula primária, nf é a dimensão fractal, f_s é um fator de forma e N é uma função que descreve a distribuição espacial e geométrica do número de flocos.

A mudança do diâmetro dos grãos transportados pelas correntes de turbidez a partir da formação (ou desagregação) de flocos impacta diretamente a velocidade de sedimentação, flocos estes que são modelados como esferas. Em WINTERWERP [4] a seguinte expressão é introduzida para contemplar esse efeito:

$$w_{st} = \frac{\alpha}{18\ \beta}\frac{(\rho_s - \rho_w)g}{\mu}D_p^{3-nf}\frac{D^{nf-1}}{1 + 0.015Re_p^{0.687}} \tag{2.5}$$

onde w_{st} é a velocidade de sedimentação dos flocos, μ é a viscosidade dinâmica, $Re_p = \frac{w_{st} \times D}{\nu}$ é o número de Reynolds da partícula, ν é a viscosidade cinemática e ρ_w é a massa específica da água.

Para tornar mais simples as deduções, adota-se a seguinte notação compacta:

$$w_{st} = \frac{L_1}{L_3}D^{nf-1}$$

onde:

$$L_1 = \frac{\alpha}{18\ \beta}\frac{(\rho_s - \rho_w)g}{\mu}D_p^{3-nf} \ \text{ e } \ L_3 = 1 + 0,015Re_p^{0,687}$$

Usando (2.4) e (2.5), com as devidas operações algébricas, tem-se:

$$\frac{c}{\rho_s}\left[\frac{D}{D_p}\right]^{(3-nf)} = f_s N D^3 \Rightarrow D^3 = \frac{c}{\rho_s f_s N}\left[\frac{D}{D_p}\right]^{(3-nf)} \Rightarrow \frac{D^3}{D^{(3-nf)}} = \frac{c}{\rho_s f_s {D_p}^{(3-nf)} N}$$

$$\Rightarrow D^{3-(3-nf)} = \frac{c}{\rho_s f_s {D_p}^{(3-nf)} N} \Rightarrow D = \left(\frac{c}{\rho_s f_s {D_p}^{(3-nf)} N}\right)^{(1/nf)}$$

$$\Rightarrow D^2 = \left(\frac{c}{\rho_s f_s {D_p}^{(3-nf)} N}\right)^{(2/nf)} \Rightarrow D^2 = \left(\frac{1}{\rho_s f_s {D_p}^{(3-nf)}}\right)^{(2/nf)}\left(\frac{c}{N}\right)^{(2/nf)}$$

sendo $L_2 = \left(\frac{1}{\rho_s f_s {D_p}^{(3-nf)}}\right)^{(2/nf)}$, então:

$$D^2 = L_2\left(\frac{c}{N}\right)^{(2/nf)} \Rightarrow D = \sqrt{L_2}\left(\frac{c}{N}\right)^{(1/nf).} \tag{2.6}$$

Portanto:

$$w_{st} = \frac{L_1}{L_3} L_2^{(nf-1)/2} \left(\frac{c}{N}\right)^{1-1/nf} \tag{2.7}$$

2.3 Equações de Transporte e de Floculação

O transporte de sedimentos é descrito por duas equações de advecção-difusão que são deduzidas através dos balanços de massa e da distribuição espacial e geométrica do número de flocos (floculação) introduzido em [4] e já adaptadas à versão unidimensional compatível com o modelo 1DV. Essas equações são apresentadas a seguir.

Diretamente do balanço de massa resulta a equação de transporte:

$$\frac{\partial c}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left((a\ c) - D_s \frac{\partial c}{\partial z}\right) = 0 \tag{2.8}$$

onde $a = w' - w_{st}$ e a é a velocidade advectiva.

Admite-se que não há transporte de sedimentos por difusão nas fronteiras do escoamento. O que resulta nas condições de contorno abaixo:

$$\frac{\partial c}{\partial z}(z = L) = 0, \qquad \frac{\partial c}{\partial z}(z = 0) = 0 \tag{2.9}$$

O termo de difusão molecular (D_s) é dado por:

$$D_s = \frac{k\mathrm{T}}{6\pi\mu D_p} \tag{2.10}$$

em que k é a constante de Boltzman ($k = 1,38 \times 10^{-23} J/K$), T é a temperatura absoluta da água.

O crescimento (ou diminuição) da distribuição espacial e geométrica do número de flocos decorrente da floculação é governado, dentro do modelo proposto em [4],

pela função de floculação F_N, que, por sua vez, se combina com os outros mecanismos físicos envolvidos no escoamento através da equação de balanço apresentada a seguir:

$$\frac{\partial N}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}\left((a\ N) - D_s \frac{\partial N}{\partial z}\right) = F_N \tag{2.11}$$

Consistentemente com a hipótese sobre o transporte de massa por difusão admitida anteriormente, adotam-se as seguintes condições de contorno:

$$\frac{\partial N}{\partial z}(z = L) = 0, \qquad \frac{\partial N}{\partial z}(z = 0) = 0 \tag{2.12}$$

A função de floculação, F_N, proposta por WINTERWERP [4], é dada por:

$$F_N = -K_A\ (1 - C)\ G\ D^3\ N^2 + K_B\ G^{q+1}\ (D - D_P)^p\ D^{2q}\ N \tag{2.13}$$

em que K_A é o coeficiente de agregação do modelo de floculação, K_B é o coeficiente de quebra de flocos do modelo de floculaçao, C é a concentração volumétrica, G é o parâmetro de dissipação pela turbulência, e $q\ e\ p$ são expoentes empíricos do modelo floculação.

Segundo WINTERWERP [4], a concentração volumétrica C, é uma relação da concentração mássica e a concentração de gelificação c_{gel}, ou seja, $C = \frac{c}{c_{gel}}$, e $c_{gel} = \rho_s \left[\frac{D_p}{D}\right]^{(3-nf)}$, logo a concentração volumétrica pode ser expressa por:

$$C = \frac{c}{\rho_s}\left[\frac{D}{D_p}\right]^{(3-nf)}$$

O parâmetro de dissipação turbulenta, G, é definido por:

$$G = \sqrt{\frac{\varepsilon}{\nu}} = \frac{\nu}{{\lambda_0}^2}$$

onde ε é a taxa de dissipação turbulenta por unidade de massa, λ_0 é a microescala de Kolmogorov da turbulência: $\lambda_0^2 = \left(\frac{\nu^3}{\varepsilon}\right)^{(1/4)}$, para valores de λ_0 em estuários no intervalo de $100 - 1000\ \mu m$, dependendo da profundidade e da velocidade do escoamento da água.

Capítulo 3

Formulação Matemática e Implementação Computacional

Neste capítulo, constrói-se uma formulação numérica para o modelo matemático de transporte de sedimentos coesivos apresentado anteriormente. Esta formulação baseia-se no Método Variacional Multi-Escala baseado em Resíduos (do inglês, *Residual-Based Variational Multi-Scale*, RB-VMS) apresentada em [10].

Uma grande questão dos modelos computacionais é a instabilidade numérica. Diante disso, o modelo aqui proposto utiliza a formulação RB-VMS que serve, simultaneamente, para garantir a estabilidade numérica e para introduzir um modelo numérico de turbulência como proposto em CODINA [12].

3.1 Método Variacional Multi-escala (RB-VMS)

Para projetar métodos computacionais robustos envolvendo escoamentos fortemente advectivos ou cuja formulação de elementos finitos utiliza aproximações de pressão e velocidade de mesma ordem, geralmente, faz-se uso de técnicas de estabilização [13]. Aqui emprega-se o RB-VMS [10] para estabilizar o modelo numérico de floculação.

O RB-VMS é construído a partir de uma decomposição dos espaços em que a solução é procurada. Esta decomposição divide esse espaço em dois subespaços: "escalas grossas"(do inglês *coarse scales*) e "escalas finas"(do inglês *fine scales*). O primeiro é determinado pela malha computacional, portanto de dimensão finita, já o segundo é seu complemento de dimensão infinita.

Tal decomposição é representada pela soma direta das componentes das variáveis.

$$\begin{aligned} u &= u^h + u' \\ c &= c^h + c' \\ N &= N^h + N' \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde u^h, c^h e N^h são componentes associadas ao espaço de elementos finitos. Por outro lado, u', c' e N' são componentes de "escalas finas" de dimensões infinitas não representadas na discretização dos elementos finitos. Por esta razão, são chamados de escalas não resolvidas ou sub-grid [10].

Assim, o método de elementos finitos juntamente com o RB-VMS, será aplicado nas seguintes equações governantes:

- Equação de movimento do fluido:

$$\frac{\partial}{\partial t}(u^h + u') + \frac{1}{\rho}\left(\frac{\partial p}{\partial x} - \frac{\partial \top xz}{\partial z}\right) = 0$$

- Equação de transporte de concentração:

$$\frac{\partial}{\partial t}(c^h + c') + \frac{\partial}{\partial z}(a\ (c^h + c')) - D_s\frac{\partial^2}{\partial z^2}(c^h + c') = 0$$

- Equação de Floculação:

$$\frac{\partial}{\partial t}(N^h + N') + \frac{\partial}{\partial z}(a\ (N^h + N')) - D_s\frac{\partial^2}{\partial z^2}(N^h + N') = F_N(D^h + D')$$

onde $D = D^h + D'$ é a decomposição do campo que expressa a distribuição do

diâmetro dos flocos induzida por (3.1).

Seguindo abordagens usuais para formulações RB-VMS, as componentes c' e N' (escalas finas) não são efetivamente calculados [10]. Tais componentes são aproximadas numericamente com o auxílio de projeções variacionais, de forma que c' e N' serão computados de forma proporcional aos resíduos das equações de transporte quando nestas as soluções exatas são substituídas pelas aproximações de elementos finitos c^h e N^h.

Desta forma para a equação de transporte, tem-se:

$$\begin{aligned} c' &= -\tau_k R^h_{kc} \\ R^h_{kc} &= \frac{\partial c^h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(a\ c^h) - D_s\ \frac{\partial^2 c^h}{\partial z^2} \\ \tau_k &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{2}{\Delta t}\right)^2 + \left(\frac{a}{h}\right)^2}} \end{aligned} \tag{3.2}$$

onde τ_k é o parâmetro de estabilização e R^h_{kc} é o resíduo da equação de transporte.

Já para a equação de floculação, tem-se:

$$\begin{aligned} N' &= -\tau_k R^h_{kN} \\ R^h_{kN} &= \frac{\partial N^h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z}(a\ N^h) - D_s\ \frac{\partial^2 N^h}{\partial z^2} - F_N \\ \tau_k &= \frac{1}{\sqrt{\left(\frac{2}{\Delta t}\right)^2 + \left(\frac{a}{h}\right)^2}} \end{aligned} \tag{3.3}$$

onde τ_k é o parâmetro de estabilização e R^h_{kN} é o resíduo da equação de floculação.

3.2 Formulação de Elementos Finitos, discretização temporal e evolução no tempo

A formulação matemática desenvolvida resulta em um problema de evolução acoplado (hidrodinâmica e transporte de sedimentos) não linear que será resolvido por dois blocos separadamente. O primeiro bloco corresponde ao problema hidrodinâmico. O segundo bloco corresponde ao transporte de sedimentos.

Neste item, somente a abordagem numérica para o bloco do transporte de sedimentos coesivos será apresentada. A formulação RB-VMS aplicada a escoamentos incompressíveis já é bem conhecida e testada [10]. Os escoamentos que a variação de massa específica do fluido é desprezível são denominados incompressíveis [14].

O bloco do transporte é formado por duas equações acopladas que contém termos não lineares, sua solução numérica segue o formato usual em métodos semi-discretos [15]. Inicialmente, para discretizar as equações de transporte e de floculação utiliza-se o método dos elementos finitos. Neste trabalho emprega-se elementos finitos lineares unidimensionais. Desta forma, os termos associados a difusão no resíduo R^h_{kc} da equação (3.2) e R^h_{kN} da equação (3.3), foi considerado nulo já que apenas elementos lineares são empregados. Em seguida, sobre as equações semi-discretas resultantes é aplicado um método de evolução no tempo. Aqui foi adotada a regra de trapézio [15], que, para problemas lineares, apresenta uma taxa de convergência de segunda ordem.

