

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**DISPERSÃO E CONTENÇÃO DE POLUENTES ORGÂNICOS
EM MEIO AQUOSO: MODELAGEM E SIMULAÇÃO**

Marcella Mayara Costa Araújo Aragão

ORIENTADOR: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE CAMPINA GRANDE
CENTRO DE CIÊNCIAS E DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA DE
PROCESSOS**

**DISPERSÃO E CONTENÇÃO DE POLUENTES ORGÂNICOS
EM MEIO AQUOSO: MODELAGEM E SIMULAÇÃO**

Marcella Mayara Costa Araújo Aragão

Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos da Universidade Federal de Campina Grande, como parte dos requisitos para a obtenção do título de Doutor em Engenharia de Processos, área de concentração: Desenvolvimento de Processos. Orientador: Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto.

A659

Aragão, Marcella Mayara Costa Araújo.

Dispersão e contenção de Poluentes orgânicos em meio aquoso :
modelagem e simulação / Marcella Mayara Costa Araújo. - Campina
Grande, 2022.

132 f. il. color.

Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) - Universidade Federal
de Campina Grande, Centro de Ciências e Tecnologia, 2022.

"Orientação: Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto."

Referências.

1. Benzeno – Dispersão. 2. Barreira de Contenção. 3. CFD. 4. Danos
Ambientais. I. Farias Neto, Severino Rodrigues de. II. Título.

CDU 547.532-048.53(043)


DISPERSÃO E CONTENÇÃO DE POLUENTES ORGÂNICOS EM MEIO AQUOSO: MODELAGEM E SIMULAÇÃO


Tese apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos da Universidade Federal de Campina Grande por Marcella Mayara Costa Araújo Aragão


Aprovado em: 20 de junho de 2022.


Membros da Banca:

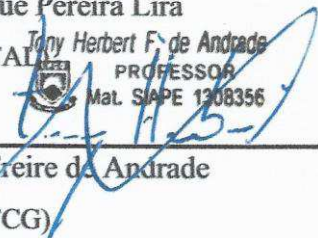
Membros da Banca:


Prof. Dr. Severino Rodrigues de Farias Neto
Orientador – (UFCG)


Prof. Dr. Antônio Gilson Barbosa de Lima
Examinador Externo – (UFCG)


Prof. Dr. Geraldo Dantas Silvestre Filho
Examinador Externo – (UFPB)


Prof. Dr. Raniere Henrique Pereira Lira
Examinador Externo – (UFAL)


Prof. Dr. Tony Herbert Freire de Andrade
Examinador Externo – (UFCG)

Tony Herbert F. de Andrade
PROFESSOR
Mat. SIAPE 1308356

Dedicatória

Dedico este trabalho a minha filha Helena de Melo Aragão.

AGRADECIMENTOS

Sou grata a Deus pelas oportunidades que Ele me proporcionou ao longo da minha trajetória, por ser meu melhor amigo, pelo cuidado diário com a minha vida e minha família. A Ele dedico cada uma das minhas vitórias.

A minha família que muito tem me auxiliado e tido paciência comigo. Ao meu amado esposo Victor que sempre acreditou em mim e me deu palavras de consolo e encorajamento. A minha doce e intensa Helena que mesmo tão pequena entende a mamãe e com carinho me ajuda a finalizar este projeto (dela vem minha força).

Aos meus avós que com carinho e dedicação me criaram e me educaram, sou grata pelos esforços e garras do meu querido avô João e minha amada Terezinha.

Minha gratidão aos meus pais Marcelo e Isabel, pois sei o quanto almejam meu sucesso, a minha mãe que sempre me ajuda cuidando da minha pequena nos momentos que mais preciso. A minha irmã Mariana que me escuta, me acolhe, me aconselha, me ajuda cuidando de Helena e sei que ora por mim.

Meus agradecimentos em especial ao meu orientador o Professor Severino Rodrigues que com muita sabedoria tem me auxiliado, me conduzido neste caminho por vezes tão difícil. Agradeço pelas palavras, pelo incentivo e principalmente por sua paciência.

Aos meus amigos do Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI) que tem contribuído com esta pesquisa diariamente. Um agradecimento especial ao meu amigo Diego que muito me ajudou com dicas e ensinamentos valiosos, ao meu amigo Boniek que sempre está disposto a ajudar e minha amiga de trajetória Mábia Ruana sou muito grata por tê-los.

Ao programa de Pós- Graduação em Engenharia de Processos (UFCG), como também ao LPFI. Agradeço a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) pelo apoio financeiro.

Enfim, agradeço a todos que contribuíram de alguma forma para o andamento deste projeto. Certamente que a bondade e a misericórdia do Senhor te seguirão todos os dias da tua vida e habitarei na casa do Senhor para todo sempre (Salmos 23:6).

Aragão, M. M. C.A. Dispersão e contenção de poluentes orgânicos em meio aquoso: Modelagem e Simulação, Tese ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Brasil (2022).

RESUMO

O petróleo e seus derivados é uma das principais fontes de energia utilizada pela humanidade na atualidade, entretanto, desde o processo de extração até o consumo do produto o meio ambiente está sujeito a danos ambientais a exemplo de acidentes decorrentes de vazamentos que podem ser ocasionados por falhas humanas, corrosão, eventos naturais e rupturas em dispositivos ou em tubulações ou por falhas mecânicas. O conhecimento da dispersão dos hidrocarbonetos aromáticos (benzeno, tolueno, etil-benzeno e xileno – BTEX, por exemplo) e os não hidrocarbonetos que constituem o petróleo tem sido alvo de variados estudos em consequência aos danos ambientais. O alto nível de toxicidade do BTEX pode causar doenças como, por exemplo, o câncer. Após um levantamento bibliográfico percebeu-se uma escassez de estudos relacionados a dispersão dos poluentes orgânicos em meio aquático e atmosférico. Assim, a proposta deste trabalho é avaliar o comportamento da dispersão de óleo e de componentes aromáticos, mais especificamente o benzeno, em meio aquático na presença ou não de barreiras de contenção. As equações de conservação de massa e momento linear em regime transitório foram resolvidas adotando-se a abordagem *Volume of fluid* (VOF) juntamente com o modelo de turbulência *realizable k-ε*. Considerando o regime adotou-se a condição de contorno de canal aberto (*open channel*) disponibilizado no aplicativo Ansys Fluent®. Aplicou-se o índice de convergência de malha (ICM) para avaliar a qualidade e a independência dos resultados em relação a malha computacional utilizada. Os resultados numéricos apresentaram uma boa concordância com os dados experimentais reportados na literatura e ilustram como a dispersão advectiva dos poluentes orgânicos se comporta com a variação dos parâmetros velocidades da água e do poluente, densidade, fração volumétrica e a presença da barreira de contenção de óleo na superfície da água com e sem ondas. O modelo adotado apresentou resultados satisfatórios para representar a dispersão advectiva dos poluentes em ambientes aquáticos, bem como a contenção dos poluentes a partir do uso de uma barreira fixa.

Palavras-chave: Dispersão. Benzeno. Barreira de contenção. CFD.

Aragão, M. M. C.A. Dispersion and pollution of organic pollutants in aqueous media: Modeling and Simulation. Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Brazil (2022).

ABSTRACT

Oil and its derivatives are one of the main sources of energy used by humanity today, however, from the extraction process to the consumption of the product, the environment is subject to environmental damage, such as accidents resulting from leaks that can be caused by failures. humans, natural events, corrosion, breakage in devices or pipes or mechanical failure. The knowledge of the dispersion of aromatic hydrocarbons (benzene, toluene, ethyl-benzene and xylene – BTEX, for example) and non-hydrocarbons that constitute petroleum has been the subject of several studies as a result of environmental damage. The high level of toxicity of BTEX can cause diseases such as cancer. After a bibliographic survey, it was noticed a scarcity of studies related to the dispersion of organic pollutants in aquatic and atmospheric environments. Thus, the purpose of this work is to evaluate the behavior of oil dispersion and aromatic components, more specifically benzene, in an aquatic environment in the presence or not of containment barriers. The equations of conservation of mass and linear momentum in transient regime were solved by adopting the Volume of fluid (VOF) approach together with the realizable k- ϵ turbulence model. Considering the regime, the open channel boundary condition was adopted, available in the Ansys Fluent® application. The mesh convergence index (ICM) was applied to evaluate the quality and independence of the results in relation to the computational mesh used. The numerical results showed a good agreement with the experimental data reported in the literature and illustrate how the advective dispersion of organic pollutants behaves with the variation of the parameters water and pollutant velocity, density, volumetric fraction and the presence of the oil containment barrier on the surface of the water with and without waves. The adopted model presented satisfactory results to represent the advective dispersion of pollutants in aquatic environments, as well as the containment of pollutants through the use of a fixed barrier.

Keywords: Dispersion. Benzene. Block barrier. CFD.

LISTA DE FIGURAS

Figura 2-1- Representação esquemática da atuação dos principais processos de intemperismo, após o derramamento do óleo.-----	22
Figura 2-2- Fatores que influenciam na posição da mancha em função do tempo.-----	24
Figura 2-3- Substância solúvel injetada instantaneamente em um escoamento uniforme e laminar, processos advectivo e difusivo.-----	33
Figura 2-4- Dispersão de efluentes industriais em rios.-----	34
Figura 2-5- Classificação dos lançamentos de poluentes.-----	41
Figura 2-6- Esquema do perfil de velocidade de ondas.-----	57
Figura 3-1- Domínio usado para comparação com Zhu; Lin; Pan, (2014).-----	64
Figura 3-2- Domínio usado para validação experimental.-----	65
Figura 3-3- Domínio com comprimento alongado para análise da barreira.-----	65
Figura 3-4- Domínio com aumento de barreira.-----	66
Figura 3-5- Malha utilizada nos casos estudados para validação numérica.-----	66
Figura 3-6- Malha utilizada nos casos estudados para validação experimental.-----	66
Figura 3-7- Malha usada para análise da barreira.-----	66
Figura 3-8- Malha usada para analisar tamanho de barreira.-----	66
Figura 3-9- Condições de contorno utilizadas.-----	72
Figura 4-1- (a) Malha (M1), (b) Malha (M2) e (c) Malha (M3).-----	78
Figura 4-2- Apresentação das linhas escolhidas para estudo.-----	79
Figura 4-3- Gráficos pressão e velocidade obtidas em L1.-----	81
Figura 4-4- Gráficos fração mássica e pressão obtidas na linha L2-----	82
Figura 4-5- Gráficos pressão e velocidade obtidas em L3.-----	83
Figura 4-6- Comparativo do caso simulado nesta pesquisa com o caso padrão Zhu.-----	85
Figura 4-7- Evolução da dispersão advectiva do óleo obtida por Zhu; Lin; Pan, (2014) (a) e obtida no presente trabalho (b).-----	87
Figura 4-8- Evolução da altura da gota em função do tempo com velocidade de vazamento de 0,125 m/s em (a) e 0,25 m/s em (b).-----	90
Figura 4-9- Dispersão advectiva do benzeno no meio aquoso nos tempos 0,1; 10; 20; 30 e 40 s. -----	92
Figura 4-10- Análise da dispersão do benzeno a partir da variação da velocidade da água com velocidade do poluente constante. -----	94

Figura 4-11- Relação altura e tempo da subida do poluente. -----	98
Figura 4-12- Dispersão advectiva do benzeno com variação da velocidade do poluente nos tempos 0,1;1;5;10;20 e 30 s. -----	101
Figura 4-13- Diferentes formas do jato de poluente para velocidades variadas (a) Domínio geral. (b) Aproximação na região de entrada do óleo. -----	103
Figura 4-14- Variação da fração volumétrica do óleo – benzeno em diferentes intervalos de tempo. Em (a) 0 de benzeno; (b) 0,25 de benzeno; (c) 0,5 de benzeno; (d) 0,75 de benzeno; (e) 1 de benzeno. -----	106
Figura 4-15- Perfis de velocidade do benzeno para as diferentes frações volumétricas-----	109
Figura 4-16- Fração volumétrica do óleo a partir da variação da densidade (750, 870 e 930 kg/m ³). -----	110
Figura 4-17- Variação da velocidade do poluente (1 e 2 m/s) para densidades iguais. -----	114
Figura 4-18- Comportamento do óleo na presença de uma barreira de contenção. -----	117
Figura 4-19 – Comportamento da dispersão do óleo na presença de uma barreira de contenção com ondas na superfície da água. -----	119
Figura 4-20- Efeito da zona de recirculação sobre o comportamento da dispersão do jato de óleo a partir do vazamento. -----	124
Figura 4-21- Efeito da zona de recirculação sobre o comportamento da dispersão do óleo próximo a barreira de contenção. -----	124
Figura 4-22- Pequenas e grandes recirculações no tempo de 80 s. -----	125
Figura 4-23- Domínio com barreira ampliada (a) sem ondas e (b) com ondas. -----	127
Figura 4-24- Campo de fração volumétrica de óleo sobre o plano XY na presença de barreira de contenção de tamanhos diferentes. -----	129

LISTA DE TABELAS

Tabela 3.1 - Informações gerais do problema e da solução numérica aplicada.	74
Tabela 3.2 – Densidade e viscosidade dos fluidos utilizados.....	75
Tabela 3.3 – Especificações das simulações numéricas realizadas.	76
Tabela 4.1 – Informações quantitativas das malhas numéricas estudadas.	78
Tabela 4.2 – Resultados do parâmetro pressão na linha L1 para o estudo de índice de convergência de malha.	80
Tabela 4.3 - Resultados do parâmetro velocidade na linha L1 para o estudo de índice de convergência de malha.	80
Tabela 4.4 - Resultados do parâmetro fração mássica na linha L2 para o estudo de índice de convergência de malha.	81
Tabela 4.5 - Resultados do estudo de ICM para a pressão na linha L3.....	82
Tabela 4.6 - Resultados do estudo de ICM para a velocidade na linha L3.	83
Tabela 4.7 – Valores das vazões obtidas nas regiões de entrada da água e do poluente para as diferentes velocidades estudadas.....	93
Tabela 4.8 – Vazões obtidas para entrada da água e entrada do poluente.....	97

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

- BTEX** – *Benzeno, tolueno, etilbenzeno, xileno*
- COV** – *Compostos orgânicos voláteis*
- CFD** – *Computational Fluid Dynamics*
- VOF** – *Volume of fluid*
- GVF** – *Escoamento gradualmente variado*
- RVF** – *Escoamento rapidamente variado*
- EPA** – *Environmental Protection Agency*
- IARC** – *International Agency of Research of the Cancer*
- TLM** – *Matriz de linha de transmissão*
- CONAMA** – *Conselho nacional do meio ambiente*
- ADE** – *Equação analítica*
- CADM** – *Modelo de dispersão de poluição do ar*
- PCN** – *Política Nacional de Contingência*
- NEBA** – *Análise de Benefício Ambiental Líquida*
- CSF** – *Modelo de força de superfície contínua*
- CSS** – *Modelo de tensão de superfície contínua*
- ICM** – *Índice de convergência de malha*
- LPFI** – *Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem*

LISTA DE SÍMBOLOS

Re	Número de Reynolds	[-]
Fr	Número de Froude	[-]
G	Aceleração da gravidade	[m/s ²]
H	Altura da onda	[m]
At	Amplitude da onda	[m]
Ac	Amplitude da crista	[m]
Y	Profundidade	[m]
K	Número da onda	[-]
F	Forças externas	[-]
SM _α	Termo fonte	[N]
U	Velocidade média da corrente de fluxo	[m/s]
C _{ε1}	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
C _{ε2}	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
C _μ	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]
R	Raios de curvatura	[m]

Letras Especiais

∇	Operador nabla	[-]
$\partial / \partial t$	Derivada parcial com relação ao tempo	[s ⁻¹]

Letras gregas

ρ	Massa específica do fluido	[kg/m ³]
σ_ε	Constante do modelo de turbulência k-ε	[-]

σ_k	Constante do modelo de turbulência k- ϵ	[-]
μ	Viscosidade molecular	[Pa.s]
μ_t	Viscosidade turbulenta	[Pa.s]
ρ_q	Massa específica da fase q	[kg/m ³]

SUMÁRIO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO	13
1.1 Introdução	13
1.2 Objetivos	17
1.2.1 Objetivo Geral	17
1.2.2 Objetivos Específicos	17
1.3 Organização do Trabalho	17
CAPÍTULO 2 - REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	19
2.1 Petróleo	19
2.2 Acidentes com vazamentos de óleo: Processos envolvidos	20
2.3 Poluentes orgânicos (BTEX) e impactos causados ao meio ambiente e a saúde do homem	25
2.4 Escoamentos em rios e canais	28
2.5 Dispersão de efluentes: no meio aquoso e atmosférico	32
2.6 Classificação dos lançamentos de poluentes	40
2.7 Barreiras de contenção	42
2.8 Escoamentos multifásicos	43
2.9 Modelagem no escoamento multifásico	44
2.9.1 Equação da conservação da massa	44
2.9.2 Equação da quantidade de movimento linear	45
2.9.3 Equação da energia	45
2.10 Ação da turbulência em escoamentos	46
2.10.1 Modelos de turbulência	47
2.10.1.1 Modelo de turbulência $k-\varepsilon$ padrão	48
2.10.2 Modelo de turbulência $k-\varepsilon$ RNG	49
2.10.3 Modelo $k-\varepsilon$ <i>Realizable</i>	50
2.11 Abordagens para o modelo de escoamento multifásico	51
2.11.1 Euleriana – Euleriana	51
2.11.1.1 Modelo <i>volume of fluid</i> (VOF)	52
2.11.1.1.1 Modelo de tensão superficial	52
2.11.1.1.1.1 Modelos CSF	52

2.12 Índice de convergência de malha-----	60
CAPÍTULO 3 - METODOLOGIA-----	63
3.1 Modelagem Matemática-----	62
3.1.1 Descrição do problema-----	62
3.1.2 Geometria e Geração da Malha Computacional-----	65
3.1.3 Análise da qualidade de malha-----	67
3.1.4 Modelo matemático-----	70
3.1.5 Condições inicial e de contorno-----	71
3.1.6 Propriedades físico-químicas dos materiais adotados-----	74
3.1.7 Casos avaliados-----	75
CAPÍTULO 4 - RESULTADOS E DISCUSSÃO-----	77
4.1 Resultados e Discussões-----	77
4.1.1 Avaliação do Índice de Convergência de Malha (ICM) -----	77
4.1.2 Comparação dos resultados com os reportados na literatura-----	85
4.1.3 Validação experimental-----	90
4.1.4 Dispersão advectiva do benzeno-----	91
4.1.5 Variação da velocidade de entrada da água-----	94
4.1.6 Variação da velocidade dos poluentes-----	97
4.1.7 Variações das frações volumétricas-----	105
4.1.8 Variação da densidade do óleo-----	109
4.1.9 Influência das variações da velocidade do poluente mantendo a densidades água poluente iguais-----	112
4.1.10 Influência da barreira de contenção-----	115
CAPÍTULO 5 - CONCLUSÕES-----	130
5.1 Conclusões-----	130
5.2 Trabalhos futuros-----	132
REFERÊNCIAS-----	133

Capítulo 1

INTRODUÇÃO

No capítulo 1 serão apresentados a introdução, os objetivos (geral e específicos) e a forma que a tese está estruturada. O intuito deste capítulo é entender a importância do estudo da dispersão e espalhamento de poluentes como o benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno (BTEX) e o diferencial desta pesquisa para a sociedade e o meio ambiente.

1.1 Introdução

O aumento populacional e industrial tem demandado cada vez mais o uso de combustíveis fósseis (petróleo e gás natural) como fontes de energia e como matéria prima para fabricação de matérias. O uso destes são essenciais no desenvolvimento da sociedade na sua totalidade. O petróleo e o gás natural podem ser encontrados em terra (*onshore*) ou no mar (*offshore*). As atividades em campos *offshore* são as que geram maior impacto ambiental e acidentes, podendo ainda ocasionar danos irreversíveis a fauna e flora (MARTINS; FORTES; LESSA, 2015).

O petróleo é formado por hidrocarbonetos e não hidrocarbonetos que podem ser classificados em: saturados, insaturados e aromáticos. Os aromáticos podem aparecer através de compostos, tais como: benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos (BTEX) (LOPES TIBURTIUS; PERALTA-ZAMORA; LEAL, 2004).

Os hidrocarbonetos aromáticos também conhecidos como compostos orgânicos voláteis (COV) são altamente nocivos para os seres vivos. Estes compostos apresentam características indesejáveis como a toxicidade crônica (pequenas concentrações podem causar alterações ao sistema nervoso central) e elevada capacidade de contaminação de solos, águas e ar. Outra particularidade é que eles são mais prejudiciais que os hidrocarbonetos alifáticos e possuem maior facilidade de movimentação na água, por este motivo são alvos de estudos. O benzeno é reconhecidamente o mais tóxico, pois trata-se de uma substância comprovadamente

carcinogênica (podendo causar leucemia, ou seja, câncer dos tecidos que formam os linfócitos do sangue). Uma exposição aguda (altas concentrações em curtos períodos) por inalação ou ingestão pode causar até mesmo a morte de uma pessoa (LOPES TIBURTIUS; PERALTA-ZAMORA; LEAL, 2004).

Na atualidade a principal fonte de energia é baseada em petróleo e seus derivados. Com isso, o meio ambiente está sujeito a sofrer diversos impactos desde a extração do combustível até a distribuição do produto final. Entre os impactos ocasionados pode-se citar: acidentes com derrames de hidrocarbonetos, poluição da fauna – flora, impactos econômicos e sociais. Uma consequência de grande preocupação é a poluição das águas que pode ser ocasionada devido a afundamentos, explosões, colisões de navios transportadores de petróleo, lavagem de tanques, descargas inadequadas de águas contaminadas, derrames durante as operações de transferência do óleo e descarte de efluentes industriais (MOREIRA, 2016).

Falhas em equipamentos submersos como as tubulações tendem a ocorrer, em especial se as condições adversas estiverem presentes como pressões elevadas, variações na temperatura, interações entre as ondas e correntezas. Nos campos *offshore* estas condições extremas estão presentes fazendo com que os equipamentos operem próximos aos seus limites (FOX; PRITCHARD; MCDONALD, 2011).

Segundo Oliveira e Luz (2013) os dutos flexíveis podem apresentar falhas que comprometem sua integridade estrutural, tendo como consequências: danos na produção, acidentes que podem gerar vítimas fatais e danos ambientais, especialmente com a contaminação das águas com compostos altamente tóxicos.

A poluição marinha causada por derramamento ou vazamento do óleo e seus componentes está entre os impactos socioambientais mais graves e danosos da atualidade, sendo a indústria petrolífera a atividade que apresenta o maior risco de acidentes ambientais, com possibilidade de derrames desde a perfuração do poço até a distribuição do produto. Acidentes como esses atraem a atenção de toda a sociedade e da mídia, pois afetam uma gama de atividades e usos. Como por exemplo, *habitats* com considerável importância ecológica devido a presença de espécies raras e/ou endêmicas, locais de reprodução, além dos interesses socioeconômicos, como áreas de pesca, de extração de água e alimento e turismo (SILVA, 2006).

Os vazamentos com hidrocarbonetos em águas submarinas provocam sérios danos ambientais e econômicos, por isso, os órgãos competentes tendem a fiscalizar, multar e exigir as medidas corretivas de empresas que geram acidentes como estes.

Nos últimos anos muitos acidentes com vazamentos e derramamentos de petróleo têm sido registrados. Como por exemplo, o acidente que ocorreu no Golfo do México (costa da Louisiana, EUA) com aproximadamente 20 mil barris de óleo vazados por dia, resultando em uma devastação ecológica em áreas adjacentes. Outro acidente com impactos negativos ocorreu em uma plataforma de petróleo no mar de Bohai (China), no qual aproximadamente 700 barris de óleo e 2500 barris de lama de perfuração à base de óleo foram derramados. O mar de Bohai é uma espécie de baía com profundidade média de 14,5 metros, o que torna o risco de contaminação alto (WANG *et al.*, 2013).

Em Tramandaí, no Rio Grande do Sul (RS), uma mancha de petróleo foi vista em alto-mar, um navio descarregava o óleo na monoboia quando a área foi afetada por um temporal, cerca de 2,5 mil litros de óleo foi derramado nas águas marítimas (GONZATTO, 2016).

Em agosto de 2019 o litoral brasileiro foi atingido por manchas de óleo, sendo considerado o maior desastre ambiental provocado por vazamento de petróleo no país. O acidente foi considerado extremamente grave, com consequências para saúde e o meio ambiente. Muitos impactos negativos foram identificados no bioma brasileiro, atingindo cerca de 1300 espécies de peixes, manguezais, recifes de corais, prejudicando atividades pesqueiras e o turismo. As comunidades de pescadores ficaram impedidos de comercializar os mariscos, ostras, mexilhões e caranguejos ficando impossibilitados de ter o sustento diário. As pessoas que tiveram contato com óleo precisarão ser monitoradas devido ao contato com as substâncias cancerígenas, verificou-se que os danos ocasionados são incalculáveis e a contaminação química tende a durar mais tempo que a poluição visual (ARAÚJO *et al.*, 2020).

Mediante a estes fatores a legislação tem se tornado cada vez mais rigorosa, de modo que os limites estabelecidos devem ser cumpridos. No Brasil, a portaria Nº 518, de 25 de março de 2004, determina que os limites máximos permitidos para benzeno, tolueno e xilenos são de 5, 170 e 300 µg/L, respectivamente, para que a água seja considerada potável (LOPES TIBURTIUS; PERALTA-ZAMORA; LEAL, 2004). Em 2021 houve uma alteração na legislação através da portaria GM/MS Nº 888 de modo que os limites máximos permitidos para benzeno, tolueno e xilenos são 5, 30 e 500 µg/L, respectivamente, para que a água seja potável.

No momento que vazamentos acidentais acontecem é preciso que soluções rápidas e objetivas sejam tomadas para diminuir os impactos ambientais, sociais e econômicos. Uma das maneiras de conter o óleo após o derramamento é fazendo uso de barreiras de contenção que são métodos alternativos utilizados para conter o espalhamento do óleo. O uso desta técnica

dependerá do crescimento das gotas de óleo, velocidade e tendência de propagação. Portanto, é imprescindível o estudo do comportamento dos fluidos no ambiente marinho, para que se conheça o posicionamento preferencial dos contaminantes (TAVARES, 2012).

As barreiras de contenção são equipamentos de resposta rápida e por vezes, geram resultados satisfatórios na contenção do óleo derramado em água a partir de um acidente, fazendo com que a área exposta sofra um menor impacto ambiental.

Esta pesquisa foi motivada devido as consequências sofridas pelo meio ambiente e a população à medida que acidentes como estes ocorrem, o espalhamento do óleo e dos componentes presentes em sua estrutura trazem danos irremediáveis, sendo imprescindível ter um conhecimento prévio do comportamento destes poluentes em ambientes com a presença de ondas. Nesse sentido, estimar o comportamento da dispersão advectiva do óleo e do benzeno como determinadas propriedades podem influenciar no deslocamento destes, possibilita o conhecimento do posicionamento dos fluidos, auxilia também na escolha da técnica mais apropriada para realizar a contenção destes poluentes. Sendo possível ainda a partir destes conhecimentos verificar a eficiência do uso de barreiras como resposta do derramamento de óleo no mar. As análises experimentais são de elevados custos e podem gerar impactos negativos, por este motivo o uso de métodos computacionais como a fluidodinâmica computacional (CFD – *Computational Fluid Dynamics*) juntamente com modelos de previsão do fluxo dos fluidos são capazes de simular o comportamento hidrodinâmico dos poluentes no meio.

Neste contexto, a proposta desta pesquisa é dar uma contribuição no estudo da dispersão do óleo e do benzeno presentes na água e auxiliar na compreensão dos fenômenos que podem influenciar no deslocamento desses componentes no meio aquoso. A previsão da trajetória do óleo derramado é essencial para que respostas rápidas sejam obtidas. Verificar ainda, o desempenho de uma barreira na contenção dos poluentes derramados em um ambiente com ondas. Utilizando a modelagem numérica a partir do método de volumes finitos com uso de variáveis para completar os modelos selecionados.

1.2 Objetivos

1.2.1 Objetivo Geral

Avaliar a dispersão advectiva e contenção dos poluentes orgânicos (óleo e benzeno) através e uma barreira fixa.

1.2.2 Objetivos Específicos

- Definir uma modelagem matemática capaz de prever o comportamento fluidodinâmico da dispersão advectiva dos poluentes e barreiras de contenção;
- Avaliar a influência dos parâmetros (fração volumétrica, velocidade da água, velocidade do poluente e densidade) sobre a dispersão e espalhamento dos poluentes no meio aquático;
- Avaliar a eficiência de uma barreira fixa na contenção do espalhamento do óleo e benzeno na região aquática;
- Avaliar a influência das ondas na dispersão advectiva dos poluentes;
- Avaliar a influência das ondas na contenção dos poluentes a partir de uma barreira fixa.

1.3 Organização do Trabalho

O presente trabalho está estruturado em 5 capítulos. No Capítulo 1 tem-se uma exposição do tema abordado, mostrando a importância da realização desta pesquisa. Este capítulo está subdividido em introdução, definição dos objetivos (geral e específicos) e a forma geral da estruturação do trabalho.

O capítulo 2 contém a revisão bibliográfica e a fundamentação teórica desta pesquisa. A revisão bibliográfica foi enfatizada nos trabalhos que abordaram a dispersão de poluentes em meios aquáticos e atmosféricos, o espalhamento do óleo devido a ocorrência de acidentes, bem como, as limitações e modelos aplicados. A fundamentação teórica relaciona as propriedades e os fatores que influenciam no deslocamento dos poluentes.

Capítulo 1 - Introdução

O capítulo 3 descreve a metodologia empregada no estudo, a modelagem matemática, as malhas utilizadas, as simplificações consideradas, as propriedades dos fluidos aplicados e as especificações dos casos estudados.

O capítulo 4 apresenta os resultados obtidos, um comparativo dos dados experimentais e os gerados na simulação, as análises dos diferentes parâmetros, assim como, algumas discussões sobre eles.

O capítulo 5 mostra as conclusões alcançadas neste trabalho. E finalizando com as referências utilizadas.

Capítulo 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

No capítulo 2 são apresentados a fundamentação teórica e a revisão bibliográfica que baseiam o tema abordado nesta pesquisa. A fundamentação teórica é formada por todo o referencial teórico desde os impactos ocasionados pelo BTEX ao homem e ao meio ambiente até a modelagem matemática definida.

Neste capítulo ainda será apresentado uma revisão do estado da arte cujo intuito é apresentar os trabalhos e relatos abordados por variados autores sobre a dispersão de poluentes em meios aquáticos e atmosféricos que serão a base para justificativa dos resultados aqui apresentados.

A finalização do capítulo se dá com a apresentação da modelagem matemática, as equações que foram utilizadas no desenvolvimento dos cálculos usados na simulação numérica.

2.1 Petróleo

Oriunda do latim (*petra* = pedra e *oleum* = óleo) a palavra petróleo é dada as misturas de hidrocarbonetos que podem ser encontradas em diferentes estados a depender das condições de pressão e temperatura que estejam submetidas (ROSA, CARVALHO, XAVIER, 2006).

O petróleo pode ser definido como uma substância oleosa, inflamável, menos densa que a água, que possui cheiro característico e cor variando entre o negro ao castanho-claro (THOMAS, 2004).

Segundo Schiavi e Hoffmann (2015) petróleo é um combustível fóssil resultante da transformação e decomposição da matéria orgânica depositada junto com os sedimentos submetidos a determinadas condições termoquímicas. O tipo de hidrocarboneto gerado (óleo ou gás) dependerá do tipo da matéria orgânica original e a intensidade do processo termoquímico atuante. O fitoplâncton em condições adequadas tende a gerar hidrocarbonetos líquidos, o vegetal lenhoso tende a gerar hidrocarbonetos gasosos (THOMAS, 2004).

Em estado natural o petróleo é uma mistura de hidrocarbonetos, compostos por átomos de carbono e hidrogênio, além desses e em concentrações menores é possível encontrar

compostos oxigenados, sulfurados, nitrogenados e metais que são os não hidrocarbonetos ou contaminantes (ROSA; CARVALHO; XAVIER, 2006).

Os hidrocarbonetos são compostos orgânicos formados por carbono e hidrogênio, mediante como estão estruturados podem ser classificados em: hidrocarbonetos saturados (alcanos ou parafínicos), hidrocarbonetos insaturados ou olefinas e os hidrocarbonetos aromáticos.

Os hidrocarbonetos saturados são aqueles que os átomos de carbono estão ligados ao maior número possível de átomos de hidrogênio por ligações simples. Os insaturados apresentam na sua estrutura pelo menos uma ligação dupla ou tripla carbono – carbono. Enquanto que os hidrocarbonetos aromáticos ou arenos possuem pelo menos um anel benzênico na sua estrutura. Os não hidrocarbonetos ou impurezas podem aparecer em toda faixa de ebulição do petróleo, os principais representantes dessa classe são: os compostos sulfurados, compostos nitrogenados, compostos oxigenados, compostos metálicos, resinas e asfaltenos (THOMAS, 2004).

2.2 Acidentes com vazamentos de óleo: Processos envolvidos

A indústria petrolífera é formada por uma gama complexa de equipamentos utilizados para fins variados. Para que o produto final seja obtido (como por exemplo a gasolina) muitas etapas precisam ser cumpridas, desde a prospecção do petróleo até a distribuição do produto final. Na etapa de perfuração e exploração do óleo muitos equipamentos como sonda de perfuração, colunas de perfuração, acessórios, brocas entre outros itens são aplicados.

Durante a retirada do óleo principalmente em ambientes *offshore* condições adversas são presenciadas. Os equipamentos, tais como, tubulações submarinas estão sujeitas a um ambiente muito agressivo e conseqüentemente a processos de corrosão que é acelerado devido às circunstâncias (PERGHER *et al.*, 2011).

Os dutos são sistemas de canalização usados para realizar o transporte de materiais como o petróleo e seus derivados. É um meio que interliga as fontes produtoras, refinarias, terminais de armazenagem, bases distribuidoras e centros de consumo. Este sistema de dutos está sujeito a falhas por fadiga, danos por corrosão e até mesmo casos de ruptura ocasionando acidentes de vazamentos dos fluidos transportados (CARDOSO, 2004).

No momento que ocorre a ruptura de um equipamento submarino, o hidrocarboneto contido no seu interior é expulso devido ao diferencial de pressão aplicado para provocar o deslocamento do fluido ao longo de grandes distâncias (LIST, 1982).

Na indústria petrolífera acidentes com vazamentos de petróleo são um dos principais causadores de contaminação do meio aquático. Os riscos são iminentes na etapa de transporte através de dutos, devido às variações de pressão no sistema de escoamento, velocidade de escoamento, atrito, variações em conexões curvas e de área. Esses e outros fatores são responsáveis pela ruptura dos dutos ocasionando vazamentos (FREITAS *et al.*, 2007).

Mallmann; Sousa; Hammerschmidt (2016), Tavares *et al.* (2012) e Monteiro; Benatti; Rodrigues (2009) definiram acidente como o resultado de falhas operacionais, decisões gerenciais inadequadas e barreiras de segurança degradadas.

Se acidentes de vazamento de óleo ou derivados acontecem devido à presença de rupturas ou furos, tem-se mudanças significativas nas propriedades pressão e temperatura alterando, portanto, as condições de escoamento (OLIVEIRA *et al.*, 2009).

É possível observar nos últimos anos muitos episódios de acidentes na indústria petrolífera com vazamentos de óleo. Entre eles tem-se o acidente com o *Exxon Valdez* que aconteceu em março de 1989, o qual derramou cerca de 41,6 milhões de litros de óleo cru no Alaska (BIRKLAND; LAWRENCE, 2002).

Em 1997 um acidente aconteceu no Rio de Janeiro onde 2000 toneladas de óleo vazaram na Baía de Guanabara (RJ), a causa do acidente foi uma movimentação anormal de um duto no sentido vertical provocando o rompimento dele (ACSELRAD; MELLO, 2002).

No ano de 2000 um desastre ambiental aconteceu na baía do rio Iguazu, aconteceu um vazamento de hidrocarbonetos provocado em uma refinaria da Petrobras. Cerca de quatro milhões de litros de óleo foram jogados no meio ambiente alterando a fauna e a flora (PERGHER *et al.*, 2011).

Outro exemplo de acidente catastrófico ocorreu na Espanha em frente à costa *Galician*, o navio *Prestige* se rompeu em dois, vazando aproximadamente 63 mil toneladas de óleo pesado, em novembro de 2002 (LAFFON *et al.*, 2006).

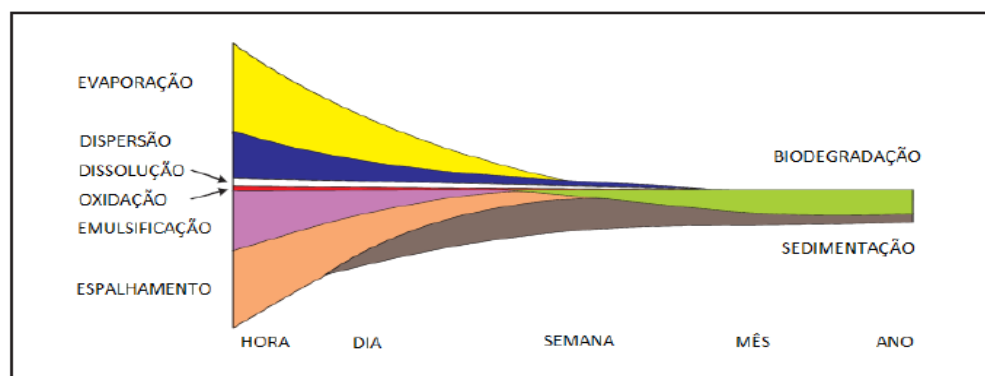
Durante estes acidentes com derramamento de óleo acontecem muitos processos, aos quais podem ser divididos em: processos de transporte e físico-químicos, como afirma Paladino (2005). Processos estes que influenciam na dispersão, espalhamento e transporte dos componentes, tais como o BTEX.

Na maioria dos acidentes petrolíferos em ambientes *offshore* ocorre o derramamento de óleo que tende a se espalhar semelhante a uma película sobre a água. A posição final e a maneira que esse óleo é transportado dependem dos processos físicos, químicos, biológicos, as propriedades do óleo, as condições meteorológicas, hidrodinâmicas e ambientais da região atingida (SANTOS, 2012).

Na Figura 2-1 está representado os diversos processos que podem ocorrer após um acidente com derramamento de óleo. A combinação dos processos físicos, químicos e biológicos é conhecida por intemperismo e inicia-se logo após o derrame de óleo no mar.

Os processos físicos estão associados a advecção e a dispersão hidrodinâmica. Na advecção o transporte ocorre devido ao fluxo de água que tende a carregar os poluentes. Na equação diferencial o termo que representa a advecção tem por objetivo descrever o transporte do poluente misturado com a mesma velocidade da água, enquanto que na dispersão hidrodinâmica ocorre a junção da difusão molecular e a dispersão mecânica sendo possível observar o espalhamento do poluente ao longo do meio aquoso. Os processos bio - físico - químico estão relacionados as reações que ocorrem entre o meio poroso e o poluente (SANTOS, 2015).

Figura 2-1- Representação esquemática da atuação dos principais processos de intemperismo, após o derramamento do óleo.



Fonte: Itopof (2014).

Como apresentado na Figura 2-1 os variados processos acontecem após a ocorrência de acidentes envolvendo derramamento de óleo e derivados podendo ocorrer de maneira

simultânea e alguns deles podem perdurar por anos. Os processos apresentados serão explicados abaixo.

O processo de emulsificação é um processo físico em que o líquido é disperso em outro líquido na forma de gotículas. Os óleos crus tendem a absorver água e formar a emulsão água – óleo aumentando o volume de poluentes (ITOPF, 2014).

Durante o escoamento do óleo pode ocorrer períodos de turbulência que podem provocar o transporte de gotículas de óleo, desprendendo-as da mancha de óleo e levando-as verticalmente na coluna d'água, esse processo é conhecido por dispersão. As gotículas possuem dimensões variáveis, as gotículas menores permanecem em suspensão na coluna d'água sendo afetadas por outros processos como: biodegradação e sedimentação (SANTOS, 2015).

O espalhamento acontece logo após o derrame do óleo e é um dos principais responsáveis pelo rápido aumento da área exposta pelos contaminantes. O espalhamento pode ser definido como o movimento horizontal da mancha, devido à ação da tensão superficial e gravidade, aumentando sua área exposta. Acredita-se que nos primeiros instantes após o acidente o espalhamento é o processo predominante. Após algum tempo, e mediante a existência de vento forte, mar agitado, efeito das correntes, a mancha pode ser deformada, fragmentada e dispersa (PERGHER *et al.*, 2011).

Outro processo que acontece na presença de uma mancha de óleo é o de dissolução. Este processo físico tem-se constituintes solúveis do óleo se dissolvendo na água, a taxa de dissolução do óleo depende da sua composição, do espalhamento da mancha, da temperatura, turbulência da água e da taxa de dispersão. A dissolução também ocorre imediatamente após o derrame e se propaga ao longo do tempo, uma vez que a oxidação e a biodegradação constantemente formam subprodutos solúveis (SANTOS, 2015).

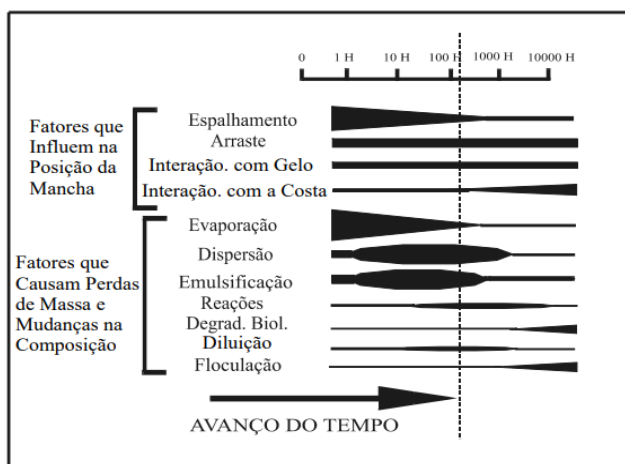
A oxidação é a reação de combinação ou quebra entre as moléculas de hidrocarbonetos com o oxigênio, esse mecanismo ocorre devido à presença de luz solar e contribui para o intemperismo do óleo, já que origina compostos solúveis. Na presença de sais minerais dissolvidos em água tem-se uma maior taxa de oxidação (ITOPF, 2014).

A Figura 2-2 apresenta a relevância dos diferentes fenômenos com o passar do tempo. Cada fenômeno apresenta-se de forma diferenciada em escalas de tempo distintas e dependem ainda do volume de óleo derramado.

A espessura da mancha de óleo irá variar com o passar dos dias. As forças viscosas passam a predominar sobre as forças inerciais, a gravidade se mantém ativa, tendo, portanto, um balanço entre forças viscosas e de gravidade. No fim do processo a espessura do óleo será

extremamente pequena as forças de gravidade perdem a força tendo como substituta as forças de tensão superficial e as forças viscosas, esta etapa é o espalhamento em tensão superficial (PALADINO, 2005).

Figura 2-2- Fatores que influenciam na posição da mancha em função do tempo.



Fonte: Paladino (2005).

Com a ocorrência de acidentes impactantes para o homem e o meio ambiente viu-se a necessidade na realização de estudos para investigar as causas, consequências, impactos e meios de remediar os danos gerados por derramamentos de óleo e derivados.

Oliveira *et al.* (2009) fizeram uma modelagem a partir do uso do CFD de um vazamento submarino através do *software* de simulação ANSYS CFX®. O estudo foi baseado num trabalho prévio que simulava experimentalmente um vazamento submarino e que resultou num modelo semi - empírico cujo intuito era estimar a quantidade de óleo vazado. As conclusões foram que o estudo de modelagem simulou com boa precisão a velocidade de vazamento e apresentou de forma adequada os diferentes aspectos geométricos observados na etapa experimental, com potencial para auxiliar no desenvolvimento de ferramentas preditivas para o projeto e controle de processos envolvendo escoamentos imiscíveis.

Li; Liang; Lin, (2013) estudaram o derramamento de óleo em águas geladas pelo *software* ANSYS FLUENT®. O estudo foi realizado em regime transiente, utilizou-se o acoplamento pressão – velocidade e aplicou-se o modelo VOF. Viu-se com os resultados que o óleo aderiu a parte inferior da camada de gelo, parte do óleo foi arrastado para superfície superior do gelo acelerando seu derretimento e a poluição foi maior na região que não possuía

as camadas de gelo. Os resultados simulados apresentaram concordância com os dados experimentais.

Lopes *et al.* (2018) estudaram diferentes situações com derramamento de óleo em condições ambientais adversas na região portuária do Rio Grande do Sul. A modelagem foi feita com o sistema numérico Telemac 3D + ECOS. Observou-se com a realização deste trabalho que inicialmente o deslocamento das manchas de óleo foram influenciadas pela força das correntes e com o passar do tempo houve uma predominância na ação dos ventos. O modelo aplicado mostrou-se apropriado na simulação de deslocamento de manchas quanto a sensibilidade ambiental.

Souza *et al.* (2019) estudaram o incidente de vazamento de óleo na monoboia de Tramandaí para verificar a influência do intemperismo em diferentes tipos de óleo. Para realização deste trabalho foram usados dois *softwares*. Para o derramamento do óleo o modelo escolhido foi o ECOS acoplado ao modelo hidrodinâmico TELEMAC-3D. Verificou-se na realização deste trabalho que o intemperismo aplicado não teve interferência no tamanho da mancha de óleo ao contrário das condições climáticas e oceanográficas que direcionaram seu deslocamento atuando na emulsificação e evaporação.

Yang *et al.* (2020) pesquisaram o fluxo de óleo e de água em um vórtice com superfície livre, utilizou-se o *software* ANSYS FLUENT® e os resultados foram comparados com dados experimentais. O modelo VOF foi utilizado para obter o campo de corrente água-ar-óleo, a partir do modelo foi produzida estrutura do fluxo e a evolução do vórtice na superfície livre. Alguns parâmetros foram calculados, tais como: distribuição vertical do raio do vórtice, variação dos componentes de velocidade de cada fase no campo de fluxo com posição e tempo. Observou-se com esta pesquisa características do transporte de óleo através dos vórtices na superfície livre e obteve-se um método de recuperação do óleo pelas características dos vórtices.

2.3 Poluentes orgânicos (BTEX) e impactos causados ao meio ambiente e a saúde do homem

O BTEX são hidrocarbonetos aromáticos que se destacam no grupo de compostos orgânicos voláteis (COV) devido ao seu grau de toxicidade e a alta capacidade de mobilidade

em meio ambiente, podendo ser facilmente transportado através do solo, água e ar (GHELERI; TOMAZ, 2003).

Encontrados no petróleo e derivados estes compostos orgânicos voláteis são altamente nocivos ao meio ambiente, a saúde humana, devido as suas propriedades de volatilização e solubilização. Dentre os componentes do BTEX o que se destaca é o benzeno por ser o principal composto de relevância toxicológica podendo provocar diversos efeitos negativos ao meio (LOPES TIBURTIUS; PERALTA-ZAMORA; LEAL, 2004).

No momento que o petróleo atinge o solo ocorre a separação dos seus constituintes em fase dissolvida, líquida e gasosa (menor porção). A fase dissolvida migra para o lençol freático, parte da fase líquida é armazenada nos espaços porosos do solo e a fração gasosa por ser passível de evaporação ocasiona a contaminação atmosférica. Assim, este poluente é capaz de contaminar águas subterrâneas, solo e a atmosfera (NADIM *et al.*, 1999). Os impactos ocasionados pelo BTEX são negativos, prejudicando a qualidade do solo, as águas subterrâneas, além de representar um risco à saúde das pessoas que tenham contato direto ou indireto (LOPES TIBURTIUS; PERALTA-ZAMORA; LEAL, 2004).

Os piores efeitos da intervenção humana no meio ambiente são: a perda da diversidade biológica ou biodiversidade (que se refere à variedade de vida no planeta terra, incluindo a variedade genética dentro das populações e a diversidade de espécies, como a fauna, a flora e os microrganismos), as mudanças nas funções ecológicas desempenhadas pelos organismos nos ecossistemas como a variedade de comunidades, *habitat* e ecossistemas formados pelos organismos (ALMEIDA *et al.*, 2014).

A saúde humana pode ser afetada na presença do BTEX que pode ocasionar doenças, como o benzenismo (conjunto de sintomas apresentados devido a exposição ao benzeno). O diagnóstico a ser realizado é de natureza clínica - epidemiológica e baseia-se na observação dos sintomas e sinais clínicos presentes, assim como no histórico de exposição ocupacional (AMARAL *et al.*, 2017).

O BTEX é um depressor do Sistema Nervoso Central, dentre os quatro, o benzeno é classificado por organizações como *Environmental Protection Agency (EPA)* e *International Agency of Research of the Cancer (IARC)* como carcinogênico humano representando assim sérios problemas para saúde pública (LOPES TIBURTIUS; PERALTA-ZAMORA; LEAL, 2004).

De acordo com Souza (2011) o benzeno pode entrar no organismo através das vias respiratória (vapores), via oral (alimentos e água) e mais dificilmente por via cutânea, pois precisa do contato direto com o poluente líquido.

Para saúde pública a via de contaminação mais relevante é a respiratória, a parte absorvida fica acumulada principalmente em tecidos com alto teor lipídico. Dependendo do tipo de exposição e o nível de concentração pode-se ter variados sintomas, a exposição via respiratória pode levar o indivíduo a morte (elevado nível de poluente), sonolência, tontura, dores de cabeça, tremores (baixo nível de poluente) entre outros. Caso aja ingestão de alimentos ou água contaminados os sintomas são vômitos, irritação do estômago, convulsões, coma levando até a morte (BARATA-SILVA *et al.*, 2014).

Segundo Schwarzenbach; Gschwend; Imboden (2016) as propriedades físico-químicas que influenciam na mobilidade dos hidrocarbonetos são: massa molecular, solubilidade em água, pressão a vapor e lei de Henry. A concentração máxima de um composto dissolvido em água a uma determinada temperatura está relacionada com a solubilidade. A solubilidade é uma propriedade importante quando se deseja determinar a distribuição do componente em subsuperfície para moléculas altamente solúveis e a distribuição ocorre de forma rápida em água subterrânea enquanto que a volatilização é mínima (WIEDEMEIER *et al.*, 1999).

Na volatilização utiliza-se a pressão a vapor e a constante da Lei de Henry, os mesmos são parâmetros que medem a tendência de um sólido ou líquido se volatilizarem e estimam a liberação do composto para fase vapor (SCHWARZENBACH;GSCHWEND; IMBODEN, 2016).

As principais propriedades físico – químicas dos componentes do benzeno, tolueno, etilbenzeno e os variados tipos de xileno podem ser verificadas em Chiaranda (2006).

Costa; Costa (2002) estudaram o benzeno como questão de saúde pública e observaram que a exposição da população pode acontecer em ambientes ocupacionais e em ambientes não ocupacionais, trabalhos como frentistas e mecânicos de automóveis, todos estes profissionais estão expostos a concentrações elevadas deste contaminante sendo cenários preocupantes devido aos casos de leucemia retratados na literatura. Nos ambientes não ocupacionais observou-se que a população está sujeita a diversos graus de exposição aos poluentes químicos, estando presentes desde a fumaça de cigarro, emissões dos motores automotivos, indústrias químicas e postos de abastecimento de veículos.

Amaral *et al.* (2017) realizaram um estudo para verificar os danos genotóxicos relacionados a exposição ocupacional ao BTEX em trabalhadores de postos de combustíveis no

Rio de Janeiro - RJ. Foram analisadas as concentrações do BTEX no ar e exames de sangue de 97 trabalhadores. Viu-se que as concentrações do BTEX estavam de acordo com o que é padronizado na NR-15, porém, houve alterações nos exames dos trabalhadores. Os resultados deste estudo sugerem que a exposição ao BTEX, mesmo em baixas concentrações, contribui para o risco genotóxico a saúde do homem. Bezerra *et al.* (2016) avaliaram e monitoraram o aquífero subterrâneo do rio Lucaia (Bahia) contaminado pelo BTEX para determinar o impacto ambiental e a possível atenuação natural dos compostos. O estudo foi realizado em duas etapas, amostras de água foram colhidas em tempo de seca e em tempo chuvoso para que uma comparação fosse feita da concentração do poluente no meio analisado. Verificou-se que no decorrer dos meses em que as amostras foram coletadas houve uma redução significativa na concentração do BTEX, em especial o benzeno que teve uma redução de 82%.

Costa; Goldbaum (2017) verificaram que a toxicidade do benzeno é conhecida e as doenças a ela ligada vêm se ampliando. O objetivo do trabalho foi analisar as aplicações das regulações para identificar o impacto ocasionado, com o intuito de aumentar as informações relacionadas ao benzeno e as consequências ocasionadas por ele. Viu-se com a realização deste estudo que houve uma evolução na forma como é tratada a saúde dos trabalhadores no Brasil, porém a falta de estudos quantitativos e das informações existentes relacionando a contaminação ambiental e o adoecimento dos trabalhadores permanece com limitações.

2.4 Escoamentos em rios e canais

De acordo com French (2007) canal aberto é um conduto que possui uma superfície livre. A formação dos canais pode ocorrer a partir de processos naturais como em rios, estuários e riachos ou por processos artificiais como em canais para navegação, irrigação e os vales de drenagem.

O escoamento em canal aberto envolve líquidos expostos ao ar geralmente a pressão atmosférica, para este tipo de escoamento a gravidade deve ser considerada. Para escoamentos transientes outros parâmetros importantes no escoamento devem ser analisados com a inércia do líquido e a velocidade de escoamento. Nas superfícies laterais e no fundo do canal a velocidade é nula devido a condição de não escorregamento, enquanto que a velocidade máxima

ocorre no plano médio da superfície livre e variando tridimensionalmente (ÇENGEL; CIMBALA, 2007).

Isto acontece, devido ao fato dela variar em relação ao tempo e ao espaço, enquanto que nos tubos não ocorre pois o fluido preenche-o completamente (MACHADO, 2006).

A taxa de escoamento em canal aberto é determinada pelo balanço dinâmico entre a gravidade e o atrito. A superfície livre coincide com a linha piezométrica e a pressão é constante ao longo da superfície livre. A altura da superfície livre em relação ao fundo do canal varia juntamente com a velocidade média do escoamento. A pressão em um canal varia hidrostáticamente na direção vertical para escoamentos completamente desenvolvidos e constantes (ÇENGEL; CIMBALA, 2007).

Os canais abertos podem ser classificados por diferentes critérios, variando a profundidade do fluxo em relação ao tempo e ao espaço (FRENCH, 2007).

Em função do tempo os canais podem ser classificados em:

- Fluxo permanente: acontece quando a profundidade do fluxo não altera ou considera-se constante ao longo do tempo.
- Fluxo não – permanente: ocorre variação ao longo do tempo na profundidade do fluxo.

Em função do espaço os canais classificam-se em:

- Fluxo uniforme: em qualquer seção transversal do canal a profundidade do fluxo é considerada constante.
- Fluxo não uniforme ou variado: ocorre quando existe a presença de comportas ou há variações na inclinação ou seção transversal. Este tipo de fluxo é comum em ambientes naturais como os rios e em ambientes criados pelo homem como sistemas de irrigação e linhas de esgoto. O escoamento variado ainda se subdivide em escoamento rapidamente variado (RVF) que ocorre quando a profundidade do escoamento varia consideravelmente em um pequeno espaço e escoamento gradualmente variado (GVF) de modo que a profundidade varia gradualmente com a distância (ÇENGEL; CIMBALA, 2007).

O escoamento em canais ainda pode ser classificado em laminar, transição ou turbulento. Esta classificação depende da relação existente entre as forças inerciais e viscosas. O número de Reynolds (Re) é o parâmetro adimensional que relaciona essas duas forças. O escoamento é laminar quando existe uma predominância das forças viscosas sobre as forças inerciais, enquanto que no escoamento turbulento as forças inerciais predominam sobre as forças viscosas. French (2007) mostrou a seguinte classificação para canais abertos de acordo com Reynolds, $Re < 500$ – Laminar; $500 \leq Re \leq 12500$ - Transição e $Re > 12500$ Turbulento.

De acordo com Çengel; Cimbala, (2007) a velocidade média em escoamentos de canal aberto é de maneira generalizada acima de 0,5 m/s e com raio hidráulico superior a 0,1 m, portanto na maioria das vezes temos um escoamento turbulento.

Machado (2006) ainda afirma que a maioria dos escoamentos em canais abertos são turbulentos. Pesquisas experimentais e simuladas estão sendo realizadas para verificar a dispersão de efluentes em canais abertos, o efeito de variados parâmetros como concentração de poluentes, turbulência, velocidades dos fluidos e coeficiente de dispersão.

Outra forma de classificação dos canais é defini-los como subcrítico, crítico ou supercrítico, para saber qual o tipo de canal é utilizado o número adimensional de *Froude* dado por:

$$Fr = \frac{V}{\sqrt{gy}} \quad (2.1)$$

onde g é a aceleração da gravidade (m/s^2), V é a velocidade do fluido (m/s) e y a profundidade nos canais retangulares (m).

Para velocidades de escoamentos baixas ($Fr < 1$) ocorre um pequeno distúrbio que viaja a montante e afeta as condições nesta região este escoamento é conhecido como subcrítico. Para velocidades altas ($Fr > 1$) tem-se o escoamento supercrítico neste caso as condições a montante não podem ser influenciadas pelas condições a jusante e para $Fr = 1$ a onda é fixa na superfície. Outra influência é que a velocidade da onda de superfície aumenta com a profundidade do escoamento, assim em canais profundos um distúrbio de superfície se propaga muito mais rápido que em canais rasos (ÇENGEL; CIMBALA, 2007).

Os escoamentos em canal aberto formam ondas nas superfícies livres como podem ser observados em oceanos, lagos, rios e até mesmo em piscinas. Os tamanhos das ondas podem variar desde muito altas a ondas despercebidas, outras podem ser suaves e quebram na superfície. Um parâmetro importante nos casos de canal aberto é a velocidade da onda que é a velocidade na qual uma variação na superfície viaja através do líquido. O tipo de escoamento subcrítico ou supercrítico é influenciado no formato e velocidade das ondas, o escoamento em rios e canais geralmente apresentam dois comportamentos em geral é subcrítico, porém em comportas basculantes e vertedouros é supercrítico (ÇENGEL; CIMBALA, 2007).

Alguns estudos foram realizados para obter informações sobre a influência de determinados parâmetros no canal aberto tais como apresentados abaixo:

Demuren; Rodi, (1986) realizaram um estudo para obter um modelo matemático que representasse o espalhamento de poluentes em canais sinuosos. Para atingir o objetivo proposto os pesquisadores consideraram uma geometria tridimensional e a concentração dos poluentes. O modelo elaborado baseou-se nas soluções das equações de momento, da continuidade, para a turbulência o modelo adotado foi o $k-\epsilon$ e para concentração usou-se a equação de transporte. Viu-se com a realização deste trabalho que os resultados dos campos de velocidade e concentrações dos poluentes mostraram boa concordância. A turbulência provocou efeitos significativos na geometria que tinha um menor diâmetro.

Park *et al.* (2009) realizaram um estudo com o intuito de propor um método híbrido de ajuste do nível VOF para escoamentos bifásicos e incompressíveis. A movimentação da superfície livre é representada por um algoritmo VOF que utiliza esquemas de diferenciação de alta resolução para preservar algebricamente a nitidez da interface e a condição da fração de volume. Os pesquisadores realizaram testes de verificação da precisão e convergência do método adotado. Verificou-se que os resultados gerados apresentaram boa concordância entre as soluções numéricas e os dados experimentais.

Khaldi *et al.* (2014) estudaram a dispersão de poluentes em um canal considerando os efeitos de um sistema bifásico e turbulento. Para a realização deste estudo o método de volumes finitos foi escolhido. Diferentes geometrias foram utilizadas e analisadas para observar a influência de um obstáculo na dispersão do poluente. Verificou-se com a realização desta pesquisa que a geometria que possuía um obstáculo ocasionou um maior tempo de permanência do poluente no fundo do canal, outro parâmetro analisado foi a forma de injeção do poluente, o método de pulsação teve um papel importante no estágio inicial do transporte, gerando um aumento da dispersão longitudinal do poluente injetado.

Kamel *et al.* (2014) realizaram um estudo com o objetivo de desenvolver um método numérico para prever o comportamento da vazão nas regiões de curvaturas em rios com profundidades variadas. O modelo de turbulência usado foi o $k-\epsilon$, o modelo numérico 3D foi usado para calcular o fluxo em coordenadas cilíndricas e o algoritmo SIMPLE foi usado para fazer o acoplamento entre velocidade e pressão. Os autores concluíram que o modelo de turbulência apresentou bons resultados na análise de estruturas de fluxo, transporte de poluentes e distribuição de velocidade. Viu-se ainda que o estudo de canais abertos é desafiador com

previsão extremamente difícil devido ao fluxo transitório, turbulento, com geometria irregular e a elevação da superfície livre com o tempo.

Lopes (2016) realizou um trabalho experimental em um canal hidráulico para determinar a capacidade de transporte e dispersão de efluentes solúveis com o uso de técnicas de campo para aplicação do traçador realizando uma injeção contínua. Para a realização desta pesquisa foi realizada uma restauração de um canal hidráulico retangular e foi feita a quantificação do coeficiente de dispersão através de dez métodos matemáticos. Como resultado deste estudo foi possível observar a formação da pluma e o momento de sua estabilidade. O coeficiente de dispersão foi obtido através das equações encontradas na literatura e uma equação empírica foi criada para o caso estudado dando uma maior precisão no coeficiente de dispersão.

2.5 Dispersão de efluentes: no meio aquoso e atmosférico

Segundo Machado (2006) a dispersão pode ser conceituada pela ocorrência da difusão molecular e/ou turbulenta e da convecção provocando o fenômeno de transporte de efluentes. O transporte por difusão acontece quando as moléculas do efluente se dispersam entre as camadas do fluido devido ao gradiente de concentração em diferentes regiões do escoamento. Enquanto que, o transporte por advecção acontece devido aos componentes de velocidades presentes no meio.

A dispersão de poluentes é um problema típico em poluição das águas podendo ser dividido em dois grupos. O primeiro grupo está relacionado as situações que descrevem problemas com despejos de poluentes instantâneos que formam manchas, estas por sua vez são transportadas pelas águas e sofrem processos simultâneos difusão, advecção, degradação, evaporação ou precipitação. O segundo grupo é formado por problemas estacionários de modo que uma carga poluente contínua é lançada em um corpo hídrico, considerando-se o campo de velocidade permanente e o termo temporal da equação advecção – difusão é nulo (NEVES, 2012).

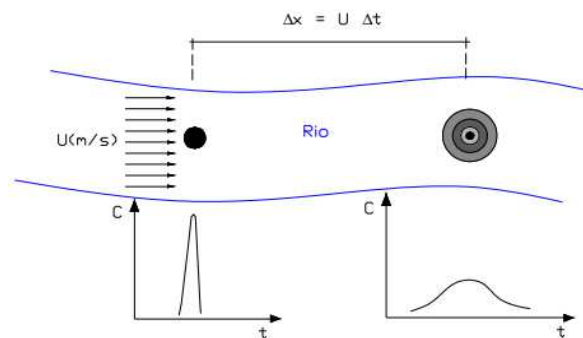
A Figura 2-3 ilustra de que maneira os processos de difusão e advecção agem no meio, de modo que o fluxo advectivo é responsável pelo deslocamento Δx e o espalhamento do poluente é ocasionado pelo processo difusivo (RIBEIRO, 2007).

No processo advectivo o contaminante é carregado pelas águas na velocidade delas e o pico de concentração geralmente não tem modificação como apresentado na figura 2-3 observa-se ainda na imagem que no processo difusivo ocorre o espalhamento do poluente a partir das forças de natureza intermolecular, para esta situações verifica-se que o pico da concentração altera-se havendo uma redução dela com o passar do tempo.

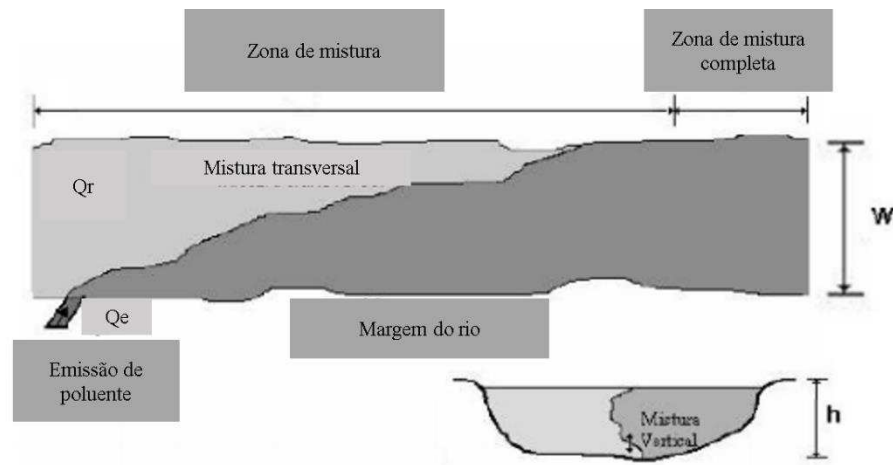
A Figura 2-4 apresenta um esquema da dispersão de efluentes industriais em rios. A partir da imagem é possível perceber que o efluente é lançado a uma vazão constante (Q_e) na lateral do rio que escoar também a uma vazão constante (Q_r). Conforme o efluente percorre o rio a pluma se forma e vai se expandindo ao longo da zona de mistura até atingir um estágio que não há mais dispersão significativa. Os processos de advecção e difusão atuam no transporte de poluentes nos meios aquáticos, atmosféricos ou nos solos, de modo que o primeiro atua diretamente no deslocamento e o outro no espalhamento, respectivamente.

A dispersão é uma propriedade que vem sendo avaliada por variados pesquisadores, devido a sua capacidade de transporte de fluidos e propagação de diferentes poluentes como: compostos orgânicos, inorgânicos, metais, resíduos, entre outros.

Figura 2-3- Substância solúvel injetada instantaneamente em um escoamento uniforme e laminar, processos advectivo e difusivo.



Fonte: Ribeiro (2007).

Figura 2-4- Dispersão de efluentes industriais em rios.


Fonte: Machado (2006).

Fortis (2005) estudou via modelagem computacional, a análise do processo de dispersão de efluentes em corpos d'água, e como suporte na decisão das agências ambientais e dos processos industriais mediante a exigência da legislação. Os *softwares* utilizados foram o *FLUENT* e o *CORMIX*. O *CORMIX* apresentou resultados da dispersão extremamente conservadores, onde o padrão de qualidade da água só foi atingido a grandes distâncias de lançamentos (200 m), enquanto que o *FLUENT* apresentou resultados de acordo com os estudos de monitoramento da qualidade da água e de diluição de traçadores atingindo o padrão de qualidade das águas a poucos metros (15 m).

Machado (2006) aplicou a fluidodinâmica computacional tridimensional para simular a dispersão de substâncias solúveis em rios. Foram utilizados o método de volumes finitos, o modelo algébrico de turbulência da ordem zero, o modelo de Streeter – Phelps para prever a concentração de substâncias orgânicas. Observou-se ainda o efeito da ocorrência de múltiplos pontos de emissão no trecho estudado. Viu-se com este trabalho que a metodologia aplicada foi uma boa ferramenta para a avaliação de impactos ambientais causados pela emissão de efluentes em rios. Os resultados experimentais apresentaram boa concordância com os dados obtidos no modelo.

Duarte & Boaventura (2008) estudaram o comportamento dispersivo do poluente *Rhodamine WT* nos rios: Mondego, Douro e Tejo, cujo objetivo foi avaliar o transporte de

poluentes em diferentes trajetórias. Os autores concluíram que a modelagem matemática é uma ferramenta útil na análise de dispersão de poluentes em meios aquáticos

Battle-Aguillar *et al.* (2009) realizaram um estudo experimental em uma planta coqueiral com o objetivo de avaliar a atenuação de poluentes em um aquífero aluvial contaminado. A partir da obtenção dos dados verificou-se a presença de variados compostos orgânicos e inorgânicos com concentrações acima do que é regulamentado. Nos compostos orgânicos o que mais gerou preocupação foi o benzeno, isto ocorreu devido ao nível elevado de concentração e a sua alta capacidade de mobilidade.

Ani *et al.* (2010) estudaram o desenvolvimento de dois modelos matemáticos para o transporte não conservador de nitrato e amônia em condições instáveis. As análises foram realizadas em duas perspectivas: o transporte de poluentes em circunstâncias usuais e em acidentes com liberação dos poluentes. O local de estudo foi o rio Swale na Inglaterra, de modo que as fontes lançadas foram pontuais e múltiplas. Na realização da pesquisa considerou-se os parâmetros reais do rio estudado tais como: velocidades, coeficiente de dispersão e vazões. Os modelos propostos mostraram-se eficientes para a obtenção da concentração de poluentes para casos usuais e acidentais, sendo útil também na gestão de qualidade da água.

Mariano *et al.* (2010) aplicaram as técnicas de condutividade elétrica e a simulação computacional com o objetivo de avaliar a dispersão de um resíduo líquido oriundo de uma refinaria de petróleo presente no meio aquoso. A partir do estudo observou-se que os resultados apresentados pela condutividade elétrica foram adequados para a avaliação de dispersão de efluentes líquidos e o comportamento da dispersão do resíduo obtido através da simulação computacional apresentou aspectos semelhantes ao do método de condutividade.

Meddah *et al.* (2015) aplicaram uma técnica numérica espacial e temporal que se baseia em redes elétricas, conhecida por método de matriz de linha de transmissão (TLM) para estimar a dispersão dos poluentes em rios. Para validar o modelo os resultados foram comparados com os dados experimentais obtidos no estudo realizado por Atkinson; Davis, (2000) que analisaram a dispersão do *Rhodamine WT* 40 g/l por 107 s ao longo do rio Severn em Gales (Reino Unido). Verificou-se com o trabalho que o modelo proposto de TLM unidimensional fornece uma boa estimativa na dispersão dos poluentes longitudinais, este modelo superestima os valores de velocidade e os coeficientes de dispersão, porém, descreve bem a evolução das concentrações máximas ao longo do tempo, essa superestimação pode ser explicada devido a fatores como rugosidade, topografia, geometria e zonas mortas que interferem diretamente na mancha do poluente.

Vidal *et al.* (2015) desenvolveram uma metodologia para avaliar o comportamento do transporte de poluentes em rios naturais sujeitos a diferentes tipos de lançamentos. Utilizou-se a teoria de transporte de massa para avaliar os campos de concentração de substâncias poluentes em função do tempo e do espaço, verificando a influência de parâmetros como declividade do fundo do canal e rugosidade. Viu-se com a realização deste trabalho que o comportamento da concentração é influenciado pelas características hidráulicas do canal e que quanto maior o coeficiente de rugosidade menor é a propagação da nuvem de poluente.

Fan; Bravo; Collischonn (2016) estudaram a dispersão de poluentes em cursos d'água empregando modelos baseados em agentes que possui linguagem de programação própria e uma interface visual que permite o acompanhamento das simulações. Suposições foram levantadas para representar os fenômenos de advecção, dispersão e decaimento de primeira ordem no modelo. Os resultados foram comparados com os da solução analítica unidimensional da equação advecção – dispersão e apresentaram uma boa concordância dos resultados.

Batista; Harari (2017) avaliaram os efeitos das ações antrópicas no sistema costeiro de Ubatuba (SP). Utilizou-se modelos para descrever as reações e mecanismos presentes no processo de dispersão de coliformes termotolerantes e enterococos, na modelagem foi usado o *software Delft3D*. Foi observado com a realização deste trabalho que o sistema de correntes nas enseadas não permite a diluição e dispersão, porém, a circulação marinha permite o decaimento das bactérias, difundindo e diminuindo a concentração ao longo da enseada.

Oliveira *et al.* (2017) estimaram o coeficiente de dispersão longitudinal para dois cursos d'água de pequeno porte. Foram utilizados métodos de campo de estímulo – resposta e o método de propagação, o traçador escolhido foi o salino. Desenvolveu-se ainda uma equação semiempírica a partir da análise dimensional da técnica de regressão linear múltipla para que o coeficiente de dispersão fosse determinado. A equação desenvolvida foi comparada com outras presentes na literatura e viu-se que ela gerou bons resultados com uma acurácia de 71%.

Radu *et al.* (2017) realizaram uma comparação entre dados experimentais e simulados para estudar a dispersão de poluentes (níquel, chumbo, cromo, cádmio e cobre) no rio Danúbio. Foi desenvolvido um modelo matemático para analisar dois cenários (cenário de referência e cenário acidental). A determinação dos metais pesados foi realizada a partir da espectrofotometria de absorção atômica e a simulação foi feita pelo *software Delft3D*, considerou-se um ambiente de estudo complexo. Observou-se que o modelo utilizado representou de maneira satisfatória o fenômeno estudado e que o coeficiente de dispersão calculado indicou um declínio na dispersão na região que existia um encontro de águas.

Ferreira (2019) estudou a concentração de potenciais contaminantes (coliformes fecais e nutrientes), em condições extremas, e a dispersão de plumas dos efluentes desses emissários. Observou-se com a realização deste estudo que as simulações hidrodinâmicas foram consistentes com a literatura e a modelagem do campo próximo ao lançamento teve influência das correntes de transporte e diluição inicial das plumas, para os campos distantes viu-se que as concentrações não excederam o determinado pelo Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA).

Machado *et al.* (2019) propuseram um modelo analítico bidimensional transiente cujo objetivo foi estudar o fenômeno de dispersão de poluentes em um corpo hídrico fazendo comparativos com os dados experimentais. Para obtenção da solução analítica utilizou-se o método de separação de variáveis com uma transformação de similaridade. Uma das simplificações adotadas foi considerar constantes os parâmetros turbulentos. Viu-se com a realização desta pesquisa que a metodologia abordada foi capaz de reproduzir o fenômeno da dispersão adequadamente.

Pengpom *et al.* (2019) estudaram as dispersões e concentrações de poluentes em um modelo bidimensional simulados em um rio na Tailândia. Os autores observaram que a temperatura tem influência direta na concentração do poluente caso as velocidades de entrada dos fluidos forem elevadas, as velocidades de entrada dos canais são parâmetros importantes para remoção do poluente nas águas dos rios. Observou-se ainda que quando as velocidades de entrada dos canais são mais elevadas que a velocidade do rio é mais fácil a remoção deste poluente.

Ramezani *et al.* (2019) realizaram um estudo comparativo das equações utilizadas para calcular os coeficientes de dispersão longitudinal (D_x) para transporte de solutos em rios. Foi utilizado o método de diferenças finitas para discretizar a equação de transporte da matéria para representar a dispersão do componente. Foi testada uma solução analítica para equação (ADE) e comparado o uso de oito fórmulas para encontrar o coeficiente de dispersão longitudinal. A pesquisa mostrou que o coeficiente de dispersão longitudinal tem influência nas concentrações do poluente usando a ADE. O estudo comparativo mostrou êxito nas equações propostas por Zeng e Huai para estimar o D_x , enquanto que as demais equações estudadas pode aumentar a precisão da resolução da ADE.

Yang; Harari; Braga, (2019) estudaram o monitoramento da dispersão de plumas de efluentes provenientes dos emissários submarinos, a partir do *software Delft3D* e o modelo usado foi o *Visual plumes*. Viu-se a partir dos resultados que a modelagem do campo próximo

indicou que as correntes geradas pelo vento foram mais eficientes do que as correntes de maré na diluição inicial das plumas dos emissários e as concentrações dos potenciais poluentes de todas as plumas não ultrapassaram os limites máximos estabelecidos pelo Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA).

Nguyen *et al.* (2020) estudaram a dispersão do NH_4^+ presentes em águas residuais provenientes da drenagem urbana na cidade de Vietnã. Na área de estudo as águas residuais são descartadas diretamente no ambiente aquático sem qualquer tratamento. Para realização deste estudo utilizou-se os *softwares* Mike Urban e Mike 21 FM EcoLab. Eles foram escolhidos devido a possibilidade de simular conjuntamente o comportamento do sistema do esgoto, a qualidade da água que os recebe, a liberação e produção dos poluentes. Com a realização deste trabalho viu-se que em períodos de seca a concentração da amônia foi superior ao que é permitido de acordo com a regulamentação técnica e nos períodos chuvosos houve uma maior dispersão do traçador, porém ainda presente em elevadas concentrações.

Silva; Martins; Romão (2020) estudaram a dispersão de poluentes no rio Paraíba do Sul cujo objetivo era verificar a influência da geometria do rio e das entradas dos efluentes sobre a vazão do rio. O *software* comercial utilizado para realização deste trabalho foi o COMSOL MULTIFÁSICO e realizou-se uma simulação bidimensional. Os resultados mostraram que as variações das geometrias das entradas dos efluentes alteravam a dispersão do poluente ao longo do rio.

A dispersão de poluente pode acontecer também no meio atmosférico. Alguns pesquisadores estudaram a dispersão do contaminante no ar. Schmitz (2005) estudou a dispersão de monóxido de carbono (CO) em Santiago – Chile para avaliar a advecção - difusão usando o modelo de dispersão da poluição do ar (CADM). Verificou-se com o estudo que os modelos foram capazes de reproduzir as principais características do ambiente, assim como, as mudanças espaciais e temporais. Com relação à dispersão de CO, viu-se que no mês de janeiro a dispersão aconteceu com maior propagação na direção horizontal e vertical.

Sharan; Kumar (2009) estudaram um modelo analítico cujo objetivo era descrever as concentrações transversais integradas da dispersão de poluentes emitidos a partir de uma fonte contínua na camada limite atmosférica. Eles resolveram a equação advecção – difusão, considerando o sistema estacionário e bidimensional. A velocidade horizontal do vento foi em função da altura vertical acima do solo e a difusividade turbulenta da distância a jusante da fonte e da altura em relação ao solo. Viu-se com a realização deste trabalho que os resultados

mostraram uma boa concordância do experimental com o analítico, fazendo com que o modelo utilizado seja usado para prever uma pequena faixa da dispersão a partir de uma fonte contínua.

Guerrero *et al.* (2012) pesquisaram sobre a dispersão de gases poluentes (CO e NO) emitidos por uma termelétrica de gás natural. A dispersão dos poluentes foi simulada utilizando o modelo AERMOD e a pluma de poluente foi obtida a partir do método de pluma gaussiana simples. Concluiu-se com a realização deste trabalho que a partir da comparação dos modelos o que melhor estimou a distribuição dos poluentes foi o AERMOD que apresentou como vantagem considerar os dados mais críticos, as mudanças de velocidade e direção do vento. Este modelo apresentou resultados satisfatórios com relação a dispersão de poluentes atmosféricos num raio de 50 km da fonte.

Leelössy *et al.* (2014) realizaram uma revisão bibliográfica sobre a modelagem matemática da dispersão de poluentes na atmosfera. Os modelos de dispersão estudados foram: Gaussiano, Euleriano e Lagrangeano. O modelo Gaussiano tem um tempo de resposta rápida devido à redução dos cálculos, neste modelo utiliza-se apenas uma fórmula para cada ponto receptor, para situações com baixas velocidades do vento onde a difusão tridimensional é considerada, o uso deste modelo é inviável. O modelo Lagrangeano calcula a trajetória do poluente atmosférico impulsionados pelo efeito dos ventos e da turbulência, a distribuição final das partículas fornece uma estimativa do campo de concentração, sendo indicado para simulações de curto alcance e com alta resolução. E por fim, o modelo Euleriano que está baseado na resolução da equação de transporte do poluente em coordenadas fixas, o método está baseado na discretização espacial e temporal.

Mărunțălu; Lăzăroi; Bondrea (2015) investigaram a distribuição de poluentes como SO_x, NO_x e PM₁₀, espacial e temporalmente. Foi utilizado o *software* FlexPDE para obter uma estimativa da gravidade da poluição do ar a partir do monitoramento desses poluentes. Observou-se com a realização deste estudo que a concentração permanece constante com a modificação da altura das fontes de emissão, já a deposição dos poluentes no solo varia no espaço com a variação da altura.

Martins; Fortes; Lessa (2015) estudaram diversos modelos de qualidade para verificação da dispersão de poluentes atmosféricos emitidos por veículos no Brasil e no mundo. Viu-se que para maioria dos modelos utilizados, os dados de entrada foram direção e velocidade do vento, classe de estabilidade da atmosfera, altura da camada da mistura, taxas de emissão e rugosidade de solo.

Abiye *et al.* (2016) pesquisaram estimativas baseadas em modelos de dispersão de poluentes gasosos (SO_x e NO_x) liberados de uma fábrica de reciclagem localizada na Nigéria. Foram utilizados dados meteorológicos acoplados a um sistema avançado baseado no modelo de Gauss (AERMOD). Concluiu-se com a realização do trabalho que em períodos diurnos a ocorrência de concentração foi superior ao permitido e locais dentro de um raio de 1,5 km da fábrica de reciclagem foram mais atingidos pelos impactos da liberação dos gases.

Gadelha (2016) estudou o processo de dispersão de poluentes a partir de uma chaminé de usina termelétrica sob diferentes condições de estabilidade. As simulações numéricas foram realizadas no ANSYS CFX 15.0 e o modelo de turbulência adotado foi o $k - \epsilon$ padrão. O autor verificou que o modelo matemático usado foi capaz de prever o comportamento do fenômeno de dispersão de espécies químicas emitidas na atmosfera. Observou-se ainda que as propriedades de maior influência no processo de dispersão foram: velocidade do vento (convecção) e a taxa de emissão do poluente. Comprovou-se que quanto maior a velocidade do vento maior a taxa de dispersão fazendo com que aja uma redução na concentração próximo as fontes de emissão.

Moreira; Albuquerque (2016) analisaram alguns dos modelos matemáticos de difusão de poluentes na atmosfera com o intuito de mostrar a importância do uso dos mesmos como ferramenta para gestão ambiental. Os autores concluíram que os modelos matemáticos são importantes ferramentas para auxiliar na medição das concentrações e para realizar o acompanhamento da evolução destas, viram ainda que quando o modelo apropriado é escolhido pode-se analisar a ação das fontes poluidoras e aplicar medidas corretivas.

2.6 Classificação dos poluentes

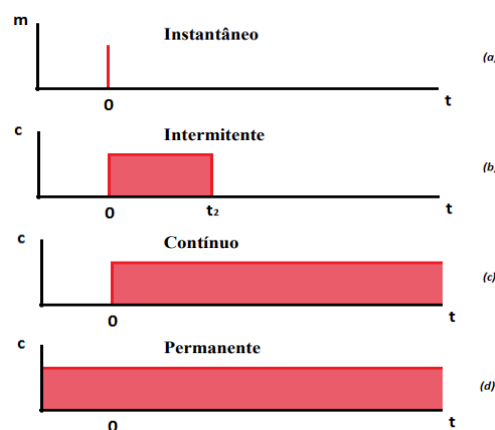
Os tempos de início e término de lançamentos de poluentes são os parâmetros avaliados para que uma classificação seja padronizada. A Figura 2-5 apresenta os principais tipos de lançamentos que são: instantâneo, intermitente, contínuo e permanente.

O tipo instantâneo é mostrado na Figura 2-5 (a) tem-se despejos de uma fonte pontual, para o tempo da análise muito grande em comparação com a duração do despejo. O lançamento é considerado intermitente quando é realizado em uma duração não muito pequena, porém finita como é apresentado na Figura 2-5 (b). O lançamento contínuo é identificado na 2-5 (c) o tempo

inicial é determinado, porém o tempo final não, sendo considerado contínuo. E o lançamento permanente (Figura 2-5 (d)) é aquele que não tem tempo inicial nem tempo final definido. Todos esses comportamentos podem ocorrer a partir de um fonte pontual (FAN, 2013).

Fan (2013) apresentou exemplos práticos para cada tipo de lançamento como: lançamento instantâneo derramamento de um caminhão que cai de uma ponte, lançamento intermitente derramamento de efluente em uma bacia de contenção, lançamento contínuo em um momento específico um efluente é despejado em um rio e o lançamento permanente um efluente sendo despejado 24 horas em uma bacia hidrográfica.

Figura 2-5- Classificação dos lançamentos de poluentes.



Fonte: Fan (2013).

Abrahão (2006) afirmou que existem basicamente duas formas de atingir o meio aquoso através da poluição pontual e a poluição difusa. A poluição pontual tende a atingir os corpos d'água de forma concentrada e no espaço, um exemplo prático é o despejo de esgotos em um rio. Enquanto, a poluição difusa faz com que os poluentes entrem no rio e sejam distribuídos ao longo de toda extensão do ambiente, como a poluição veiculada pela drenagem pluvial natural.

Diversos são os tipos de lançamentos que provocam o derramamento de substâncias nos corpos d'água, durante o transporte de tais poluentes variados processos ocorrem como: dispersão, advecção, difusão e decaimento. O processo de dispersão acontece longitudinalmente quando a mistura está completa, assim, para os rios o sentido principal da dispersão é o longitudinal (FAN, 2013).