Em seguida, são apresentadas as formas fracas em que se baseia a formulação de elementos finitos das equações de transporte e de floculação.

$$\int_0^L \frac{\partial c}{\partial t}\,\varphi\,dz + \int_0^L \frac{\partial}{\partial z}(a\,c)\,\varphi\,dz - \int_0^L \frac{\partial}{\partial z}\left(D_s\,\frac{\partial c}{\partial z}\right)\,\varphi\,dz = 0 \quad \forall\,\varphi \tag{3.4}$$

$$\int_0^L \frac{\partial N}{\partial t}\ \psi\ dz + \int_0^L \frac{\partial}{\partial z}(aN)\ \psi\ dz - \int_0^L D_s \frac{\partial^2 N}{\partial z^2}\ \psi\ dz = \int_0^L F_N\ \psi\ dz \quad \forall\ \psi \quad (3.5)$$

Com o intuito de incorporar as condições de contorno ao problema, em seguida integração por partes é aplicada nas parcelas advectivas e difusivas em ambas as equações. Isto é,

$$\int_0^L \frac{\partial c}{\partial t}\ \varphi\ dz + a\ c\ \varphi\ |_0^L - \int_0^L a\ c\ \frac{\partial \varphi}{\partial z}\ dz - D_s \left(\varphi\ \frac{\partial c}{\partial z}\ |_0^L - \int_0^L \frac{\partial c}{\partial z}\frac{\partial \varphi}{\partial z}\ dz \right) = 0$$

$$\int_0^L \frac{\partial N}{\partial t}\ \psi\ dz + \ a\ N\ \psi\ |_0^L - \int_0^L a\ N\ \frac{\partial \psi}{\partial z}\ dz - D_s\ \left(\psi\ \frac{\partial N}{\partial z}\ |_0^L - \int_0^L \frac{\partial N}{\partial z}\frac{\partial \psi}{\partial z}\ dz \right)$$
$$= \int_0^L F_N\ \psi\ dz$$

onde $\left(a\ c\ \psi\ |_0^L\right)$ é proveniente da integração por partes da parcela de advecção, e indica a contribuição da condição de contorno no primeiro nó ($z = 0$) e no último nó ($z = L$) do bloco da equação de transporte. E $\left(a\ N\ \psi\ |_0^L\right)$, proveniente da parcela advectiva da equação de floculação, indica que a condição de contorno advectiva contribui no primeiro nó ($z = 0$) e no último nó ($z = L$) do bloco da equação de floculação.

As condições de contorno da parcela difusiva da equação de transporte (2.8) e da equação de floculação (2.11) não tem transporte por difusão para o meio externo.

Já na parcela advectiva, as condições de contorno são impostas de maneira que não haja perda de sedimentos para o meio externo, ou seja, a velocidade de advecção no topo em ($z = L$) é negativa e no fundo da coluna ($z = 0$) é positiva, desta maneira a massa de sedimentos do sistema mantém-se constante.

Substituindo nas equações acima as aproximações por elementos finitos c^h e N^h e aplicando-se também a regra do trapézio obtém-se:

$$\int_0^L c_{n+1}^h \, \varphi^h \, dz - \Delta t \int_0^L a \, c_{n+1/2}^h \, \frac{\partial \varphi^h}{\partial z} \, dz + \Delta t \int_0^L D_s \, \frac{\partial c_{n+1/2}^h}{\partial z} \frac{\partial \varphi^h}{\partial z} \, dz$$

$$= \int_0^L c_n^h \, \varphi^h \, dz \;\; \forall \, \varphi^h \tag{3.6}$$

$$\int_0^L N_{n+1}^h \, \psi^h \, dz - \Delta t \int_0^L a \, N_{n+1/2}^h \, \frac{\partial \psi^h}{\partial z} \, dz + \Delta t \int_0^L D_s \, \frac{\partial N_{n+1/2}^h}{\partial z} \frac{\partial \psi^h}{\partial z} \, dz$$

$$= \int_0^L N_n^h \, \psi^h \, dz + \Delta t \int_0^L \{ -K_A \left(1 - \frac{c_{n+1/2}^h}{\rho_s} \left[\frac{D_{n+1/2}}{D_p} \right]^{(3-nf)} \right) G \, D_{n+1/2} (N_{n+1/2}^h)^2$$

$$+ K_B \, G^{q+1} \, (D_{n+1/2} - D_p)^p \, D_{n+1/2}^{2q} \, N_{n+1/2}^h \} \, \psi^h \, dz \;\; \forall \, \psi^h \tag{3.7}$$

onde o super-índice h indica a contribuição do espaço dos elementos finitos. O diâmetro da partícula D_{n+1} é um termo não linear dependente de c^h *e* N^h, a concentração mássica $c_{n+1/2} = \frac{1}{2} c_{n+1} + \frac{1}{2} c_n$ e a distribuição espacial e geométrica do número de flocos $N_{n+1/2} = \frac{1}{2} N_{n+1} + \frac{1}{2} N_n$.

As equações (3.6) e (3.7) formam um sistema algébrico, acoplado e não linear a ser resolvido em cada passo de tempo. A não linearidade está presente na velocidade de sedimentação w_{st} e na função de floculação F_N, termos que também contemplam o acoplamento, uma vez que o diâmetro do floco D_n é uma função de c_n e N_n através da relação fractal introduzida em (2.6). Portanto, a linearização necessária para aplicação do método de Newton resume-se a esses termos, umas vez que os demais já são lineares e representados pelas matrizes de massa (**M**), advecção (**C**) (excluindo o termo da velocidade de deposição) e difusão (**K**), já tradicionais na literatura de elementos finitos [15].

Assim, só serão detalhados os termos originados no processo de linearização. No caso da equação de transporte a contribuição da parcela do transporte advectivo

envolvendo a linearização com respeito à c será detalhada abaixo, onde é descrita a derivada direcional, ou seja,

$$\frac{\partial\, C}{\partial c_{n+1}} = -\Delta t \int_0^L \frac{\partial}{\partial c_{n+1}} \left[\frac{1}{2}(w' - w_{st})_{n+1} c_{n+1} + \frac{1}{2}(w' - w_{st})_n\, c_n\right] \frac{\partial \varphi}{\partial z}\, [\delta c]\, dz \quad (3.8)$$

onde $[\delta c]$ representa o incremento da concentração mássica a ser calculado em uma iteração do Método de Newton. De 3.8, tem-se:

$$\frac{\partial\, C}{\partial c_{n+1}}[\delta c] = -\Delta t \int_0^L \frac{1}{2} \left(\frac{\partial}{\partial c}(-w_{st})_{n+1}\, [\delta c]\, c_{n+1} + (w' - w_{st})_{n+1}\right) \frac{\partial \varphi}{\partial z}\, dz \quad (3.9)$$

Portanto, o único termo nessa parcela que necessita detalhamento é a derivada direcional $\frac{\partial}{\partial c}\, w_{st}\, [\delta c]$, o que é feito em seguida.

$$\frac{\partial w_{st}}{\partial c}\, [\delta c] = \frac{L_1}{L_3}\, (nf - 1)\, D^{nf-2}\, \frac{\partial D}{\partial c}\, [\delta c]$$

sendo que a derivada direcional do diâmetro do floco em relação a concentração mássica é obtida a partir da relação fractal (2.6) e dada por:

$$\frac{\partial D}{\partial c}\, [\delta c] = \sqrt{L_2}\, \frac{1}{nf}\, \left(\frac{c}{N}\right)^{1/nf-1}\, \left(\frac{1}{N}\right)$$

Cumpre salientar que nas expressões anteriores os índices h e $n + 1$ foram suprimidos com o intuito de auxiliar apresentação das expressões. As derivadas acima são atualizadas em cada iteração de Newton e calculadas em todos os pontos de integração numérica.

Ainda na equação de transporte, a mesma parcela advectiva deve ser linearizada com respeito à N^h_{n+1}, o que é denotado a seguir é apenas para a derivada direcional,

isto é,

$$\frac{\partial w_{st}}{\partial N}\,[\delta N] = \frac{L_1}{L_3}\,(nf-1)\,D^{nf-2}\,\frac{\partial D}{\partial N}\,[\delta N]$$

onde δN é o incremento em N_{n+1}^h em cada iteração de Newton é:

$$\frac{\partial D}{\partial N}\,[\delta N] = -\sqrt{L_2}\,\frac{1}{nf}\,\left(\frac{c}{N}\right)^{1/nf-1}\,\left(\frac{c}{N^2}\right)$$

O processo de linearização da equação de floculação envolve duas parcelas: transporte advectivo e função de floculação. A linearização da primeira leva a termos análogos aos já desenvolvidos, e, portanto, suas deduções não serão repetidas aqui. Para facilitar o acompanhamento da dedução dos termos associados à segunda, a função de floculação (2.13) é decomposta em duas parcelas $F_N = F_{N1} + F_{N2}$. A primeira delas governa a criação de novos flocos e dada, já na forma integral e discretizada por:

$$F_{N1} = -K_A\,G\Delta t\int_0^L \{\frac{1}{2}\left(1-\frac{c_{n+1}}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right)D_{n+1}^3 N_{n+1}^2$$

$$+\frac{1}{2}\,\left(1-\frac{c_n}{\rho_s}\left[\frac{D_n}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right)D_n^3 N_n^2\}\,\psi\,dz \tag{3.10}$$

cuja linearização em relação à c_{n+1} é dada por:

$$\frac{\partial F_{N1}}{\partial c_{n+1}}[\delta c] = \frac{\partial}{\partial c_{n+1}}\{-K_A\,G\Delta t\int_0^L [\frac{1}{2}\left(1-\frac{c_{n+1}}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right)D_{n+1}^3 N_{n+1}^2$$

$$+\frac{1}{2}\left(1-\frac{c_n}{\rho_s}\left[\frac{D_n}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right)\,D_n^3\,N_n^2]\,\psi\,[\delta c]\,dz\} \tag{3.11}$$

Logo:

$$\frac{\partial F_{N1}}{\partial c_{n+1}}[\delta c] = -K_A\, G\Delta t \int_0^L \frac{1}{2}\{\left(-\frac{1}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)} - \frac{c_{n+1}}{\rho_s}(3-nf)\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(2-nf)}\frac{\partial D_{n+1}[\delta c]}{\partial c}\frac{1}{D_p}\right)$$

$$D_{n+1}^3 N_{n+1}^2 + \left(1 - \frac{c_{n+1}}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right)\, 3D_{n+1}^2 \frac{\partial D_{n+1}[\delta c]}{\partial c} N_{n+1}^2\}\, \psi\, dz \qquad (3.12)$$

onde $\frac{\partial D}{c}[\delta c]$ já foi obtida anteriormente.

Já a linearização da parcela de transporte advectivo em relação à N_{n+1}^h é obtida através das expressões:

$$\frac{\partial F_{N1}}{\partial N_{n+1}}\,[\delta N] = \frac{\partial}{\partial N_{n+1}} - K_A\, G\Delta t \int_0^L [\frac{1}{2}\left(1 - \frac{c_{n+1}}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right) D_{n+1}^3 N_{n+1}^2$$

$$+ \frac{1}{2}\left(1 - \frac{c_n}{\rho_s}\left[\frac{D_n}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right)\, D_n^3\, N_n^2]\, \psi\, [\delta N]\, dz \qquad (3.13)$$

Logo:

$$\frac{\partial F_{N1}}{\partial N_{n+1}}\,[\delta N] = -K_A\, G\Delta t\, \frac{1}{2}\int_0^L \{\left(-\frac{c_{n+1}}{\rho_s}(3-nf)\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(2-nf)}\frac{1}{D_p}\frac{\partial D_{n+1}[\delta N]}{\partial N}\right) D_{n+1}^3 N_{n+1}^2$$

$$+ \left(1 - \frac{c_{n+1}}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right) 3D_{n+1}^2 \frac{\partial D_{n+1}[\delta N]}{\partial N} N_{n+1}^2$$

$$+ \left(1 - \frac{c_{n+1}}{\rho_s}\left[\frac{D_{n+1}}{D_p}\right]^{(3-nf)}\right) D_{n+1}^3 2N_{n+1}\}\, \psi\, dz \qquad (3.14)$$

onde $\frac{\partial D}{N}[\delta N]$ já foi obtida anteriormente.