Para os lançamentos permanentes na maioria das vezes o processo de dispersão é desconsiderado, justifica-se que para este tipo de lançamento são gerados pequenos gradientes

de concentração e dispersão. Para lançamentos não permanentes desconsiderar a dispersão longitudinal é um erro significativo, pois mesmo em casos que o processo advectivo prevaleça ocorre alguma dispersão (CHAPRA, 1997).

2.7 Barreiras de contenção

Derramamentos de óleos tendem a causar grandes impactos ambientais, econômicos e sociais. Mediante a magnitude e complexidade é preciso que intervenções imediatas dos órgãos locais, regionais, nacionais ou internacionais sejam tomadas para que uma resposta rápida venha ser obtida.

Os acidentes na indústria petrolífera decorrentes de vazamento de derramamento de óleo conduzem a desafios contínuos para as empresas e os órgãos reguladores. Assim há a necessidade de implementação de novas medidas de segurança operacional para que a legislação esteja cada vez mais rigorosa, visando eliminar ou minimizar os acidentes decorrentes dos vazamentos.

Um instrumento utilizado é o Plano Nacional de Contingência (PCN) usado para vazamentos de óleo, tendo como conteúdo o planejamento local, regional e até nacional. O PCN deverá ser acionado em casos de acidentes de grandes proporções, nele são previstas ações a serem tomadas como resposta para situações de emergência.

De acordo com Michel e Benggio (1999) a técnica escolhida para contenção dos poluentes deve ser adequada a situação, não pode ser mais impactante que o próprio poluente e deve proporcionar rápida recuperação do meio. Uma ferramenta aplicada para escolher a técnica é a Análise de Benefício Ambiental Líquida (NEBA) que realiza uma comparação a partir de valores atribuídos para as vantagens e desvantagens de cada método.

As barreiras de contenção ou flutuantes são métodos aplicados. Elas são usadas com intuito de reter e concentrar o óleo espalhado, para que possa ser removida mecanicamente por um recolhedor. Os componentes presentes para que esta técnica seja alcançada são: a barreira flutuante, um recolhedor e uma bomba de transferência da mistura água e óleo. As barreiras de contenção estão disponíveis em modelos variados e a escolha está ligada a fatores como cenário acidental, as condições ambientais (maré, ventos), tipo de poluente e cenário acidental.

Embarcações são usadas para lançar e colocar as barreiras no destino final (MICHEL e BENGGIO, 1999).

2.8 Escoamentos multifásicos

Em diversas atividades como na indústria petrolífera, de alimentos, geração de materiais e na própria natureza são encontradas misturas de fases. Na matéria as fases são conhecidas como sólida, líquida e gasosa, mas no sistema multifásico este conceito é mais amplo, uma fase pode ser definida como uma classe de matéria identificável com resposta inercial particular e interação com o fluxo e o campo ao qual está imerso (ANSYS FLUENT, 2013).

O termo escoamento multifásico é utilizado quando mais de uma fase escoam simultaneamente, ou seja, tem-se a presença de dois ou mais fluidos imiscíveis separados entre si por uma interface, exemplos de escoamento multifásico estão presentes em diversos tipos de atividades e fenômenos naturais. De acordo com Rodriguez (2011) erosão do solo, dunas, sedimentação, formação de nuvens e evaporação da água são exemplos de fenômenos naturais multifásicos.

Segundo Santos (2010) as leis que regem este tipo de escoamento são as equações diferenciais parciais não lineares que podem ser resolvidas através das técnicas da Fluidodinâmica Computacional (CFD) isso porque são não lineares e não possuem solução analítica. O equacionamento do escoamento multifásico é feito em termos das equações de conservação da massa, conservação da energia e da conservação da quantidade de movimento.

O escoamento multifásico pode ser classificado em diferentes formas como citado por Leite (2016), Tavares (2012), Santos (2014) e Barbosa (2012).

O escoamento multifásico apresentado em dutos envolve diferentes tipos de fluidos (líquidos e gases). Os diferentes padrões de fluxo dependem de fatores como: vazões de fases, diâmetro de inclinação dos dutos, tensão superficial, rugosidade, viscosidade e densidades dos fluidos. Os tipos gerais de fluxos observados em estudos como o realizado por Trevisan (2003) são: bolhas estratificadas, bolhas dispersas e anular.

Andrade (2013) estudou numericamente o transporte de água e óleo em dutos horizontais e dutos com conexão T empregando a técnica *core annular flow*. As condições aplicadas foram o escoamento bifásico para tratar a água – óleo, transiente, isotérmico, não

isotérmico e modelo de turbulência $k - \epsilon$. O autor verificou com este estudo que houve uma redução na pressão de 90% (para a conexão T com cantos vivos) até 96% (para o duto curvado) durante o escoamento bifásico em situações que havia uma película de água próximo as paredes da tubulação quando comparado com o escoamento monofásico de óleo pesado para as mesmas condições operacionais.

Guerrero; Muñoz; Ratkovich (2017) estudaram a caracterização do fluxo bifásico e analisaram as principais diferenças causadas pelos modelos VOF e o Euleriano. Observou-se na realização desta pesquisa que a formulação matemática destes modelos teve diferenças na convergência, na precisão e no tempo computacional. Comparando com os dados experimentais viu-se que o modelo VOF gerou erro quadrado médio superior ao modelo Euleriano, o desempenho do modelo Euleriano não dependeu da malha gerando um menor tempo computacional e apenas o VOF previu o fluxo padrão.

2.9 Modelagem no escoamento multifásico

Neste tópico será abordada a fundamentação teórica da modelagem matemática de escoamentos multifásicos. O modelo matemático de escoamento de fluidos divide-se em: equações de conservação (massa, quantidade de movimento e energia), condições iniciais, condições de contorno e pelas equações constitutivas que estabelecem relações entre o campo de tensões e o campo de velocidades do escoamento. As soluções analíticas para as Equações de Navier - Stokes são ainda desconhecidas e as numéricas, podem apresentar elevado custo computacional. Então, utiliza-se modelos matemáticos baseados em valores médios de Navier - Stokes para cada fase do escoamento.

2.9.1 Equação da conservação da massa

A Equação (2.2) descreve a forma geral da equação da conservação da massa, podendo ser aplicada tanto em escoamentos compressíveis como em incompressíveis (ANSYS FLUENT, 2013).

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \nabla \cdot (\rho \vec{V}) = S_m \quad (2.2)$$

Onde ρ corresponde a massa específica, \vec{V} o vetor velocidade e S_m o termo fonte de massa.

2.9.2 Equação da quantidade de movimento linear

A Equação da conservação da quantidade de movimento considerando um referencial inercial é dada por:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \vec{V}) + \nabla \cdot (\rho \vec{V} \vec{V}) = -\nabla p + \nabla \cdot (\bar{\tau}) + \rho \vec{g} + \vec{F} \quad (2.3)$$

De modo que: p corresponde a pressão estática, τ ao tensor de tensões, $\rho \vec{g}$ a força gravitacional do corpo e F as forças externas do corpo.

O tensor τ é dado pela equação (2.4):

$$\bar{\tau} = \mu \left[(\nabla \vec{v} + \nabla \vec{v}^T) - \frac{2}{3} \nabla \cdot \vec{v} I \right] \quad (2.4)$$

Sendo o μ a viscosidade molecular e I o tensor unitário.

2.9.3 Equação da energia

A Equação da energia é apresentada na equação (2.5).

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho E) + \nabla \cdot (\vec{v}(\rho E + p)) = \nabla \cdot (k_{eff} \nabla T - \sum_j h_j \vec{J}_j + (\bar{\tau}_{eff} \cdot \vec{v})) + S_h \quad (2.5)$$

Onde: k_{eff} corresponde à condutividade efetiva; \vec{J}_j o fluxo de difusão das espécies e S_h o calor da reação química e quaisquer outras fontes de calor.

2.10 Ação da turbulência em escoamentos

A maioria dos escoamentos encontrados na natureza apresentam comportamento turbulento, tais como em canais abertos, rios e tubulações. Sendo assim é de fundamental importância considerar o efeito da turbulência para entender melhor os fenômenos que acontecem nesses meios. De acordo com Simões (2009) algumas características do escoamento turbulento são:

- Aleatoriedade (escoamentos irregulares, caóticos e imprevisíveis);
- Escoamento altamente não linear;
- Difusivos (devido a mistura macroscópica das partículas de fluido, este tipo de escoamento é caracterizado por uma rápida taxa de difusão e calor);
- Vorticidade (presença de turbilhões, estruturas coalescentes, divididas, alongadas e rotatórias);
- Dissipativos (o alongamento dos vórtices transfere energia e vorticidade para o aumento das menores escalas, até que o gradiente se torne tão grande que se espalhe ou dissipe pela viscosidade, portanto o escoamento turbulento necessita de um constante suprimento de energia para compensar as perdas viscosas.

Conforme Souza *et al.* (2011) as características dos movimentos turbulentos são as flutuações instantâneas de velocidade, temperatura e quando presentes em um fluido contribuem significativamente no transporte de *momentum*, calor e massa, tendo influência direta na distribuição dessas propriedades durante o escoamento.

O transporte de poluentes pode ser acelerado em ambientes que existem a ação da turbulência, a qual provoca um aumento no efeito de dispersão do contaminante (MACHADO, 2006).

Uma teoria foi proposta por Boussinesq que relacionava o gradiente local de velocidade do escoamento médio, a viscosidade associada a geometria e particularidades do escoamento. A esquematização de escoamentos turbulentos usa de forma contínua a hipótese de Boussinesq, a qual emprega a resolução de equações diferenciais parciais utilizadas na modelagem de problemas ambientais, com a vantagem de depender apenas das variáveis: tensão de atrito e viscosidade turbulenta.

O intuito de utilizar a viscosidade turbulenta é a inclusão dela na equação de conservação de quantidade de movimento. De maneira semelhante, na equação de transporte de massa pode ser introduzida a difusividade turbulenta (MACHADO, 2006).

Para escoamentos com elevadas velocidades livres observa-se uma maior turbulência e tendem a apresentar uma interface ar – água com maior área superficial. Na interface ocorre uma taxa de troca de gases sendo proporcional a área da superfície, a turbulência aumenta a intensidade com essas trocas. Assim, o oxigênio penetra na superfície da água de maneira mais rápida e os gases deixam o meio aquático mais rapidamente (MACHADO, 2006).

Cunha *et al.* (2011) realizaram um estudo para avaliar o comportamento hidrodinâmico e a dispersão de poluentes no rio Matapi – AP. Foi considerado o efeito das marés e o regime transiente. Os autores concluíram que o modelo de turbulência híbrido SST mostrou-se eficiente e capaz de descrever o escoamento hidrodinâmico esperado. Foi observado na região estuarina diferentes mecanismos de dispersão, bem como, diferentes áreas de risco devido o acúmulo de poluentes ao longo de vários lançamentos e ciclos de marés.

Krim e Hamza (2015) avaliaram o efeito da poluição originada a partir de uma fonte intencional descarregada nas águas do rio. Os autores objetivaram prever um modelo hidrodinâmico para explorar o fenômeno da dispersão do poluente injetado em superfície livre. O trabalho mostrou que o modelo VOF e o modelo k- ϵ forneceram bons resultados comparados com os dados experimentais. Com relação a dispersão de poluentes viu-se que ela é influenciada principalmente pelos vórtices de turbulência.

2.10.1 Modelos de turbulência

Bardina; Huang; Coakley (1997) classificaram os modelos de turbulência em:

- Modelo de tensão de Reynolds ou modelo de fechamento de segunda ordem: determina o número de equações de modelos parciais diferenciais que são requeridas para definir as escalas turbulentas;
- Modelo de tensão algébrica: determina o número de diferenciais ordinárias ou outros modelos de equações diferenciais não – parciais requeridos para definir a escala turbulenta;
- Modelo de uma equação: emprega a hipótese de viscosidade turbulenta e a equação diferencial de transporte para se determinar uma propriedade turbulenta (em geral a

energia cinética – k) e a segunda propriedade obtida através de equação algébrica, normalmente o comprimento de escala;

- Modelo de duas equações: utiliza-se duas equações diferenciais de transporte de propriedades, sendo um para energia cinética turbulenta (k) e outra para taxa de dissipação de energia cinética turbulenta por unidade de massa (ϵ) ou uma frequência de passagem de grandes estruturas turbulentas (ω). Os modelos de duas equações foram lançados com o propósito de contornar as limitações dos modelos algébricos e de uma equação.

No modelo k- ϵ assume-se que os tensores de Reynolds são proporcionais aos gradientes de velocidade média, com a constante de proporcionalidade sendo caracterizada pela viscosidade turbulenta. Estes tipos de modelos têm como características modelar duas equações de transporte, sendo resolvidas separadamente para o comprimento e a escala de tempo ou para outras combinações linearmente dependentes entre elas.

2.10.1.1. Modelo de turbulência k- ϵ padrão

O modelo k- ϵ padrão é o de duas equações, sendo amplamente utilizado em simulações industriais, apresenta boa robustez e precisão. É um modelo de viscosidade turbulenta e assume-se que os tensores de Reynolds são diretamente proporcionais aos gradientes de velocidade média, de modo que a constante de proporcionalidade é caracterizada pela viscosidade turbulenta (ANSYS FLUENT, 2013).

As equações de transporte que caracterizam a turbulência são a energia cinética (k) que é definida como a variância das flutuações na velocidade com dimensões e a taxa de dissipação de turbulência (ϵ) que consiste na taxa em que as flutuações de velocidade dissipam (ANSYS FLUENT, 2013). As equações de transporte para a energia cinética turbulenta (k) e a taxa de dissipação turbulenta (ϵ) são:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k V_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_K + G_b - \rho \epsilon - Y_M + S_k \quad (2.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho\varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho\varepsilon V_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} + S_\varepsilon \quad (2.7)$$

onde G_K representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média, G_b é geração de energia cinética turbulenta devido a flutuabilidade, Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível para taxa de dissipação geral. σ_k e σ_ε são os números de Prandtl para k , ε , S_k e S_ε são termos fontes.

A viscosidade turbulenta μ_t é calculada da seguinte maneira:

$$\mu_t = \rho C_\mu \frac{k^2}{\varepsilon} \quad (2.8)$$

De modo que $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, $C_{3\varepsilon}$ e C_μ são constantes. $C_{1\varepsilon}$, $C_{2\varepsilon}$, C_μ , σ_k e σ_ε equivalem a 1,44, 1,92, 0,09, 1 e 1,3, respectivamente. Esses valores padrões foram determinados a partir de dados experimentais.

2.10.2 Modelo de turbulência k- ε RNG

O modelo k- ε RNG foi derivado do modelo k- ε padrão onde foi feita uma re-normalização das equações de Navier - Stokes. No modelo k- ε RNG termos foram adicionados com o intuito de melhorar a precisão e tornar este modelo útil para uma classe mais ampla de fluidos. A forma do modelo k- ε RNG é similar ao modelo k- ε padrão.

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho k u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_k \mu_{eff} \frac{\partial k}{\partial x_j} \right) + G_K + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_i}(\rho \varepsilon u_i) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left(\alpha_\varepsilon \mu_{eff} \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right) + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} (G_k + C_{3\varepsilon} G_b) - C_{2\varepsilon} \rho \frac{\varepsilon^2}{k} - R_\varepsilon + S_\varepsilon \quad (2.10)$$

onde G_K representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média, G_b representa a geração de energia cinética turbulenta devido a gravidade,

Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível para taxa de dissipação geral, α_k e α_ε são os números de Prandtl efetivos inversos para k e ε , os termos fontes são representados por S_k e S_ε .

2.10.3 Modelo k- ε Realizable

O modelo k- ε *realizable* difere do modelo k- ε padrão por dois fatores importantes:

- O modelo k- ε *realizable* contém uma formulação alternativa na viscosidade turbulenta;
- Uma equação de transporte modificada para taxa de dissipação (ε), sendo derivada de uma equação exata para o transporte de flutuação de vorticidade quadrada média. O modelo satisfaz algumas restrições matemáticas nas tensões de Reynolds, consistentes com a física dos fluxos turbulentos. O formato da equação do modelo k- ε *realizable* é apresentada abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho k) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho k u_j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_k} \right) \frac{\partial k}{\partial x_j} \right] + G_K + G_b - \rho \varepsilon - Y_M + S_k \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\rho \varepsilon) + \frac{\partial}{\partial x_j}(\rho \varepsilon j) = \frac{\partial}{\partial x_j} \left[\left(\mu + \frac{\mu_t}{\sigma_\varepsilon} \right) \frac{\partial \varepsilon}{\partial x_j} \right] + \rho C_{1\varepsilon} S_\varepsilon - C_{2\varepsilon} \frac{\varepsilon^2}{k + \sqrt{\nu \varepsilon}} + C_{1\varepsilon} \frac{\varepsilon}{k} C_{3\varepsilon} G_b + S_\varepsilon \quad (2.12)$$

De modo que:

$$C_1 = \max \left[0,43, \frac{\eta}{\eta + 5} \right] \quad (2.13)$$

$$\eta = S \frac{k}{\varepsilon} \quad (2.14)$$

$$S = \sqrt{2S_{ij}S_{ij}} \quad (2.15)$$

$$C_\mu = \frac{1}{A_0 + A_S \frac{kU^*}{\varepsilon}} \quad (2.16)$$

$$U^* \equiv \sqrt{S_{ij}S_{ij} + \Omega_{ij}\Omega_{ij}} \quad (2.17)$$

Sabendo que: G_K representa a geração de energia cinética turbulenta devido aos gradientes de velocidade média, G_b representa a geração de energia cinética turbulenta devido a gravidade, Y_M representa a contribuição da dilatação flutuante na turbulência compressível para taxa de dissipação geral, α_k e α_ε são os números de Prandtl efetivos inversos para k e ε , os termos fontes são representados por S_k e S_ε .

2.11 Abordagens para o modelo de escoamento multifásico

Na realização de simulações envolvendo escoamentos multifásicos é necessário se ter um conhecimento prévio de duas abordagens distintas: a abordagem Euleriana – Euleriana e Euleriana –Lagrangeana.

2.11.1 Euleriana – Euleriana

Na abordagem Euleriana- Euleriana as fases são tratadas de maneira separada, ou seja, para cada fase atribui-se um campo de velocidade, uma fração volumétrica, um campo de pressão e um campo de temperatura. Sendo acopladas através dos modelos de transferência interfacial (incluindo quantidade de movimento, massa e calor).

Os modelos de transferência interfacial dependem totalmente da área de superfície de contato entre as fases. Esta área é definida como a área interfacial por unidade de volume entre uma fase α e β , nomeada por densidade de área interfacial ($A_{\alpha\beta}$).

Neste tipo de abordagem pode-se modelar múltiplas fases separadas e possuir interação entre si, sendo o tratamento realizado por fases que podem ser líquidas, sólidas e gasosas. Nos pacotes comerciais exemplos de modelos disponíveis para este tipo de metodologia são: VOF, modelo de mistura, modelo de superfície livre e modelo de partícula.

O modelo VOF realiza o rastreamento da superfície, esta técnica é usada para dois ou mais fluidos imiscíveis entre si, de modo que a região da interface apresenta um grande interesse, uma única equação de conservação de movimento é utilizada entre os fluidos e a fração volumétrica é acompanhada pelo domínio.

O modelo de mistura ou modelo de dois fluidos sendo aplicado para duas ou mais fases, resolve a equação de quantidade de movimento para mistura e utiliza as velocidades relativas para descrever as fases dispersas. Dentro da abordagem Euleriana - Euleriana ainda existe dois submodelos: Modelo homogêneo e Modelo não - homogêneo.

Modelo homogêneo: este modelo é uma particularidade da abordagem Euleriana – Euleriana, de modo que se admite que a taxa de transferência interfacial entre os fluidos é muito elevada. Fazendo com que exista um compartilhamento das variáveis entre as fases, inclusive os efeitos de turbulência. Assim é o suficiente resolver os campos compartilhados das variáveis usando uma equação do transporte para o sistema, no lugar de resolver por fase.

Na modelagem homogênea a força de arraste é considerada de duas maneiras: a força de arraste total, de modo que as duas forças compartilham o mesmo campo de velocidade. Para força de arraste não total tem-se cada fase com o campo de velocidade distinto (a solução das equações da continuidade e do movimento serão resolvidas para cada fase).

Modelo não - homogêneo: para este modelo existe um campo de solução para cada fase e as quantidades transportadas interagem entre si pelos termos de transferência interfacial. Os modelos de transferência interfacial mais utilizados para o modelo não homogêneo são o modelo de partícula e o modelo de mistura.

A abordagem Euleriana-Euleriana tem seu campo de aplicação para escoamentos (líquidos – líquidos), (gás – líquido) e (líquido – sólido).

2.11.2 Modelo *Volume of Fluid* (VOF)

O modelo VOF pode ser utilizado para modelar dois ou mais fluidos imiscíveis. De acordo com a literatura este modelo tem sido muito utilizado quando deseja-se obter de maneira adequada a interface entre dois ou mais fluidos. O VOF resolve um conjunto de equações de momento e faz o rastreamento da fração de volume para cada fluido em todo o domínio. Este modelo pode ser aplicado em variadas situações como: previsão do rompimento do jato, o movimento de grandes bolhas no líquido, o movimento do líquido após o rompimento de uma

barragem e o rastreamento permanente ou transitório da interface gás – líquido (ANSYS FLUENT, 2013).

O VOF é um método robusto capaz de rastrear a interface água - ar, sendo possível oferecer alternativas para reconstruir a interface com precisão, conservando o volume de fluido fracionado. A maioria das vezes este modelo é usado para soluções dependentes do tempo, porém é possível seu uso em situações com o estado permanente (KATOPODES, 2019).

Este modelo apresenta algumas limitações como por exemplo, ele só está disponível para o solucionador baseado na pressão, o modelo não permite regiões vazias, pois todos os volumes de controle devem ser preenchidos com um fluido ou combinação deles, a formulação implícita de tempo de segunda ordem não pode ser usada com o esquema explícito VOF devido a presença de várias limitações (ANSYS FLUENT, 2013).

Segundo Andrade (2013) a formulação do modelo VOF considera que as duas ou mais fases são impenetráveis, para cada fase nova inserida é calculada no volume a fração volumétrica. Para as demais propriedades e variáveis os campos são compartilhados pelas fases e valores médios são calculados no volume, desde que sejam conhecidas as frações volumétricas. Considerando f_q a q-ésima a fração volumétrica do fluido temos que:

- $f_q = 0$ (célula computacional está vazia do q-ésima fluido);
- $f_q = 1$ (célula computacional está cheia do q-ésima fluido);
- $0 < f_q < 1$ (a célula computacional contém a fase q-ésima juntamente com outras fases);

O rastreamento da interface formada entre as fases é feito utilizando a solução de uma equação de continuidade para fração de volume de uma ou mais fases, considerando a fase q^{th} tem-se a seguinte forma:

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t} (\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = S_{\alpha q+} \sum_{p=1}^n (m_{pq} - m_{qp}) \right] \quad (2.18)$$

Onde: m_{pq} corresponde a transferência de massa da fase p para fase q; m_{qp} a transferência de massa da fase q para fase p e $S_{\alpha q+}$ o termo fonte de massa que pode ser constante ou definida pelo usuário;

A equação da fração volumétrica não será resolvida na fase primária, mas será calculada conforme a seguinte restrição, esta equação será resolvida de acordo com esquema explícito ou implícito:

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (2.19)$$

A interpolação próxima a interface é feita a partir de um tratamento no volume de controle. As diferenças de tratamento ocorrerão de acordo com o método escolhido, para o método de reconstrução geométrica é realizado um tratamento especial de interpolação nas células que ficam próximas a interface entre as duas fases é um esquema preciso e aplicado em geral nas malhas não estruturadas (ANSYS FLUENT, 2013).

Zhu; Lin; Pan (2014) estudaram o fluxo de óleos presentes em dutos danificados, tendo como objetivo verificar a influência dos diferentes tamanhos de diâmetros de vazamentos, a taxa de vazamento do óleo, e velocidade da água sobre o derramamento. Para realização desta pesquisa os autores utilizaram o *software* ANSYS FLUENT, o modelo VOF foi aplicado e condições de contorno determinadas como condição de pressão outlet na saída e velocidade na entrada da água, outra variação foi a velocidade de entrada do poluente (1 a 5 m/s). Viu-se com a realização deste trabalho que para pequenas velocidades de deslocamento do óleo (1 m/s) o tempo para o mesmo alcançar a superfície foi de 79 s, enquanto que para velocidade maiores (5 m/s) o tempo gasto foi de 15 s. Com relação a velocidade da água viu-se que ela influenciou diretamente na distância percorrida pelo óleo e o diâmetro do furo estava diretamente relacionado com a propagação do óleo na água.

Phuc *et al.* (2016) realizaram uma pesquisa para verificar o comportamento de um óleo derramado em uma parede de retenção com as condições de um tsunami hidráulico. Utilizou-se o *software* ANSYS FLUENT adotando-se o VOF. Verificou-se que o modelo aplicado gerou resultados satisfatórios em comparação com dados experimentais, o comportamento do tsunami e a difusão do óleo derramado foram representadas adequadamente. Observou-se ainda que as ondas geradas pelo fenômeno provocaram um forte espalhamento no óleo derramado.

Zhu; You; Zhao (2017b) estudaram a propagação do óleo proveniente de um vazamento de um duto verificando a ação combinada da onda e da corrente, o objetivo foi observar o efeito desta ação sobre o vazamento do fluxo, densidade do óleo e a viscosidade. O *software* utilizado

foi o ANSYS FLUENT, os modelos selecionados foram o VOF, o modelo de turbulência k- ϵ *realizable* e a técnica de criação de onda. Observou-se com a realização desta pesquisa que a ação combinada (correntes e ondas) em comparação com a água parada gera uma maior propagação subaquática, a taxa da deriva superficial é maior e a densidade tem efeito significativo na propagação subaquática.

Ji *et al.* (2020) estudaram a migração do óleo ocasionada pelo derramamento em oleodutos submarinos. Os modelos utilizados foram o VOF e o modelo de turbulência k- ϵ . Foram simuladas várias situações com diferentes velocidades do oceano e vazões do óleo. Observou-se com o estudo que a velocidade da corrente oceânica tem uma grande influência na migração de óleo derramado. Quanto maior a velocidade do mar mais gotículas se acumulam devido ao impulso inicial e este parâmetro se torna predominante.

2.11.1.1. Modelos de tensão superficial

O modelo VOF pode incluir os efeitos da tensão superficial ao longo da interface entre as fases. Sendo possível especificar um coeficiente de tensão superficial como uma constante ou como uma função. Os modelos de tensão superficial são: de força de superfície contínua (CSF) e o de tensão de superfície contínua (CSS) (ANSYS FLUENT, 2013).

2.11.1.1.1. Modelo CSF

O modelo CSF é o modelo de força de superfície contínua a adição de tensão superficial ao cálculo VOF resulta em um termo fonte na equação de impulso. Para entender a origem do termo fonte, considere o caso especial em que a tensão superficial é constante ao longo da superfície sendo considerada apenas as forças normais a interface.

O modelo CSF foi implementado de modo que a adição de tensão de superficial para os cálculos VOF é resultado de um termo fonte na Equação da quantidade de movimento (2.3). Neste caso a queda de pressão (ΔP) através da interface depende do coeficiente de tensão superficial (σ) e os raios de curvatura (R_1 e R_2).

$$\Delta P = \sigma \left[\frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} \right] \quad (2.20)$$

Para o modelo CSF a curvatura da interface é determinada baseada nos gradientes de fração volumétrica (α_q) em cada lado da interface, definindo o vetor normal a superfície como:

$$\vec{n} = \nabla \alpha_q \quad (2.21)$$

A curvatura κ , é definida em termos do divergente da unidade normal \hat{n} :

$$\kappa = \nabla \cdot \hat{n} \quad (2.22)$$

Em que:

$$\hat{n} = \frac{\vec{n}}{|\vec{n}|} \quad (2.23)$$

Assim, a força na interface por unidade de volume pode ser expressa a partir do teorema de divergência que será adicionado na equação do movimento.

$$F = \sigma \frac{\rho \kappa \nabla \alpha_q}{(\rho_1 + \rho_2)/2} \quad (2.24)$$

De modo que κ corresponde a curvatura; \vec{n} o vetor normal e \hat{n} = vetor unitário normalizado;

A Equação (2.24) é válida para tensão superficial constante. Para tensão superficial variável a formulação requer modelar um termo adicional na direção tangencial a interface.

2.11.3 Canal aberto

Utilizando o modelo VOF é possível modelar rios, barragens e estruturas de córregos a partir da condição de contorno canal aberto. Para esta situação tem-se fluxos que envolvem a existência de uma superfície livre entre o fluido que está fluindo e o fluido acima dele, nestes casos o comportamento da superfície e da propagação das ondas são importantes. De maneira geral, as forças que atuam em sistemas com essas características são as forças inercias e as

gravitacionais, relacionadas a partir do número adimensional de Froude (ANSYS FLUENT, 2013).

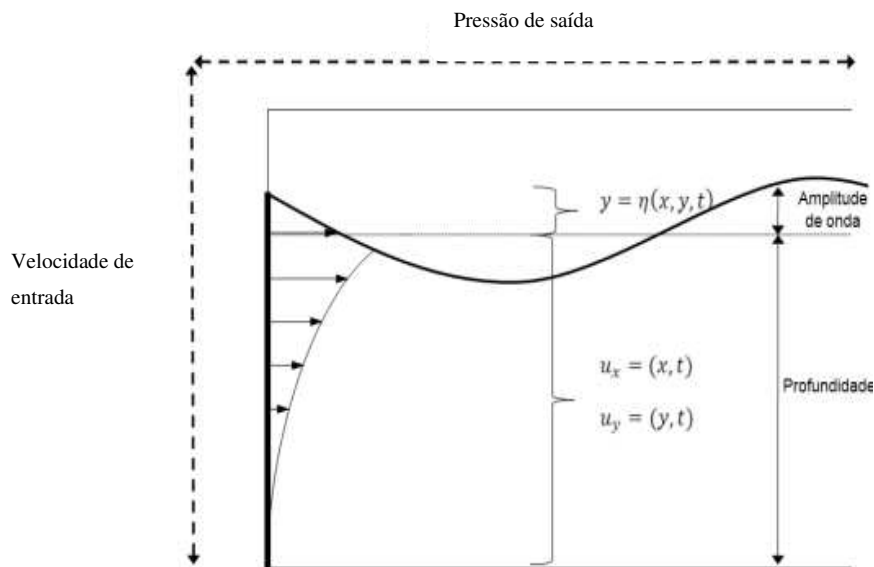
As Equações (2.25) apresenta a velocidade de onda vista por um observador fixo, respectivamente:

$$V_w = V \pm \sqrt{gy} \quad (2.25)$$

onde: V corresponde a velocidade do fluido, g a gravidade e y a distância da parte inferior do canal a superfície livre.

Na Figura 2-6 está representado o esquema do perfil de velocidades de ondas gerado pelo Ansys Fluent.

Figura 2-6- Esquema do perfil de velocidade de ondas.



Fonte: André (2010).

A condição limite de onda em canal aberto pode ser utilizada quando deseja-se propagar ondas, sendo aplicada em situações com ambientes marinhos. Os métodos de geração de ondas utilizados no Ansys Fluent baseiam-se em ondas geradas a partir de um batedor situado na fronteira esquerda as quais se propagam pelo fluido ao longo do tempo. É na condição de

entrada que são impostas as informações de elevação de superfície livre, velocidade horizontal e velocidade vertical (ANDRÉ, 2010).

O Ansys Fluent apresenta as teorias de ondas: de pequena amplitude que são geralmente aplicadas para diminuir a inclinação da onda e a profundidade relativa e as ondas de amplitude finita que são usadas para aumentar a inclinação e a profundidade relativa. As teorias das ondas superficiais de gravidade disponíveis nesta condição são: teoria das ondas de *Airy*, teoria de ondas de *Stokes* e a teoria de ondas Senoidal (ANSYS FLUENT, 2013).

A teoria das ondas de *Airy* de primeira ordem é aplicada a ondas de pequena amplitude em intervalos de profundidade de líquidos rasos a profundos e é de natureza linear. A teoria de ondas de *Stokes* é de ordem superior sendo aplicadas a ondas de amplitudes finitas com faixas de profundidade intermediárias e profundas, sendo de natureza não linear. Por fim, a teoria de ondas Senoidal é aplicada a ondas de amplitude finita em faixas de profundidades rasas.

A altura da onda (H) é definida pela Equação 2.26:

$$H = 2A = A_t + A_c \quad (2.26)$$

onde: A corresponde a amplitude da onda; A_t é a amplitude da onda no vale e A_c é a amplitude na crista.

Para a teoria de onda linear, $A_t = A_c$, enquanto que para teoria de onda não linear, $A_t \neq A_c$.

O número da onda (k) é dado por:

$$k = \frac{2\pi}{\lambda} \quad (2.27)$$

A forma vetorial para o número de onda (\vec{K}):

$$\vec{K} = k_x \hat{x} + k_y \hat{y} \quad (2.28)$$

Onde: λ corresponde o comprimento da onda; \hat{x} a direção de propagação da onda de referência; \hat{y} é a direção normal de \hat{x} e \hat{z} é a direção oposta da gravidade.

O número de ondas nas direções de \hat{x} e \hat{y} são definidas pelas Equações 2.29 e 2.30:

$$k_x = k \cos \theta \quad (2.29)$$

$$k_y = k \sin \theta \quad (2.28)$$

A frequência de onda efetiva (w_e) é dada pela Equação 2.31:

$$w_e = w + \vec{K} \cdot \vec{U} \quad (2.29)$$

Onde: θ é o ângulo de direção da onda, que é definido como o ângulo entre a frente da onda e a direção de propagação da onda de referência; w_e é frequência da onda efetiva; w a frequência da onda e \vec{U} o vetor velocidade média da corrente de fluxo.

A condição de contorno de canal aberto com ondas ou *Open channel wave BC* possibilita a inicialização da solução com todo o fluido estacionário ou com uma agitação definida. Podendo escolher ondas de águas profundas ou ondas de águas pouco profundas. Para estes casos devem ser inseridos propriedades da onda e profundidade investigada. As equações que são usadas para obter essa condição são dadas abaixo:

- Ondas de águas profundas:

$$(V_x) = \frac{gkA}{w} e^{ky} (\cos(\alpha)) \cos(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (2.30)$$

$$V_y = \frac{gkA}{w} e^{ky} \cos(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (2.31)$$

$$V_z = \frac{gkA}{w} e^{ky} (\sin(\alpha)) \cos(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (2.32)$$

- Ondas pouco profundas:

$$(V_x) = \frac{gkA \cosh(k(y+h))}{w \cosh(kh)} (\cos(\alpha)) \cos(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (2.33)$$

$$V_y = \frac{gkA \sinh(k(y+h))}{w \cosh(kh)} \sin(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (2.34)$$

$$V_z = \frac{gkA \cosh(k(y+h))}{w \cosh(kh)} (\sin(\alpha)) \cos(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (2.35)$$

onde: A a amplitude da onda; w_e a frequência da onda efetiva; k_x e k_y o número de ondas na direção x e y; ε a diferença de fases; g aceleração da gravidade; V_x , V_y e V_z os componentes de velocidades para ondas de gravidade de superfície nas direções, x, y e z; w a frequência da onda e t o tempo.

Sendo está uma condição aplicada na entrada da velocidade do modelo VOF, o perfil de onda é dado pela seguinte equação.

$$\zeta = A \cos(k_x x + k_y y - w_e t + \varepsilon) \quad (2.38)$$

Gusev *et al.* (2008) realizaram estudos teóricos e experimentais de ondas em canal aberto geradas a partir da propagação de uma onda com quebra em barragem descontínua (degrau inferior). Dois casos foram analisados o primeiro tinha-se um nível da água superior ao degrau, enquanto no segundo caso o nível da água estava inferior ao degrau. A teoria aplicada foi a de águas rasas com sistema modificado das leis básicas de conservação. Foram adicionadas soluções exatas com equações de primeira aproximação que permitem a propagação de ondas descontínuas. Viu-se que os resultados tiveram boa concordância nos parâmetros tipo de onda e velocidades de propagação.

2.12 Índice de convergência de malha

Atualmente a fluidodinâmica computacional é uma ferramenta com grande aplicabilidade nas resoluções de problemas diversos. Porém, as simulações podem apresentar muitos erros desde as condições de entrada até erros de malha, ou seja, erros de discretização espacial. Por este motivo é de suma importância a redução dos erros que surgem durante a simulação para que o resultado gerado possua credibilidade e seja o mais preciso possível.

Pensando nisso o estudioso Roache (1994) propôs um parâmetro de estimativa de erro conhecido por índice de convergência de malha (ICM) que tem como objetivo fornecer maior confiabilidade e uniformizar os resultados obtidos. A partir desta ferramenta é possível realizar uma quantificação das incertezas com relação a convergência da malha. O método ICM é baseado na extrapolação de Richardson, sendo realizadas comparações das soluções discretas em intervalos e malhas distintas.

Nunes (2019) afirmou que o ICM fornece uma estimativa quando a solução numérica está convergindo para a solução exata, obtém-se um percentual entre o valor computado e o valor assintótico. Quando os valores deste índice são pequenos indica-se que a solução está na região assintótica. Segundo Karatekin (1997) quando o valor do ICM for menor que 10% pode-se afirmar que a solução se encontra na região assintótica.

Almohammadi *et al.* (2013) estudaram quatro métodos distintos com o intuito de obter uma solução independente da malha para uma curva de energia de turbina eólica de eixo vertical e lâmina reta. Utilizou-se as equações de Navier Stokes com os modelos de turbulência k- ϵ (SST e RNG). Para o método de índice de convergência de malha os resultados não foram satisfatórios devido ao comportamento oscilatório da convergência para o coeficiente de potência da turbina. Já o método de montagem apresentou bons resultados na previsão do coeficiente de energia independente da malha.

Baker; Kelly; O'Sullivan (2020) avaliaram o efeito do índice de convergência de malha em malhas hexaédricas estruturadas, hexaédrica não estruturada e malhas tetraédrica, observando a ordem de precisão e a precisão da solução numérica do perfil médio de velocidade de fluxo de ar. Observou-se para malha hexaédrica estruturada que a ordem de precisão foi obtida de forma direta, enquanto para as malhas não estruturadas a convergência foi atingida gradualmente. Foi comparado os resultados utilizando o modelo de turbulência k- ϵ RNG com

o modelo de turbulência LES e viu-se que os resultados produzidos foram semelhantes dos diferentes tipos de malha hexaédrica estruturada e não estruturada.

Longest; Vinchurkar (2007) estudaram os efeitos de técnicas de geração de malha e da convergência da malha em campos de velocidade e padrões de deposição de partículas em modelos respiratórios bifurcados. Para atingir o objetivo utilizou-se as malhas: hexaédrica estruturada, tetraédrica não estruturada, tetraédrica de fluxo adaptativo e malha híbrida. A precisão das simulações foi comparada com dados experimentais disponíveis na literatura para o campo velocidade. Aplicou-se o índice de convergência de malha (ICM) e viu-se que a malha hexaédrica apresentava os valores do ICM com ordem de magnitude abaixo dos valores obtidos para malha tetraédrica não estruturada.

Capítulo 3

METODOLOGIA

O objetivo deste capítulo é apresentar os procedimentos desenvolvidos para a realização da modelagem matemática e simulação numérica de um meio aquático com a dispersão de poluentes utilizando a fluidodinâmica computacional (CFD). A primeira etapa deste trabalho consiste na definição do fenômeno físico do problema estudado, o modelo físico foi elaborado a partir do uso dos princípios físicos descritos pelas leis de conservação da massa e do movimento sendo denominada a modelagem matemática do caso.

Definiu-se o domínio (local que as equações são válidas) para tratar numericamente o modelo, para isso foi realizada a construção e discretização da geometria compreendendo a segunda etapa. Na terceira e quarta etapa foram definidas a modelagem matemática considerando as simplificações necessárias e a utilização do código CFD ANSYS FLUENT baseado no método de volumes finitos para aplicação no problema em questão.

3.1 Modelagem matemática

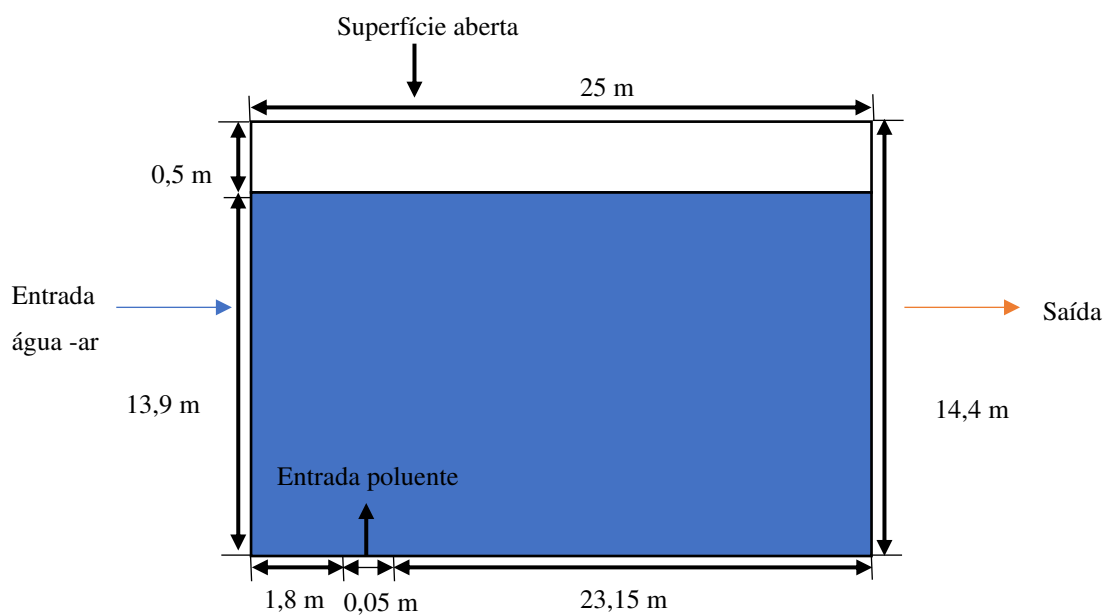
Para realização deste trabalho foi realizada uma pesquisa de variados problemas envolvendo vazamentos de óleo no meio aquoso. A partir do estudo destas pesquisas definiu-se o domínio e a modelagem matemática a ser utilizada. A validação dos resultados foi feita mediante os dados fornecidos por Zhu; You; Zhao, (2017a) e Zhu; Lin; Pan, (2014).

3.1.1 Descrição o problema

A proposta deste trabalho consiste na análise do vazamento de componentes orgânicos tóxicos em meio aquático. O processo de advecção é estudado com o intuito de observar o comportamento do óleo (espalhamento e dispersão). Para isso foram feitas geometrias com base nas pesquisas realizados por Zhu; You; Zhao, (2017a) e Zhu; Lin; Pan, (2014).

O domínio de estudo aplicado nas simulações corresponde a simplificações de um canal aberto composto por seções: seção de entrada (água - ar), seção de entrada do poluente, seção de saída e uma seção aberta como ilustrado na Figura 3-1. As principais diferenças entre as geometrias estão no diâmetro do vazamento, posição da entrada da água e na altura da lâmina d'água.

Figura 3-1- Domínio usado para comparação com Zhu; Lin; Pan, (2014).



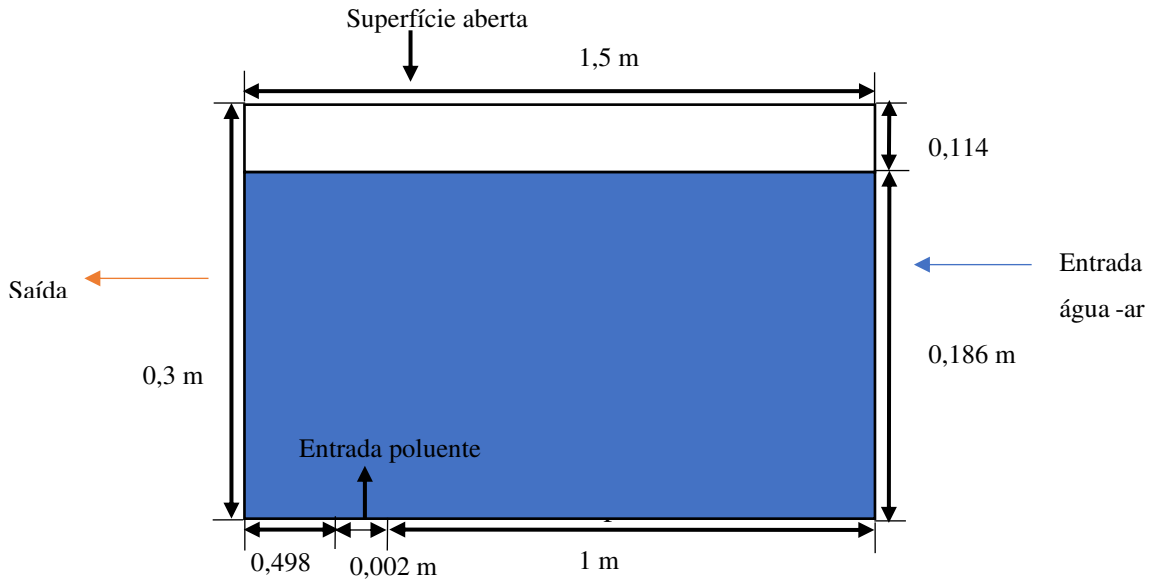
Fonte: Própria do autor.

As Figuras 3-1, 3-2, 3-3 e 3-4 apresentam as simplificações do problema físico baseado nos trabalhos numérico (Zhu; Lin; Pan, (2014)), experimental (Zhu; You; Zhao, (2017a)), para o caso de análise de barreira e o caso de barreira alongada.

A partir dos dados fornecidos pelos autores citados foram realizadas as validações numérica e experimental do modelo proposto. Para a análise numérica as regiões possuíam as seguintes dimensões: região de entrada mede 14,4 metros, sendo 13,9 metros a lâmina d'água e 0,5 metros a região do ar. O contaminante entra na seção de entrada do poluente com vazamento de 0,05 metros de diâmetro, a parte superior encontra-se a seção de superfície aberta.

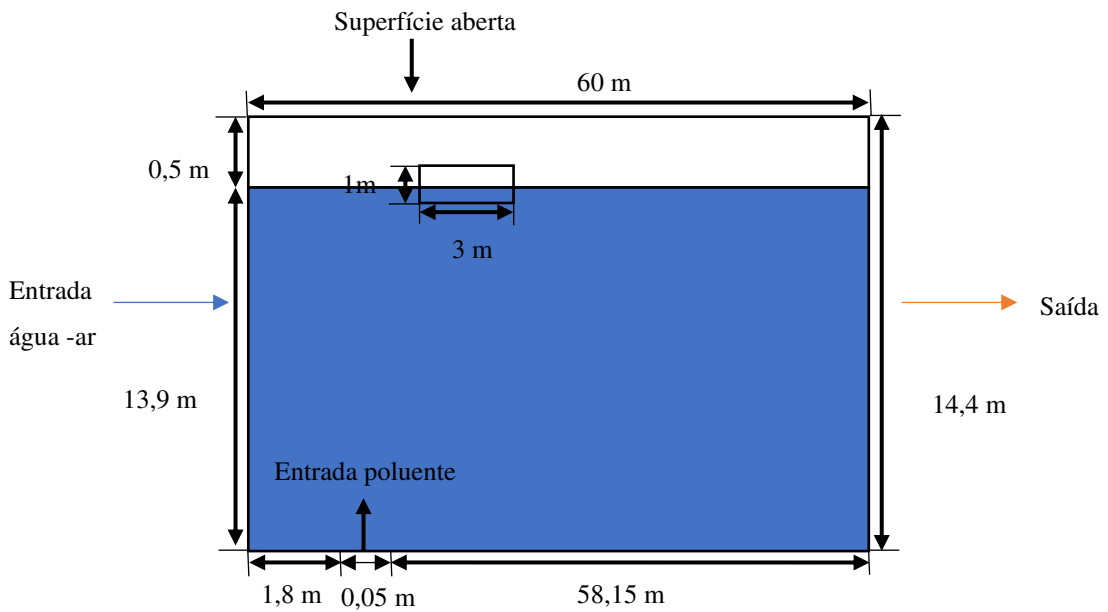
Para o domínio usado para comparação com os dados experimentais houve uma variação no domínio e nas dimensões tendo altura de 0,3 m com 0,186 m de lâmina d'água e diâmetro de vazamento 0,002 m.

Figura 3-2- Domínio usado para validação experimental baseado em Zhu; You; Zhao, (2017a)

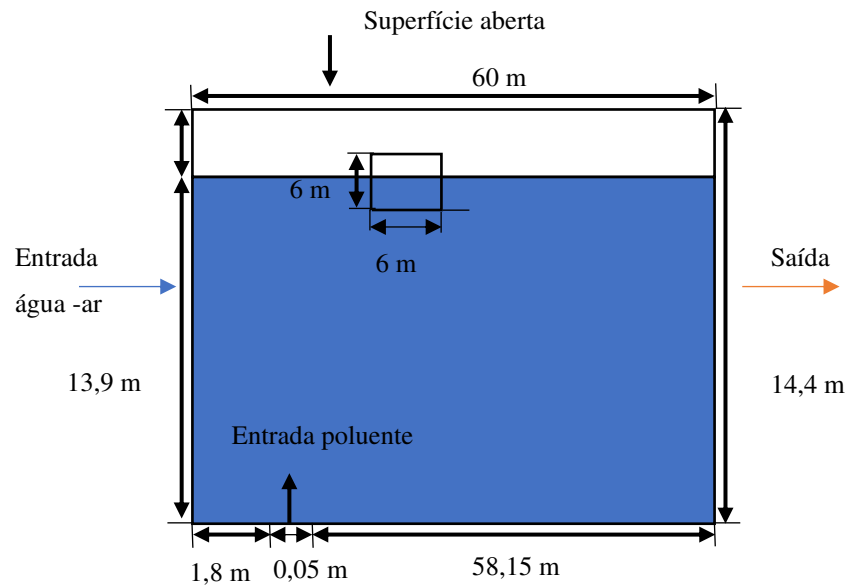


Fonte: Própria do autor.

Figura 3-3- Domínio com comprimento alongado para análise da barreira.



Fonte: Própria do autor.

Figura 3-4- Domínio com aumento de barreira.


Fonte: Própria do autor.

3.1.2 Geometria e geração de malha computacional

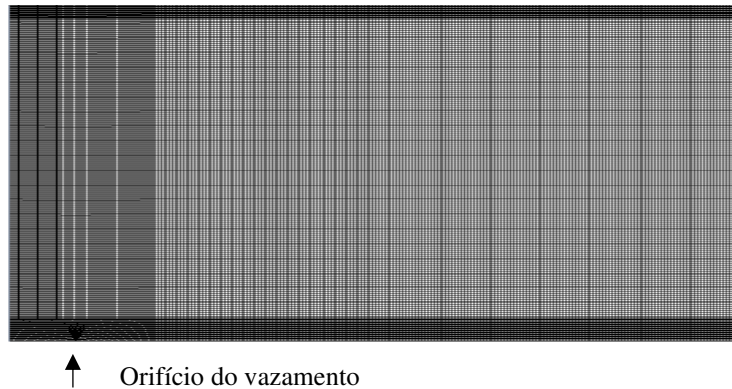
As Figuras 3-5 e 3-6 representam os domínios computacionais para as simulações propostas numericamente e experimentalmente, com as medidas utilizadas para cada caso analisado. O objetivo para ambas as análises foi o mesmo, diferenciando-se entre si as dimensões, fluidos utilizados, direção de escoamento e altura do nível da água.

Para realização da simulação numérica foi gerada uma malha utilizando *software* ICEM CFD, utilizou-se a ferramenta de blocagem e criou-se elementos hexaédricos no interior do domínio. A malha gerada para o caso da validação numérica possuía 61846 elementos e 62350 nós apresentada na Figura 3-5, enquanto a malha usada para validação experimental apresentava 169500 elementos e 171114 nós, apresentado na Figura 3-6 não sendo possível observar nitidamente o orifício de vazamento, isto ocorreu pois o refinamento desta malha foi feito de modo que os elementos se apresentaram uniformes.

A Figura 3-7 apresenta a malha confeccionada para analisar a eficiência da barreira na contenção dos poluentes. A malha gerada tem 101834 elementos e 102625 nós, com uma barreira medindo 3 metros de comprimento e 1 metro de altura, posicionada a 16 metros da entrada. A

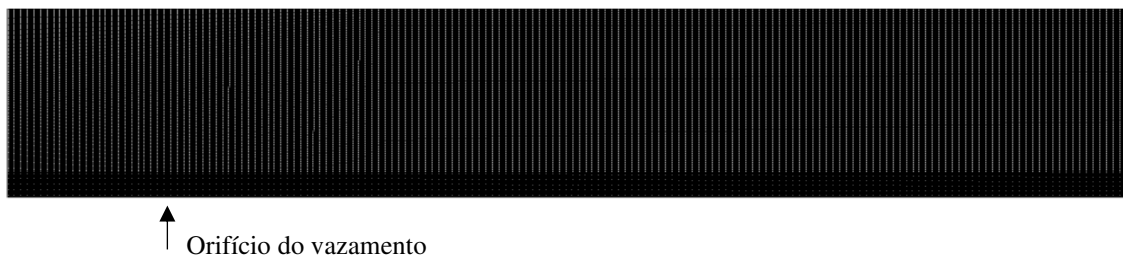
Figura 3-8 mostra a malha feita para analisar a barreira de contenção com maior comprimento. A malha gerada tem 260400 elementos e 262838 nós com a barreira medindo 6 metros de comprimento e 6 metros de altura, posicionada a 16 metros de entrada.

Figura 3-5- Malha utilizada nos casos estudados para validação numérica.

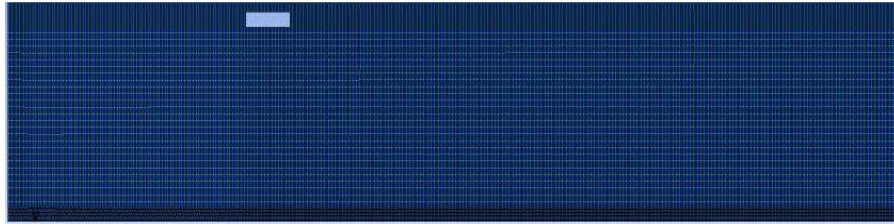


Fonte: Própria do autor.

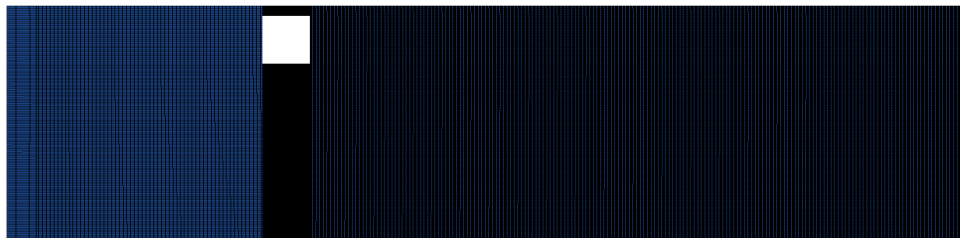
Figura 3-6- Malha utilizada nos casos estudados para validação experimental.



Fonte: Própria do autor.

Figura 3-7- Malha usada para análise da barreira.


Fonte: Própria do autor.

Figura 3-8- Malha usada para analisar tamanho de barreira.


Fonte: Própria do autor.

3.1.3 Análise da qualidade de malha

Adotou-se o método índice de convergência de malha (ICM) já abordado na seção 2.11. Para realizar os cálculos e escolher a malha mais satisfatória aplicou-se os seguintes passos. O primeiro passo para chegar no ICM é o cálculo do tamanho representativo do elemento de malha γ que é dado pela Equação 3.1.

$$\gamma = \left[\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta V_i \right]^{1/3} \quad (3.1)$$

onde, N é o número de elementos das malhas e ΔV_i é o volume ocupado pelo elemento i.

A partir deste cálculo foram geradas três malhas com $M_3 < M_2 < M_1$ e razão de refino $r = \frac{\gamma_{grosseira}}{\gamma_{refino}}$ com este valor maior que 1,3. As razões de refinamento foram diferentes e a ordem de convergência é calculada a partir da relação das malhas fina – intermediária e intermediária – grosseira.

A ordem e convergência ou ordem aparente é dada pela Equação 3.2:

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \ln \left| \frac{\varepsilon_{32}}{\varepsilon_{21}} \right| + |q(p)| \quad (3.2)$$

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \quad (3.3)$$

$$s = 1 \cdot \text{sign}(\varepsilon_{32}/\varepsilon_{21}) \quad (3.4)$$

$$\varepsilon_{32} = \phi_3 - \phi_2 \quad (3.5)$$

$$\varepsilon_{21} = \phi_2 - \phi_1 \quad (3.6)$$

Com ϕ_1, ϕ_2, ϕ_3 sendo os resultados de uma dada variável para as respectivas malhas.

Caso r_{21} e r_{32} sejam iguais ou constantes tem-se que $q(p) = 0$. Paudel e Saenger (2017) afirmaram que o valor da constante C é determinada pela Equação 3.7. Assim, quando $0 < C < 1$ tem-se convergência monoatômica, $C < 0$ convergência oscilatória e $C > 1$ divergência da solução.

$$C = \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_2 - \phi_3} \quad (3.7)$$

A Equação 3.8 determina como as soluções extrapoladas são calculadas:

$$\phi_{ext}^{21} = \frac{(r_{21}^p \phi_1 - \phi_2)}{(r_{21}^p - 1)} \quad (3.8)$$

As Equações 3.9 e 3.10 determinam o erro relativo aproximado entre malhas:

$$e_a^{21} = \left| \frac{\phi_1 - \phi_2}{\phi_1} \right| \quad (3.9)$$

$$e_a^{32} = \left| \frac{\phi_2 - \phi_3}{\phi_2} \right| \quad (3.10)$$

Assim, os índices de convergência são determinados pelas equações 3.11 e 3.12:

$$ICM_{21} = \frac{1,25e_a^{21}}{r_{21}^p - 1} \quad (3.11)$$

$$ICM_{32} = \frac{1,25e_a^{32}}{r_{32}^p - 1} \quad (3.12)$$

De acordo com Roache (1994) em situações que a solução exata não é conhecida a Equação 3.13 determina se o intervalo assintótico foi atingido:

$$ICM_{32} \cong r^p ICM_{21} \quad (3.13)$$

3.1.4 Modelo matemático

A modelagem matemática definida para representação do escoamento trifásico bidimensional é baseada na abordagem Euleriana – Euleriana não homogênea, considerando o modelo VOF, bem como as seguintes premissas:

- Domínio bidimensional, isotérmico e transiente;
- Fluidos Newtonianos, incompressíveis e imiscíveis;
- Propriedades físico – químicas constantes;
- Adotou-se massa específica de referência, ρ_{ref} , igual a 1.185 kg/m³;
- Não há ocorrência de reações químicas;
- As fases são consideradas contínuas;
- Não existe transferência de massa entre as fases.

Com base nestas condições as equações de conservação de massa e momento linear podem ser escritas como sendo:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) = 0 \quad (3.14)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q \vec{v}_q) = -\alpha_q \nabla p_q + \nabla \cdot (\bar{\tau}_q) + \rho_q \vec{g} + \vec{F} \quad (3.15)$$

Com

$$\bar{\tau}_q = \alpha_q \mu_q (\nabla \vec{v}_q + \nabla \vec{v}_q^T) + \alpha_q \left(\lambda_q - \frac{2}{3} \mu_q \right) \nabla \cdot \vec{v}_q \bar{I} \quad (3.16)$$

onde μ_q e λ_q são, respetivamente, a viscosidade e a tensão de cisalhamento da fase q .

O rastreio das interfaces é realizado a partir do modelo VOF e devido as simplificações adotadas tem-se que a equação da continuidade para fração volumétrica de uma ou mais fases é apresentada na equação (3.17).

$$\frac{1}{\rho_q} \left[\frac{\partial}{\partial t}(\alpha_q \rho_q) + \nabla \cdot (\alpha_q \rho_q \vec{v}_q) \right] = 0 \quad (3.17)$$

A equação da fração volumétrica é resolvida com base na restrição estabelecida pela Equação (3.18):

$$\sum_{q=1}^n \alpha_q = 1 \quad (3.18)$$

O efeito da tensão superficial entre os fluidos é incluído no método VOF. Neste trabalho o modelo aplicado foi o força de superfície contínua (CSF), a adição da tensão superficial para os cálculos do VOF resulta em um termo fonte na equação da quantidade de movimento (3.15), termo de força \vec{F} como apresentado na Equação (2.31). Neste caso considera-se que a tensão superficial é constante ao longo da interface, de modo que apenas a força normal atua sobre a interface.

Com relação ao modelo de turbulência adotou-se o k - ε *Realizable* as equações referentes a este modelo estão presentes na seção (2.10.3) e as equações referentes a este modelo são da 2.11 a 2.17.

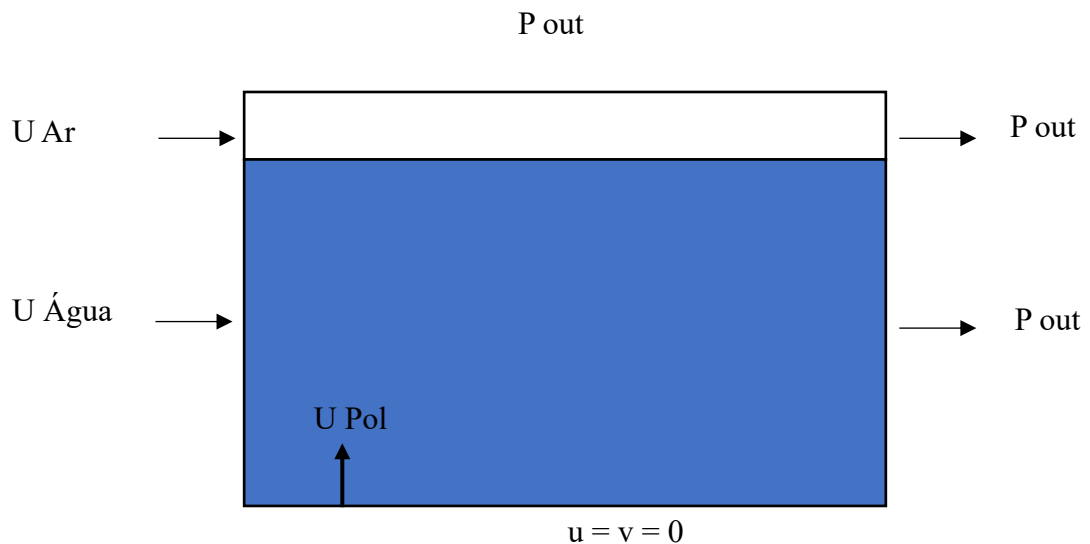
3.1.5 Condições iniciais e de contorno

As condições iniciais aplicadas nesta simulação: velocidades dos fluidos água, ar e poluentes foram consideradas nulas, os valores das constantes do modelo de turbulência para energia cinética e energia de dissipação foram $0,000089 \text{ m}^2/\text{s}^2$ e $0,00610 \text{ m}^2/\text{s}^3$, respectivamente. Considerou-se inicialmente a fração volumétrica da água igual a 1 e a pressão 0 Pa.

As condições de contorno estabelecidas para: entrada do sistema água - ar, entrada do poluente e saída, sendo apresentados na Figura 3-9.

As condições aplicadas foram: na região de entrada água -ar optou-se por usar velocidade de entrada sendo aplicado valores constantes.

Figura 3-9- Condições de contorno utilizadas.



Fonte: Própria do autor.

Aplicando as simplificações para a condição de canal aberto com ondas tem-se as seguintes equações:

$$V_w = V \pm \sqrt{gy} \quad (3.19)$$

onde V corresponde a velocidade da onda, y a altura do nível de água no domínio de estudo.

De modo que $V = 0,1 \text{ m/s}$; $g = 9,81 \text{ m/s}^2$ e $y = 13,9 \text{ m}$.

Para condição de contorno de canal aberto utilizou-se o modelo de ondas de pouca profundidade, definidas por:

$$\begin{pmatrix} u_x \\ u_z \end{pmatrix} = \frac{gkA}{w} \frac{\cosh(k(y+h))}{\cosh(kh)} \begin{pmatrix} \cos(\alpha) \\ \sin(\alpha) \end{pmatrix} \cos(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (3.20)$$

onde h corresponde a altura da onda, w_e a frequência de onda efetiva e α o ângulo

$$u_y = \frac{gkA \sinh(k(y+h))}{w \cosh(kh)} \sin(k_x x + k_z z - w_e t + \varepsilon) \quad (3.21)$$

$$w_e = w + \vec{K} \cdot \vec{U} \quad (3.22)$$

Assumiu-se neste trabalho as seguintes condições: magnitude da velocidade da onda incidente é $\vec{U} = 0$ então $w_e = w$. As alturas das ondas consideradas neste estudo foram de 0,00005 e 0,00001 m e os comprimentos das ondas de 5 e 1 m, para os casos de validação numérica e experimental, respectivamente, apenas uma onda foi adicionada no domínio.

Na interface água -ar utilizou-se a condição de contorno *open channel* essa opção permite adicionar o nível da água (13,9 m e 0,186 m para o caso com dados experimentais) e velocidades nas direções (x e y) a partir das equações (3.21) - (3.22). Nas regiões de saída e na fronteira superior do domínio a condição usada foi a de *pressure outlet* de modo que a pressão assumida foi de 0 Pa.

Na região de entrada do poluente foi aplicada a velocidade de entrada sendo usado valor constante de 2 m/s e 0,125 m/s para o caso com dados experimentais. Na parte inferior do domínio foi considerada uma parede com condição de não deslizamento com velocidades $v_x = v_y = v_z = 0$ m/s. Foi utilizado a condição de simetria.

As informações gerais do problema e as condições da solução numérica são apresentados na Tabela 3.1.

Tabela 3.1 - Informações gerais do problema e da solução numérica aplicada.

Condições gerais	
Tipo de escoamento	Trifásico, não isotérmico
Regime de escoamento	Transiente
Modelo multifásico	Não homogêneo – VOF
Força gravitacional	Considerada
Condições do modelo	CNTP (a 25° C e 1 atm)
Pressão de operação	104000 Pa
Modelo de turbulência	<i>k-ε realizable</i>
Critério de convergência	Resíduo Médio Quadrático (RMS) igual a 10^{-4}
Acoplamento pressão – velocidade	Piso (<i>Pressure Implicit with Splitting of Operators</i>)
Modelo de tensão superficial	Força de superfície contínua (CSF)
Rugosidade na parede	Lisa
Solver	Baseado na pressão
Discretização	Pressão = PRESTO (<i>Pressure Staggering Option</i>) Eq. Movimento = <i>Upwind</i> de segunda ordem Energia cinética e taxa de dissipação turbulenta = <i>Upwind</i> de primeira ordem Fração volumétrica: reconstrução geométrica
Passo de tempo	0,005 s

Fonte: Própria do autor.

3.1.6 Propriedades físico – química dos materiais utilizados

As propriedades físico – químicas dos fluidos utilizados é apresentado na Tabela 3.2.

Tabela 3.2 – Densidade e viscosidade dos fluidos utilizados.

Fluido	Densidade (kg/m ³)	Viscosidade (Pa.s)
Água ⁽¹⁾	1000	1,0030 x 10 ⁻³
Ar ⁽¹⁾	1,185	17,4 x 10 ⁻⁶
Óleo* ⁽²⁾	870	0,048
Benzeno ⁽³⁾	875	0,000589
Óleo ⁽⁴⁾	820	0,3485

Fonte: ⁽¹⁾Çengel; Cimbala, (2007); ⁽²⁾Zhu; Lin; Pan, (2014); ⁽³⁾Chiaranda, (2006), ⁽⁴⁾Zhu; You; Zhao, (2017).

As tensões superficiais usadas entre os pares foram: água -ar: 0,072 N/m, água – benzeno: 0,032 N/m, água – óleo: 0,02 N/m, água – óleo branco: 0,048 N/m (ÇENGEL; CIMBALA, 2007; ZHU; YOU; ZHAO, 2017a; ZHU; LIN; PAN, 2014; CHIARANDA, 2006).

3.1.7 Casos avaliados

O vazamento e a dispersão dos poluentes foram avaliados a partir da realização de simulações numéricas empregando o pacote computacional ANSYS FLUENT. Para os cálculos foram utilizados *clusters* tipo *beowulf* com quatro nós (computadores) com processador Intel Core I7-3770 3.40 Ghz e 16 GB de memória RAM disponibilizados no Laboratório de Pesquisa em Fluidodinâmica e Imagem (LPFI) da Universidade Federal de Campina Grande.

Os casos que foram estudados estão apresentados na Tabela 3.3. As especificações dos casos são mostradas abaixo com as velocidades de entrada da água e a velocidade de entrada do poluente. As malhas produzidas foram referentes ao caso numérico de Zhu; Lin; Pan, (2014) com as dimensões propostas pelos autores.

Tabela 3.3 – Especificações das simulações numéricas realizadas.

Tipos de casos avaliados	Casos avaliados	Velocidade de entrada da água (m/s)	Velocidade de entrada do poluente (m/s)
ICM	Caso 1	0,1	2
Comparativo com Zhu (2014)	Caso 2	0,1	2
Comparativo com Zhu (2017a)	Caso 3	0,086	2
Dispersão advectiva do benzeno	Caso 4	0,1	2
Variação da velocidade de entrada da água	Caso 5	0,01	2
	Caso 6	0,1	
	Caso 7	0,5	
	Caso 8	1	
Variação da velocidade dos poluentes	Caso 9		0,5
	Caso 10	0,1	1
	Caso 11		2
Fração volumétrica do benzeno	Caso 12	0,1	2
	Caso 13	0,01	2
Variações das densidades do poluente orgânico	Caso 14	0,01	2
	Caso 15	0,01	2
Análise da densidade com variação da velocidade do poluente	Caso 16	0,1	1
	Caso 17	0,1	2
Avaliação da barreira com domínio aumentado sem ondas	Caso 18	0,1	2
Avaliação da barreira com ondas	Caso 19	0,1	2
Aumento da barreira de contenção sem ondas	Caso 20	0,1	2
Aumento da barreira de contenção com ondas	Caso 21	0,1	2

Capítulo 4

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Neste capítulo são apresentados os resultados de avaliação de qualidade de malha, os resultados obtidos para validar a modelagem matemática, análise com o benzeno e avaliação dos parâmetros como velocidade de entrada da água, velocidade de entrada do poluente, variação de fração volumétrica, variação de densidade e análise de contenção por barreiras. Foram gerados gráficos com o intuito de realizar comparações dos resultados obtidos numericamente - experimentalmente, bem como, resultados qualitativos da evolução do poluente ao longo do domínio em função do tempo.

4.1 Resultados e discussões

Neste tópico serão apresentados os resultados obtidos dos casos de avaliação de malha, o caso da validação numérica, o caso da validação experimental, o caso do benzeno e os casos que foram avaliados os parâmetros: velocidade de entrada da água, velocidade de entrada do poluente, fração volumétrica, densidades, avaliação da barreira e finalizando o caso com ondas.

4.1.1 Avaliação do Índice de Convergência de Malha (ICM)

Para que bons resultados sejam gerados é preciso possuir malhas independentes de fatores como: relação dos tamanhos dos elementos, quantidades de elementos hexaédricos ou tetraédricos e refinamento de malha. Neste trabalho utilizou-se o método índice de convergência de malha (ICM) para analisar a qualidade da malha (Caso 1), o fator aplicado para verificar a independência de malha foi principalmente número de elementos.

Baseado na metodologia mencionada na seção 3.1.3, obteve-se os dados apresentados na Tabela 4.1, referente ao número de elementos de cada malha produzida. Para um melhor entendimento as malhas foram denominadas M1, M2 e M3, de modo que M1 a malha mais

refinada, M2 é a malha intermediária e M3 a malha mais grosseira. Sendo que a discretização da malha foi realizada de maneira uniforme.

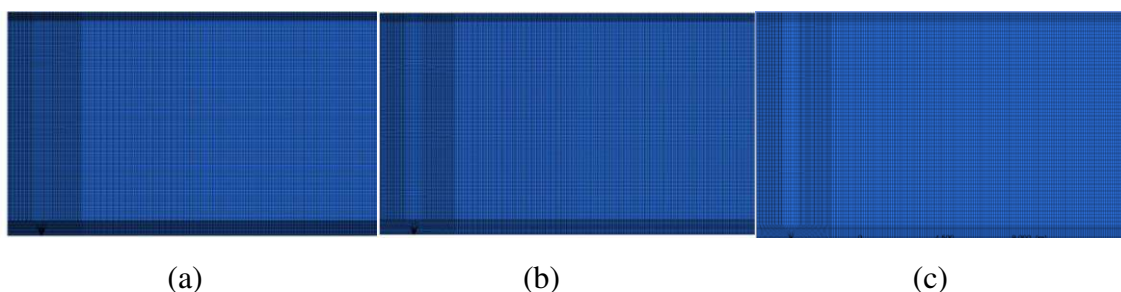
Tabela 4.1 – Informações quantitativas das malhas numéricas estudadas.

Malhas	Nº de elementos	Volume
M1	61846	0,00346285
M2	53262	0,00371661
M3	45318	0,00425841

Fonte: Própria do autor.

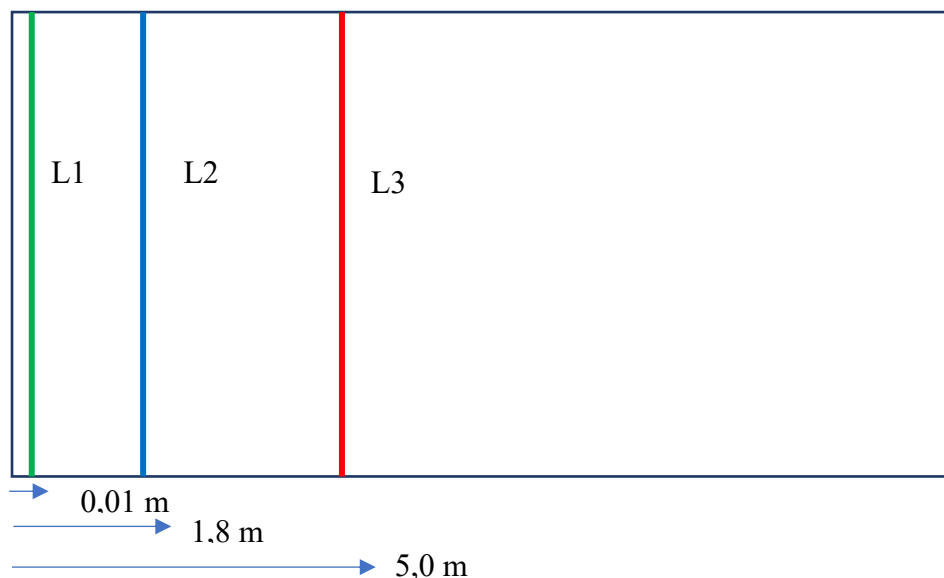
A Figura 4.1 ilustra as malhas geradas e alguns detalhes do refinamento. O maior refinamento aconteceu em duas regiões: na seção de entrada do poluente e na seção da interface água – ar (devido a variação de densidades).

Figura 4-1- (a) Malha (M1), (b) Malha (M2) e (c) Malha (M3).



Fonte: Própria do autor.

Destaca-se que para realização do estudo de dependência de malha, foram consideradas como condições de simulação a construção de três linhas distribuídas ao longo do domínio. Para 1ª linha foram tomados dois pontos cujas coordenadas são: (0,01; 0; 0,05) e (0,01; 20; 0,05 m), para 2ª linha (1,8; 0; 0,05 m) e (1,8; 20; 0,05 m), para 3ª linha (5; 0; 0,05 m) e (5; 20; 0,05 m), respectivamente.

Figura 4-2- Apresentação das linhas escolhidas para estudo.


Fonte: Própria do autor.

As Tabelas 4-2 a 4-6 ilustram os valores da velocidade, pressão e fração mássica ao longo das linhas 1, 2 e 3, para as malhas M1, M2 e M3. Os resultados mostram que ao se refinar as malhas, a solução tende a se aproximar do valor assintótico da solução extrapolada. Os valores do ICM entre as malhas 1-2 (ICM₂₁), 3-2 (ICM₃₂) e o valor da constante C, definidos, respectivamente pelas Equações 3.9 a 3.12.

As Tabelas 4.2 e 4.3 apresentam os resultados referentes a L1 das variáveis pressão e velocidade. A Tabela 4.4 apresenta o resultado gerado para variável fração mássica obtida na L2, as Tabelas 4-5 e 4-6 apresentam os resultados obtidos em L3 das variáveis pressão e velocidade.

Observa-se nas Tabelas 4-2 e 4-3 que os $ICM_{21} < ICM_{32}$ isto aponta que a dependência dos resultados no tamanho dos elementos de malha foi reduzida, se aproximando de uma solução independente de malha. O valor de C para as variáveis pressão e velocidade na linha 1 foram entre 0 e 1 o que indica a convergência monoatômica. Observa-se ainda que a solução extrapolada está próxima da solução exata para as variáveis pressão e velocidade devidas as proximidades dos valores de ICM₃₂ e $r^{pICM_{21}}$. Pode-se observar também uma redução na condição de convergência, visto que $ICM_{21} < ICM_{32}$, e que os valores de ICM_{21} e ICM_{32} estão dentro do limite de 10% conforme relatado por Karatekin (1997), o que indica que a dependência

dos resultados com o tamanho dos elementos da malha foi reduzido e se aproxima de uma solução independente da malha.

Tabela 4.2 – Resultados do parâmetro pressão na linha L1 para o estudo de índice de convergência de malha.

X (m)	M1 (Pa)	M2 (Pa)	M3 (Pa)	ICM 21	ICM 32	C
0,00	139243,75	139233,91	139020,90	0,00	0,00	0,73
1,04	129228,23	129136,62	129031,80	0,03	0,03	0,73
2,07	119493,25	119067,96	118935,40	0,00	0,00	0,73
3,11	109218,52	108942,72	108824,00	2,96	2,56	0,73
4,14	98873,47	98821,59	98783,60	15,01	12,45	0,73
5,18	88870,31	88716,18	88690,20	8,14	6,75	0,73
6,21	78775,99	78593,98	78558,30	7,59	6,23	0,73
7,25	68768,19	68474,62	68425,50	5,40	4,42	0,73
8,29	58630,45	58383,29	58293,70	6,47	5,18	0,73
9,32	48485,91	48305,97	48162,70	8,23	6,39	0,73
10,35	38356,36	38217,82	38039,20	10,72	7,94	0,73

Fonte: Própria do autor.

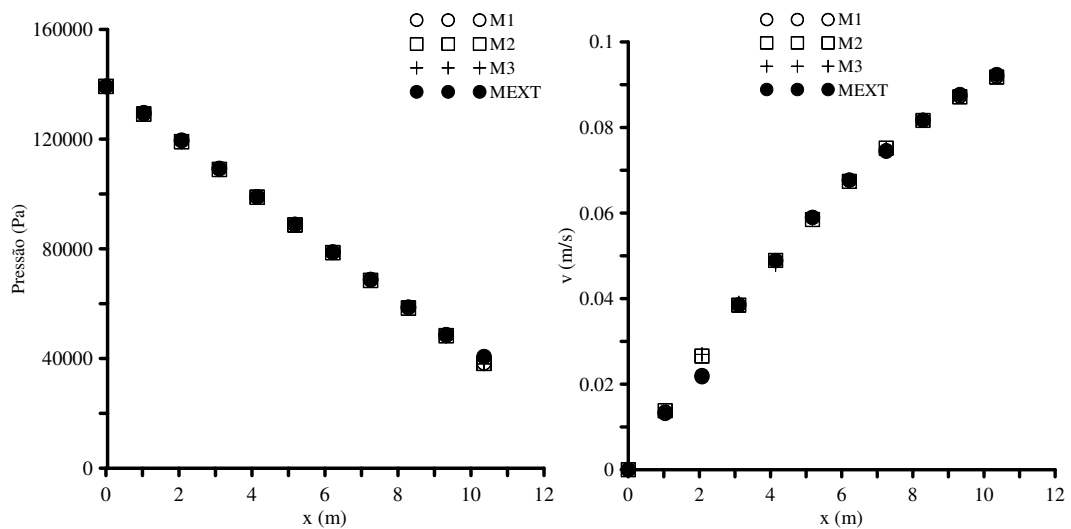
Tabela 4.3 - Resultados do parâmetro velocidade na linha L1 para o estudo de índice de convergência de malha.

X (m)	M1 (m/s)	M2 (m/s)	M3 (m/s)	ICM 21	ICM 32	C
0,00	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000	0,3660
1,04	0,0135	0,0138	0,0132	0,0324	0,0532	0,3660
2,07	0,0220	0,0266	0,0269	0,0170	0,0009	0,3660
3,11	0,0385	0,0385	0,0389	0,0002	0,0017	0,3660
4,14	0,0489	0,0489	0,0479	0,0000	0,0011	0,3660
5,18	0,0589	0,0585	0,0584	0,0004	0,0000	0,3660
6,21	0,0677	0,0674	0,0673	0,0008	0,0001	0,3660
7,25	0,0746	0,0752	0,0750	0,0026	0,0005	0,3660
8,29	0,0817	0,0817	0,0816	0,0000	0,0000	0,3660
9,32	0,0873	0,0872	0,0872	0,0060	0,0039	0,3660
10,35	0,0919	0,0918	0,0919	0,0061	0,0041	0,3660

Fonte: Própria do autor.

A Figura 4-3 mostra os resultados referentes aos parâmetros pressão e velocidade gerados na L1. É possível observar uma boa correlação entre as malhas M1, M2, M3 e a solução extrapolada para as variáveis pressão e velocidade. Estes gráficos mostram que ao se refinar as malhas a solução obtida se aproxima do valor assintótico da solução extrapolada, sendo a solução da malha M1 a que mais se aproximou. A solução extrapolada representa uma estimativa da solução exata da variável em estudo.

Figura 4-3- Gráficos pressão e velocidade obtidas em L1.



Fonte: Própria do autor.

A Tabela 4-4 apresenta os resultados referentes a fração mássica para L2. Verifica-se que os valores de $ICM_{21} < ICM_{32}$ para maioria dos pontos isto aponta que a dependência dos resultados no tamanho dos elementos de malha foi reduzida, se aproximando de uma solução independente de malha. O valor de C foi de 0,174 estando entre o intervalo de 0 e 1 indicando que a solução é monoatômica.

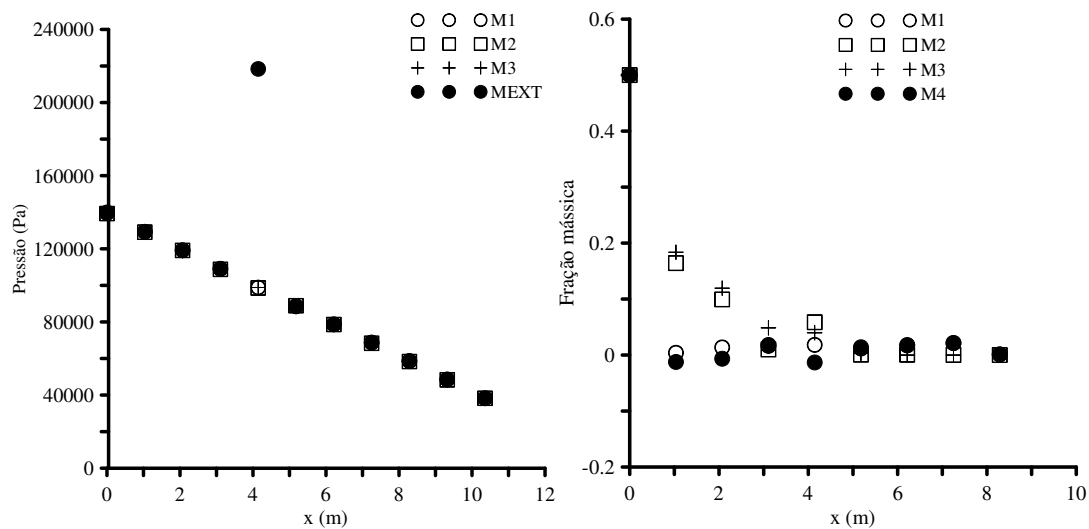
Tabela 4.4 - Resultados do parâmetro fração mássica na linha L2 para o estudo ICM.

X (m)	M1	M2	M3	ICM 21	ICM 32	C
0,00000	0,302	0,296	0,282	0,043	0,069	0,174
1,611	0,013	0,793	0,149	282,9	2,650	0,174
3,222	0,017	0,022	0,052	0,171	0,427	0,174

Fonte: Própria do autor.