Agora a segunda parcela da função de floculação que governa a quebra dos flocos e dada, já na forma integral e discretizada por:

$$F_{N2} = K_B\ G^{q+1}\ \Delta t \int_0^L [\frac{1}{2}\ (D_{n+1} - D_P)^p\ D_{n+1}^{2q}\ N_{n+1}$$
$$+ \frac{1}{2}\ (D_n - D_P)^p\ D_n^{2q}\ \ N_n]\ \psi\ dz \tag{3.15}$$

cuja linearização em relação à c_{n+1} é dada por:

$$\frac{\partial F_{N2}}{\partial c_{n+1}}[\delta c] = \frac{\partial}{\partial c_{n+1}} K_B\ G^{q+1} \Delta t \int_0^L [\frac{1}{2}\ (D_{n+1} - D_P)^p\ D_{n+1}^{2q}\ N_{n+1}$$
$$+ \frac{1}{2}\ (D_n - D_P)^p\ D_n^{2q}\ N_n]\ \psi\ [\delta c]\ dz \tag{3.16}$$

Logo:

$$\frac{\partial F_{N2}}{\partial c_{n+1}}[\delta c] = K_B\ G^{q+1} \Delta t \frac{1}{2} \int_0^L \{p(D_{n+1} - D_P)^{p-1}\ \frac{\partial D_{n+1}[\delta c]}{\partial c}\ D_{n+1}^{2q}\ N_{n+1}$$
$$+ (D_{n+1} - D_P)^p\ 2q\ D_{n+1}^{2q-1}\ \frac{\partial D_{n+1}[\delta c]}{\partial c}\ N_{n+1}\}\ \psi\ dz \tag{3.17}$$

onde $\frac{\partial D}{c}[\delta c]$ já foi obtida anteriormente.

Já a linearização da parcela de transporte advectivo em relação à N_{n+1}^h é obtida através das expressões:

$$\frac{\partial F_{N2}}{\partial N_{n+1}}\ [\delta N] = \frac{\partial}{\partial N_{n+1}} \{K_B\ G^{q+1} \Delta t \int_0^L [\frac{1}{2}\ (D_{n+1} - D_P)^p\ D_{n+1}^{2q}\ N_{n+1}$$
$$+ \frac{1}{2}\ (D_n - D_P)^p\ D_n^{2q}\ N_n]\ \psi\ dz\}\ [\delta N]$$

Logo:

$$\frac{\partial F_{N2}}{\partial N_{n+1}} = K_B\ G^{q+1} \Delta t \int_0^L \frac{1}{2}\ \{p(D_{n+1} - D_P)^{p-1} \frac{\partial D_{n+1}\ [\delta N]}{\partial N_{n+1}} D_{n+1}^{2q} N_{n+1}$$
$$+ (D_{n+1} - D_P)^p \left(2q\ D_{n+1}^{2q-1}\ \frac{\partial D_{n+1}\ [\delta N]}{\partial N_{n+1}} N_{n+1} + D_{n+1}^{2q}\right)\}\ \psi\ dz$$

A formulação do método dos elementos finitos desenvolvida acima, é expressa de maneira simplificada no algoritmo por blocos para o avanço do tempo abaixo, onde este é desenvolvido de modo a resolver através de um algoritmo numérico em estágios que trata, dentro de cada passo de tempo, dois blocos separadamente, o primeiro bloco corresponde ao problema hidrodinâmico em que a concentração é mantida fixa e igual à computada no instante anterior, e o segundo bloco corresponde ao transporte de sedimentos. Esse procedimento segue análogo para todos os passos de tempo, o campo de velocidade, é mantido fixo e igual ao computado no passo anterior. Neste segundo bloco, o método de Newton é empregado para resolver o problema não linear proveniente das equações de transporte.

Algoritimo 1DV

Dados: $u^h(z,1) = u_0,\ c^h(z,1) = c_0$ *e* $N^h(z,1) = N_0$
Então:

Laço de marcha no tempo
Faça $n = 1, ..., n \times \Delta t$
Resolva a equação de Hidrodinâmica
Obtenha $u^h(z, n+1)$
sendo $c^h(z, n+1) = c^h(z, n)$
$N^h(z, n+1) = N^h(z, n)$

Laço de Newton
Enquanto $\epsilon > tol$, faça:
Resolva o Problema Linear
Encontre δ_c^k e δ_N^k
Atualize $c^h(z, n+1) = c^h(z, n+1) + \delta_c^k$
$N^h(z, n+1) = N^h(z, n+1) + \delta_N^k$

Teste a convergência
Fim
Fim

Capítulo 4

Resultados e Discussões

Neste capítulo testa-se o modelo computacional proposto anteriormente. Serão apresentados ao longo deste capítulo testes para verificar a confiabilidade e desempenho. A seguir são listados os parâmetros do modelo computacional que foram mantidos fixos em todos experimentos numéricos:

- $nf = 2.2$ é a dimensão do fractal,
- $Dp = 4 \times 10^{-6}\ m$ é o diâmetro da partícula primária,
- $T = 283\ K$ é a temperatura absoluta da água,
- $\rho_s = 2650\ kg/m^3$ é a massa específica de sedimento,
- $\rho_w = 1020\ kg/m^3$ é massa específica da água,
- $\nu = 1.31 \times 10^{-6}\ m^2/s$ é a viscosidade cinemática da água,
- $\mu = \nu \times \rho_w = 0.0013\ Pas$ é a viscosidade dinâmica da água,
- $D_s = \frac{cte \times T}{6 \times \pi \times \mu \times D} = 3.8764 \times 10^{-15}\ m^2/s$ é o coeficiente de difusão molecular,
- $fs = \frac{\pi}{6} = 0.5236$ é o fator de forma,
- $g = 9.81\ m^2/s$ é a aceleração da gravidade,
- $L = 1\ m$ é o comprimento de domínio (profundidade, altura da coluna),

- $p = 1$ expoente empírico do modelo floculação,
- $q = 0.5$ expoente empírico do modelo floculação,
- $\alpha = 1$ parâmetro de forma da velocidade de sedimentação dos flocos,
- $\beta = 1$ parâmetro de forma da velocidade de sedimentação dos flocos.

Logo depois dos testes de desempenho, apresentam-se várias simulações que permitem compreender melhor o papel dos parâmetros do modelo no processo de floculação.

Para tornar a análise do modelo de floculação mais efetiva, restringiu-se o cenário analisado para o caso em que o acoplamento entre o escoamento e o transporte de sedimentos acontece em uma única via. Apenas o escoamento influencia a suspensão e a criação (destruição) dos flocos de sedimento, onde o escoamento é imposto, portanto, somente as equações de transporte e de floculação são resolvidas. Este escoamento foi projetado de forma a tentar reproduzir as condições de uma coluna (domínio espacial definido no intervalo $[0,\ L]m$) de agitação. Para tanto, é imposto um campo de velocidade w', ou seja, apenas a componente vertical associada às escalas finas é diferente de zero, produzindo uma agitação de alta frequência que busca intensificar o efeito da turbulência na floculação. Neste ponto, torna-se importante salientar que, dado o cenário restrito analisado, não é possível investigar estratificação do escoamento ou qualquer outro efeito do transporte de sedimentos finos no escoamento turbulento [1]. O perfil espacial e a intensidade do campo imposto w' foram variados de forma a observar o comportamento da floculação em diferentes escoamentos.

Junto com as condições de contorno aplicadas nas equações de transporte e de floculação, também é imposto o perfil w' impedindo que haja perda de sedimentos para o meio externo, fato este que será explorado na fase de avaliação da formulação numérica proposta. O perfil espacial imposto do campo w' pode ser visto na figura 4.1, analisando w' na vertical ($eixo\ z$), tem-se que para diferentes instantes, w' mantém a mesma característica, no fundo da coluna ($z = 0$) o valor de w' é zero, assim como no topo ($z = L$) da coluna de sedimento. Este fato é essencial para garantir a conservação de massa de sedimentos ao longo dos experimentos numéricos.

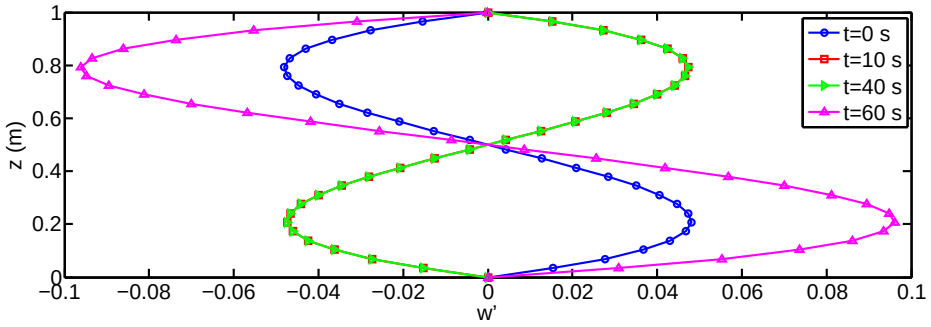

Figura 4.1: Perfil espacial da velocidade vertical

O perfil de velocidade de w' é expresso por:

$$w'(z,t) \;=\; A\, F(z)\, cos(\omega\, t) \tag{4.1}$$

onde A define a amplitude de w' e $\omega = \frac{2\pi}{0.75}$.

Duas quantidade globais serão utilizadas nas análises apresentadas a seguir: a massa de sedimentos em suspensão ($\widetilde{M}_{tot}$) e o número total de flocos ($\widetilde{N}_{tot}$). Estes são dados por:

$$\widetilde{M}_{tot} = \int_0^L c(z,t)\, dz.$$

$$\widetilde{N}_{tot} = \int_0^L N(z,t)\, dz.$$

Para facilitar a compreensão dos gráficos a seguir, os resultados obtidos foram normalizados, ou seja, o valor em cada instante de tempo é dividido pelo valor no instante inicial. Então nos gráficos usa-se apenas as nomenclaturas M_{tot} e N_{tot}.

4.1 Desempenho Computacional do modelo Proposto

Para validar o modelo computacional, em princípio variou-se o parâmetro de discretização temporal dt.

Na figura 4.2 mostra-se a massa de sedimentos em suspensão para duas discretizações temporais distintas ($dt = 10^{-2}\ s$ e $dt = 10^{-3}\ s$), adotando os parâmetros pertencentes à floculação com valores $G = 2.04\ s^{-1}$, $K_A = 0.31$, $K_B = 14.0 \times 10^3$, malha espacial com 25 elementos e tempo total de simulação de 200 s. Nota-se nesta figura que há uma perda de massa considerável para $dt = 10^{-2}$.

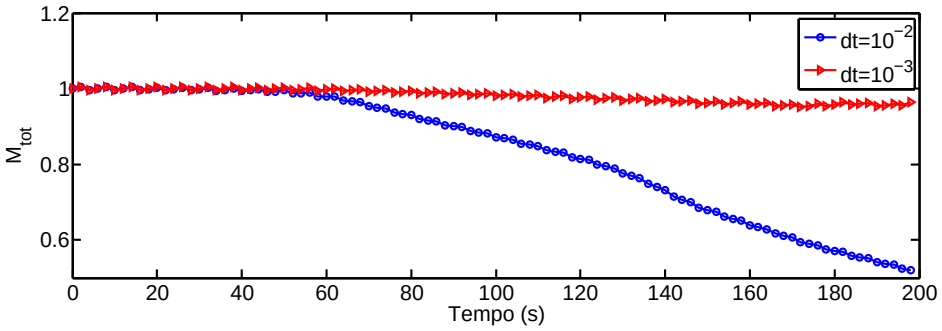

Figura 4.2: Distribuição temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes discretizações temporais.

A figura 4.3 apresenta o número total de flocos em $t = 200\ s$ com duas diferentes discretizações temporais ($dt = 10^{-2}\ s$ e $dt = 10^{-3}\ s$). Observando mais próximo, isto é, no intervalo $[60,\ 200]$, conforme mostra a figura 4.4, pode-se verificar que quando $dt = 10^{-2}\ s$ o número de flocos total da coluna diminui e logo começa a crescer novamente, diferente de quando $dt = 10^{-3}\ s$, onde o número de flocos total se mantém constante a partir de $t = 90\ s$.