A Figura 4-4 apresenta os resultados gerados para fração mássica e pressão obtidos em L2. Observa-se que para fração mássica houve um maior desvio dos resultados obtidos para com os extrapolados o que é esperado devido ao fato deste parâmetro sofrer variações grandes ao longo do domínio. Para a pressão verifica-se que os resultados apresentaram uma boa concordância com os resultados extrapolados. Ambos os gráficos mostram que a solução da malha M1 é a que mais se aproximou dos resultados ideais gerados pela solução extrapolada.

Figura 4-4- Gráficos fração mássica e pressão obtidas na linha L2



Fonte: Própria do autor.

Tabela 4.5 - Resultados do estudo de ICM para a pressão na linha L3.

X (m)	M1 (Pa)	M2 (Pa)	M3 (Pa)	ICM 21	ICM 32	C
0,0000	139392,44	139272,03	139160,20	0,005	0,004	0,887
1,03571	129255,85	129141,91	129030,58	0,007	0,007	0,887
2,07143	119106,99	119009,07	118905,44	0,022	0,022	0,887
3,10714	108948,28	108870,25	108799,20	0,003	0,003	0,887
4,14286	98784,71	98748,87	98702,48	0,002	0,003	0,887
5,17857	88639,97	88760,04	88540,61	0,002	0,004	0,887
6,21429	78492,14	78602,65	78303,87	0,001	0,003	0,887
7,25000	68358,23	68324,50	68013,76	0,000	0,000	0,887
8,28571	58279,31	58064,30	58068,43	0,000	0,000	0,887
9,32143	48289,25	48069,49	47895,46	0,013	0,001	0,887
10,3571	38250,33	38004,12	37897,11	0,005	0,002	0,887

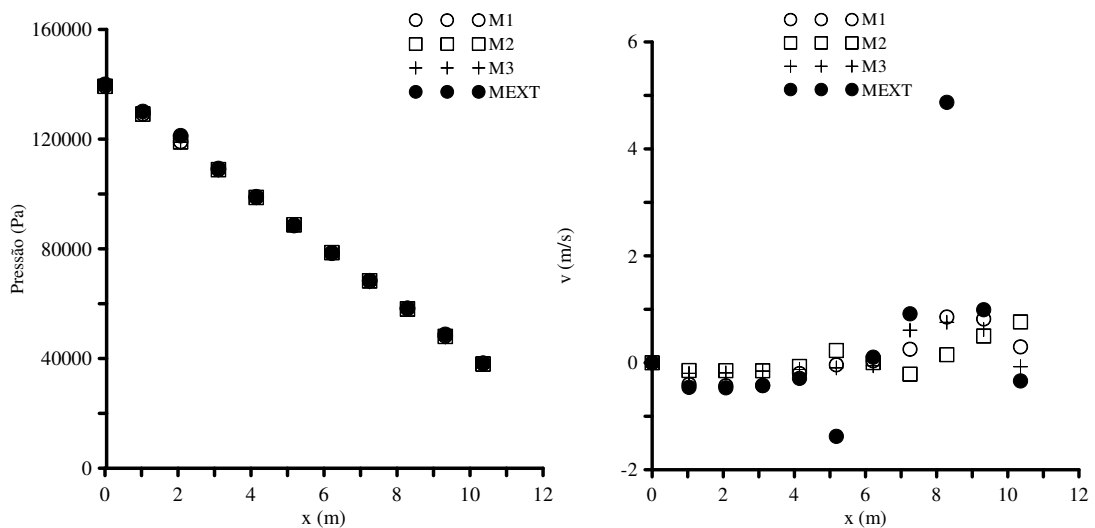
Tabela 4.6 - Resultados do estudo de ICM para a velocidade na linha L3.

X (m)	M1 (m/s)	M2 (m/s)	M3 (m/s)	ICM 21	ICM 32	C
0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00000	0,00008
1,03571	-0,40509	-0,14452	-0,19678	0,16596	0,07504	0,00008
2,07143	-0,42929	-0,14682	-0,18823	0,11229	0,03759	0,00008
3,10714	-0,42333	-0,14918	-0,15486	0,01088	0,00041	0,00008
4,14286	-0,20104	-0,06764	-0,12516	0,55903	0,61422	0,00008
5,17857	-0,03775	0,23023	-0,09481	44,29108	7,90081	0,00008
6,21429	0,03734	0,00348	-0,05399	2,25439	36,35044	0,00008
7,25000	0,25370	-0,21184	0,60933	3,26369	6,05825	0,00008
8,28571	0,85657	0,15156	0,75675	5,85792	25,51820	0,00008
9,32143	0,81979	0,50117	0,62258	0,26292	0,13919	0,00008
10,3571	0,29804	0,76430	-0,07330	0,26722	1,64313	0,00008

Fonte: Própria do autor.

As Tabelas 4-5 e 4-6 mostram os resultados de pressão e velocidade obtidas na L3. Observou-se comportamento semelhante as linhas L1 e L2. Os valores de C foram de 0,8873 e 0,000076 o que confirma a monotonicidade da solução. A partir da Figura 4-5 observa-se que para a pressão todas as malhas apresentaram resultados próximos a solução extrapolada, já para velocidade a malha M1 gerou os resultados mais satisfatórios.

Figura 4-5- Gráficos pressão e velocidade obtidas em L3.



Fonte: Própria do autor.

A partir das tabelas com resultados referentes a velocidade, pressão e fração mássica é possível observar que os menores valores de ICM foram entre as malhas 21, outro fator visto nos resultados é que todas as variáveis tiveram o valor de C entre 0 e 1, indicando, portanto, que a convergência monoatômica foi atingida. Observa-se que todas as malhas geraram resultados semelhantes a malha extrapolada, mas no gráfico velocidade a malha 1 gerou melhores resultados em todos os pontos. Para a região próxima a entrada do poluente (L2) observa-se uma maior variação nos resultados, mas para a análise de fração mássica a malha (M1) teve resultados mais próximos ao da malha extrapolada, já na variável pressão todas as malhas tiveram resultados semelhantes neste ponto.

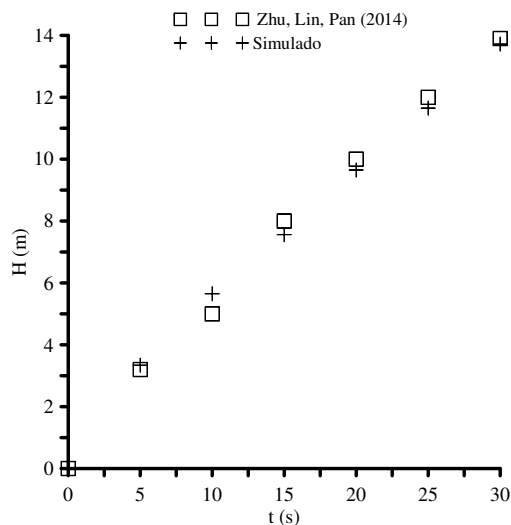
Por fim, a linha mais afastada das entradas (L3) apresentou resultados semelhantes para todas as malhas na variável pressão, enquanto que na variável velocidade a malha que gerou melhores resultados em comparação com a malha extrapolada foi a malha (M1). O que significa que ao se refinar a malha, a solução tende a se aproximar do valor assintótico da solução extrapolada, fazendo com que as malhas não interfiram na obtenção dos resultados. A solução extrapolada mostra uma estimativa da solução exata da variável estudada. Sendo assim, verificou-se a partir do índice de convergência de malha que entre as três malhas analisadas a malha (M1) foi a que gerou melhores resultados sendo a escolhida para a realização das simulações.

4.1.2 Comparação dos resultados com os reportados na literatura

Com o intuito de confrontar os resultados numéricos da presente pesquisa com os obtidos por Zhu; Lin; Pan, (2014) foi realizada uma comparação entre os resultados da distância percorrida pelo óleo a partir de um vazamento em função do tempo (Caso 2).

Na Figura 4-6 estão representados os valores das alturas atingidas pelo óleo em função do tempo, do presente trabalho e Zhu; Lin; Pan, (2014) percebe-se uma boa concordância entre os resultados. O que nos proporciona afirmar que o modelo proposto foi capaz de prever o comportamento das gotas de óleo se dispersando no meio aquoso decorrente de um vazamento através do orifício em uma tubulação submersa.

Figura 4-6- Comparativo do caso simulado nesta pesquisa com o caso padrão Zhu, Lin, Pan (2014).



Fonte: Própria do autor.

Na Figura 4-7 está representado a distribuição da fração volumétrica de óleo em diferentes intervalos de tempo (5, 10, 15, 20, 25, 30 e 39 s) referentes ao presente trabalho (b) e o de Zhu; Lin; Pan, (2014) (a). Com estes resultados é possível observar o comportamento da evolução das gotas de óleo oriundas do vazamento através do orifício na tubulação submersa. No tempo de 39 s verifica-se um maior deslocamento horizontal na superfície da água.

O jato contínuo do óleo permaneceu até aproximadamente 4,5 m de altura, havendo uma quebra deste jato ao longo da altura variando de 4,5 a 13,9 metros. Observa-se ainda que as

gotas de óleo são influenciadas pela ação da gravidade, pela diferença de densidade, pela força inercial, fluatuabilidade e tensão de cisalhamento retificando assim as observações feitas por Zhu; Lin; Pan, (2014). Observa-se que para os mesmos intervalos de tempo os resultados indicam comportamentos bastante semelhantes e que as gotas de óleo migram na mesma direção da água, sendo influenciadas pelas forças externas aplicadas ao sistema água – ar – óleo.

No tempo t igual a 39 s a extensão horizontal da gotícula de óleo é cerca de 4 vezes maior do que no tempo de 15 s. As gotículas de óleo tendem a se mover a jusante sob a ação da água, porém não é possível observar este fenômeno no fundo do canal. Com o aumento da altura, a inércia do óleo é enfraquecida pela tensão de cisalhamento da corrente.

Para as regiões que apresentam uma maior velocidade da água a transferência de energia cinética para o óleo induzido pelas forças de arraste resultam em um maior deslocamento horizontal. Observa-se na imagem que a primeira gota atinge a superfície não é a de maior distância horizontal, isto ocorre devido a variação de tamanhos das gotículas que devido ao balanço de forças (empuxo, arraste e peso) conduzem a comportamentos diferentes das gotas de óleo.

Figura 4-7- Evolução da dispersão advectiva do óleo obtida por Zhu; Lin; Pan, (2014) (a) e obtida no presente trabalho (b).

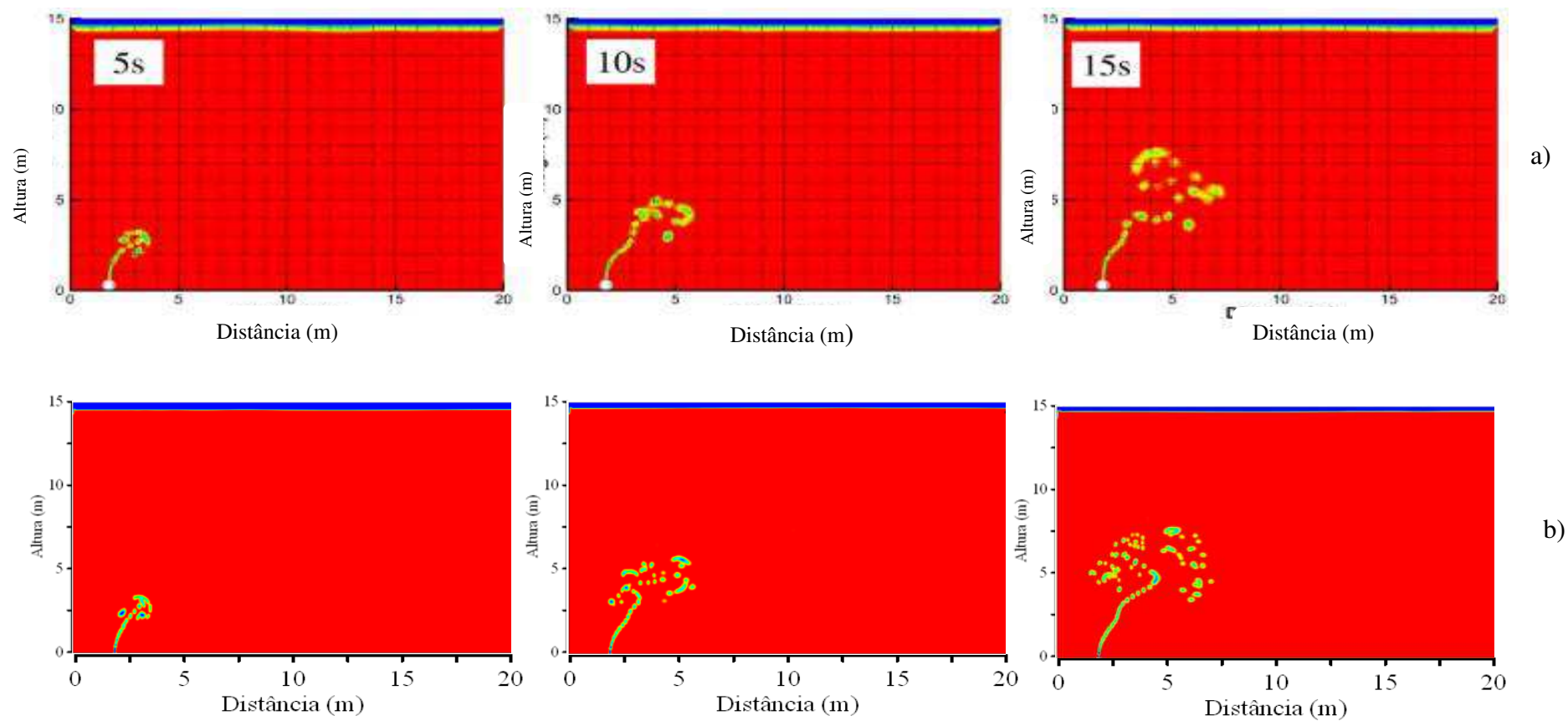


Figura 4-8- Continuação.

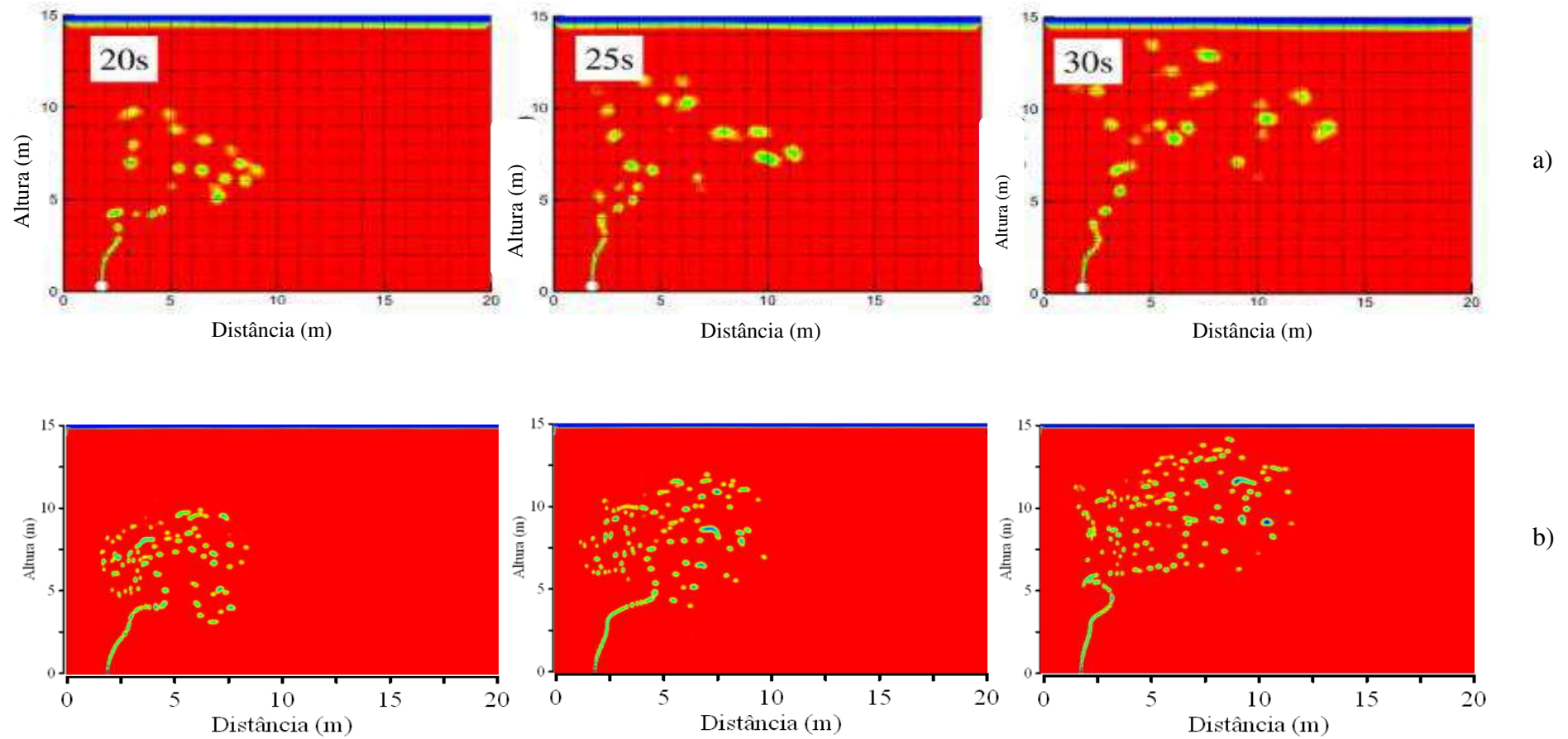
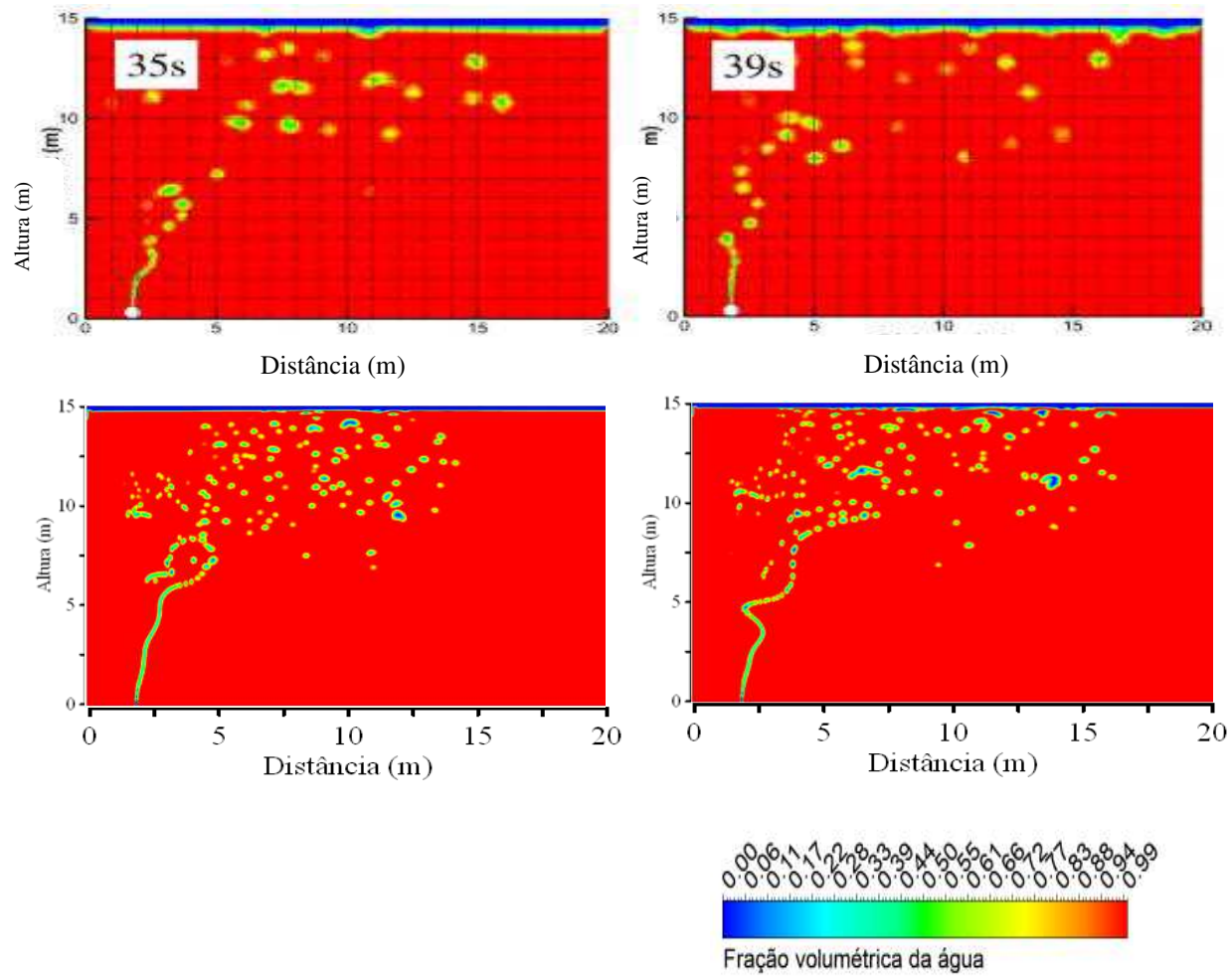


Figura 4-9- Continuação.



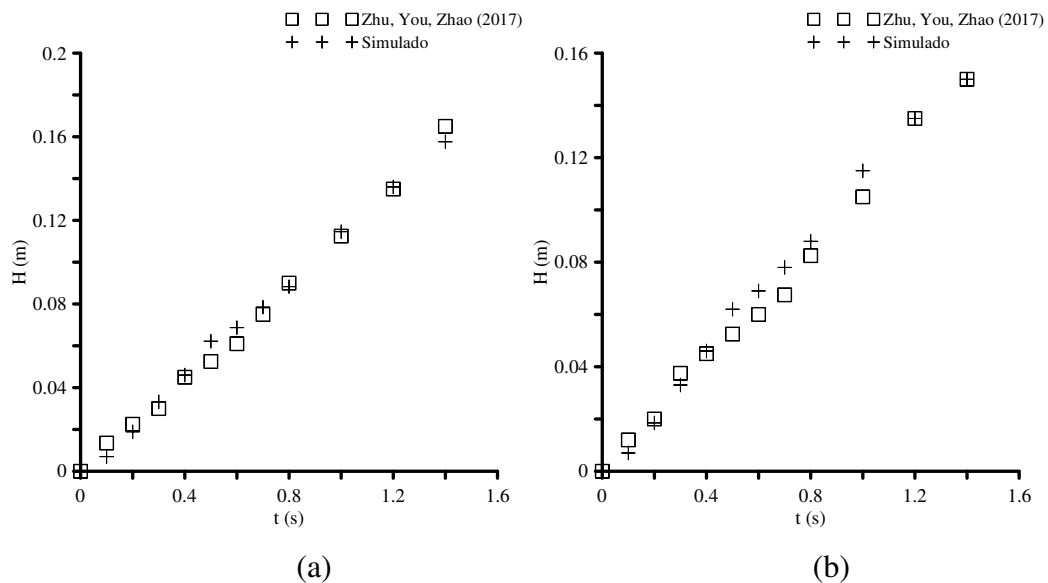
Fonte: Própria do autor.

4.1.3 Validação experimental

Para realizar a validação experimental utilizou-se os dados propostos por Zhu; You; Zhao (2017a), os autores criaram um canal de água simplificado com um vazamento na parte inferior para verificar o comportamento do óleo em situações distintas (Caso 3). Foi variada a altura do nível da água e velocidade de entrada do poluente. Foram definidos dois casos alterando-se os valores de velocidade de vazamento (0,125 m/s e 0,25 m/s) e mantendo-se constantes os valores do nível de água (0,186 m), velocidade de entrada da água (0,086 m/s).

Nas Figuras 4-8 (a) e (b) estão representados as evoluções das alturas da gota de óleo em função do tempo determinadas no presente trabalho e os reportados por Zhu; You; Zhao (2017).

Figura 4-10- Evolução da altura da gota em função do tempo com velocidade de vazamento de 0,125 m/s em (a) e 0,25 m/s em (b).



Fonte: Própria do autor.

O experimento consistiu em uma calha de recirculação de água em pequena escala (150 cm x 10 cm x 30 cm). Um tubo de vidro de 15 mm de diâmetro foi colocado no centro da calha na parte inferior ao longo da direção do fluxo. O vazamento estava localizado na parte superior do tubo com 2 mm de diâmetro.

O poluente usado foi um óleo com massa específica de 820 kg/m^3 , viscosidade cinemática de $4,25 \text{ mm/s}^2$ e tensão superficial água – óleo de 17 N/m .

Verificou-se que o padrão de transporte do poluente varia com a diferença de pressão interna e externa ao vazamento. A partir dos gráficos verifica-se que os resultados obtidos numericamente apresentam boa concordância com os dados experimentais, assim a abordagem numérica pode ser aplicada no estudo de derramamento de óleo.

4.1.4 Dispersão advectiva do benzeno

Realizou-se uma simulação tendo como poluente o benzeno cujo intuito foi verificar o comportamento dele com o passar do tempo durante o vazamento em um duto submerso, referente ao Caso 4.

A Figura 4-9 mostra a evolução da dispersão advectiva do benzeno no canal aberto nos diferentes intervalos de tempo 0,1; 10; 20; 30 e 40 s.

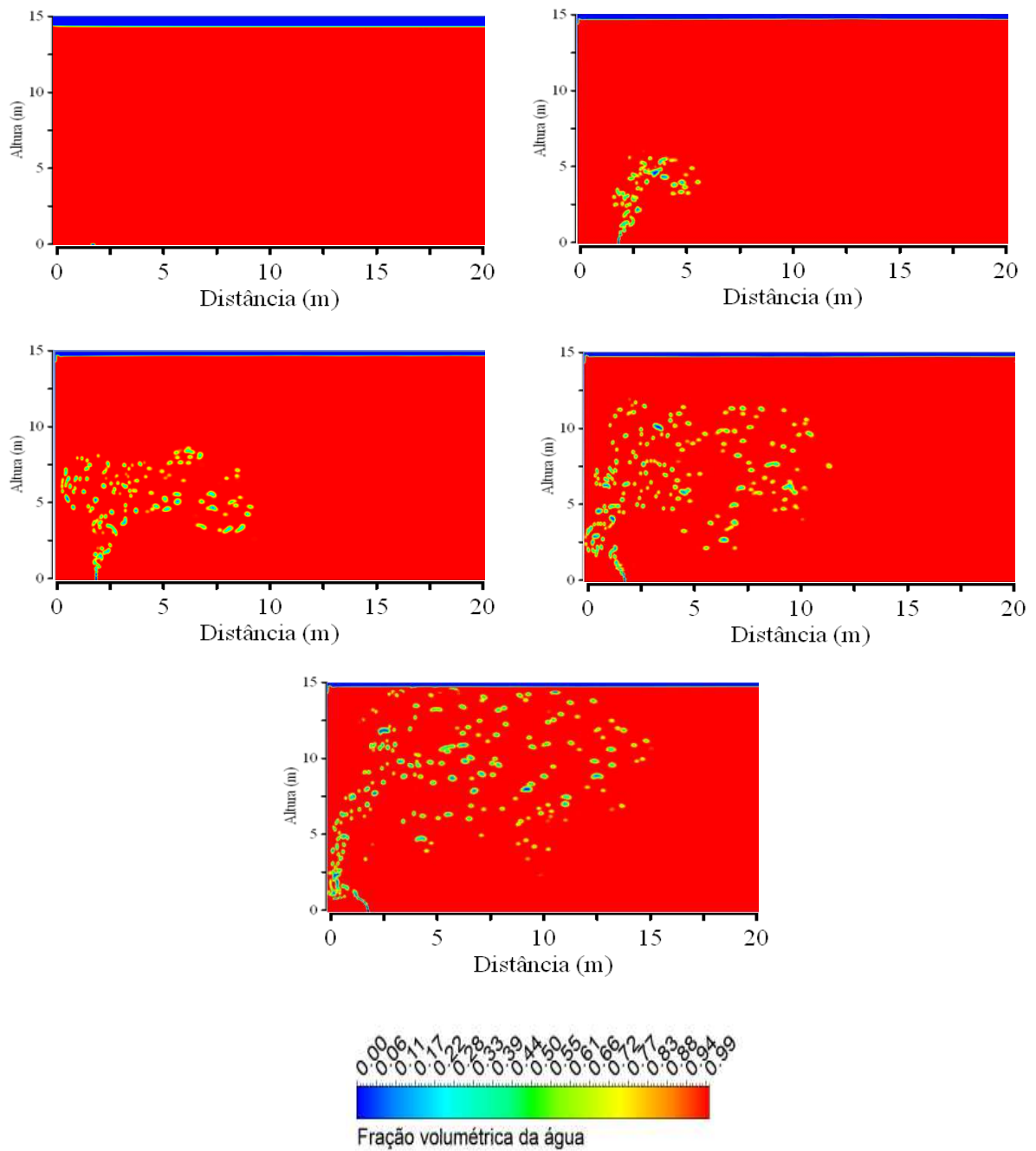
Para o tempo de 0,1 s observa-se a entrada do benzeno no meio. Já no tempo de 10 s verifica-se um pequeno jato contínuo de benzeno formado até aproximadamente 1,25 m após está altura verifica-se que o benzeno se dispersou ao longo do domínio.

Nos intervalos de tempo 20 e 30 s uma pluma de benzeno foi formada, assim como um espalhamento horizontal pode ser visto.

A evolução do benzeno ao longo do canal permite observar que as primeiras gotas atingem a superfície em 40 s. Diferentes formatos e tamanhos de gotículas são apreciados, isto acontece devido ao fato de sofrerem a ação das forças variadas tais como: peso, empuxo e arraste.

Os compostos orgânicos como o BTEX são menos densos que a água e assim favorecem a ação das forças de empuxo conduzirem verticalmente as gotas de benzeno em direção a interface água -ar. Por outro lado, as forças de arraste induzidas pela corrente da água, da esquerda para direita, movimentam as gotas de benzeno nesta mesma direção, proporcionando um movimento resultante de gotas de benzeno com angulações diferentes.

O benzeno por se tratar de um componente orgânico que possui alta capacidade de volatilização e a baixa solubilidade na água, observa-se uma dispersão molecular do benzeno em água que possibilita a formação de uma pluma do componente, conforme observado na Figura 4-9.

Figura 4-11- Dispersão advectiva do benzeno no meio aquoso nos tempos 0,1; 10; 20; 30 e 40 s.

Fonte: Própria do autor.

4.1.5 Variação da velocidade de entrada da água

Estudo da influência da variação da velocidade de entrada da água na dispersão do benzeno (Casos 5, 6, 7 e 8). Para realização deste estudo foram realizadas quatro simulações com

a velocidade da água variando em: 0,01; 0,1; 0,5 e 1 m/s, enquanto que a velocidade do poluente foi mantida num valor constante de 2 m/s. A dispersão do poluente foi afetada por um conjunto de forças que influenciaram no tamanho e posicionamento destes elementos.

A Tabela 4-7 apresenta uma comparação dos valores de vazão obtidos na região de entrada do domínio e na região de entrada do poluente no meio para os diferentes valores de velocidade da água analisados.

Com os valores quantitativos das vazões (observados na Tabela 4.7) e as imagens qualitativas da dispersão do benzeno (Figura 4-10) no meio é possível fazer uma análise das forças que predominam para as diferentes situações e que provocam no deslocamento e posição final do poluente ao longo do domínio.

Tabela 4.7 – Valores das vazões obtidas nas regiões de entrada da água e do para as diferentes velocidades estudadas.

Velocidade de entrada da água (m/s)	Vazão na entrada da água (kg/s)	Vazão de entrada do poluente (kg/s)
V (0,01)	138,7	88,2
V (0,1)	1387,5	88,2
V (0,5)	6937,8	88,2
V (1)	13875,7	88,2

Fonte: Própria do autor.

A Figura 4-10 apresenta a dispersão advectiva do benzeno nos tempos: 0,1; 1; 10; 20 e 30 s. As gotas de poluentes são submetidas a forças hidrodinâmicas variadas como forças de arraste e de sustentação. As forças peso, empuxo e arraste são as predominantes neste sistema e tiveram ação direta no deslocamento do benzeno ao longo do domínio.

O Caso 5 é apresentado na Figura 4-10 (a) de modo que a velocidade de entrada da água é de 0,01 m/s e a velocidade de entrada do poluente é de 2 m/s. Verifica-se que a partir do intervalo de tempo de 1 s o poluente tende a subir de maneira vertical, ou seja, o ângulo de contato entre a superfície sólida e o jato de benzeno tende a 90°, isto ocorre devido a alguns fatores como: a diferença de densidade entre benzeno – água, a força de empuxo foi predominante sobre as forças peso e de arraste.

Figura 4-10- Análise da dispersão do benzeno a partir da variação da velocidade da água com velocidade do poluente constante.

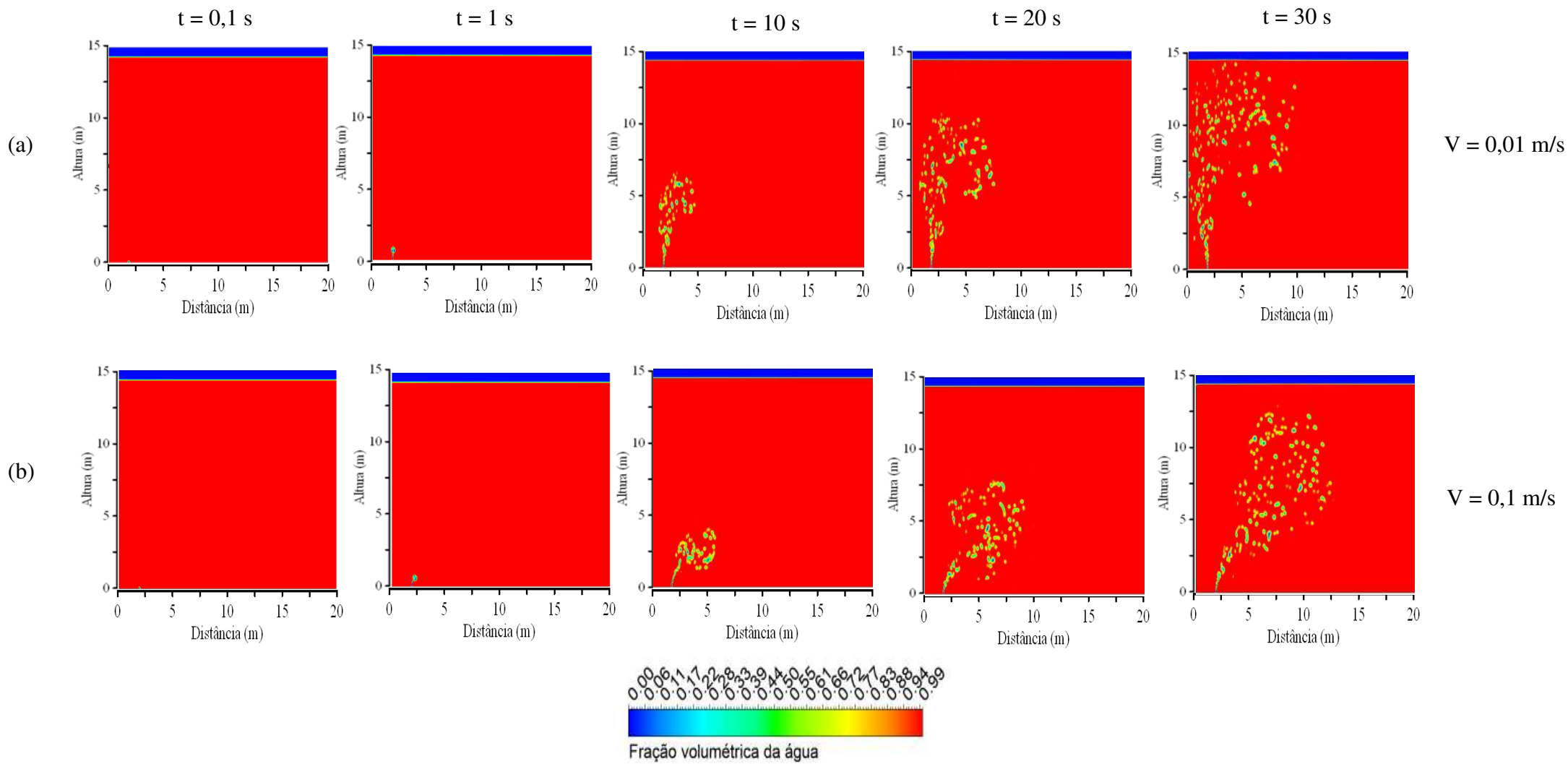
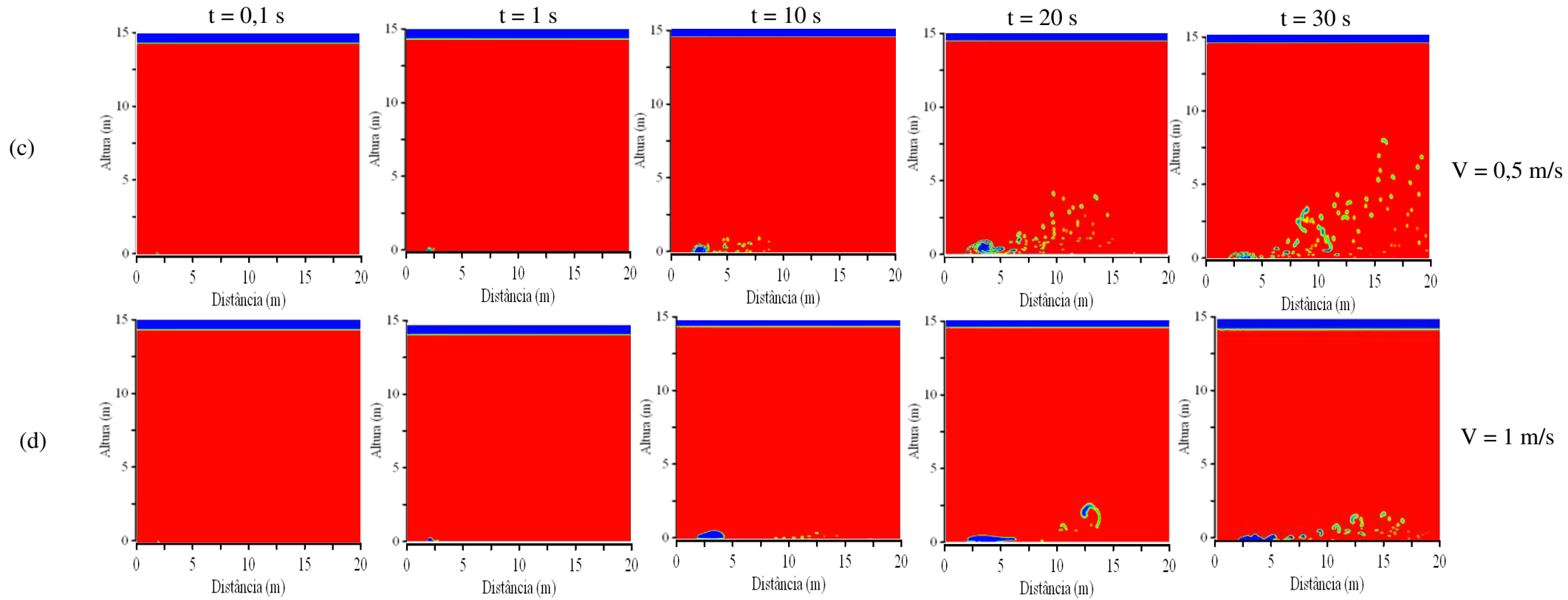


Figura 4-10- Continuação.



Fonte: Própria do autor.

Para os resultados ilustrados na Figura 4.10 (b) – Caso 6 – a velocidade da água é igual a 0,1 m/s. Verifica-se ação das forças de arraste e empuxo de forma predominante. Com esta velocidade identifica-se que o benzeno tende a acompanhar a direção do fluxo de água, a força de empuxo colabora com a subida do poluente devido a diferença de densidade. Observa-se ainda que o deslocamento do poluente teve um posicionamento distinto do que visto em (a) devido a ação da força resultante oriunda das variadas forças agindo no sistema. Já o ângulo formado entre a superfície sólida e o jato é de aproximadamente 45°.

Os comportamentos observados nas velocidades de água igual a 0,5 e 1 m/s (Casos 7 e 8) geraram ângulos entre o poluente e o piso com valores muito baixos. Verificou-se uma maior dificuldade na subida do poluente, uma hipótese para esta situação é a maior ação da força de arraste o que dificulta a flutuação do benzeno. Quando a velocidade de entrada da água é igual a 1 m/s tem-se uma maior concentração do poluente, indicando que um aumento da velocidade da água, induz a maiores dificuldades do poluente de vencer a resistência imposta pela corrente da água. A força de arraste para este caso foi dominante sobre a força de empuxo, o maior valor da vazão da água também proporcionou este comportamento do poluente que não apresentou força suficiente para vencer a camada da água.

Fatores como variação de pressão, variação de velocidade, vazão tendem a interferir no posicionamento do poluente deslocado, outros parâmetros como arraste, empuxo, turbulência, forças cisalhantes podem provocar a perda de momento. Estudos realizados como por exemplo o por Zhu et al., (2017a) e Feller (2012) corroboram com os resultados obtidos. Bem como os de Feller (2012) que verificou que baixas vazões tendem a provocar forças monodispersas, enquanto Zhu et al., (2017a) observou que situações com variação de pressão acima de 800 Pa tende a originar jatos contínuos.

A influência da velocidade de entrada da água está diretamente relacionada com a dispersão e espalhamento do poluente, corroborando com os resultados desta pesquisa observa-se o trabalho realizado por Lima (2015) que viu que nos períodos de chuva ocorrem um maior transporte do poluente devido ao aumento de velocidade das águas do corpo hídrico, a contribuição convectiva é observada em regiões com valores mais elevados de velocidade verificando-se para estes casos um maior arraste.

A partir da Tabela 4.7 observa-se para o Caso 5 (velocidade da água igual a 0,01 m/s) que os valores da vazão da água e do benzeno foram semelhantes, isto considerando a entrada de massa da água que é relativamente superior a entrada de massa do benzeno. Sendo assim, a

taxa inicial de benzeno para estas condições foi elevada o suficiente para alcançar a superfície. Estas observações corroboram com os resultados apresentados por Ji et al., (2020).

Observa-se na Tabela 4.7 que o aumento de velocidade de entrada da água gera um aumento na vazão da água o que resulta em uma maior força e energia cinética do fluido, com isso nota-se que o aumento de velocidade da água provoca um maior arraste do benzeno.

4.1.6 Variação da velocidade dos poluentes

Para realizar o estudo da influência da variação da velocidade do poluente (Casos 9,10 e 11) sobre o sistema de dispersão no ambiente água - ar foram feitas três simulações com as velocidades do poluente variando em: 0,5; 1 e 2 m/s, enquanto que a velocidade de entrada da água foi de 0,1 m/s a avaliação foi realizada em diferentes intervalos de tempo 0,1; 1; 5; 10; 15; 20; 25 e 30 s.

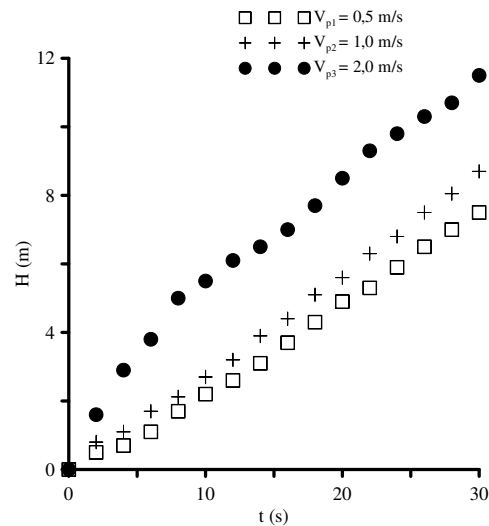
A Tabela 4.8 apresenta as vazões da água e do poluente para o caso com diferentes velocidades do poluente e velocidade da água constante. A partir do aumento da velocidade observa-se uma maior vazão, conseqüentemente uma maior força e energia cinética.

Tabela 4.8 – Vazões obtidas para entrada da água e entrada do poluente.

Velocidade de entrada do poluente(m/s)	Vazão na entrada da água (kg/s)	Vazão de entrada do poluente (kg/s)
V (0,5)	1387,5	22,0
V (1)	1387,5	44,1
V (2)	1387,5	88,2

Fonte: Própria do autor.

Na Figura 4-11 está representada a relação do tempo com a altura para as velocidades do poluente igual a 0,5; 1 e 2 m/s. Observa-se no gráfico que o aumento da velocidade de entrada do poluente provoca uma modificação nos seguintes parâmetros: maior deslocamento vertical, maior jato inicial originado causado devido ao diferencial de pressão entre o meio e o vazamento e menor tempo de chegada na superfície.

Figura 4-11- Relação altura e tempo da subida do poluente.


Fonte: Própria do autor.

A Figura 4-12 apresenta a dispersão advectiva do benzeno a partir da variação da velocidade dos poluentes, mantendo-se a velocidade de entrada da água constante em diferentes intervalos de tempo. Para os tempos iniciais (0,1 e 1 s) observa-se comportamentos semelhantes nas diferentes velocidades, sendo possível verificar a influência do fluxo de água no posicionamento do poluente.

Nos tempos de 5 e 10 s identifica-se diferenças notórias na altura de alcance do benzeno, bem como a diferença no ângulo de contato entre o jato de poluente e o piso. Nos tempos de 15, 20, 25 e 30 s fica evidente que quanto maior a velocidade do poluente maior o seu alcance vertical. Outra observação é que para o caso de velocidade de 2 m/s (Caso 11) o jato de benzeno formado foi maior o que mostra a presença de um maior diferencial de pressão. Para todos os casos tem-se a ação das forças peso, empuxo e arraste; sendo que para estas velocidades em análise originou-se uma força resultante influenciada pelas forças de empuxo e o arraste provocado pelo fluxo de água.

Os resultados obtidos para estes casos estudados corroboram com os resultados de Ji *et al.*, (2020) indicando que quanto maior a taxa de vazamento de óleo maior o impulso inicial e menor o tempo gasto para chegar na superfície. O processo de derramamento de óleo subaquático pode ser dividido em estágios: estágio do jato de pluma e o estágio de difusão de flutuação, como apresentado por Ji *et al.*, (2020).

O jato inicial (vertical) é ocasionado pelo impulso inicial do vazamento a diferença de pressão do orifício e o meio, após este impulso as gotículas de óleo migraram principalmente com a movimentação das correntes oceânicas bem como devido as flutuações.

Quando a velocidade de entrada do óleo é menor a diferença de velocidade entre dois estágios é menor devido ao pequeno momento inicial, gerando uma curva de migração mais suave do primeiro para o segundo estágio.

Na Figura 4-13 são apresentados os diferentes formatos de jato de poluente nas três velocidades analisadas em intervalos de tempo distintos. Observa-se para as velocidades de 0,5; 1 e 2 m/s no tempo de 10 s que o jato foi mais prolongado, laminar, estável, mas ao atingir certa altura se desfaz em gotas, tendo efeito predominante do arraste sendo levada com a direção da correnteza. Para o tempo de 30 s o jato teve uma força mais forte tendendo a subir quase que perpendicular, com o aumento da velocidade verifica-se uma maior turbulência e dispersão no meio.

O momento inicial é um parâmetro que influencia no formato do jato do vazamento, outros parâmetros como as características do espalhamento e a altura da elevação vertical do óleo estão diretamente relacionadas a taxa de vazão.

O jato ao ser quebrado promove o aparecimento de gotículas com diferentes tamanhos e formatos geradas a partir da turbulência, da vazão da água e o arraste. Resultados semelhantes foram obtidos por Zhu *et al.*, (2017a) que verificaram a influência do momento inicial na altura de flutuação, bem como o diferencial de pressão, o fluxo de cisalhamento e uma velocidade média de transporte atuam sobre as gotículas de óleo fazendo-as se deslocarem de acordo com as condições propostas.

Observa-se ainda na Figura 4-13 (a) que para o mesmo tempo (10 s) com velocidades distintas a formação de gotículas foram variadas. Com o aumento da taxa de vazão mais gotículas foram formadas, isto deve ter acontecido devido a maior instabilidade gerada no sistema, o aumento da turbulência no meio tende a provocar uma maior geração de gotas de variados tamanhos, outros parâmetros que influenciam nelas são densidade, viscosidade, molhabilidade como apresentado por Yoon *et al.*, (2019). Para o tempo de 30 s maior a quantidade de gotículas geradas e dispersas, tendo um maior deslocamento horizontal para a velocidade de 2 m/s.

Observa-se ainda na Figura 4-13 (a) para o tempo de 30 s que quanto maior a velocidade de entrada do poluente menor o tamanho das gotículas. O aumento da taxa de vazão do óleo gera um aumento na tensão de cisalhamento, ela está relacionada ao nível de deformação das

gotas, que provoca uma maior formação de gotículas, resultados semelhantes foram identificados por Che *et al.*, (2017) corroborando com o que foi visto nesta pesquisa.

A Figura 4-13 (b) apresenta de maneira aproximada a região de entrada do poluente para verificar o comportamento do jato de óleo em função da variação da velocidade de entrada do poluente. Verifica-se nas imagens que o aumento de velocidade de entrada do óleo tende a provocar um jato mais contínuo em função da distância. Para a velocidade de 0,5 m/s o jato de óleo formado teve influência predominante da força de arraste, isto pode ser visto na direção de escoamento assumido por ele. No tempo de 30 s para o mesmo caso observa-se que o jato contínuo está com menor altura e há formação de gotículas do óleo.

Para as velocidades de 1 e 2 m/s verifica-se que a força de arraste não predomina sobre o posicionamento do jato devido ao maior diferencial de pressão entre o vazamento e o meio, sendo assim com o aumento da velocidade de entrada do poluente identifica-se uma maior verticalização no jato, assim como observa-se que no tempo de 30 s o jato começa a desfragmentar e gotículas começam a se formar.

Figura 4-12- Dispersão advectiva do benzeno com variação da velocidade do poluente nos tempos 0,1; 1; 5; 10; 20 e 30 s.

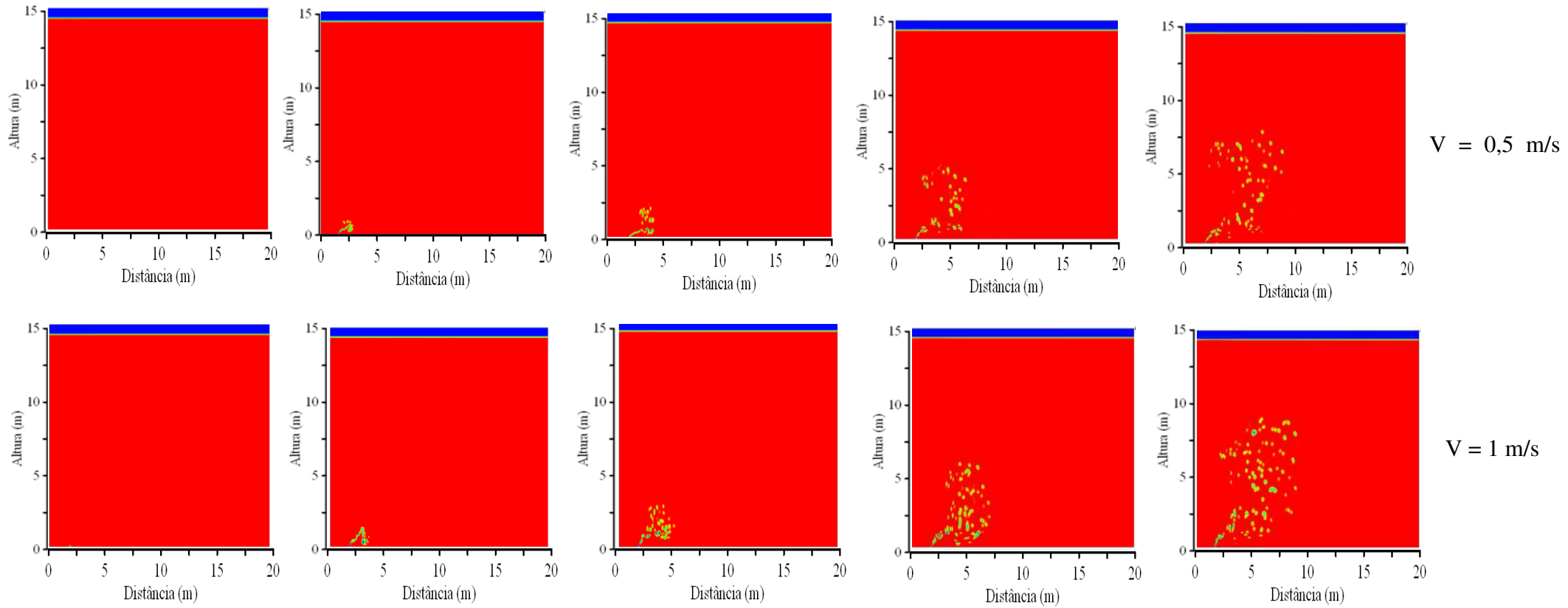
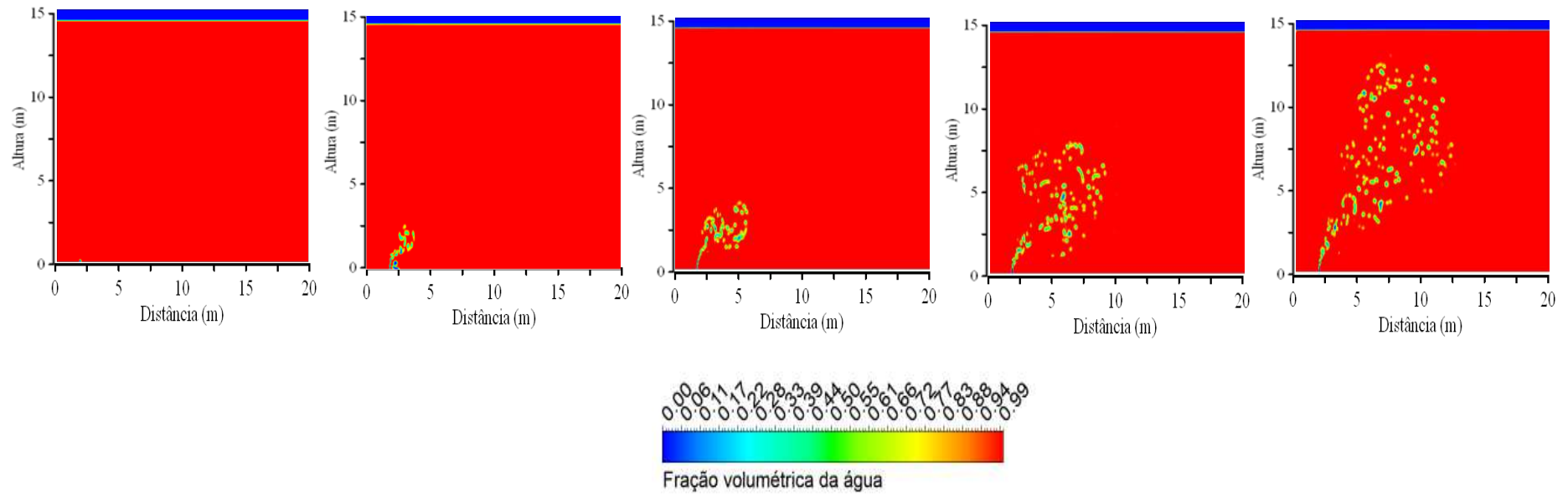
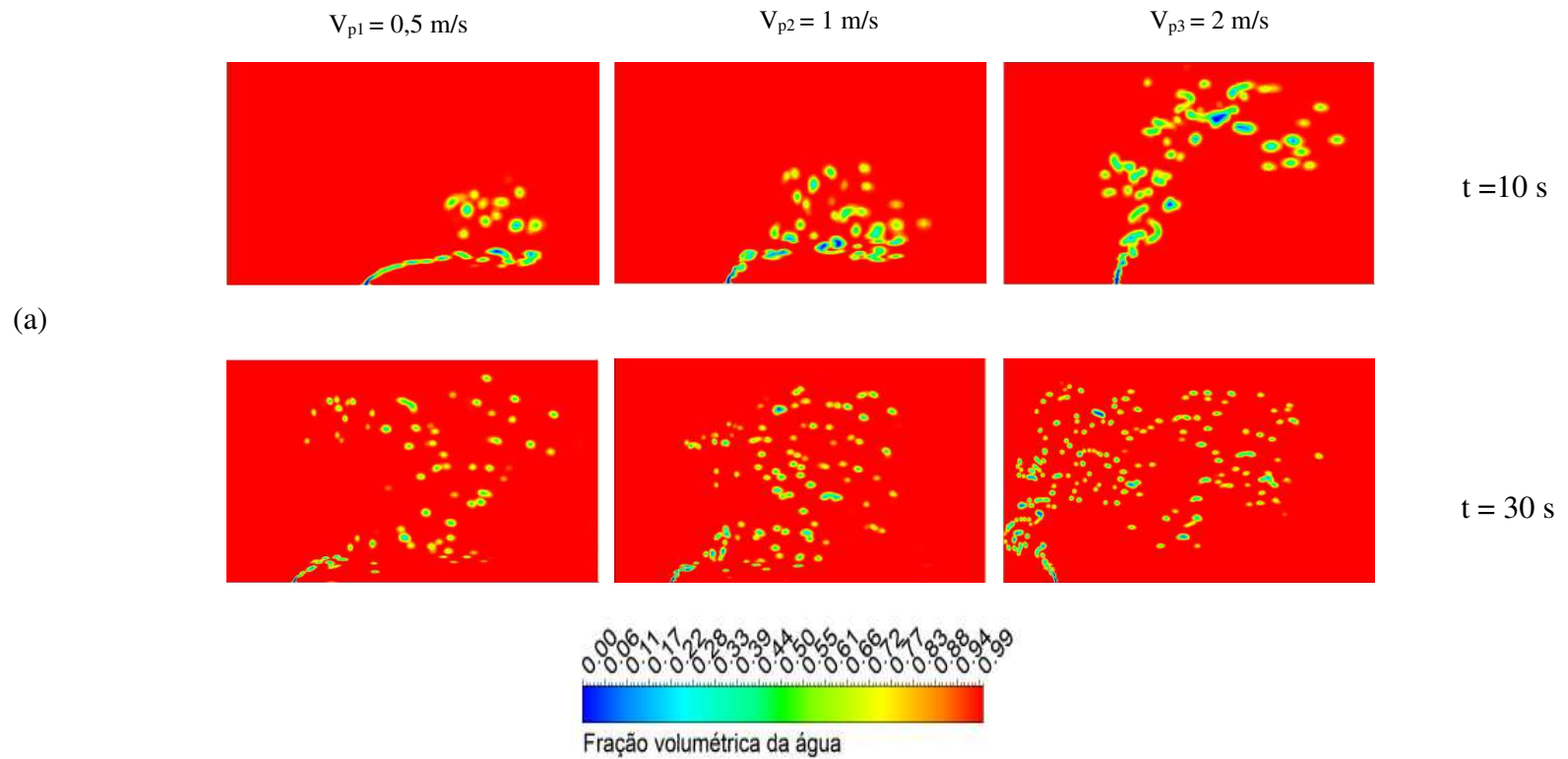


Figura 4-12- Continuação.

 $V = 2 \text{ m/s}$

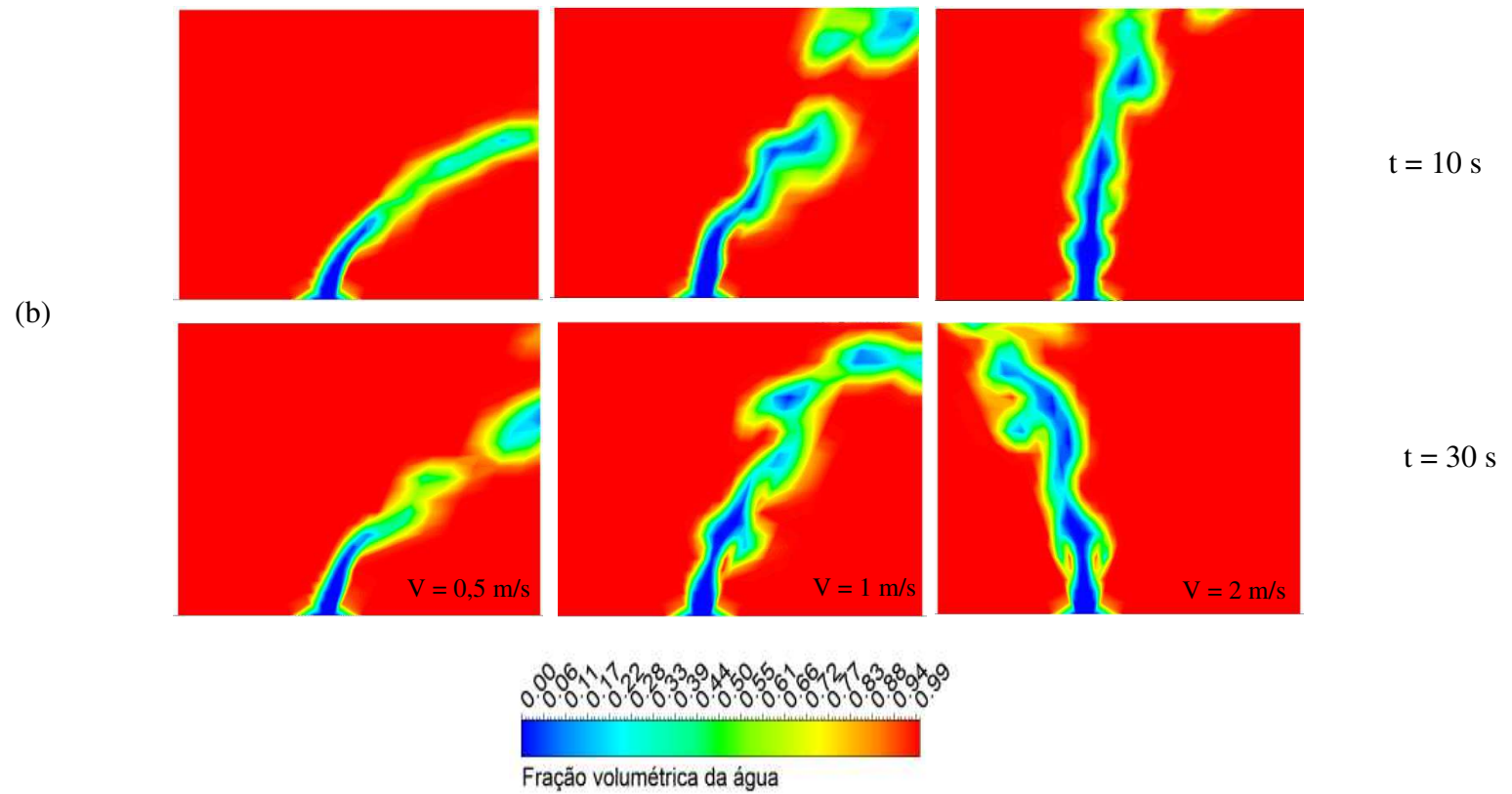
Fonte: Própria do autor.

Figura 4-13- Diferentes formas do jato de poluente para velocidades variadas (a) Domínio geral; (b) Aproximação na região de entrada do óleo.



Fonte: Própria do autor.

Figura 4-13- Continuação.



Fonte: Própria do autor.

4.1.7 Variação das frações volumétricas

O estudo da dispersão advectiva do benzeno e do óleo a partir da variação da fração volumétrica nas porcentagens 0; 0,25; 0,5 e 1 é apresentado no Caso 12. Para análise da influência da fração volumétrica fixou-se as velocidades de entrada da água e a velocidade de entrada do benzeno em: 0,1 m/s e 2 m/s, respectivamente.

A Figura 4-14 (a) apresenta os resultados gerados para uma composição de 100% de óleo e 0% de benzeno em diferentes intervalos de tempo. Em (b) tem se uma composição de 25% de benzeno e 75% de óleo. Em (c) tem se uma composição de 50% de benzeno e 50% de óleo. Em (d) tem se uma composição de 75% de benzeno e 25% de óleo e em (e) uma composição de 100% de benzeno e 0% de óleo.

Observa-se nas figuras que para o caso (a) com apenas óleo puro houve uma tendência de formação de jato contínuo próximo a região do vazamento e que está tendência foi quebrada (b, c, d e e) à medida que o benzeno foi sendo introduzido na composição, outro material insolúvel, presente no vazamento.

Identifica-se a partir das figuras que a presença do benzeno tende a provocar uma maior dispersão no poluente. Quando na composição havia apenas óleo puro o poluente tendeu a ficar mais concentrado, porém, com o acréscimo do benzeno houve uma mudança no comportamento e deslocamento do poluente. Assim, observa-se que a quantidade e presença dos variados compostos que formam um determinado contaminante podem influenciar na forma de propagação e posicionamento final.

A Figura 4-15 apresenta os perfis de velocidade ($y = 1$ m) ao longo do domínio para as frações volumétricas 0,25; 0,5 e 0,75 de benzeno. Percebe-se que com o aumento da fração volumétrica menor o valor da velocidade do poluente, sendo uma relação inversamente proporcional entre os parâmetros, mostrando ainda que a concentração de poluente tem influência na dinâmica do escoamento em todo o ambiente em estudo. Com o aumento da fração volumétrica maior a interação entre as fases e ocorre a mudança na dinâmica do meio, corroborando com o trabalho de Nunes (2019).

Figura 4-14- Variação da fração volumétrica do óleo – benzeno em diferentes intervalos de tempo. Em (a) 0 de benzeno; (b) 0,25 de benzeno; (c) 0,5 de benzeno; (d) 0,75 de benzeno e (e) 1 de benzeno.

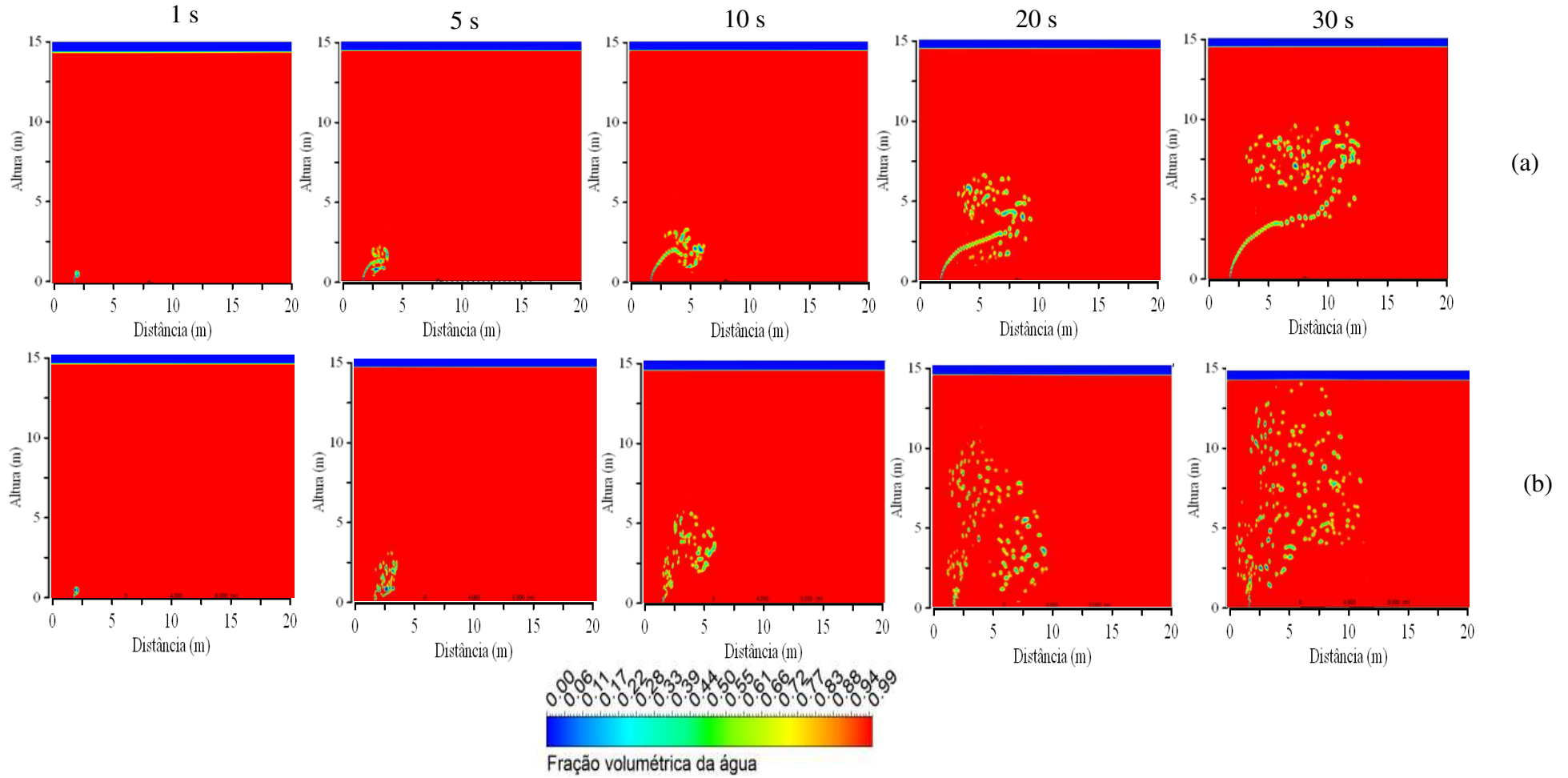


Figura 4-14- Continuação.

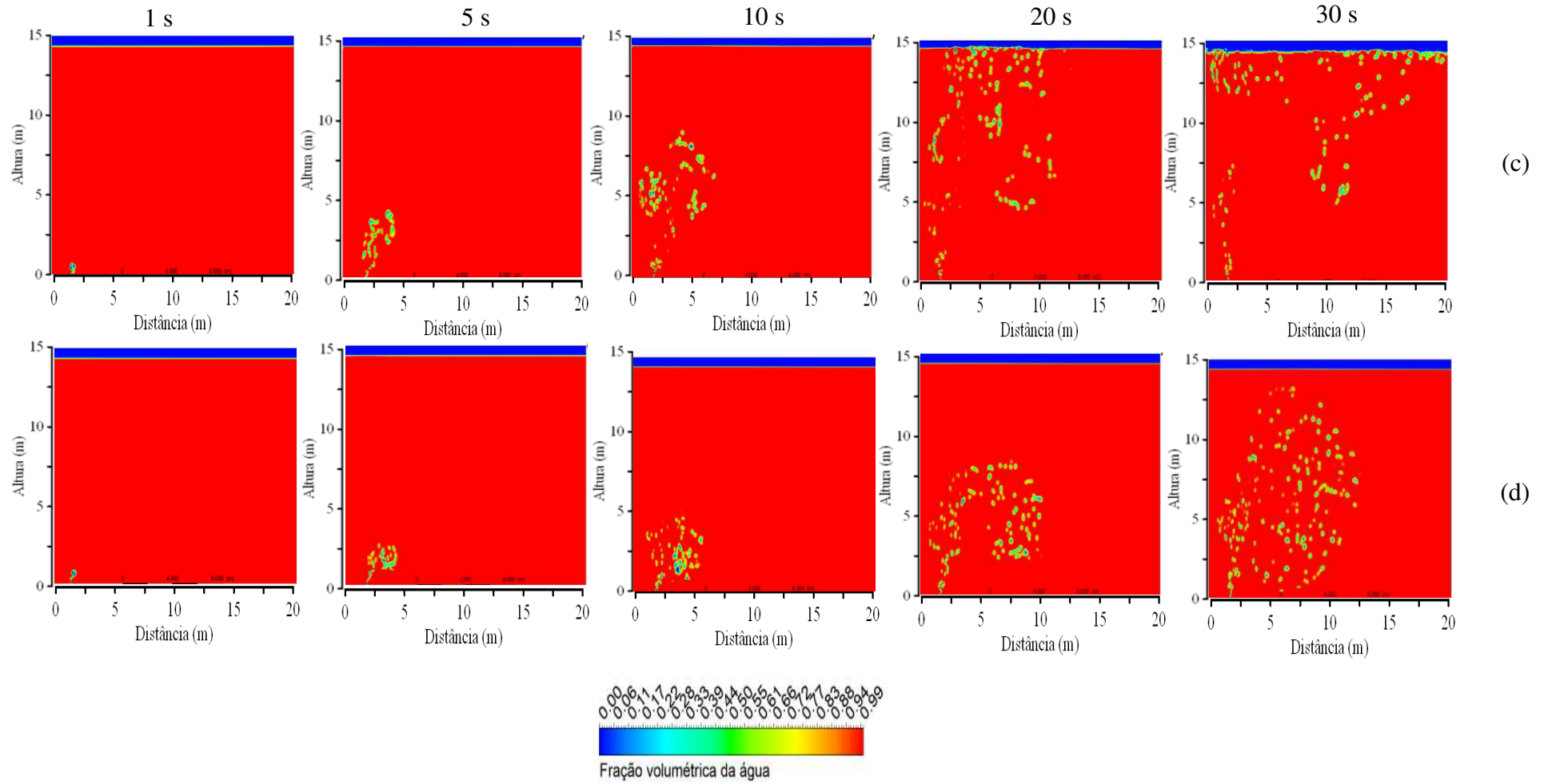
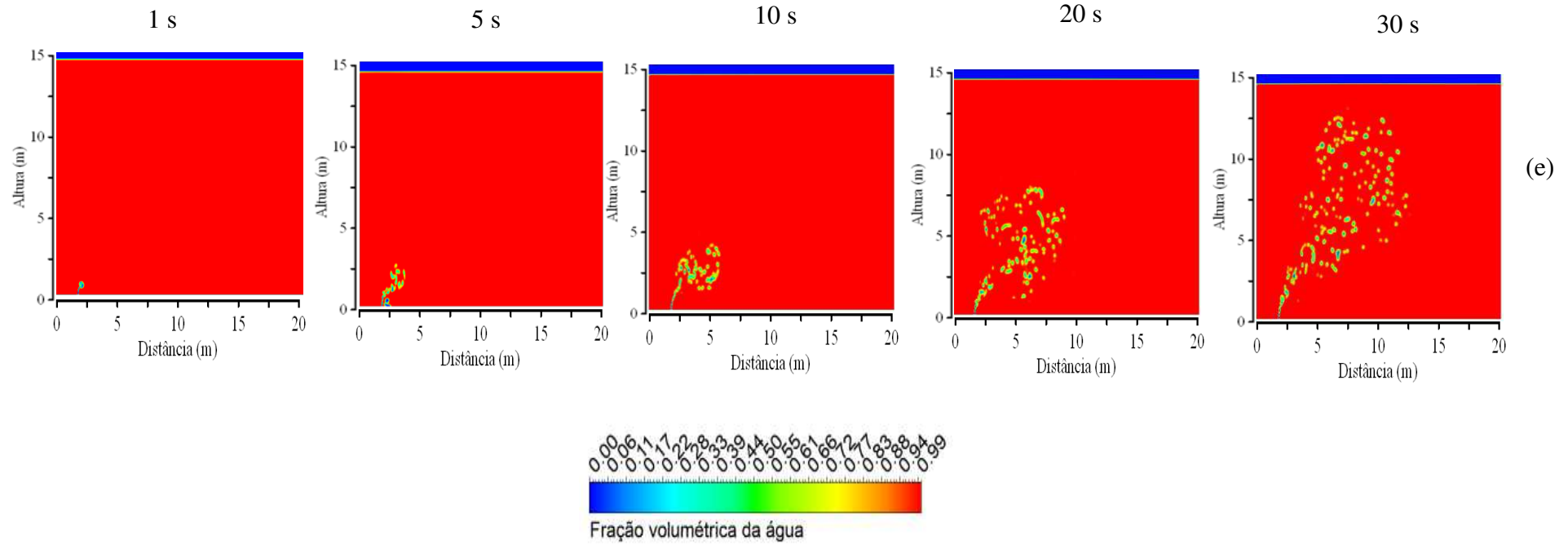
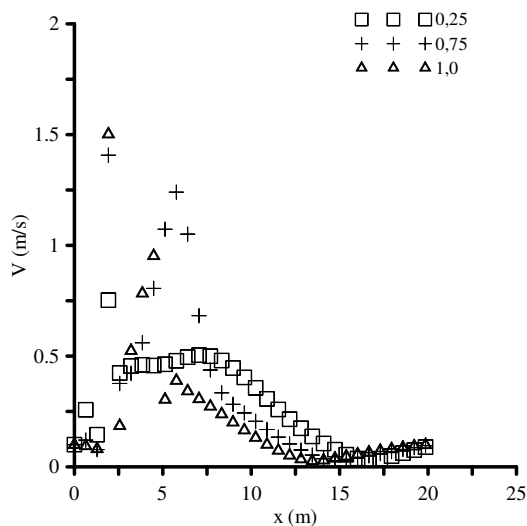


Figura 4-14- Continuação.



Fonte: Própria do autor.

Figura 4-15- Perfis de velocidades do benzeno para as diferentes frações volumétricas.

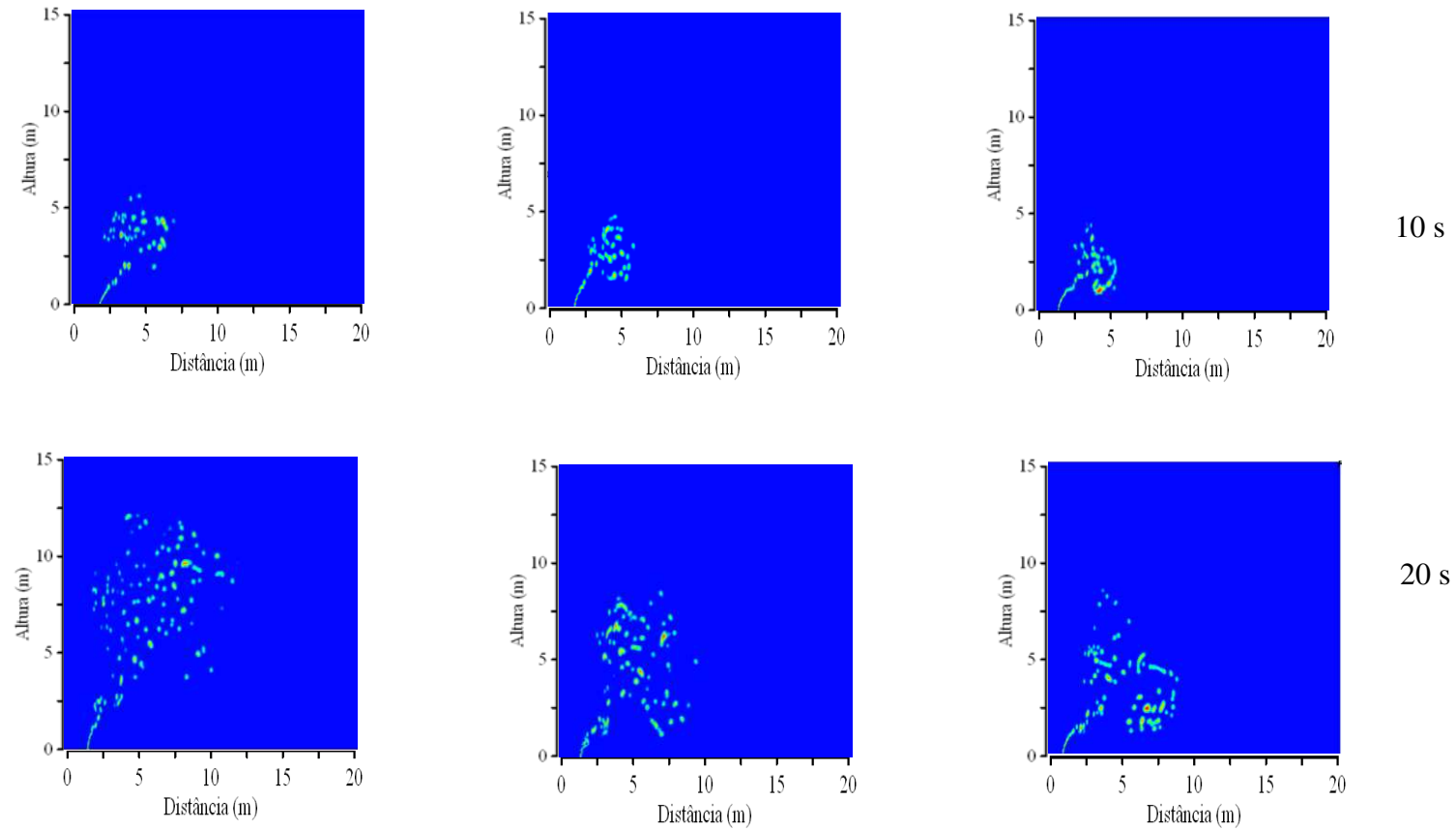
Fonte: Própria do autor.

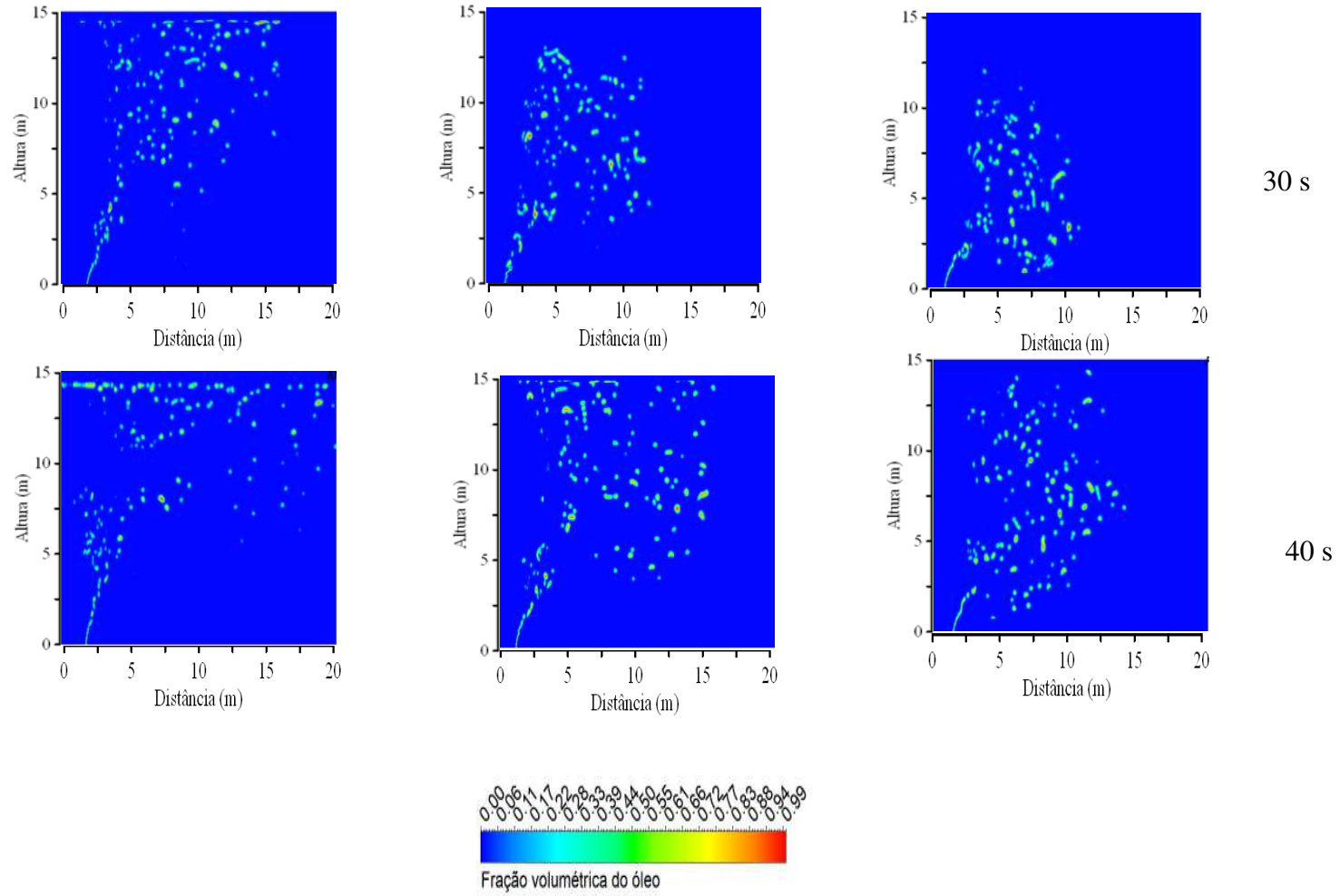
4.1.8 Variação da densidade do óleo

A dependência da dispersão do poluente com a variação da densidade (750, 870 e 930 kg/m^3) em diferentes intervalos de tempo corresponde ao Caso 13. Para realização destes estudos considerou-se as velocidades de entrada da água e do poluente constantes com valores de 0,1 e 2 m/s , respectivamente.