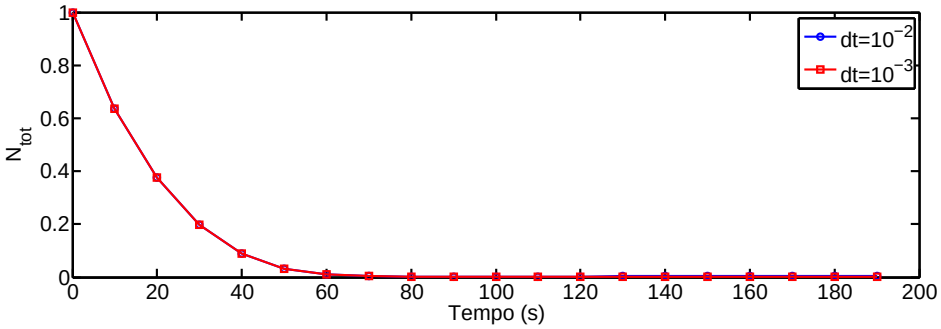

Figura 4.3: Evolução temporal do número total de flocos da coluna para diferentes discretizações temporais.

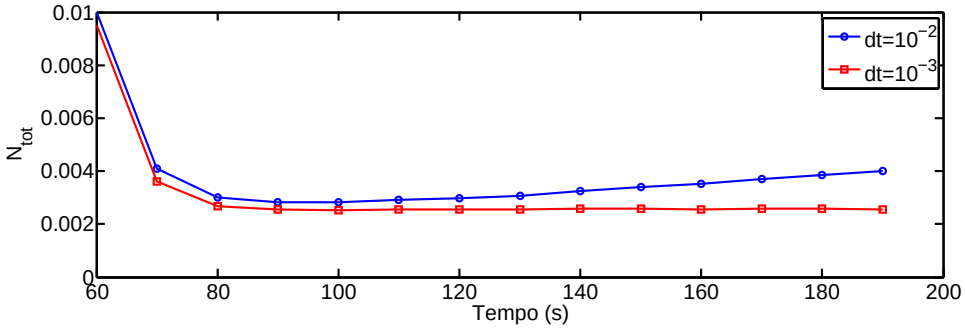

Figura 4.4: Detalhe da evolução temporal do número total de flocos da coluna para diferentes discretizações temporais.

Uma quantidade empregada para validar o modelo é a conservação da massa de sedimentos em suspensão, imposto pelas escolhas de w', figura 4.1, e das condições de contorno das equações de transporte e de floculação. Escolhendo-se $dt = 10^{-2}\ s$ na figura 4.2, observa-se que a massa de sedimentos em suspensão diminui significativamente, então fixa-se $dt = 10^{-3}\ s$ para as próximas simulações, já que nosso escoamento é incompressível.

Em seguida estuda-se a influencia da discretização, ou seja, refina-se a malha de elementos finitos. Para tanto fixaram-se os seguintes valores para os parâmetros: $dt = 10^{-3}\ s$, $G = 2.04\ s^{-1}$, $K_A = 0.31$, $K_B = 14.0 \times 10^3$, $t = 120\ s$ e discretização espacial contando com 25, 29, 35 e 55 elementos. Os resultados obtidos encontram-se na figura 4.5, onde pode-se verificar a massa de sedimentos em suspensão para diferentes discretizações espaciais.

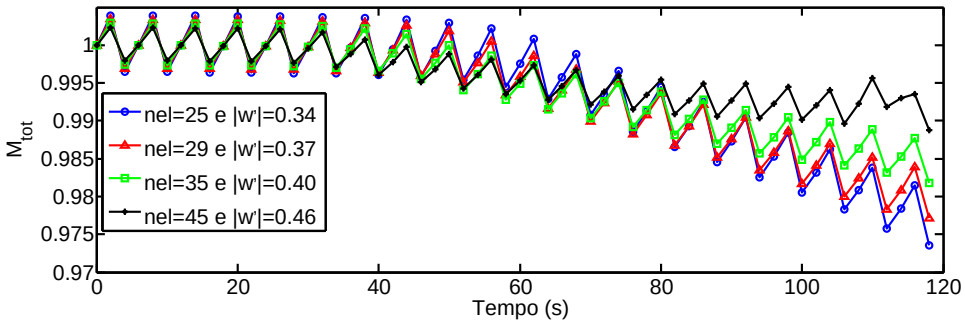

Figura 4.5: Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes discretizações espaciais.

É possível observar na figura 4.5 que a massa de sedimentos em suspensão para a malha mais refinada tem menor perda, no entanto, para todas as malhas o resultado é satisfatório, visto que a perda de sedimentos em suspensão é pequena.

Então de acordo com as observações dos resultados apresentados nas figuras 4.2 à 4.5, adota-se para as simulações que serão apresentadas a seguir uma discretização temporal $dt = 10^{-3}\ s$ e para a discretização espacial serão empregados 29 elementos.

4.2 Simulação do processo de floculação

Os exemplos anteriores que visavam testar a formulação proposta, utilizaram o tempo total de simulação de até 200 s. Já para as próximas simulações limita-se o tempo total em 60 s, tempo este considerado suficiente para apreciação da fenomenologia investigada e com os seguintes parâmetros fixos: $dt = 10^{-3}\ s$, $G = 2.04\ s^{-1}$, $K_A = 0.31$, $K_B = 14.0 \times 10^3$. E para a discretização espacial serão empregados 29 elementos.

Na figura 4.6 analisa-se como a massa de sedimentos em suspensão se comporta para diferentes intensidades de w'. Para ter uma referência, usou-se a norma de $|w'|$ calculada no instante final da simulação em $t = 60\ s$ ou no instante analisado, assim o intuito desse exemplo é investigar a influência do nível de turbulência, associado à intensidade do escoamento.

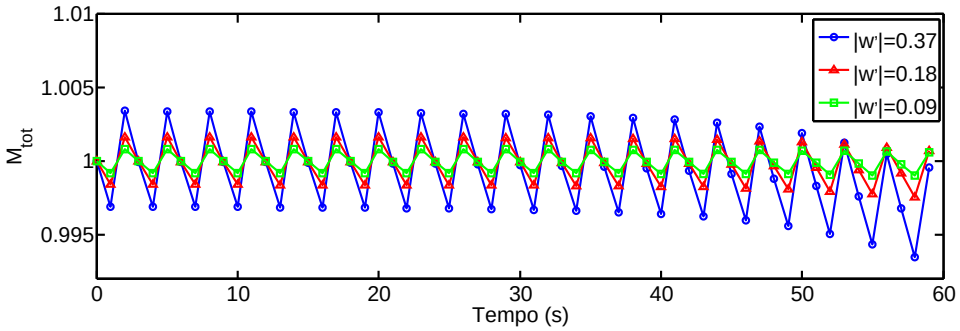

Figura 4.6: Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes intensidade de w'.

Na figura 4.6 é possível verificar que a diferença de intensidade de w' tem pouca influencia na massa de sedimentos em suspensão.

Agora nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9, apresenta-se como a concentração mássica se comporta em diferentes instantes ao longo da simulação, ou seja, os gráficos abaixo são para os instantes de $t = 0,\ 10,\ 25,\ 35,\ 50$ e $60\ s$.

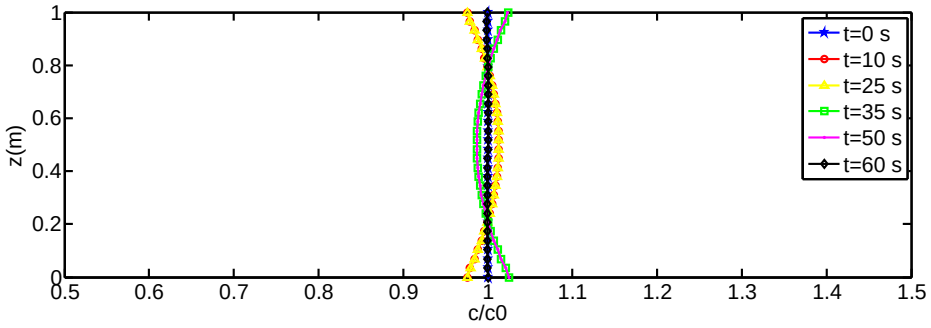

Figura 4.7: Concentração mássica ao longo da coluna para diferentes instantes e $|w'| = 0.09\ m/s$.

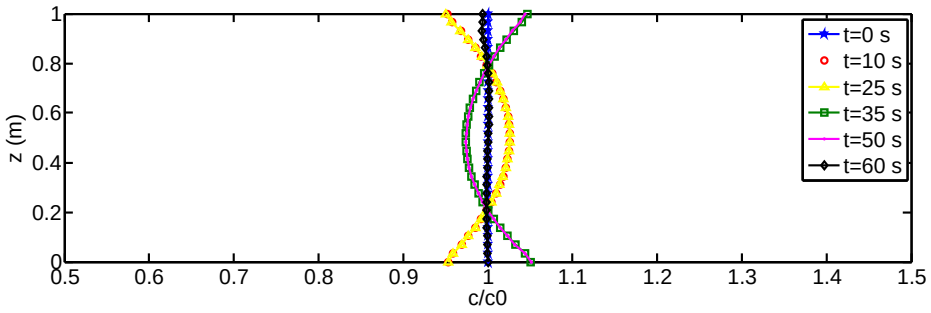

Figura 4.8: Concentração mássica ao longo da coluna para diferentes instantes e $|w'| = 0.18\ m/s$.

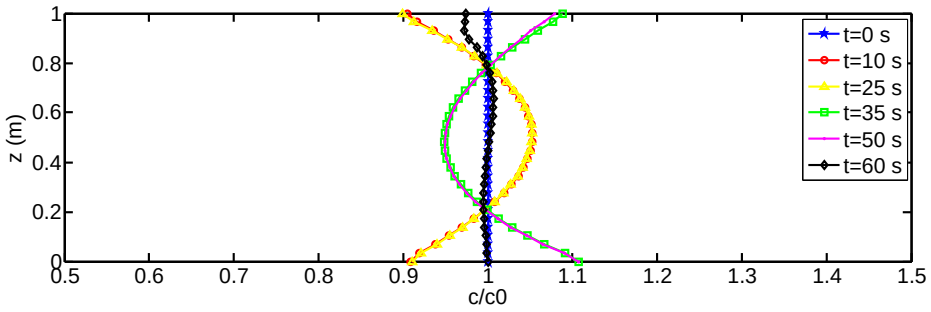

Figura 4.9: Concentração mássica ao longo da coluna para diferentes instantes e $|w'| = 0.37\ m/s$.

Pode-se observar nas figuras 4.7, 4.8 e 4.9, a evolução da concentração másssica ao longo da simulação para diferentes valores de w'. Especificamente para o caso $t = 60\ s$, a oscilação aumenta a medida que o valor de w' aumenta. Com o intuito de verificar a influência da componente vertical de velocidade w', na concentração mássica, para cada uma das figuras 4.10, 4.11 e 4.12 é comparada a concentração mássica nos instante $t = 10,\ 35$ e $60\ s$ com diferentes valores de w'.

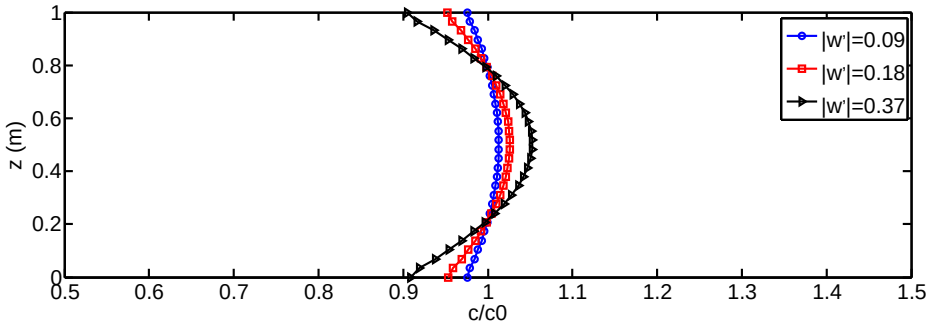

Figura 4.10: Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 10\ s$ para diferentes intensidade de w'.

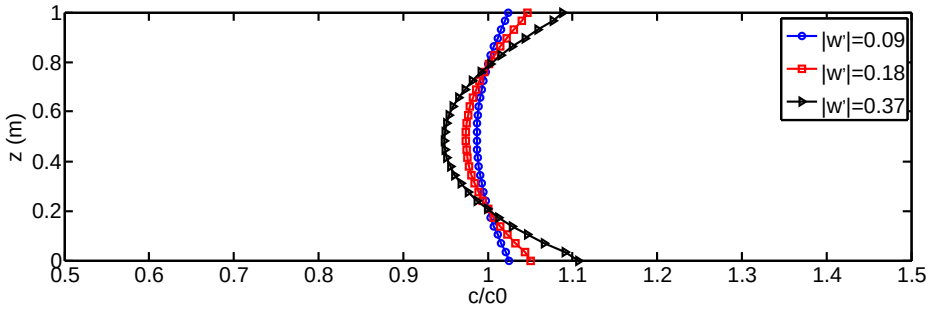

Figura 4.11: Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 35\ s$ para diferentes intensidade de w'.

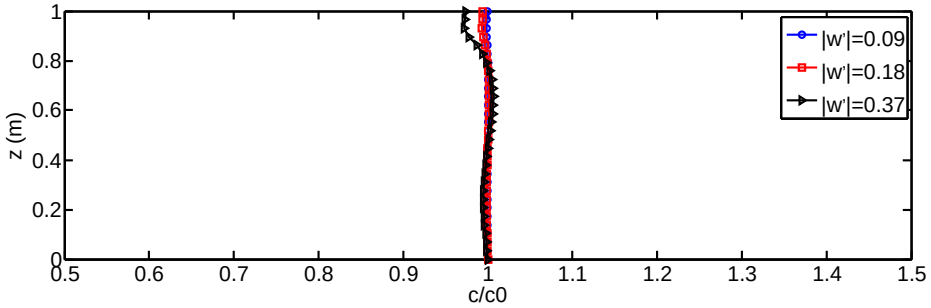

Figura 4.12: Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 60\ s$ para diferentes intensidade de w'.

Nas figuras 4.10, 4.11 e 4.12 observa-se que a concentração mássica tem oscilação com maior intensidade para valores maiores de w'.

Nas figuras 4.13, 4.14 e 4.15 apresenta-se como a distribuição espacial do diâmetro dos flocos se comporta para diferentes instantes, ou seja, as figuras abaixo

apresentam os instantes de tempo para $t = 0,\ 10,\ 25,\ 35,\ 50$ e $60\ s$ com mesma intensidade de w'.

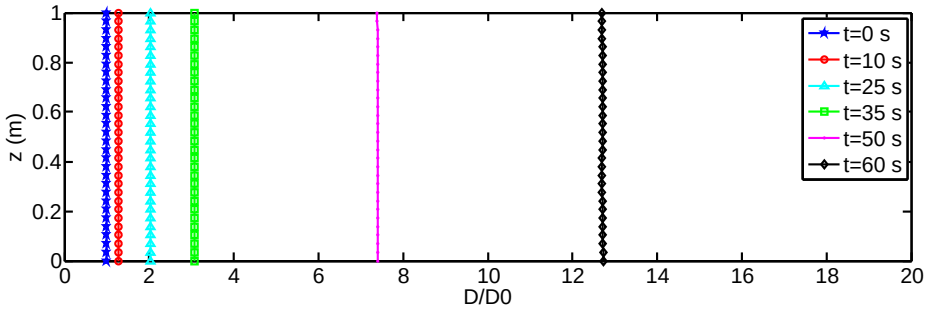

Figura 4.13: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos para diferentes instantes e $|w'| = 0.09\ m/s$.

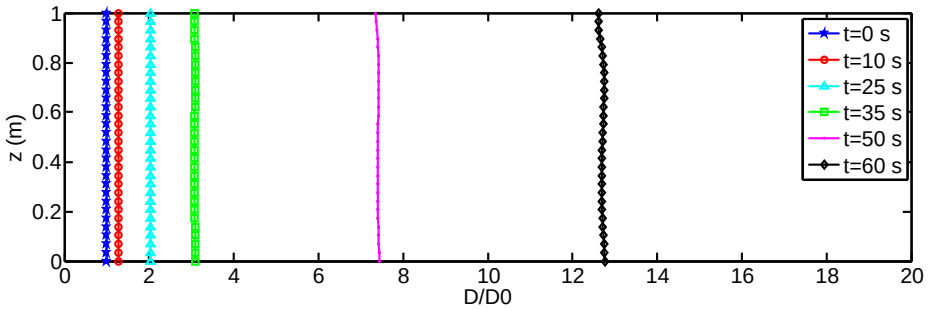

Figura 4.14: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos para diferentes instantes e $|w'| = 0.18\ m/s$.

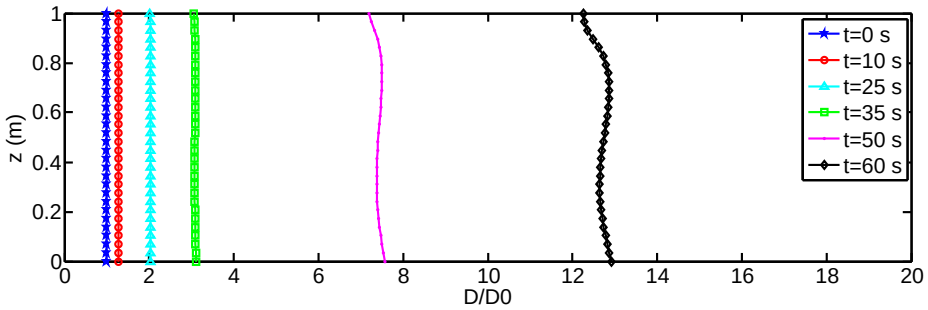

Figura 4.15: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos para diferentes instantes e $|w'| = 0.37\ m/s$.

Pode-se observar que para maiores valores de w' a distribuição espacial do diâmetro dos flocos tende a oscilar com maior intensidade, como pode ser observado na figura 4.15. Também observa-se que o diâmetro dos flocos aumenta

na medida que o método evolui no tempo, ou seja, sabendo que os valores são normalizados $D/D0$, é visível nas figuras que para $t = 0\ s$ o diâmetro dos flocos é 1, já para $t = 60\ s$ o diâmetro dos flocos são 12 vezes maiores do que no instante inicial. Sendo assim, verifica-se que o diâmetro dos flocos cresce proporcionalmente com a evolução do tempo para os três valores da intensidade de w' testados.

Para uma melhor verificação, nas figuras 4.16, 4.17 e 4.18 observa-se como o comportamento de w' influência o diâmetro dos flocos. Para tanto plota-se na mesma figura a distribuição espacial do diâmetro dos flocos, com diferentes velocidades w' no mesmo instante de tempo, sendo estes $t = 10,\ 35$ e $60\ s$.

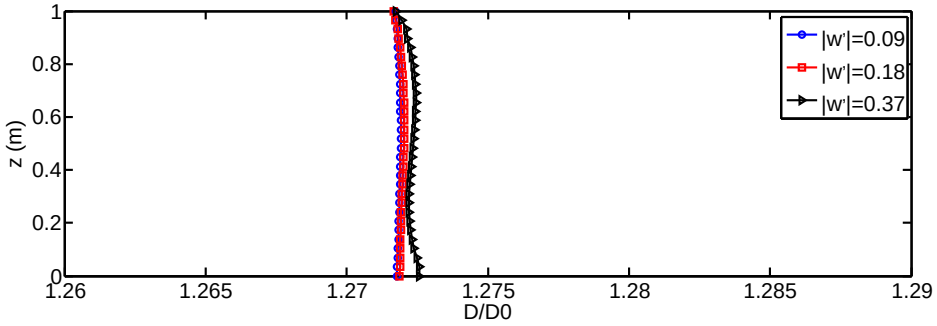

Figura 4.16: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 10\ s$ para diferentes intensidade de w'.

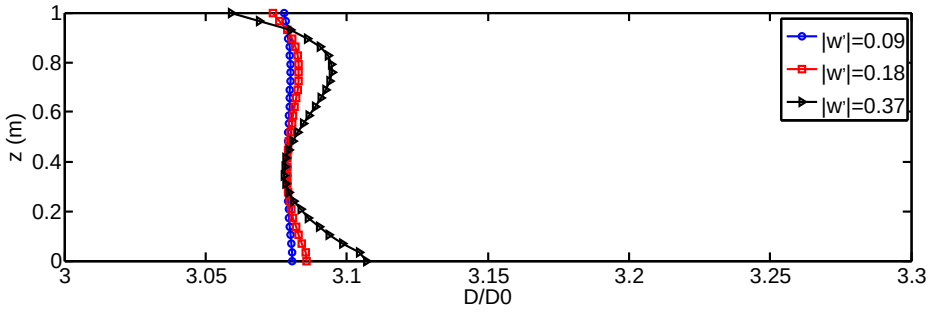

Figura 4.17: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 35\ s$ para diferentes intensidade de w'.

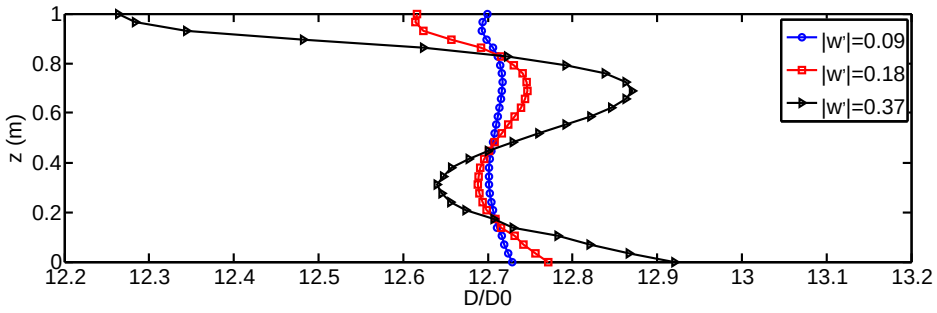

Figura 4.18: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 60\ s$ para diferentes intensidade de w'.

Em virtude das observações dos exemplos acima, pode-se dizer que a concentração mássica e a distribuição espacial do diâmetro dos flocos sofrem influência do valor de w'. Isto é melhor compreendido através do exame das figuras 4.7 à 4.18. Depois das comparações da concentração mássica e a distribuição espacial do diâmetro dos flocos com diferentes intensidades w' em diferentes instantes de tempo, pode-se concluir que a componente vertical de velocidade w' influencia na oscilação dessas grandezas em especial para nos exemplos em que a intensidade de w' é maior.

Com o intuito de explorar a simulação computacional, modifica-se o parâmetro de agregação, K_A, do modelo de floculação. Os resultados obtidos encontram-se na figura 4.19, onde mostra-se a evolução da massa de sedimentos em suspensão, que é o parâmetro de validação do modelo, mantendo fixos os seguintes parâmetros: $dt = 10^{-3}\ s, G = 2.04\ s^{-1},\ K_B = 14\ \times\ 10^3$ e com $|w'| = 0.18\ m/s$.

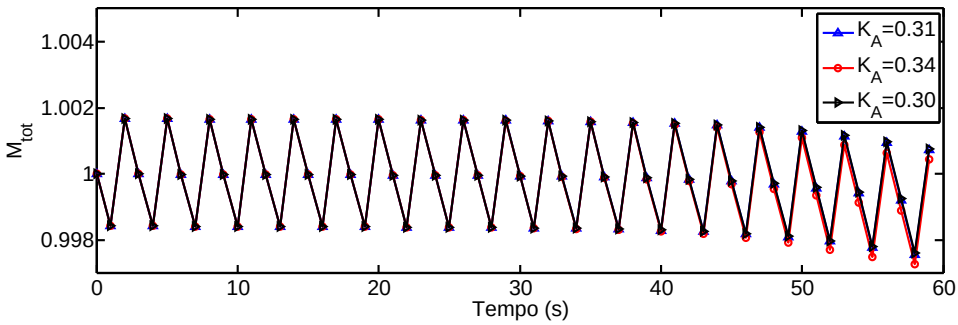

Figura 4.19: Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes valores do parâmetros de agregação.

Na figura 4.19 pode-se verificar que a massa de sedimentos em suspensão para diferentes parâmetros de agregação oscilou menos de 0.2 % em todo os experimentos numéricos, ou seja, mesmo modificando-se o parâmetro de agregação a oscilação foi pequena. Sendo assim, como o modelo foi implementado de forma a não ter perda de massa, pode-se concluir que o experimento numérico reproduz está condição para diferentes valores do parâmetro de agregação.

Nas figuras 4.20, 4.21 e 4.22 mostra-se a variação da concentração mássica ao longo da coluna para diferentes parâmetros de agregação, nos tempos $t = 25,\ 50\ s$ e $60\ s$.