Na Figura 4-16 está representado o comportamento das gotículas de óleo em relação ao tempo em diferentes densidades de óleo. Pode-se perceber a partir do tempo de 20 s que quanto maior a densidade mais tempo o poluente leva para chegar à superfície. As forças de empuxo, peso e arraste atuam de formas distintas ao longo do domínio.

Para gotículas de mesmo tamanho e mesma densidade, as forças de empuxo aplicadas são iguais, já as gotas de maior densidade maior a força peso aplicada, o que dificulta a subida do poluente. Sendo assim, quanto maior a densidade maior a ação da gravidade e a força peso passa a ser a força predominante, impedindo assim o deslocamento rápido da gotícula.

Figura 4-16- Fração volumétrica do óleo a partir da variação da densidade (750, 870 e 930 kg/m³).



Fonte: Própria do autor.

Nas mesmas condições de correntezas de ondas verificou-se que quanto maior a densidade do óleo maior o tempo necessário para alcançar a superfície. Nos mesmos intervalos de tempo, por exemplo em 30 s, o óleo mais leve ($\rho = 750 \text{ kg/m}^3$) se espalha mais rapidamente. Já o óleo mais pesado ($\rho = 930 \text{ kg/m}^3$) parte do óleo derramado tende a ficar na região inferior do domínio, mostrando assim a ação da força gravitacional sobre as gotículas, portanto, para realizar respostas rápidas em casos de acidentes com óleos pesados deve-se ter uma atenção tanto na superfície do ambiente quanto no solo. Resultados semelhantes foram obtidos por Zhu *et al.*, (2017a) corroboram com os resultados desta pesquisa.

O óleo de maior densidade derramado no meio é menos flutuante no mar, o que explica o aumento do tempo na subida vertical, comportamentos semelhantes foram observados em Sun *et al.*, (2019).

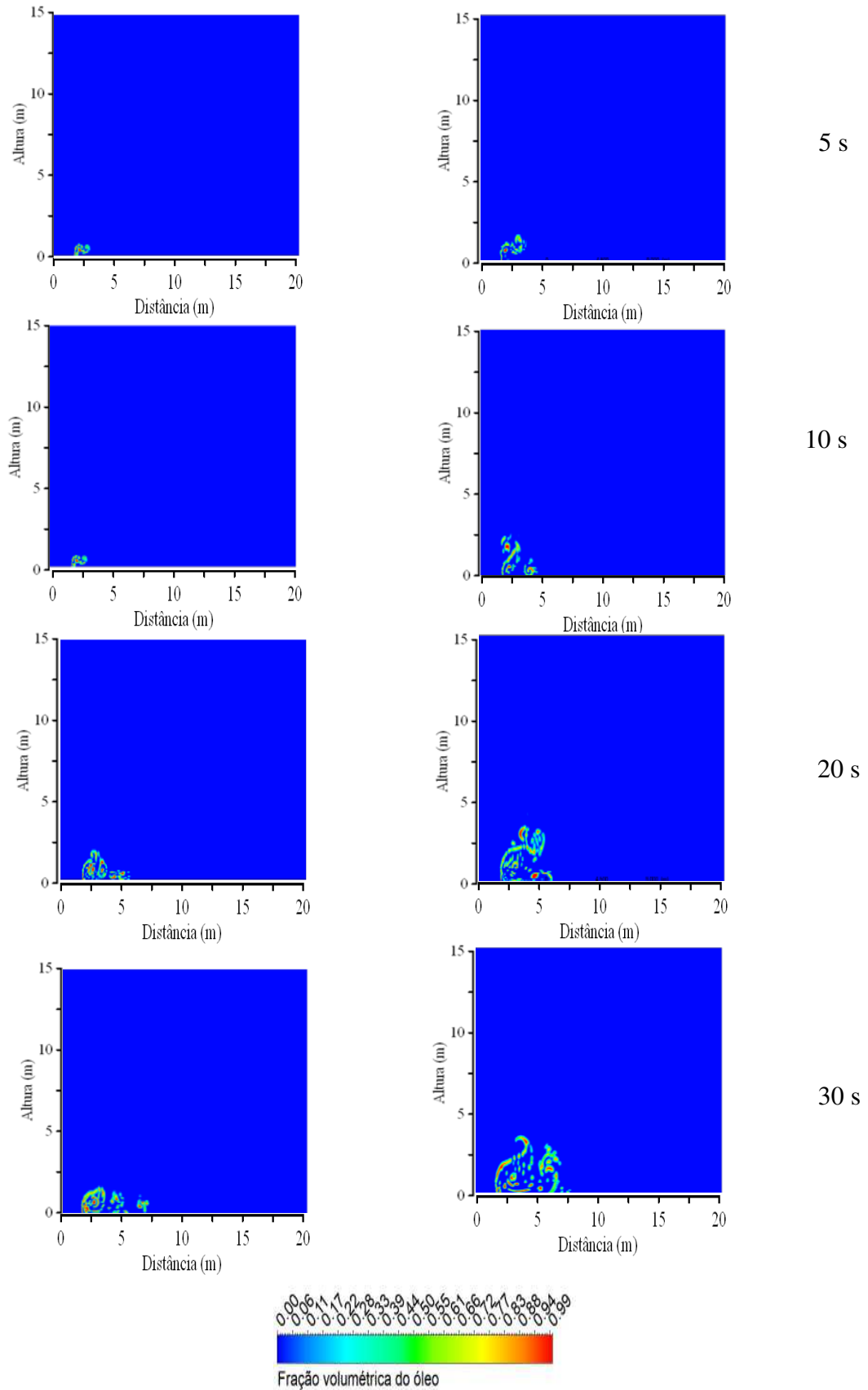
4.1.9 Influência das variações da velocidade do poluente com densidades da água e poluente iguais

Nesta seção analisou-se a dispersão do poluente no meio em relação ao tempo. Considerou-se para estes casos (16 e 17) que a densidade do poluente seria igual a densidade da água e as velocidades de entrada do poluente iriam variar em 1 e 2 m/s. O intuito desta análise é verificar a influência da taxa de vazão no deslocamento do óleo. Os resultados destas simulações estão representados na Figura 4.17.

É possível observar na Figura 4.17 que com o aumento da velocidade do vazamento ou vazão tem-se uma pequena influência da velocidade do vazamento no deslocamento do óleo em direção da superfície. Nota-se que o óleo ficou nas proximidades da base ou solo, que é explicado pela inexistência de diferença de densidade que equilibram as forças de empuxo e peso. Sendo, assim, as forças de arraste responsáveis pela movimentação do óleo na água induzido pela entrada de óleo no domínio.

Verifica-se ainda, que para velocidade do poluente igual a 2 m/s, um maior deslocamento horizontal e a maior altura atingida pelo óleo, que pode ser explicado pela maior força aplicada pela entrada de óleo no domínio de estudo. Em 40 s para velocidade de 2 m/s percebe-se uma maior formação de vórtices que são dispersados à medida que o jato de óleo adentra na água e a formação das gotas de óleo com diferentes tamanhos, em consequência da resistência viscosa proporcionada pela água e a força de arraste imposta pela velocidade que o óleo é injetado no domínio de estudo. A ação da densidade foi um fator significativo na dispersão do poluente nestas análises.

Assim, observa-se que poluentes com densidades iguais as densidades do meio, apresentam uma maior dificuldade em atingir a superfície. Para o caso em estudo viu-se que o aumento da velocidade de entrada do poluente gerou um maior deslocamento horizontal, mas o poluente atingiu um baixo valor em altura.

Figura 4-17- Variação da velocidade do poluente (1 e 2 m/s) para densidades iguais.

Fonte: Própria do autor.

4.1.10 Influência da barreira de contenção

Para se estudar a influência da presença de uma barreira de contenção de poluentes (considerou-se apenas óleo) oriundo de um vazamento subaquático (Caso 18). Adotou-se o domínio de estudo com 60 metros de comprimento e 13,5 metros de altura, com nível da água em 12,9 metros. A barreira de contenção com 3 metros de comprimento foi posicionada a 1 metro de altura e 19 metros a montante da entrada do domínio, conforme ilustrado na Figura 3-3.

A Figura 4-18 apresenta o comportamento da dispersão do óleo em função do tempo ao longo do domínio. Em t igual a 20 s é possível verificar a formação de vórtices com a entrada do poluente no domínio, isto ocorre devido ao diferencial de pressão entre o vazamento e o meio.

Observa-se que até os 40 s iniciais os o óleo ainda não tinha atingido a superfície. No tempo t igual a 60 s é possível verificar que parte do poluente já havia atingido a superfície. Três situações foram observadas: uma parte do poluente foi contida pela barreira, parte do poluente não atingiu a barreira e parte do poluente passou por baixo da barreira.

Alguns parâmetros podem contribuir para que o poluente escape da barreira tais como: velocidade da água (quanto maior a velocidade maior o arraste dos fluidos), a diferença de densidade do poluente e do meio, posição e formato da barreira, presença de ondulações e correntezas oceânicas.

A partir de 80 s identifica-se a junção das gotículas do poluente que atingiram a barreira e se localizaram a montante dela. Esta junção é visível de forma mais evidente a partir de 100 s, deste tempo em diante nota-se a geração de uma camada de poluente na superfície da água.

Óleos com baixa viscosidade tendem a escapar mais facilmente que óleos viscosos, sendo assim dependendo do tipo de poluente a barreira apresentará maior ou menor eficiência na contenção. Ambientes marinhos apresentam elevadas ações das correntezas e ondulações o que formam cenários turbulentos que tendem a arrastar as gotículas de óleo na parte inferior da barreira em um processo chamado de *Entrainment*, a presença dos vórtices de turbulência tende a permitir que o óleo escape sob a barreira.

Quando o óleo atinge uma espessura acumulada crítica irá escoar pela parte inferior da barreira. Condições de correntes, ondas e ventos podem ocasionar movimentos aleatórios nas águas o que gera mudanças de posição da barreira, bem como flutuações diversas. Óleos com baixa viscosidade estão sujeitos a um processo chamado *drainage failure* que ocorre quando

fortes correntezas quebram gotículas de óleo acumulados na barreira, fazendo com que elas migrem por baixo dela. Para os óleos com maior viscosidade camadas mais espessas podem ser formadas ao atingir uma espessura acumulada crítica, o óleo irá escoar por baixo da barreira este processo é chamado de acumulação crítica (ITOPF, 2014).

Em t igual a 160 s é possível observar o processo de acumulação crítica, o óleo atingiu uma determinada camada de espessura e tendeu a escoar por baixo da barreira.

Observa-se a partir das imagens que a barreira de contenção analisada respondeu de maneira satisfatória a retenção de parte do poluente.

Na Figura 4-19 (Caso 19) está representado o comportamento da dispersão do óleo a partir do orifício de vazamento na presença da barreira de contenção em diferentes intervalos de tempo 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80 e 90 s com a presença de ondas no meio, considerando as ondas com 52 metros de comprimento e amplitude de 1 metro. Os resultados indicam que mesmo na presença de ondas a barreira de contenção é capaz de reter o óleo impedindo a propagação do óleo sobre a superfície da água. Ao se comparar os resultados apresentados nas Figuras 4-18 e 4-19 onde estão representados, respectivamente, o comportamento da retenção de óleo pela barreira de contenção na ausência e na presença de ondas é possível observar que a presença de ondas leva a passagem da água e do óleo sobre a superfície da barreira de contenção (lembrando que a mesma foi considerada estática) enquanto não é observado sem a presença de ondas.

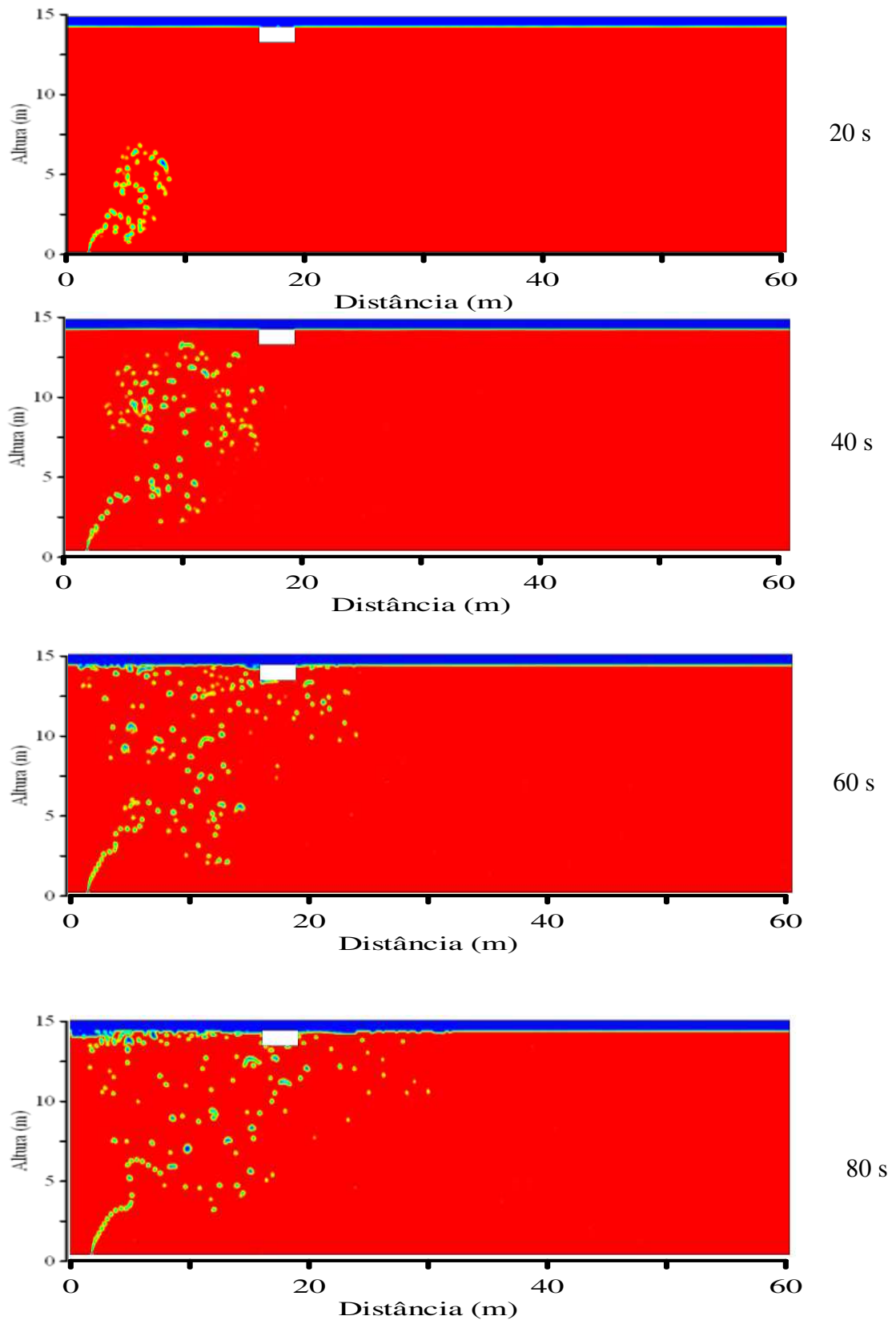
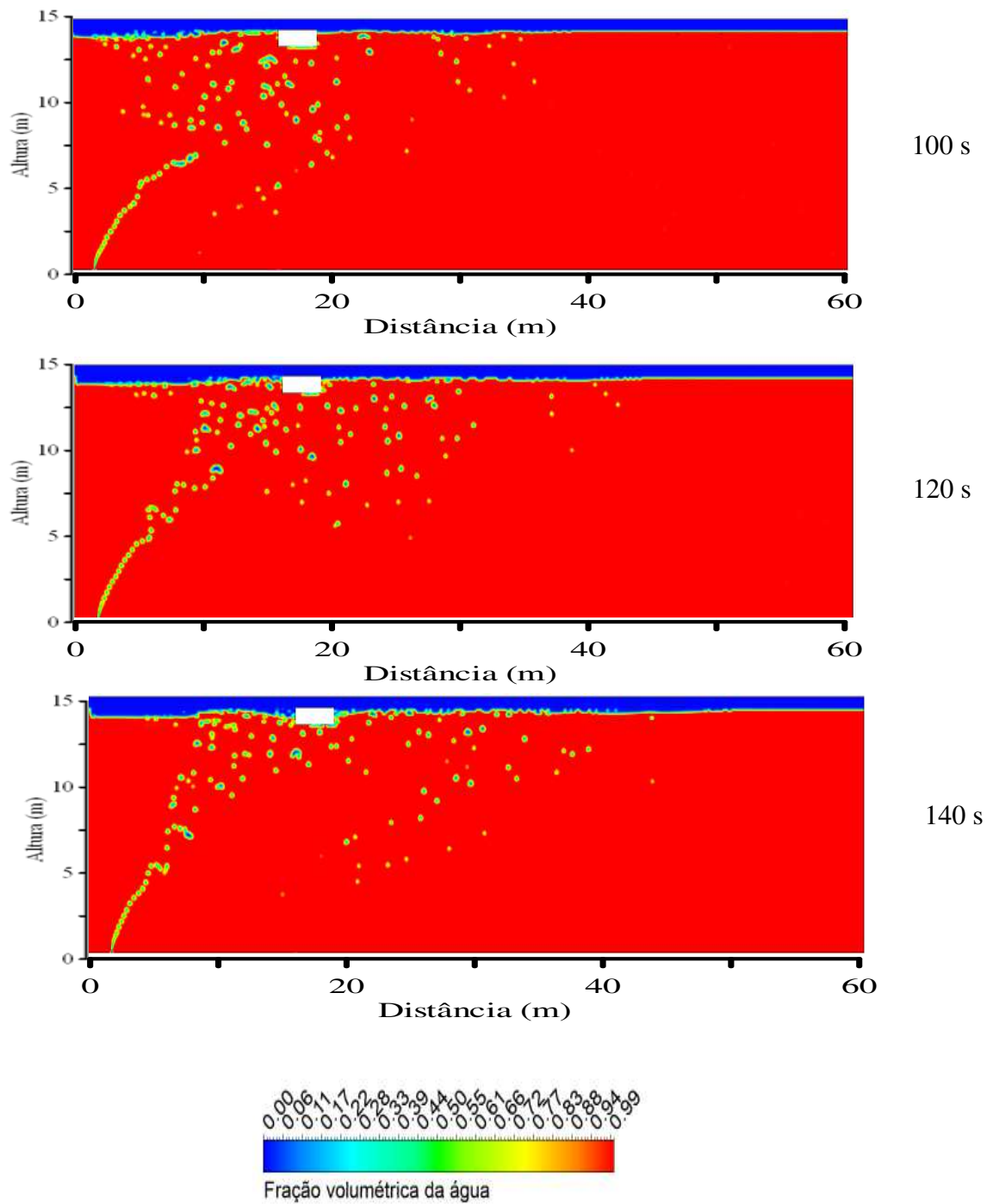
Figura 4 18 - Comportamento do óleo na presença de uma barreira de contenção.

Figura 4 18 – Continuação.



Fonte: Própria do autor.

Figura 4 19 - Comportamento da dispersão de óleo na presença de uma barreira de contenção com ondas na superfície da água

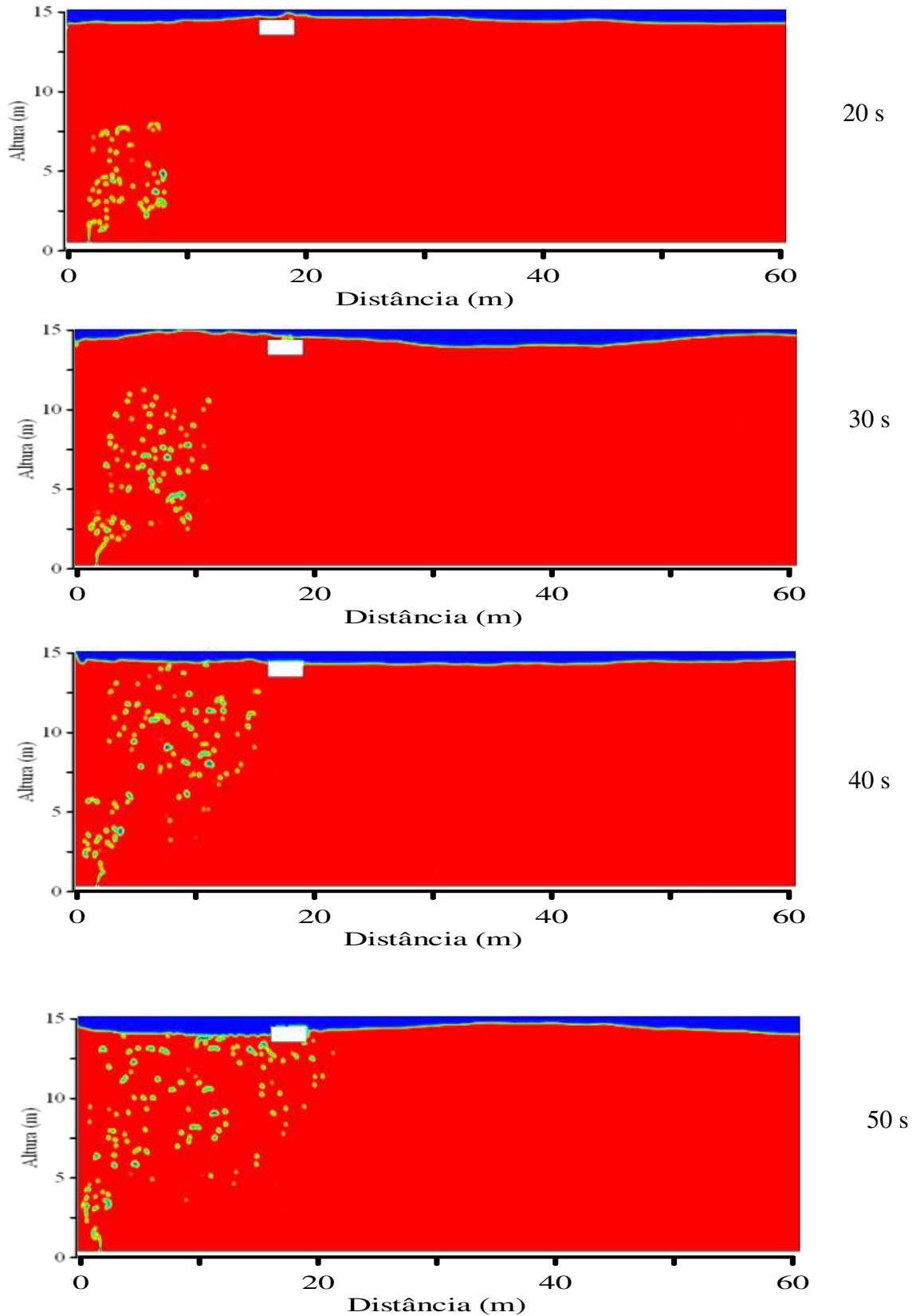
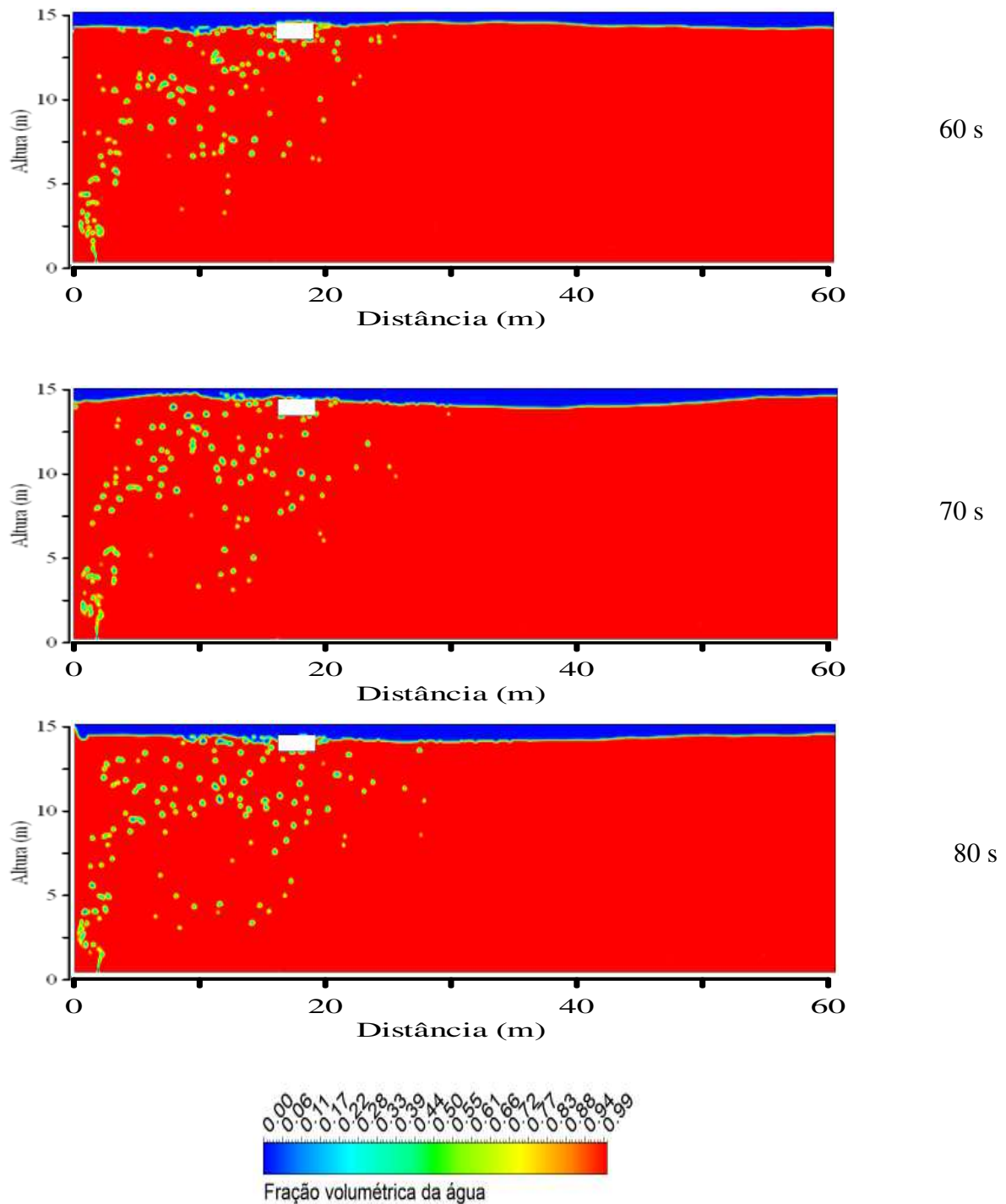


Figura 4 19 – Continuação.



Fonte: Própria do autor.

Ao observar mais atentamente a Figura 4-19 nota-se que a presença das ondulações provoca uma maior perturbação na superfície da água o que dificulta a contenção do poluente

pelas barreiras de contenção. Esta agitação ocorre devido as velocidades das correntes gerando um maior espalhamento do óleo ao longo do domínio.

A dispersão do óleo oriundo do orifício é decorrente de várias forças que estão atuando sobre os fluidos: as forças iniciais induzidas pelas correntes de água e de óleo, e no caso da situação que surgem ondas, a velocidade do ar atmosférico. A força gravitacional, que possibilita comportamentos distintos dos fluidos em consequência da diferença de densidade entre eles. A tensão interfacial, que influencia no comportamento das interfaces água-óleo, e as forças de arraste, empuxo e peso influenciam diretamente na forma das gotas de óleo e no nível de dispersão do óleo na água formando, assim, a pluma de óleo. A presença de ondas conduzidas pelas forças cinéticas proporciona forças de arraste conduzindo a uma maior dispersão do óleo na água, o que pode ser observado ao se comparar os resultados apresentados nas Figuras 4-18 e 4-19.

A Figura 4-19 indica que a dispersão do poluente é igualmente influenciada pela movimentação ondulada na superfície da água o que proporciona um maior nível de turbulência. Esta turbulência conduz a formação de zonas de recirculação ou vórtices com diferentes tamanhos, como pode ser observado nas Figuras 4-20 (no tempo igual a 80 segundos) e 4-21 (em 90 segundos). A zona de recirculação apresentada na Figura 4-20 pode auxiliar na explicação do deslocamento do jato de óleo e desprendimento das gotas de óleo que se dispersam na água à medida que as gotas se afastam do jato de óleo.

Por outro lado, a Figura 4-21 ilustra uma zona de recirculação maior que tende a transportar as gotas de óleo nas direções horizontal e vertical auxiliando, assim, a dispersão das gotas de óleo corroborando com os resultados reportado por Szewczyk (2006).

Os vórtices podem ser observados na Figura 4-22 eles variam suas formas em relação a profundidade da água, os menores vórtices foram observados próximo ao solo oceânico e os maiores vórtices encontrados próximo a superfície, corroborando com o que foi afirmado por Asis (2007).

A eficiência das barreiras de contenção dependerá de fatores diversos tais como a influência de ondas, ventos e correntezas, situações com elevada turbulência e um óleo de viscosidade baixa o espalhamento será mais fácil e rápido. Para o caso em estudo observa-se que a turbulência gerada pelas ondas na superfície da água provoca uma redução na contenção do óleo, fazendo com que óleo passe por baixo da barreira e por cima da barreira, como pode ser observado na Figura 4-19.

O processo *drainage failure* acontece em óleos com baixa viscosidade e óleos com alta viscosidade, para os de baixa viscosidade quando expostos a fortes correntezas quebram gotículas de óleo acumulados na barreira, fazendo com que elas migrem por baixo dela. Enquanto que os óleos com maior viscosidade geram camadas de óleo mais espessas e ao atingir a espessura acumulada, o óleo irá escoar por baixo da barreira este processo é chamado de acumulação crítica (ITOPF, 2013).

Outro processo que pode ocorrer de acordo com Itopf (2013) é o *Entrainment* que devido as ondas e a geração de cenários turbulentos tendem a arrastar as gotículas de óleo na parte inferior da barreira, os vórtices permitem o escapamento de óleo pela barreira.

Na Figura 4-21 é apresentado o campo vetorial de velocidade na região retangular destacada próxima a barreira de contenção. Sendo possível observar na Figura a passagem do poluente tanto por baixo como sobre a barreira, isto pode acontecer devido as diferentes condições do meio. Mesmo com a ação das ondas sobre a barreira é possível perceber que houve uma boa retenção do óleo próximo a ela. Comparando estes resultados com o apresentado na Figura 4-18 é possível perceber uma mudança significativa na dinâmica do fluido, para a situação sem ondas verifica-se que houve uma maior influência da força de arraste sobre o espalhamento das gotículas, enquanto na Figura 4-19 a presença de ondas gera turbulências que afetam significativamente a dinâmica dos fluidos.

Os resultados dos Casos 20 e 21 estão representados na Figura 4-23 que representam as simulações realizadas com a barreira de contenção do óleo a partir de uma barreira fixa com dimensões iguais a 6 m de comprimento e 6 m de altura, sem e com a presença de ondas, respectivamente, em diferentes tempos (10, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90 e 100 s). O intuito destas análises foi verificar se a variação do tamanho da barreira era capaz de melhorar sua capacidade de contenção e como foi afetada pela ação das ondas no meio.

No tempo de $t = 10$ s é possível perceber que a presença da onda é capaz de alterar a hidrodinâmica de todo o meio. Para este mesmo tempo em (a) observa-se que é formado um jato de poluente, como visto em casos anteriores o formato e tamanho deste jato dependerá de alguns fatores como: vazão de entrada do poluente, do meio, propriedades do poluente, entre outros. Como não há a ação de ondas o poluente tende a subir devido as forças de empuxo, devido as diferenças de densidade e se desloca horizontalmente por causa do arraste provocado pelas águas. Em (b) observa-se que o jato não se apresentou tão prolongado como no caso anterior, houve uma fragmentação no mesmo e um maior número de gotículas esteve presente.

No tempo de 20 s em (a) o poluente teve uma maior facilidade de alcançar a superfície. Enquanto em (b) a presença de ondas provoca a formação de vórtices, turbulências que dificultam a subida do poluente.

Para $t = 30$ s verifica-se que o caso com ondas apresentou um maior espalhamento no óleo e uma maior quantidade de gotículas o que pode indicar a presença de vórtices pequenos capazes de gerá-las.

As gotículas de óleo atingem a superfície no tempo de 40 s para ambos os casos, porém, para o ambiente sem ondulações é possível perceber uma maior concentração de óleo antes da barreira o que é vantajoso para contenção.

No tempo de 50 s para o caso com ondas as gotículas de óleo já estão atravessando a barreira tanto pela parte superior quanto pela parte inferior, isto mostra a ocorrência do processo chamado de *Entrainment* que é a passagem do poluente por baixo da barreira devido a ação de ondas e correntezas.

Observa-se no tempo de 60 s que parte do poluente é contido pela barreira e parte dele passa por baixo para as ambas condições e passa por cima no cenário com ondulação. Em 70 e 80 s verifica-se que houve um espalhamento do poluente, sendo mais evidente em (b) com um maior número de gotículas dispersas ao longo do domínio estudado.

Figura 4.20 – Efeito da zona de recirculação sobre o comportamento da dispersão do jato de óleo a partir do vazamento.

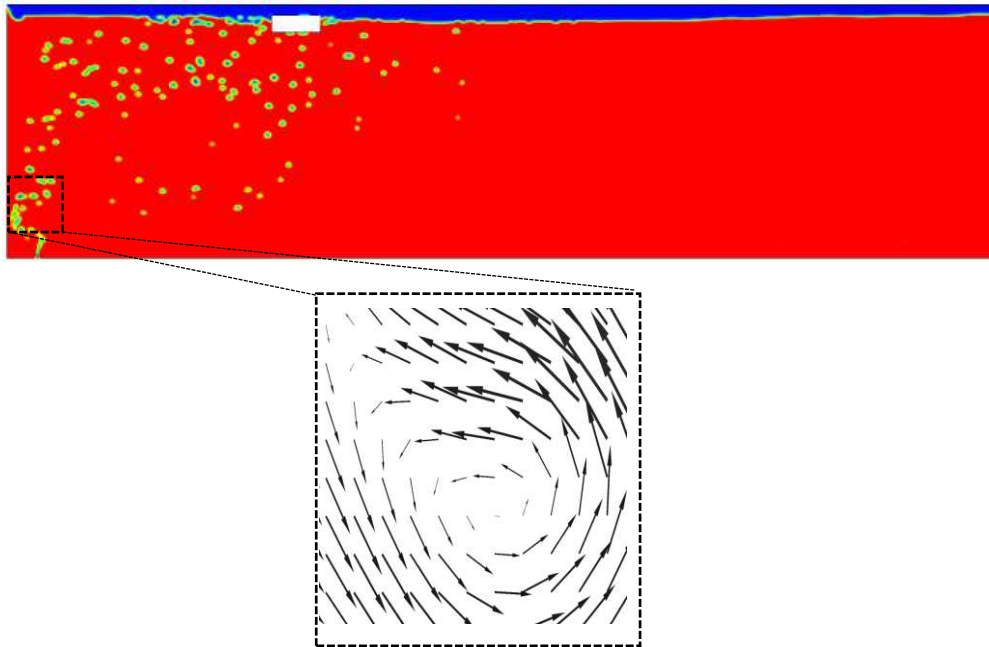
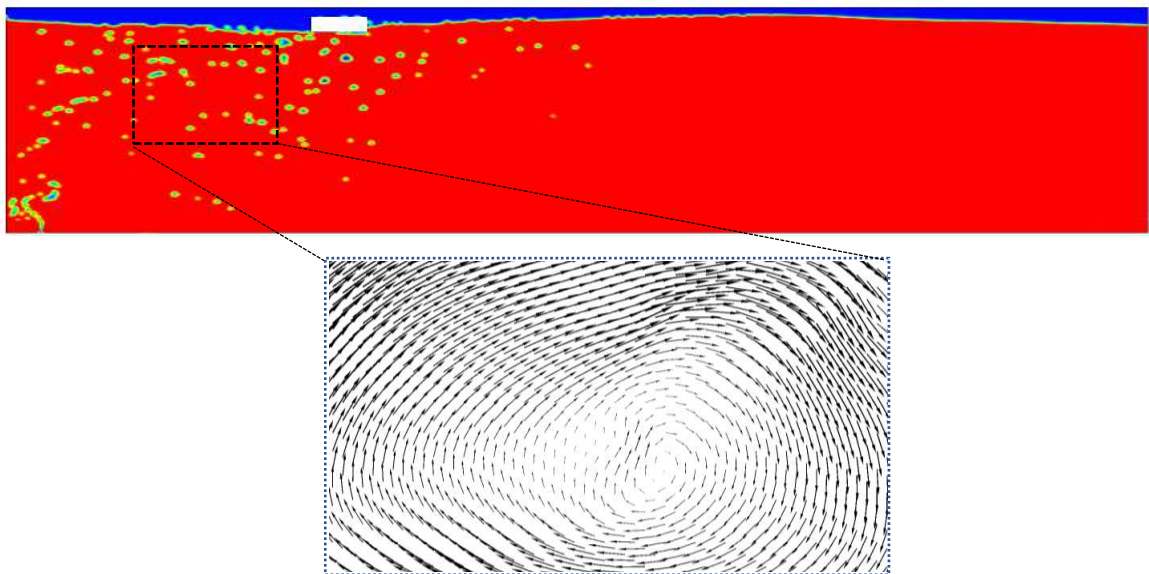
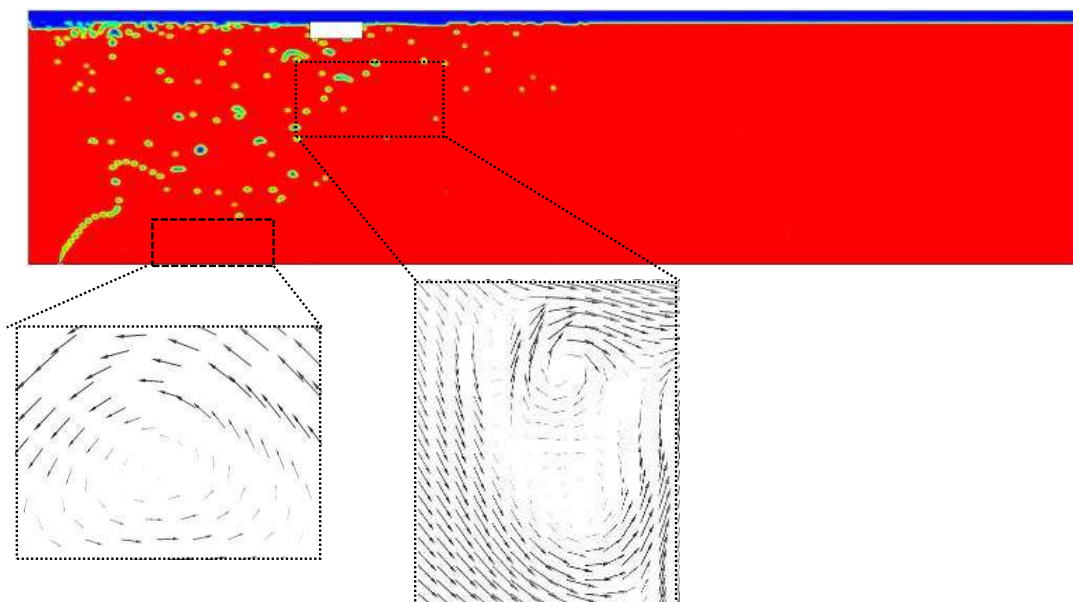


Figura 4.21 – Efeito da zona de recirculação sobre o comportamento da dispersão de óleo próximo a barreira de contenção.



Fonte: Própria do autor.

Figura 4-22 Pequenas e grandes recirculações no tempo de 80 s.


Fonte: Própria do autor.

No tempo de 100 s identifica-se que houve uma contenção de óleo nas duas situações, mas para o caso (a) não se observa a presença de poluente espalhado próximo a região do vazamento ao contrário do que foi visto em (b). Em (b) aconteceu uma maior perturbação no meio o que provocou um maior espalhamento tanto antes como após a barreira, também se viu uma maior resistência de subida do óleo.

Ao se comparar os resultados das Figuras 4.23a e 4.23b nota-se que a presença de ondas ocasiona a subida mais rápida do poluente na superfície (para o tempo de 40 s o poluente já tinha alcançado a superfície no caso de ondas, não sendo observado para o caso sem ondas).

O comportamento das gotas de óleo, como já discutido anteriormente, são fortemente dependentes das forças gravitacionais, de empuxo, e de arraste, bem como das propriedades das propriedades físico-químicas (densidade, viscosidade). A velocidade da corrente oceânica influencia na dispersão do óleo comportamento igualmente observado por Zhu et al.,(2017a).

Observa-se ao longo das imagens que a presença das ondulações provoca uma maior perturbação na superfície da água o que dificulta a contenção do poluente através das barreiras de contenção, esta agitação ocorre devido as velocidades das correntes gerando um maior espalhamento do óleo ao longo do domínio.

A dispersão do poluente é influenciada pela turbulência gerada no meio, observa-se nas imagens que a presença de ondulações na superfície da água tende a provocar uma maior perturbação no ambiente. Na Figura 4-23b pode-se observar em 80 s a formação de vórtices menores este tipo de situação resulta em um maior desprendimento das gotículas de óleo, uma maior quebra das gotículas. Vórtices maiores podem ser observados no tempo de 90 s estes tendem a transportar as bolhas verticalmente, auxiliando na subida e dispersão das gotículas corroborando com o que foi visto por Szewczyk (2006).

A eficiência das barreiras de contenção dependerá de fatores diversos tais como a influência de ondas, ventos e correntezas, situações com elevada turbulência e um óleo de viscosidade baixa o espalhamento será mais fácil e rápido. Para o caso em estudo observa-se que a turbulência gerada pelas ondas na superfície da água provoca uma redução na contenção do óleo, fazendo com que óleo passe por baixo da barreira e por cima da barreira, como visto nos tempos de 80 e 90 segundos.

Na Figura 4-24 estão representados os campos de fração volumétrica de óleo sobre o plano XY considerando a presença de barreiras de contenção com tamanho diferentes na ausência de ondas. Ao se comparar as imagens é possível observar que as barreiras de contenção são capazes de reter parte do óleo derramado, de modo que provocou o acúmulo deste na região a montante da barreira. Verificou-se ainda que o formato da barreira e tamanho influenciaram no espalhamento e tamanho de gotículas, para a barreira de maior comprimento houve uma maior divisão do óleo ao longo de todo meio alterando ainda a dinâmica do fluido. Na barreira maior viu-se que uma parte considerável do óleo não passou a jusante da barreira permanecendo na parte anterior.

Figura 4-23- Domínio com barreira ampliada (a) sem ondas e (b) com ondas.