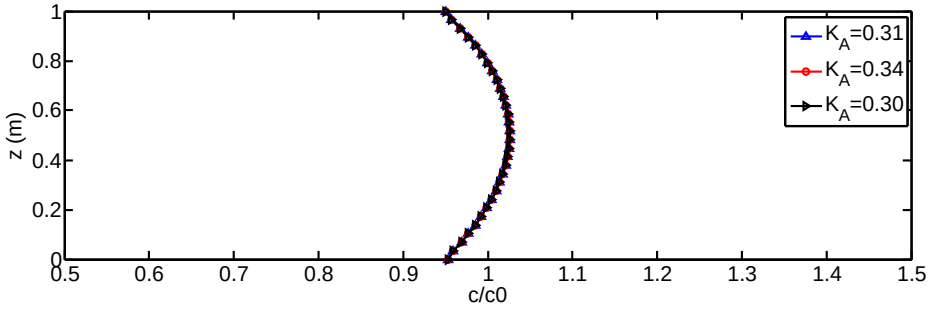

Figura 4.20: Concentração mássica ao longo da coluna para $t = 25\ s$ para diferentes parâmetros de agregação.

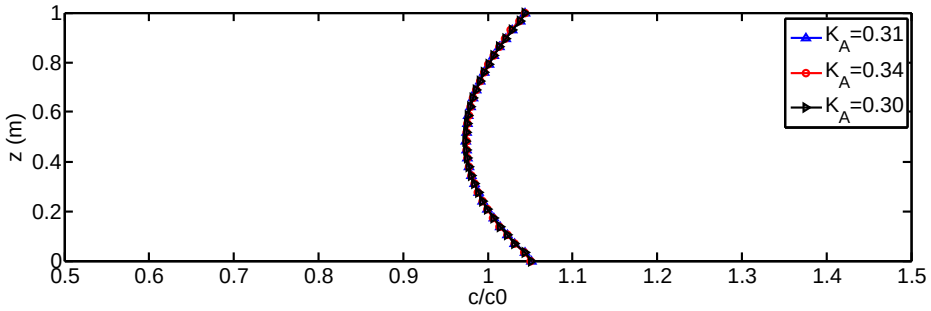

Figura 4.21: Concentração mássica ao longo da coluna para $t = 50\ s$ para diferentes parâmetros de agregação.

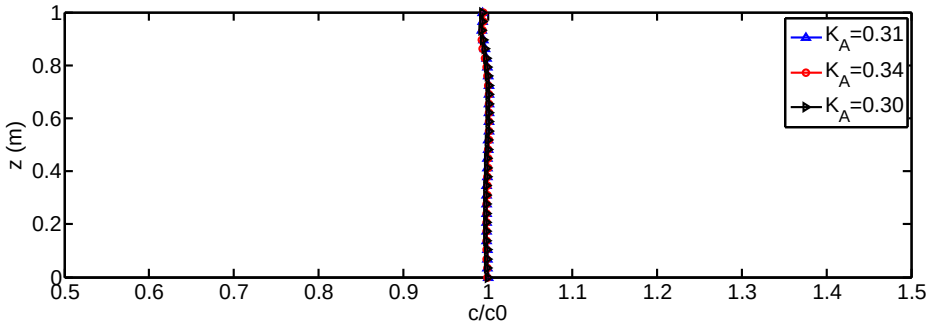

Figura 4.22: Concentração mássica ao longo da coluna para $t = 60\ s$ para diferentes parâmetros de agregação.

A concentração mássica não é afetada para diferentes parâmetros de agregação, como pode ser observado nas figuras acima.

Agora na figura 4.23 analisa-se o número de flocos total na coluna para diferentes parâmetros de agregação K_A.

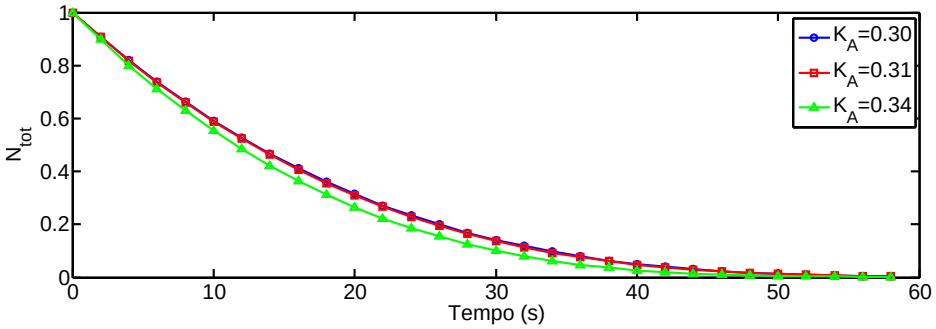

Figura 4.23: Evolução temporal do número total de flocos na coluna para diferentes valores do parâmetro de agregação.

Na figura 4.23 observa-se que o número total de flocos diminuiu para valores crescentes de K_A, ou seja, os flocos se juntaram e o número total de flocos na coluna diminui. Para exemplificar melhor esse fato analisa-se a influencia desse parâmetro na distribuição espacial e geométrica do número de flocos (figura 4.24) e no distribuição espacial do diâmetro dos flocos (figura 4.25), no tempo de $t = 20\ s$. Escolhemos este passo de tempo pois verifica-se na figura 4.23 que o número total de flocos nesse instante varia consideravelmente.

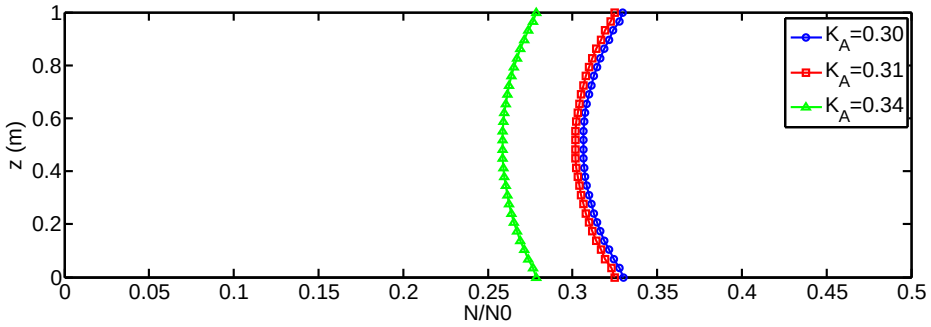

Figura 4.24: Distribuição espacial e geométrica do número de flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de agregação.

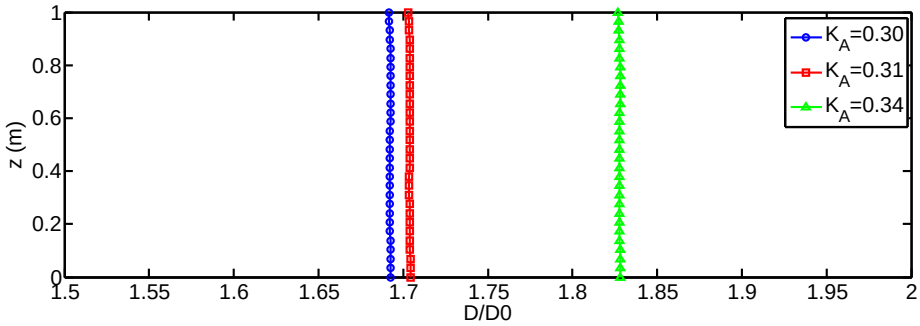

Figura 4.25: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de agregação.

É possível observar nas figuras 4.24 e 4.25 que no instante $t = 20\ s$ para um valor do parâmetro de agregação maior a distribuição espacial e geométrica do número de flocos é menor e a distribuição espacial do diâmetro dos flocos é maior. Assim pode-se comprovar que o modelo computacional está se comportando de forma consistente.

Avalia-se agora o papel do parâmetro de quebra de flocos, K_B, do modelo de floculação. Mantem-se fixos os seguintes parâmetros $dt = 10^{-3}\ s$, $G = 2.04\ s^{-1}$, $K_A = 0.31$, com discretização espacial de 29 elementos e com a intensidade de $|w'| = 0.18\ m/s$. Na figura 4.26 pode-se observar a evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes parâmetros de quebra de flocos.

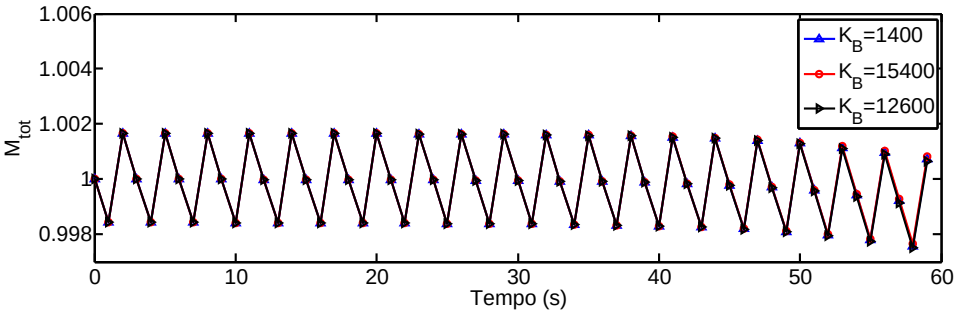

Figura 4.26: Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos.

É possível observar na figura 4.26, que a massa de sedimentos em suspensão pouco se modifica para diferentes parâmetros de ruptura de flocos. Nas próximas figuras, 4.27, 4.28 e 4.29, pode-se observar a concentração mássica ao longo da altura da coluna nos tempos $t = 25,\ 50$ e $60\ s$.

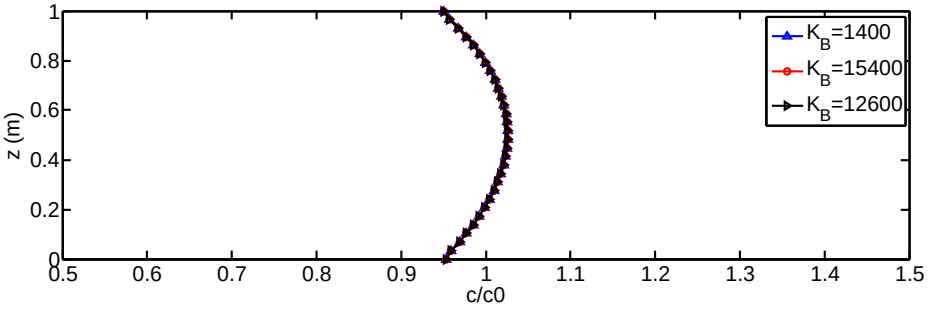

Figura 4.27: Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 25\ s$ para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos.

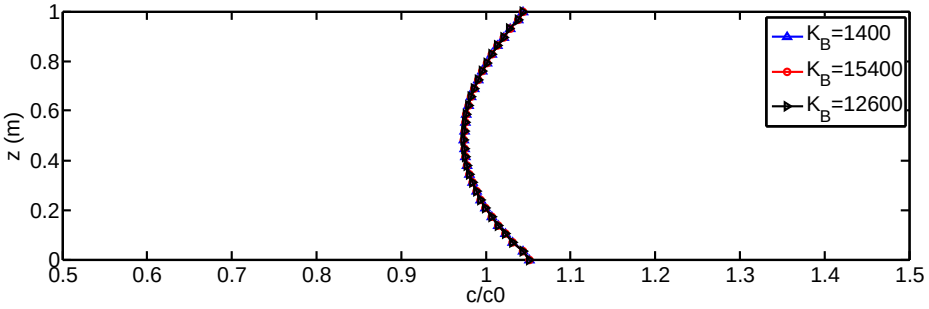

Figura 4.28: Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 50\ s$ para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos.

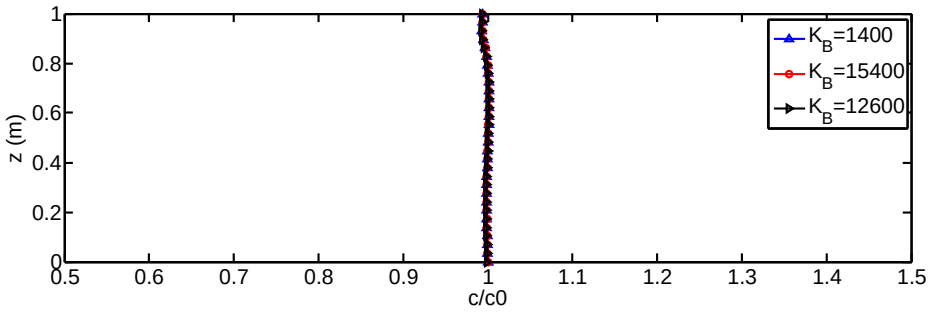

Figura 4.29: Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 60\ s$ para diferentes valores do parâmetro de quebra dos flocos.

Com o parâmetro de quebra de flocos, K_B, usado não foi possível verificar a influencia na concentração mássica, como foi verificado nas figuras acima.

Na figura 4.30 estuda-se o comportamento do número de flocos por unidade de comprimento para alguns valores do parâmetro de quebra de flocos.

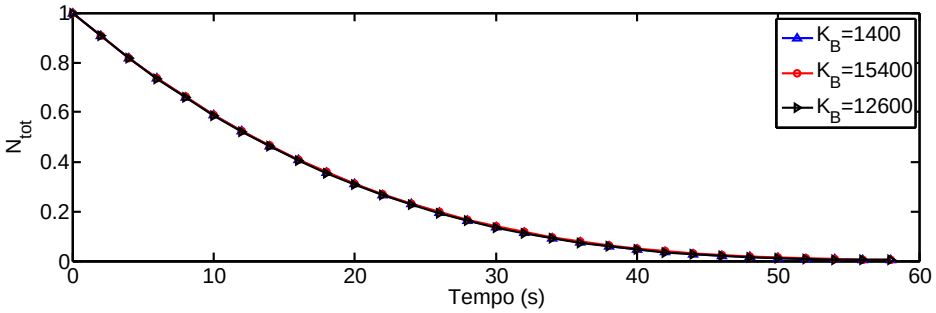

Figura 4.30: Evolução temporal do número total de flocos para diferentes valores do parâmetro de ruptura do flocos.

Pode-se observar que, para diferentes valores de K_B a concentração mássica, figuras 4.27 à 4.29, e o número total de flocos, figura 4.30, pouco se modificaram com o parâmetro de ruptura usado neste exemplo.

Avaliou-se em seguida o papel do parâmetro de dissipação, G, do modelo floculação. Os resultados estão na figura 4.31, mantendo fixos os seguintes valores para os parâmetros $dt = 10^{-3}\ s$, $K_A = 0.31$, $K_B = 14 \times 10^3$ e $|w'| = 0.37\ m/s$. Nesta figura pode-se verificar a massa de sedimentos em suspensão para diferentes parâmetros de dissipação.

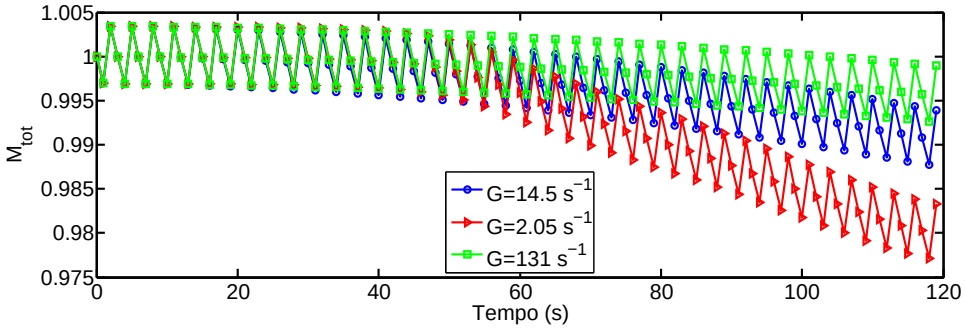

Figura 4.31: Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão para diferentes parâmetros de dissipação.

Como pode ser observado na figura 4.31, notou-se que para $G = 131\ s^{-1}$ ocorreu uma perda menor de massa de sedimentos, mas para todos os valores de G esta perda é considerada aceitável. Nas figuras 4.32 e 4.33, pode-se verificar a concentração mássica ao longo da altura da coluna para os tempos $t = 25$ e $60\ s$.

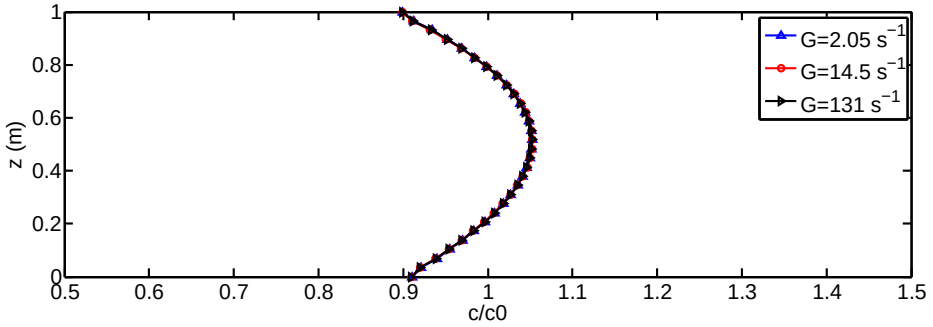

Figura 4.32: Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 25\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação.

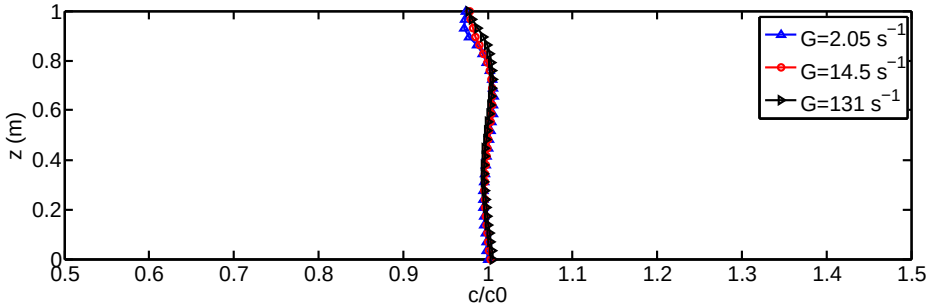

Figura 4.33: Concentração mássica ao longo da coluna em $t = 60\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação.

Como pode-se observar nas figuras 4.32 e 4.33 o parâmetro de dissipação, G,

pouco influenciou na concentração mássica.

Apresenta-se agora na figura 4.34 a evolução temporal do número de flocos total para valores diferentes do parâmetro de dissipação. Para uma melhor apreciação desta variação, na figura 4.35 mostra-se esta evolução para um intervalo menor, isto é, restringe-se o número total de flocos ao intervalo $[0,\ 0,25]$.

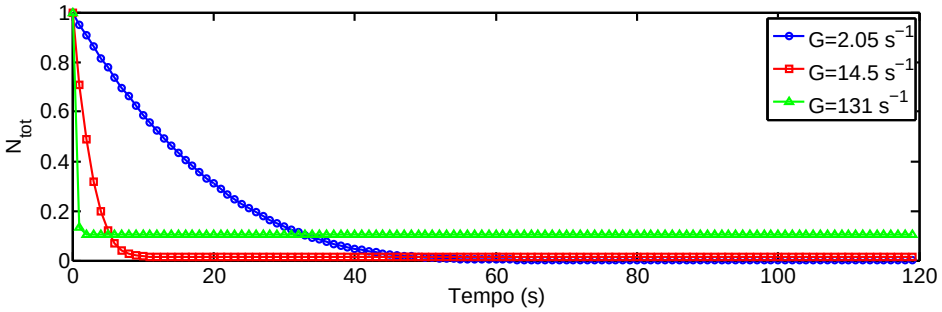

Figura 4.34: Evolução temporal do número total de flocos na coluna para diferentes valores do parâmetro de dissipação.

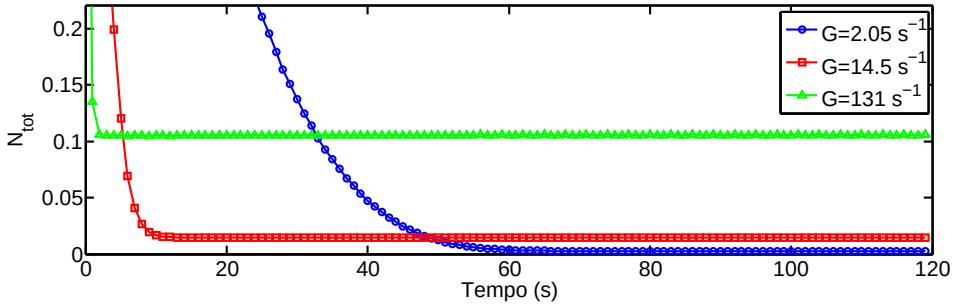

Figura 4.35: Detalhe da evolução temporal do número total de flocos na coluna para diferentes valores do parâmetro de dissipação.

Na figura 4.34, pode-se observar que o parâmetro de dissipação, G, influencia diretamente o número total de flocos. O número total de flocos estabiliza-se mais rapidamente para maiores valores do parâmetro de dissipação. Para melhor compreensão desta influencia, mostra-se a seguir, nas figuras 4.36 e 4.37, a variação ao longo da coluna da distribuição espacial e geométrica do número de flocos e da distribuição espacial do diâmetro dos flocos no instante $t = 20\ s$ para diferentes parâmetro de dissipação.

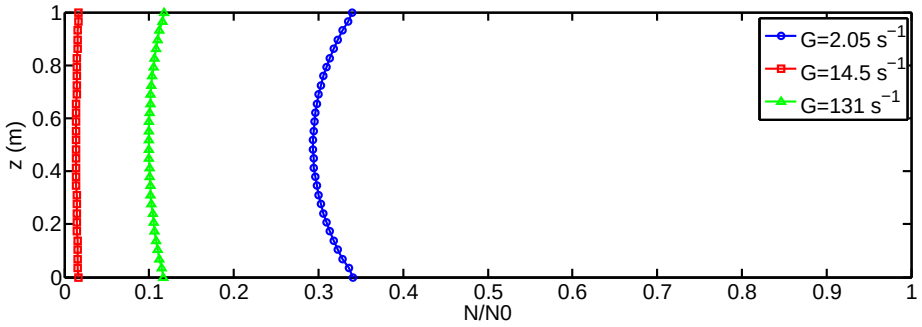

Figura 4.36: Distribuição espacial e geométrica do número de flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação.

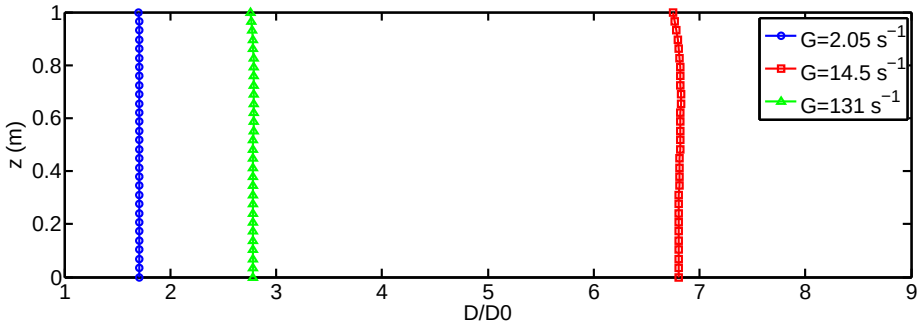

Figura 4.37: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 20\ s$ para diferentes valores do parâmetro de dissipação.

Note que na figura 4.36 a variação ao longo da coluna da distribuição espacial e geométrica do número de flocos é menor para o parâmetro de dissipação $G = 14.5\ s^{-1}$. Já a distribuição espacial do diâmetro dos flocos é maior para $G = 14.5\ s^{-1}$, ver figura 4.37, ou seja, uma menor distribuição espacial e geométrica do número de flocos implica na distribuição espacial do diâmetro dos flocos maior.

No próximo exemplo compara-se o modelo sem a ativação do parâmetro de turbulência (sem RB-VMS) e o modelo com o parâmetro de turbulência (com RB-VMS). Então para as próximas simulações adota-se os seguintes parâmetros: $dt = 10^{-3}\ s$, $G = 2.04\ s^{-1}$, $K_A = 0.31$, $K_B = 14.0 \times 10^3$, $|w'| = 0.37$ e malha com 29 elementos.