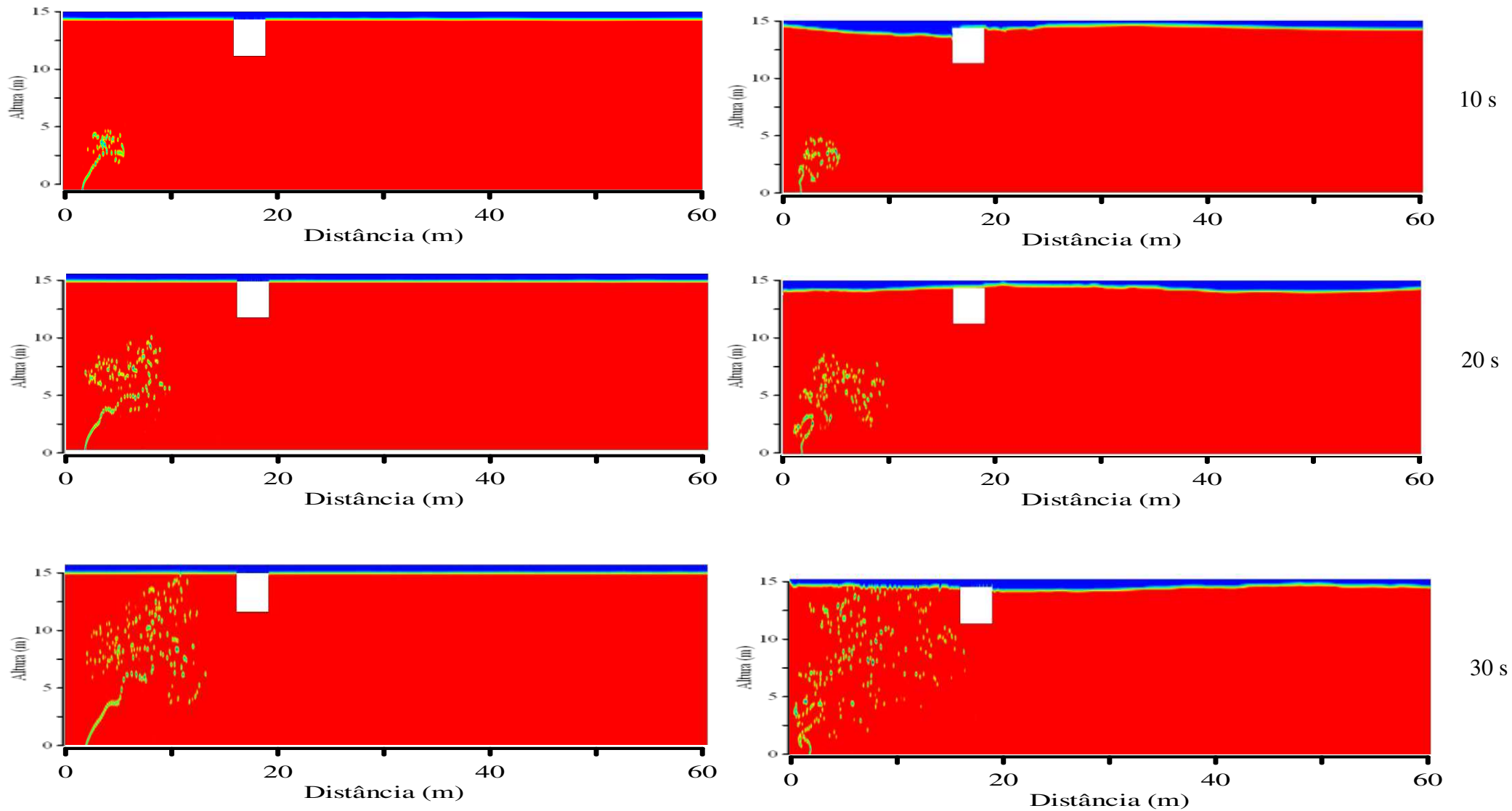


Figura 4-23 Continuação.

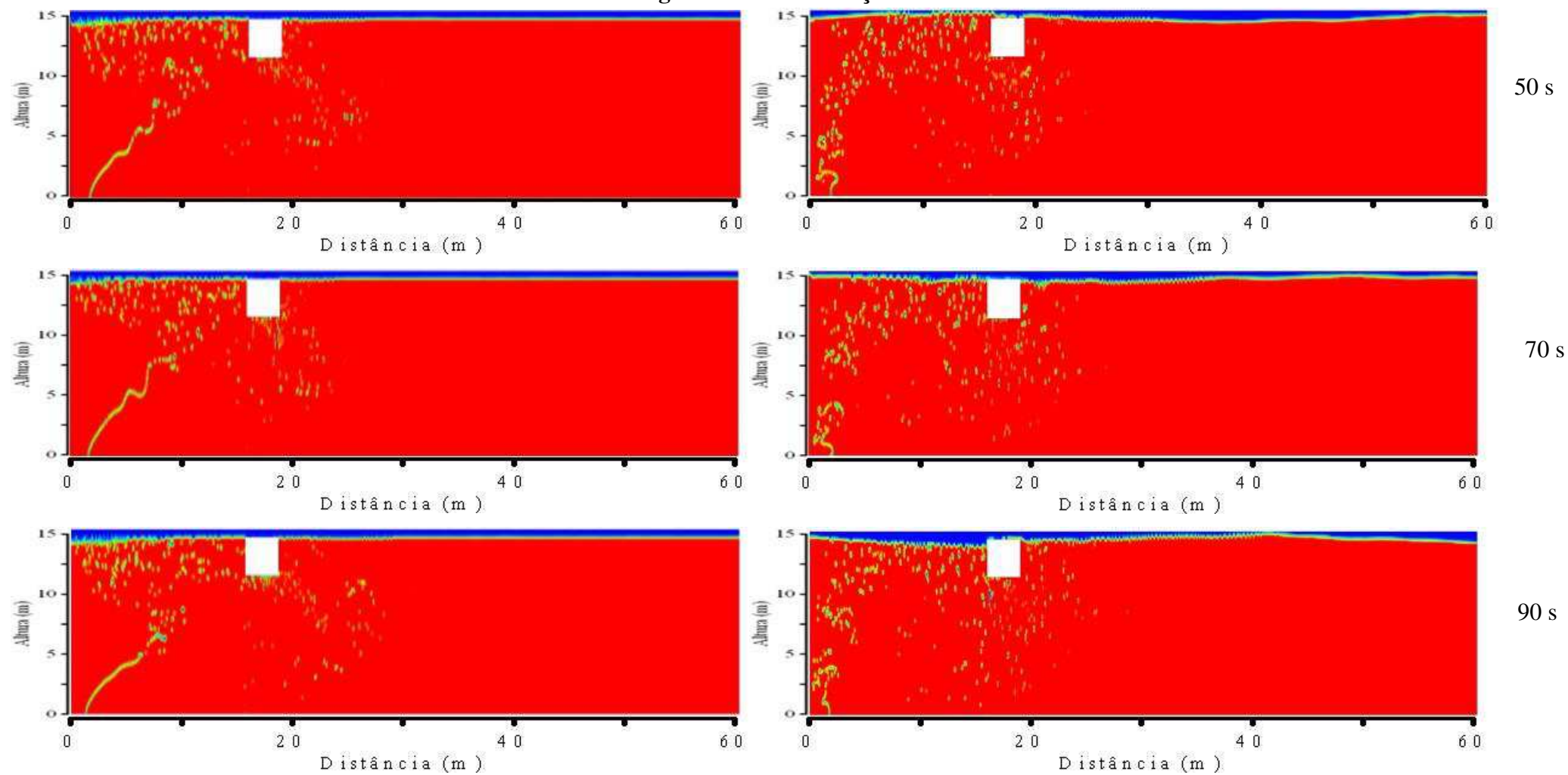
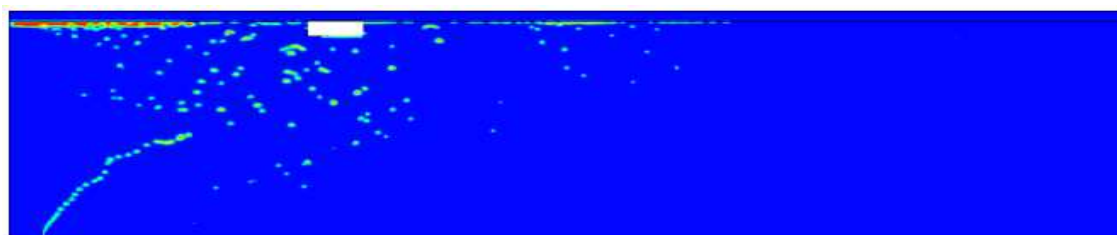
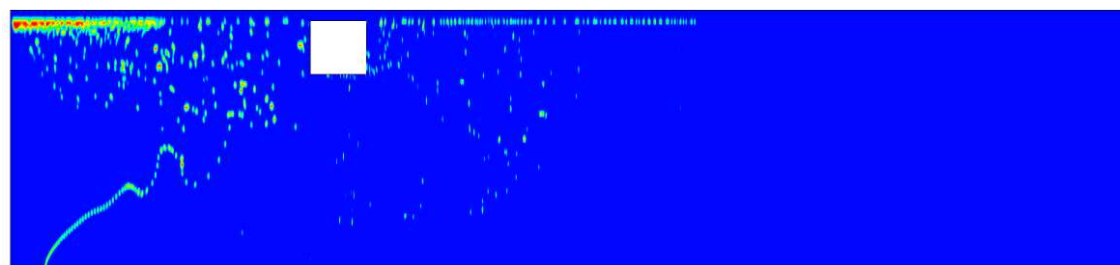


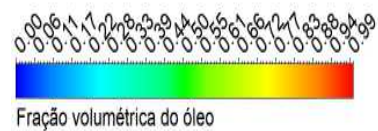
Figura 4-24- Campo de fração volumétrica de óleo sobre o plano XY na presença de barreiras de contenção de tamanhos diferentes.



(a)



(b)



Fonte: Própria do autor.

Capítulo 5

CONCLUSÕES

Nesse capítulo são apresentadas as conclusões obtidas a partir do estudo da dispersão advectiva dos poluentes em ambientes aquáticos e da avaliação de uma barreira fixa de contenção.

5.1 Conclusões

A partir dos resultados obtidos do estudo do espalhamento do óleo concluiu-se que:

- A partir do índice de convergência de malha (ICM) verificou-se que para os parâmetros analisados em três regiões distintas a malha M1 (a que tinha uma maior quantidade de elementos) apresentou os melhores resultados em comparação com a malha extrapolada, este resultado foi observado para a maioria dos parâmetros analisados, tendo um desvio nos parâmetros analisados na região de maior perturbação que é a próxima ao vazamento;
- Observou-se na validação numérica que o formato do poluente quer seja jato quer seja gota, depende de parâmetros como variação de pressão, efeitos viscosos e gravitacionais;
- Viu-se ainda que o processo advectivo teve influência direta no formato de jato e o processo difusivo no formato de gotas distribuídas ao longo do domínio;
- O campo de pressão mostrou resultados compatíveis com o fenômeno, já que devido a presença da coluna d'água e da região de ar, esperava-se ter maiores pressões no fundo do canal e valores próximos a pressão atmosférica na região superior como foi constatado. Os valores negativos obtidos podem ser ocasionados devido ao ponto de referência assumido;
- Os resultados quantitativos gerados nos casos simulados apresentaram boa concordância em comparação com os resultados experimentais;

- O modelo utilizado apresentou boa representatividade no processo de dispersão advectiva de poluentes em ambientes aquáticos;
- A subida do poluente verticalmente ocorre devido a ação de forças como empuxo e arraste, bem como, a diferença de densidade existente entre o poluente e o meio;
- O aumento da velocidade da água provoca um aumento da vazão da água, resultando em uma maior força e energia cinética do fluido, com isso tem-se uma predominância da força de arraste que ocasiona um maior deslocamento na mesma direção da propagação da água;
- O posicionamento final do poluente, assim como os tamanhos das gotículas são influenciadas pela variação de pressão, variação de velocidade, vazão, empuxo, variação de densidade e turbulência;
- Variando a velocidade de entrada do poluente observou-se que o aumento deste parâmetro gerou um maior deslocamento vertical em um menor espaço de tempo;
- Para velocidade do poluente igual a 2 m/s maior foi o jato inicial formado, como também maior o diferencial de pressão. Assim, para maior taxa de vazamento do óleo maior o impulso inicial e menor o tempo gasto para chegar na superfície;
- Viu-se com a variação da fração volumétrica que a relação entre este parâmetro e a velocidade são inversamente proporcionais. Assim, o aumento da fração volumétrica provoca um menor valor da velocidade;
- A concentração de poluente tem influencia na dinâmica do escoamento em todo o ambiente. Com o aumento da fração volumétrica maior a interação entre as fases gerando uma mudança na dinâmica do meio;
- Com a variação da densidade verifica-se que quanto maior a densidade mais tempo o poluente leva para chegar à superfície. Para as gotículas de mesmo tamanho e mesma densidade, as forças de empuxo aplicadas são iguais, já as gotículas de maior densidade maior a força peso o que dificulta o deslocamento do poluente;
- Em um cenário com densidade do poluente igual a densidade da água observou-se que a taxa de vazão de maneira isolada não foi parâmetro suficiente para fazer atingir a superfície;

- A barreira avaliada gerou bons resultados na retenção de parte considerável do poluente.
- A presença de ondas afetou a hidrodinâmica do meio, com isso houve variações no formato do jato, no número de gotículas e na posição delas desde a saída do poluente até a posição final.
- A presença de ondas conduziu uma maior dispersão do óleo no meio aquático na forma de gotas de diferentes tamanhos proporcionando uma maior dificuldade de atingir à superfície permanecendo uma parte próximo ao vazamento.
- As ondas geraram uma maior perturbação em todo o meio, o que proporcionou a formação de vórtices grandes e pequenos, próximo ao solo oceânico viu-se a presença dos vórtices menores e próximo a superfície da água os vórtices maiores, cada um deles teve influência quer seja na formação de gotículas quer seja no espalhamento destas no ambiente.

5.2 Trabalhos futuros

Como sugestão para trabalhos futuros pode-se destacar, a realização de estudos para otimização da barreira de contenção. Propõe -se que seja simulado variados designers de barreiras, bem como, modificando quantidade, posição e condições ambientais de maré – correnteza - ventos. Para verificar a melhor forma de contenção de poluentes em ambientes distintos.

Outra possibilidade de estudo seria a verificação da hidrodinâmica do mar na dispersão advectiva - difusiva e espalhamento do poluente a partir de uma malha móvel. Com o intuito de observar com mais precisão estes efeitos no posicionamento final e como o processo difusivo é afetado por estas forças.

Sugere-se ainda a análise do efeito de evaporação do componente benzeno ao atingir a superfície, verificando assim tanto o deslocamento do óleo desde o vazamento até o processo de evaporação quantificando a transferência de massa perdida para o ar e como os efeitos atmosféricos afetam neste processo.

REFERÊNCIAS

ABIYE, O. E.; SUNMONU, L. A.; AJAO, A. I.; et al. Atmospheric dispersion modeling of uncontrolled gaseous pollutants (SO₂ and NO_X) emission from a scrap-iron recycling factory in Ile-Ife, Southwest Nigeria. **Cogent Environmental Science**, v. 2, n. 1, p. 1–15, 2016.

ABRAHÃO, R. **Impactos do lançamento de efluentes na qualidade da água do riacho mussuré**. 2006. 140 f. Dissertação em Desenvolvimento e meio ambiente, Universidade Federal da Paraíba, João Pessoa, 2006.

ACSELRAD, H.; MELLO, C. A. Conflito social e risco ambiental— o caso de um vazamento de óleo na Baía de Guanabara. In: ALIMONDA. II. (Org.). *Ecologia Política - Natureza. Sociedad y Utopia*. Buenos Aires: CLACSO. 2002. p. 293-317.

ALMEIDA, W. M. S.; BRAZ, E. M. Q.; SANTOS, C. L. Impactos ambientais e o petróleo. **Revista Ceciliana**, v. 5, p. 31–37, 2014.

ALMOHAMMADI, K. M.; INGHAM, D. B.; MA, L.; POURKASHAN, M. Computational fluid dynamics (CFD) mesh independency techniques for a straight blade vertical axis wind turbine. **Energy**, v. 58, p. 483–493, 2013.

AMARAL, I. C. C.; CARVALHO, L. V. B.; PIMENTEL, J. N. DA S.; et al. Avaliação ambiental de BTEX (benzeno, tolueno, etilbenzeno, xilenos) e biomarcadores de genotoxicidade em trabalhadores de postos de combustíveis. **Revista Brasileira de Saúde Ocupacional**, v. 42, n.1, 2017.

ANDRADE, T. H. F. DE. **Transporte de Óleos Pesados e Ultraviscosos Via Core-flow : Aspectos Geométricos e Termofluidodinâmicos**. 2013. 158 f. Tese em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2013.

ANDRÉ, R. A. A. **Modelação de um Sistema de Conversão de Energia das Ondas**. 2010. 132 f. Dissertação em Engenharia mecânica, Faculdade de engenharia da Universidade

de Porto, Portugal, 2010.

ANI, E. C.; HUTCHINS, M. G.; KRASLAWSKI, A.; AGACHI, P. S. Assessment of pollutant transport and river water quality using mathematical models. **Revue Roumaine de Chimie**, v. 55, n. 4, p. 285–291, 2010.

ANSYS FLUENT User' s Guide Release 15.0. .ANSYS, v. 15317, n. November, p. 724–746, 2013.

ARAÚJO, M. E.; RAMALHO, C. W. N.; MELO, P. W. Artisanal fishers, consumers and the environment: immediate consequences of the oil spill in Pernambuco, Northeast Brazil. **Cadernos de Saúde Pública**, v. 36, n. 1, 2020.

ATKINSON, T. C. .; DAVIS, P. M. Longitudinal dispersion in natural channels: 1. Experimental results from the river Severn, UK. **Hydrol. Earth Syst. Sci.**, v. 4, p. 345– 353., 2000.

BAKER, N.; KELLY, G.; O'SULLIVAN, P. D. A grid convergence index study of mesh style effect on the accuracy of the numerical results for an indoor airflow profile. **International Journal of Ventilation**, v. 19, n. 4, p. 300–314, 2020.

BARATA-SILVA, C.; MITRI, S.; PAVESI, T.; SAGGIORO, E.; MOREIRA, J. C. Benzeno : reflexos sobre a saúde pública , presença ambiental e indicadores biológicos utilizados para a determinação da exposição. **Caderno de saúde coletiva**, v. 22, n. 4, p. 329–342, 2014.

BARBOSA, L. M. C. **Escoamento não - isotérmico de óleo pesado, água e gás em duto vertical com vazamento**. 2012. 108 f. Universidade Federal de Campina Grand. 2012.

BARDINA, J. E.; HUANG, P. G.; COAKLEY, T. J. **Turbulence modeling validation, testing, and development**. NASA TM 110446, 1997.

BATISTA, S. S.; HARARI, J. Modelagem da dispersão de coliformes termotolerantes

e enterococos em duas enseadas na região costeira de Ubatuba (SP), Brasil. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 22, n. 2, p. 403–414, 2017.

BATLLE-AGUILAR, J.; BROUYÈRE, S.; DASSARGUES, A.; et al. Benzene dispersion and natural attenuation in an alluvial aquifer with strong interactions with surface water. **Journal of Hydrology**, v. 369, n. 3–4, p. 305–317, 2009.

BEZERRA, P. G.; SOARES, S. A. R.; GARCIA, K. S. Natural attenuation of BTEX contaminants in the groundwater of the most populous city in northeastern Brazil. , p. 77–83, 2016.

BIRKLAND, T. A.; LAWRENCE, R. G. The Social and Political Meaning of the Exxon Valdez Oil Spill. **Spill Science & Technology Bulletin**, v. 7, n. 1–2, p. 17–22, 2002.

CARDOSO, L. C. S. **Logística do petróleo transporte e armazenamento**. Rio de Janeiro: Interciência, 2004.

ÇENGEL, Y. A.; CIMBALA, J. M. **Mecânicas dos fluidos Fundamentos e aplicações**. AMGH Editor ed. São Paulo, 2007.

CHAPRA, S. . **Surface water-quality modeling**. McGraw Hil ed. New York, 1997.

CHIARANDA, S. L. **Volatilização dos compostos BTEX em ambientes subsuperficiais contaminados com gasolina etanol comparação entre concentrações medidas e simuladas**. 2006. 119 f.Dissertação em Engenharia Ambiental, Universidade Federalde Santa Catarina, Santa Catarina, 2006.

COSTA, D. F.; GOLDBAUM, M. Contaminação química, precarização, adoecimento e morte no trabalho: benzeno no Brasil. **Ciência & Saúde Coletiva**, v. 22, n. 8, p. 2681–2692, 2017.

COSTA, M. A. F.; COSTA, M. F. B. Benzeno: Uma questão de saúde pública. **Interciencia**, v. 27, 2002.

CUNHA, A. C.; PINHEIRO, L. A. R.; CUNHA, H. F. A.; et al. Simulação da hidrodinâmica e dispersão de poluentes com monitoramento virtual no rio Matapi - AP. **REA – Revista de estudos ambientais**, v. 13, p. 18–32, 2011.

DEMUREN, A. O.; RODI, W. Calculation of flow and pollutant dispersion in meandering channels. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 172, n. 1, p. 63, 1986.

DUARTE, A. L. S.; BOAVENTURA, R. A. R. Dispersion modelling in rivers for water sources protection, based on tracer experiments: Case studies. 2nd International Conference on waste management, water pollution, air pollution, indoor climate. 2008.

FAN, F. M. **Simulação dos impactos de lançamentos de poluentes sobre a qualidade da água de bacias hidrográficas integrada com sistema de informação geográfica**. 2013. 241 f. Dissertação em Recursos Hídricos, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul, 2013.

FAN, F. M.; BRAVO, J. M.; COLLISCHONN, W. Modelagem baseada em agentes para a simulação da dispersão de poluentes em cursos d'água. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 21, n. 4, p. 739–746, 2016.

FELLER, R. **Estudo do vazamento e captura de óleo em ambientes subaquático**. 2012. 112 f. Universidade Federal de Santa Catarina. 2012.

FERREIRA, J. P. M. **Avaliação da dispersão das plumas dos emissários submarinos no canal de São Sebastião (estado de São Paulo, Brasil), através da modelagem numérica**. 23. Jul. 2019. Dissertação em Engenharia Hidráulica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2019.

FORTIS, R. DE M. **Modelagem computacional da dispersão da pluma do efluente dos emissários submarinos do TEBAR Petrobrás**. 2005. Dissertação em Engenharia hidráulica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2005.

FOX, R. W. .; PRITCHARD, P. J.; MCDONALD, A. T. **Introdução a Mecânica dos Fluidos**. 7th ed. Rio de Janeiro: LTC, 2011.

FREITAS, A. G. B.; SANTANA, C. R.; SILVA, R. P.; SILVS, G. F. Investigação das facilidades e métodos utilizados atualmente no processamento primário de petróleo em campos onshore e offshore. In. 4º PDPETRO, Campinas, SP. 2007.

FRENCH, H. . **Open-channel Hydraulics**. 1 st ed. Water Resources Pubns, 2007.

GADELHA, A. J. F. **Simulação fluidodinâmica da dispersão de poluentes a artir da chaminé de uma termelétrica**. 2016. 126 f.Tese em Engenharia química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2016.

GHELERI, L.; TOMAZ, E. Determinação de Compostos Orgânicos Voláteis selecionados na Vila Carioca, em São Paulo. **III Congresso Interamericano de Qualidade do Ar da AIDIS**. 2003.

GONZATTO, M. Vazamento de óleo expõe riscos de contaminação na costa gaúcha. GZH GERAL, 2013. Disponível em: [Vazamento de óleo expõe riscos de contaminação na costa gaúcha | GZH \(clicrbs.com.br\)](http://www.clicrbs.com.br) . Acesso em: 10 de Julho de 2017.

GUERRERO, E.; MUÑOZ, F.; RATKOVICH, N. Comparasion between Eulerian and VOF models for two - phase flow assessment in vertical pipes. **Ciência, tecnologia e futuro**, v. 7, p. 73–84, 2017.

GUERRERO, J. R. H.; AUGUSTO, T.; LIMA, R. D. C. F. DE; URBANO, J. J. Simulação da dispersão de poluentes emitidos por uma usina termoeétrica de 532 m nordeste brasileiro. VII Congresso Nacional de Engenharia Mecânica. p.12, 2012.

GUSEV, A. V.; OSTAPENKO, V. V.; MALYSHEVA, A. A.; MALYSHEVA, I. A. Open-channel waves generated by propagation of a discontinuous wave over a bottom step. **Journal of Applied Mechanics and Technical Physics**, v. 49, n. 1, p. 23–33, 2008.

HAMZA, S. BEN; HABLI, S.; MAHJOUB SAÏD, N.; BOURNOT, H.; PALEC, G. LE. Simulation of pollutant dispersion of a free surface flow in coastal water. **Ocean Engineering**, v. 108, p. 81–97, 2015.

ITOPF. Fate of marine oil spills. **Technical Information Paper**, v. 2, p. 12, 2014.

JI, H.; XU, M.; HUANG, W.; YANG, K. The Influence of Oil leaking rate and Ocean Current Velocity on the Migration and Diffusion of Underwater Oil Spill. **Scientific Reports**, v. 10, n. 1, p. 9226, 2020.

KAMEL, B.; ILHEM, K.; ALI, F.; ABDELBAKI, D. 3D Simulation of Velocity Profile of Turbulent Flow in Open Channel with Complex Geometry. **Physics Procedia**, v. 55, p. 119–128, 2014.

KARATEKIN, I. C. O. Numerical Experiments on Application of Richardson Extrapolation with Nonuniform Grids. **ASME Journal of Fluid Engineering**, v. 119, p. 584–590, 1997.

KRIM, H; HAMZA, A. Ben. **Geometric methods in signal and image analysis**. Cambridge University Press, 2015.

KATOPODES, N. D. Level Set Method. **Free-Surface Flow**. p.804–828, 2019.

KHALDI, N.; MHIRI, H.; BOURNOT, P. Prediction of pollutant dispersion in turbulent two-phase flows. **Environmental Fluid Mechanics**, v. 14, n. 3, p. 647–662, 2014.

LAFFON, B.; RÁBADE, T.; PÁSARO, E.; MÉNDEZ, J. Monitoring of the impact of Prestige oil spill on *Mytilus galloprovincialis* from Galician coast. **Environment International**, v. 32, n. 3, p. 342–348, 2006.

LEELŐSSY, A.; JR, MOLNÁR, F.; IZSÁK, F.; et al. Dispersion modeling of air pollutants in the atmosphere : a review. v. 6, n. 3, 2014.

LEITE, B. E. **Estudo do escoamento multifásico, transiente e não isotérmico em oleodutos com conexões curvadas com ou sem vazamentos**. 2016. 132 f. Tese em Engenharia de processos, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2016.

LI, W.; LIANG, X.; LIN, J. Mathematical Model and Computer Simulation for Oil Spill in Ice Waters Around Island Based on FLUENT. **Journal of Computers**, v. 8, n. 4, p. 1027–1034, 2013.

LIMA, R. M. Avaliação da qualidade do ar em um trecho urbano da cidade de Fortaleza – Ceará (Dissertação de mestrado). Instituto Federal do Ceará, Fortaleza, 2015.

LIST, E. J. Turbulent Jets and Plumes. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 14, n. 1, p. 189–212, 1982.

LONGEST, P. W.; VINCHURKAR, S. Effects of mesh style and grid convergence on particle deposition in bifurcating airway models with comparisons to experimental data. **Medical Engineering & Physics**, v. 29, n. 3, p. 350–366, 2007.

LOPES, M. S. Montagem de um canal retangular hidráulico para o estudo experimental da dispersão de um traçador conservativo. 2016. 79 f. Dissertação em Tecnologia, Universidade Estadual de Campinas, Limeira, 2016.

LOPES, B. V.; ALMEIDA HEYMANN, K. K.; BARBOSA MONTEIRO, C.; et al. Estudo de Cenários de Vazamento de Óleo no Porto de Rio Grande - RS e seus Impactos Ambientais. **Revista Brasileira de Geografia Física**, v. 11, n. 7, p. 2229–2243, 2018.

LOPES TIBURTIUS, E. R.; PERALTA-ZAMORA, P.; LEAL, E. S. Contaminação de águas por BTXS e processos utilizados na remediação de sítios contaminados. **Química Nova**, v. 27, n. 3, p. 441–446, 2004.

MACHADO, B.; BUSKE, D.; MELO, T.; JAHNECKE, G.; KLEIN, R. Simulação de um modelo bidimensional transiente aplicado à dispersão de poluentes em um corpo hídrico. **Revista Interdisciplinar de Pesquisa em Engenharia**, v. 5, n. 1, p. 1–12, 2019.

MACHADO, M. B. **Modelagem Tridimensional da Dispersão de Poluentes em Rios**. 2006. 165 f. Tese em Engenharia química, Universidade Federal de Campinas, São Paulo. 2006.

MALLMANN, D. G.; SOUSA, J. D. C.; HAMMERSCHMIDT, K. S. A. Acidentes de trabalho e sua prevenção na produção científica brasileira de enfermeiros. **Revisão integrativa Work accidents and their prevention in Brazilian scientific production of nurses**. v. 9, n. 1, p. 49–54, 2016.

MARIANO, A. P.; SILVA, A. J. DA; OLIVEIRA, V. J. A. DE; ANGELIS, D. DE F. DE. Avaliação da dispersão de efluente líquido de refinaria de petróleo. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 15, n. 3, p. 251–256, 2010.

MARTINS, E. M.; FORTES, J. D. N.; LESSA, R. D. A. Modelagem de dispersão de poluentes atmosféricos: Avaliação de modelos de dispersão de poluentes emitidos por veículos. **Revista Internacional de Ciências**, v. 5, n. 1, 2015.

MĂRUNȚĂLU, O.; LĂZĂROIU, G.; BONDREA, D. A. Mathematical model for air pollutants dispersion emitted by fuel combustion. **UPB Scientific Bulletin, Series D: Mechanical Engineering**, v. 77, n. 4, p. 229–236, 2015.

MEDDAH, S.; SAIDANE, A.; HADJEL, M.; HIRECHE, O. Pollutant Dispersion Modeling in Natural Streams Using the Transmission Line Matrix Method. **Water**, p. 4932–4950, 2015.

MICHEL, J.; BENGGIO, B. Guidelines for selecting appropriate cleanup endpoints at oil spills. In: INTERNATIONAL OIL SPILL CONFERENCE, 1999, Seattle. Proceedings. Seattle: IOSC, 1999. p. 591 - 595.

MONTEIRO, C. M.; BENATTI, M. C. C.; RODRIGUES, R. C. M. Occupational accidents and health-related quality of life: a study in three hospitals. **Revista Latino-Americana de Enfermagem**, v. 17, n. 1, p. 101–107, 2009.

MOREIRA, D. M.; ALBUQUERQUE, T. T. DE A. Solution of the Atmospheric Diffusion Equation with Longitudinal Wind Speed Depending on Source Distance. **Revista Brasileira de Meteorologia**, v. 31, n. 2, p. 202–210, 2016.

MOREIRA, P. A. R. **Derrames de hidrocarbonetos no mar: Uma avaliação das questões operacionais**. 2016. 139 f. Dissertação em Engenharia do Ambiente. Universidade do Porto, Portugal, 2016.

NADIM, F.; HOAG, G. E.; LIU, S.; CARLEY, R. J.; ZACK, P. Detection and remediation of soil and aquifer systems contaminated with petroleum products: an overview. **J. of Petrol. Sci. and Eng.**, v. v.26, p. 169–178, 1999.

NEVES, C. S. **Um problema de dispersão de poluentes em rios e canais por meio do método de separação de variáveis**. 2012. 92 f. Dissertação em modelagem computacional. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Rio Grande do Sul, 2012.

NGUYEN, P. Q. A.; GOURBESVILLE, P.; VO, N. D.; et al. Modelling NH₄⁺ Dispersion from Wastewater of Urban Drainage to the Coastal Area of Danang City, Vietnam. p.767–778, 2020.

NUNES, S. A. **Modelagem e simulação do tratamento de água produzida usando um separador ciclônico filtrante**. 2019. 194 f. Tese em Engenharia de Processos, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2019.

OLIVEIRA, B. Y.; MARIANO, G. C.; QUADRI, M. B. Um estudo cfd de vazamento de óleo a partir de dutos submersos. VII Congresso Brasileiro de Engenharia Química em Iniciação Científica, Minas Gerais, p.1-6, 27 jun. 2009.

OLIVEIRA, I. P. G.; LUZ, T. S. Estudo do processo de fabricação de tubos flexíveis de aço inoxidável duplex UNS 32304 utilizados na indústria de petróleo e gás. **Soldagem & Inspeção**, v. 18, n. 1, p. 02–11, 2013.

OLIVEIRA, V. V. DE; MATEUS, M. V.; GONÇALVES, J. C. D. S. I.; UTSUMI, A.

G.; GIORGETTI, M. F. Prediction of the longitudinal dispersion coefficient for small watercourses. **Acta Scientiarum. Technology**, v. 39, n. 3, p. 291, 2017.

PALADINO, E. E. **Estudo do Escoamento Multifásico em Medidores de Vazão do tipo Pressão Diferencial**. 2005. 263 f. Tese em Engenharia mecânica, Universidade Federal de Santa Catarina., Santa Catarina, 2005.

PARK, I. R.; KIM, K. S.; KIM, J.; VAN, S. H. A volume-of-fluid method for incompressible free surface flows. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 61, n. 12, p. 1331–1362, 2009.

PAUDEL, S.; SAENGER, N. Grid refinement study for three dimensional CFD model involving incompressible free surface flow and rotating object. **Computers & Fluids**, v. 134–140, n. ISSN 0045-7930., 2017.

PENGPOM, N.; VONGPRADUBCHAI, S.; RATTANADECHO, P. Numerical Analysis of Pollutant Concentration Dispersion and Convective Flow in a Two-dimensional Confluent River Model. **Mathematical Modelling of Engineering Problems**, v. 6, n. 2, p. 271–279, 2019.

PERGHER, B. B.; QUADRI, M. B.; SOARES, G. S.; et al. Estudo Teórico/Experimental sobre as Condições de Captura e Remoção de Óleo Proveniente de Vazamentos Subaquáticos. **In: VII Simpósio Brasileiro de Engenharia Ambiental**. 2011.

PHUC, P. VAN; YOSHIDA, A.; IMAZU, Y.; HASEBE, M. Three dimensional multiphase flow analysis of tsunami with oil spill using VOF method. **Journal of Japan Society of Civil Engineers, Ser. B2 (Coastal Engineering)**, v. 72, n. 2, p. I_415-I_420, 2016.

RADU, V. M.; DIACU, E.; MONCEA, M. A.; et al. Numerical modelling of pollutant dispersion in the lower danube river. **Revista de Chimie**, v. 68, n. 11, p. 2477–2481, 2017.

RAMEZANI, M.; NOORI, R.; HOOSHYARIPOR, F.; DENG, Z.; SARANG, A. Numerical modelling-based comparison of longitudinal dispersion coefficient formulas for

solute transport in rivers. **Hydrological Sciences Journal**, v. 64, n. 7, p. 808–819, 2019.

RIBEIRO, C. B. M. **Sistema de alerta ambiental fundamentado em estudo teórico-experimental de transporte e dispersão de poluentes solúveis em cursos d'água**. 2007. 168 f. Tese em Engenharia agrícola, Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais, 2007.

ROACHE, P. J. Perspective: A method for uniform Reporting of Grid Refinement studies. **ASME Journal of Fluids Engineering**, v. 16, p. 405–413, 1994.

RODRIGUEZ, O. M. H. **Escoamento Multifásico**. Associação ed. Rio de Janeiro, 2011.

ROSA, J. A.; CARVALHO, R. S.; XAVIER, J. A. D. **Engenharia de Reservatórios de Petróleo**. 1st ed. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2006.

SANTOS, L. M. **Modelagem matemática da dispersão de plumas poluentes em aquíferos**. 2015. 159 f. Dissertação em Engenharia Civil, Universidade Federal de Uberlândia, Minas Gerais, 2015.

SANTOS, M. M. **Simulação Numérica do Escoamento Bifásico Óleo-Água em Tubos**. 2010. 81 f. Dissertação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal de Itajubá, Minas Gerais, 2010.

SANTOS, P. V. Impactos ambientais causados pela perfuração de petróleo. **Engenharia ambiental**, v. V.1, p. 153–163, 2012.

SANTOS, W. R. G. DOS; ESCOAMENTO. **Escoamento multifásico em duto vertical com vazamento: Avaliação físico/geométrica do duto na hidrodinâmica do escoamento**. 2014. 144 f. Universidade Federal de Campina Grande. 2014.

SCHIAVI, M. T.; HOFFMANN, W. A. M. Cenário petrolífero: sua evolução, principais produtores e tecnologias. **RDBCI: Revista Digital de Biblioteconomia e Ciência da Informação**, v. 13, n. 2, p. 259, 2015.

SCHMITZ, R. Modelling of air pollution dispersion in Santiago de Chile. **Atmospheric Environment**, v. 39, n. 11, p. 2035–2047, 2005.

SCHWARZENBACH, R. .; GSCHWEND, P. .; IMBODEN, D. . **Environmental Organic Chemistry**. 3 edição ed. 2016.

SHARAN, M.; KUMAR, P. An analytical model for crosswind integrated concentrations released from a continuous source in a finite atmospheric boundary layer. **Atmospheric Environment, Elsevier**, v. v. 43, p. 2268–2277, 2009.

SILVA, B. F. S. O.; MARTINS, J. A.; ROMÃO, E. C. Dispersion of Pollutants in a River According to Its Geometry and Tributaries: A Case Study for River Paraíba do Sul—State of Sao Paulo, Brazil. **Environmental Engineering Science**, v. 37, n. 2, p. 142–147, 2020.

SILVA, E. S. **Estudo do Escoamento Bifásico em Risers em Movimento na Produção Marítima de Petróleo em Águas Profundas**. 2006. 90 f. Dissertação em Engenharia de petróleo - Universidade Estadual de Campinas, São Paulo, 2006.

SIMÕES, M. R. **Simulação Computacional De Escoamento Turbulento Em Compressor Axial Utilizando Ferramenta De Cfd**. 2009. 130 f. Dissertação em Engenharia mecânica, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.

SOUZA, B. S.; OLEINIK, P. H.; MONTEIRO, C. B.; MARQUES, W. C. Modelagem e simulação de derrames de dois tipos de petróleo baseado na experiência de Tramandaí/RS. **Revista Interdisciplinar de Pesquisa em Engenharia**, v. 5, n. 1, p. 96–107, 2019.

SOUZA, J. F. A.; OLIVEIRA, L. R.; AZEVEDO, J. L. L.; SOARES, I. D.; MATA, M. M. Uma revisão sobre a turbulência e sua modelagem. **Revista Brasileira de Geofísica**, v. 29, p. 21–41, 2011.

SOUZA, R. P. O benzeno e a saúde humana : A normatização para sua utilização. **6ª Mostra de produção científica da pós – graduação lato sensu**. v. 1, n. 1, p. 2, 2011.

SUN, Y.; CAO, X.; LIANG, F. Investigation on underwater spreading characteristics and migration law of oil leakage from damaged submarine pipelines. **Process Safety and Environmental Protection**, v. 127, p. 329–347, 2019.

SZEWCZYK, S. B. O. Processos envolvidos em um derramamento de óleo no mar. Tese de Doutorado do Curso de Oceanografia Física, FURG, Rio Grande, Brasil, 2006.

TAVARES, D. P. **Escoamento trifásico não -isotérmico em oleodutos horizontais com vazamento: Modelagem e simulação**. 2012. 104 f. Dissertação em Engenharia Química, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, 2012.

TAVARES, J. P.; LÚCIA, C.; BECK, C.; MARION, R.; DINIZ, M. Artigo de revisão acidente de trabalho: uma revisão integrativa. **Revista de enfermagem da universidade federal de Santa Maria**, v. 2, n. 1, p. 156–164, 2012.

THOMAS, E. J. **Fundamentos de Engenharia de Petróleo**. 2nd ed. Rio de Janeiro: Editora Interciência, 2004.

TREVISAN, F. E. **Padroes de Fluxo e Perda de Carga em Escoamento Trifásico Horizontal de Oleo Pesado, Agua e Ar**. 2003. Universidade Estadual de Campinas. 2003.

VIDAL, T. F.; CHAGAS, P. F.; SOUZA, R. O. DE. Equação da dispersão de poluentes em rios, para diferentes fontes de lançamentos, considerando os diversos parâmetros hidráulicos do corpo hídrico. **Fórum ambiental da alta paulista**, v. v 11, p. 206–217, 2015.

WANG, C.; CHEN, B.; ZHANG, B.; *et. al.*, Fingerprint and weathering characteristics of crude oils after Dalian oil spill, China. **Marine Pollution Bulletin**, v. 71, n. 1–2, p. 64–68, 2013.

WIEDEMEIER, T. H.; RIFAI, H. S.; NEWELL, C. J.; WILSON, J. T. **Natural attenuation of fuels and chlorinated solvents in the subsurface**. New York, 1999.

YANG, M.; LIU, S.; XU, W.; XU, J. Numerical and Experimental Studies of an Oil Slick Recovery Method That Uses a Free Surface Vortex. **ACS Omega**, v. 5, n. 48, p. 31332–31341, 2020.

YANG, S. H.; HARARI, J.; BRAGA, E. DE S. Modelagem de plumas de efluentes entre Praia Grande e Peruíbe, litoral do estado de São Paulo, Brasil. **Engenharia Sanitaria e Ambiental**, v. 24, n. 4, p. 697–708, 2019.

YOON, D. H.; NOZAKI, Y.; TANAKA, D.; SEKIGUCHI, T.; SHOJI, S. Integration of horizontal and vertical microfluidic modules for core-shell droplet generation and chemical application. **Micromachines**, v. 10, n. 9, 2019.

ZHU, H.; LIN, P.; PAN, Q. A CFD (computational fluid dynamic) simulation for oil leakage from damaged submarine pipeline. **Energy**, v. 64, p. 887–899, 2014.

ZHU, H.; YOU, J.; ZHAO, H. An experimental investigation of underwater spread of oil spill in a shear flow. **Marine Pollution Bulletin**, v. 116, n. 1–2, p. 156–166, 2017a.

ZHU, H.; YOU, J.; ZHAO, H. Underwater spreading and surface drifting of oil spilled from a submarine pipeline under the combined action of wave and current. **Applied Ocean Research**, v. 64, p. 217–235, 2017b.