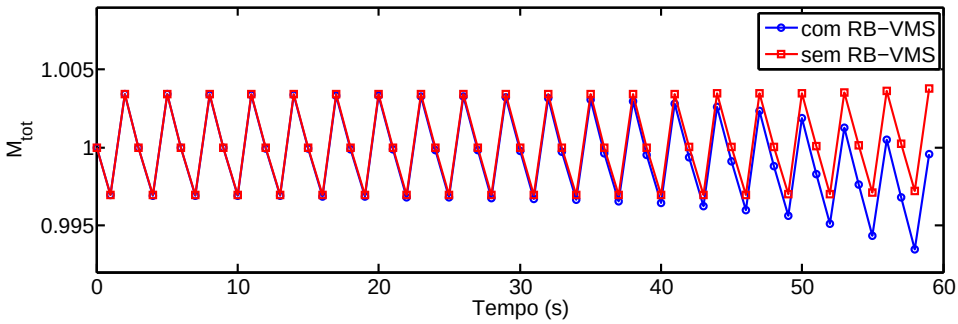

Figura 4.38: Evolução temporal da massa de sedimentos em suspensão com e sem RB-VMS.

Como o modelo foi implementado de forma a não ter perda de massa, observando a figura 4.38 pode-se concluir que o experimento numérico reproduz esta condição, mesmo o modelo com turbulência tendo uma pequena perda de sedimentos se comparado com o modelo sem turbulência.

Na figura 4.39 é apresentado o comportamento da concentração mássica sem turbulência para os instantes de $t = 0,\ 10,\ 25,\ 35,\ 50$ e $60\ s$.

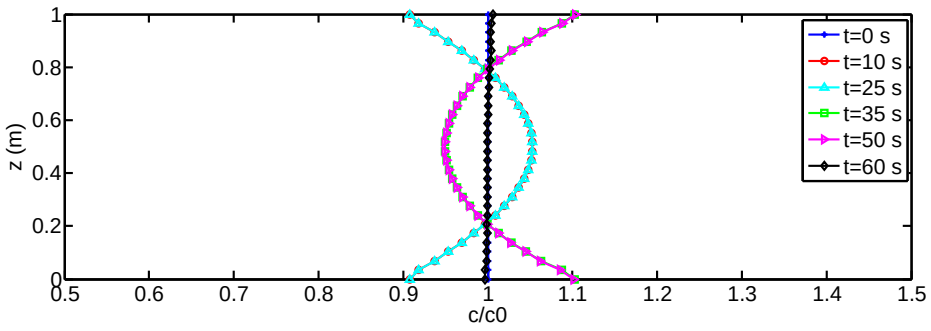

Figura 4.39: Concentração mássica ao longo da altura da coluna sem RB-VMS em diferentes instantes.

Para melhor visualizar o efeito da turbulência, compara-se o mesmo modelo no instante $t = 60\ s$ e todos outros parâmetros. Desta forma na figura 4.40, compara-se a concentração mássica com e sem a ativação do RB-VMS.

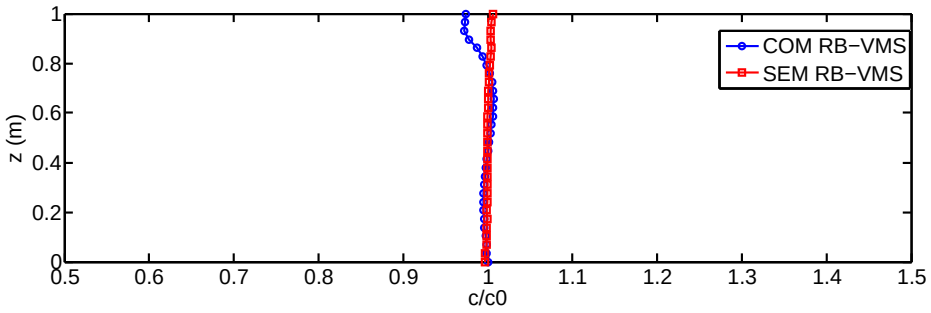

Figura 4.40: Concentração mássica ao longo da altura da coluna em $t = 60\ s$ com e sem RB-VMS.

Na figura 4.40 é possível verificar que o exemplo sem o efeito da turbulência (sem RB-VMS) é mais estável apresentando uma diferença em relação ao exemplo com o efeito da turbulência (com RB-VMS), apontando uma variação no topo da coluna. Logo pode-se concluir que o efeito de turbulência está presente na simulação numérica.

Nas figuras 4.41 e 4.42 compara-se o diâmetro dos flocos do modelo nos instantes $t = 30$ e $60\ s$, com e sem a presença do parâmetro de turbulência RB-VMS.

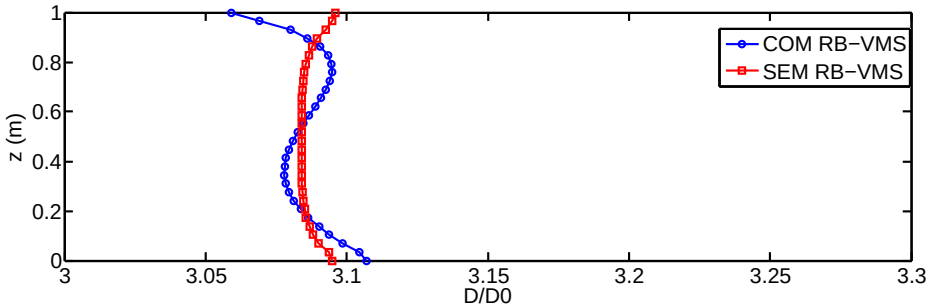

Figura 4.41: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 35\ s$ com e sem RB-VMS.

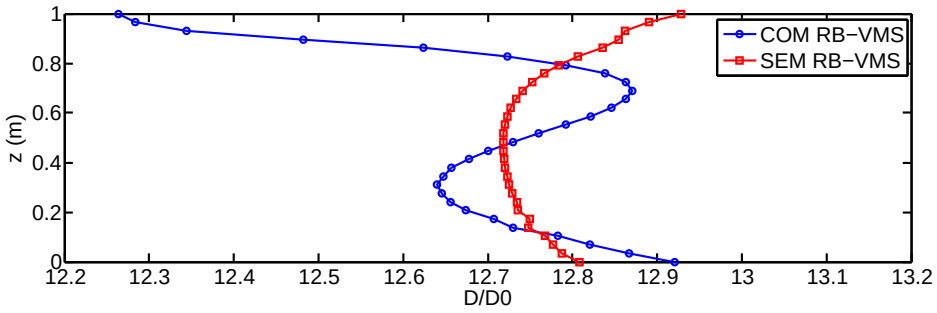

Figura 4.42: Distribuição espacial do diâmetro dos flocos em $t = 60\ s$ com e sem RB-VMS.

Verifica-se nas figuras 4.41 e 4.42 que assim como na concentração mássica o parâmetro de turbulência também influencia na distribuição espacial do diâmetro dos flocos. Em ambas as figuras o exemplo com o parâmetro de turbulência (com RB-VMS) tem maior oscilação do que o exemplo sem o efeito da turbulência.

Logo pode-se verificar na figura 4.42 que o modelo com o parâmetro de turbulência apresenta uma maior variação de tamanho de flocos no topo da coluna ($z = L$) que o modelo sem turbulência. No topo da coluna em ($z = L$) essa diferença é visível, com o efeito da turbulência o valor é perto de $12,3\ m$, já sem a turbulência o valor é próximo do $12,9\ m$. O exemplo sem a ativação do parâmetro de turbulência é mais estável, visto que o diâmetro dos flocos no topo em ($z = L$) é $12,9\ m$ e que o diâmetro dos flocos no fundo da coluna em ($z = 0$) é $12,8\ m$, proporcionando pouca diferença entre o topo e o fundo da coluna.

Capítulo 5

Conclusões

Este trabalho apresenta uma contribuição para a simulação do escoamento de sedimentos finos em uma corrente de turbidez. Foi implementado um método computacional, resolvendo apenas as equações de transporte e de floculação por meio do método dos elementos finitos, e impondo o escoamento de forma a reproduzir as condições de uma coluna de agitação. Equações estas que descrevem um fenômeno físico de transporte de sedimentos em uma corrente de turbidez.

O modelo aqui desenvolvido utiliza o método multi-escala variacional baseado em resíduos (RB-VMS) para estabilizar o modelo numérico e também, simultaneamente, introduzir um modelo numérico de turbulência. Diante da não linearidade proveniente da equação de transporte e da equação de floculação faz-se uso do método de Newton para resolver o problema não linear, o qual convergiu com 4 iterações na maioria dos instantes de tempo podendo chegar até a 10 iterações em outros passos de tempo. A tolerância usada no método de Newton foi de 10^{-4}.

De acordo com os resultados obtidos, pode-se observar que o modelo computacional implementado simula a sedimentação de sedimentos finos sem perda, visto que a massa de sedimentos em suspensão se manteve estável. Para explorar melhor o modelo computacional modificou-se alguns parâmetros, como por exemplo, a velocidade de sedimentação, os parâmetros de agregação e de quebra dos flocos, e verificou-se que a massa de sedimentos em suspensão continuou estável comprovando o que foi imposto pelas condições de

contorno do problema.

No capítulo de resultados, foi comparado dois exemplos, um com ativação da turbulência e outro sem a ativação do parâmetro de turbulência, com isso pode-se verificar que com a turbulência, a concentração mássica e o diâmetro dos flocos sofreram variações acentuadas, o que sugere uma forte influencia do fenômeno da turbulência na floculação. Este comportamento foi observado experimentalmente nas figuras 4.40 à 4.42.

Com este trabalho pode-se melhorar o entendimento do processo de floculação, através da simulação computacional, tendo como parâmetro de análise a concentração mássica dos sedimentos, a quantidade total dos flocos e a massa de sedimentos em suspensão.

Referências Bibliográficas

[1] MEIBURG, E., KNELLER, B. "Turbidity currents and their deposits", *Annual Review of Fluid Mechanics*, v. 42, pp. 135–156, 2010.

[2] WINTERWERP, J. C., VAN KESTEREN, W. G. M. *Introdution to the Phisics of Cohesive Sediment in the Marine Environment.* Amsterdam, T. Van Loon, Elsevier., 2004.

[3] WU, W., WANG, S. S. "An Introduction to Latest Developments in Soil Erosion and Sediment Transport Modeling", *11th International Symposium on River Sedimentation, Stellenbosch, South Africa*, pp. 309–326, 2010.

[4] WINTERWERP, J. "On the flocculation and settling velocity of estuarine mud", *Continental shelf research*, v. 22, n. 9, pp. 1339–1360, 2002.

[5] TRENTO, A. E. *Dinâmica da floculação no transporte de sedimentos finos.* Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2005.

[6] FIGUEIREDO, F. P. *Simulação Numérica e Computacional de Correntes de Turbidez de Baixa Densidade Para Sedimentação de Bacias.* Tese de D.Sc., PUC/RJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2010.

[7] PIRES, F. A. "O "estado de arte"dos depósitos de turbiditos", *Revista do Instituto Geológico*, v. 14, pp. 55 – 64, 1993.

[8] KRONE, R. B. "The significance of aggregate properties to transport processes", *Lecture notes on coastal and estuarine studies*, v. 14, pp. 66–84, 1986.

[9] WINTERWERP, J. C. "A simple model for turbulence induced flocculation of cohesive sediment", *Journal of Hydraulic Research*, v. 36, n. 3, pp. 309–326, 1998.

[10] BAUER, G., GRAVEMEIER, V., WALL, W. A. "A stabilized finite element method for the numerical simulation of multi-ion transport in electroche-

mical systems", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 223, pp. 199–210, 2012.

[11] BURDEN, R. L., FARIRES, J. D. *Análise numérica, tradução da 8º edição norte-americana*. São Paulo, Cengage Learning, 2008.

[12] CODINA, R. "On stabilized finite element methods for linear systems of convection–diffusion-reaction equations", *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, v. 188, n. 1, pp. 61–82, 2000.

[13] BAZILEVS, Y., AKKERMAN, I. "Large eddy simulation of turbulent Taylor–Couette flow using isogeometric analysis and the residual-based variational multiscale method", *Journal of Computational Physics*, v. 229, n. 9, pp. 3402–3414, 2010.

[14] FOX, R. W., MCDONALD, A. T. *Introdução à Mecânica dos Fluidos*. LTC, 5a. ed., 1998.

[15] HUGHES, T. J. R. *The Finite Element Method - Linear Static and Dynamic Finite Element Analysis*. New Jersey, Prentice-Hall, Inc., 1987.