**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA POLITÉCNICA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA MECÂNICA**

JACQUELINE PEDRERA YANES

**Parâmetros mais influentes na previsão da diluição inicial em
sistemas de emissários submarinos: uma contribuição
baseada em técnicas de Planejamento de Experimentos e
Superfícies de Resposta**

**São Paulo
2018**

JACQUELINE PEDRERA YANES

**Parâmetros mais influentes na previsão da diluição inicial em
sistemas de emissários submarinos: uma contribuição
baseada em técnicas de Planejamento de Experimentos e
Superfícies de Resposta**

Versão Corrigida

Tese apresentada à Escola Politécnica da
Universidade de São Paulo para a obtenção
do título de Doutora em Ciências

Área de concentração: Engenharia Mecânica
em Energia e Fluidos

Orientador: Prof. Dr. Jayme Pinto Ortiz

**São Paulo
2018**

Este exemplar foi revisado e corrigido em relação à versão original, sob responsabilidade única do autor e com a anuência de seu orientador.

São Paulo, _____ de _____ de _____

Assinatura do autor: _____

Assinatura do orientador: _____

Catálogo-na-publicação

Yanes, Jacqueline Pedrera

Parâmetros mais influentes na previsão da diluição inicial em sistemas de emissários submarinos: uma contribuição baseada em técnicas de Planejamento de Experimentos e Superfícies de Resposta / J. P. Yanes -- versão corr. -- São Paulo, 2018.

173 p.

Tese (Doutorado) - Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Departamento de Engenharia Mecânica.

1.emissários submarinos 2.simulação computacional 3.diluição inicial 4.planejamento de experimentos 5.superfícies de resposta I.Universidade de São Paulo. Escola Politécnica. Departamento de Engenharia Mecânica II.t.

JACQUELINE PEDRERA YANES. Parâmetros mais influentes na previsão da diluição inicial em sistemas de emissários submarinos: uma contribuição baseada em técnicas de Planejamento de Experimentos e Superfícies de Resposta. Tese de Doutorado. Área de Concentração Energia e Fluidos. Departamento de Engenharia Mecânica. Escola Politécnica. Universidade de São Paulo. 2017.

Aprovado em: 14 de dezembro de 2017

Banca Examinadora

Prof. Dr. Jayme Pinto Ortiz

Instituição: PME - Escola Politécnica - Universidade de São Paulo

Julgamento: Aprovada

Prof. Dr. José Rodolfo Scarati Martins

Instituição: PHA - Escola Politécnica - Universidade de São Paulo

Julgamento: Aprovada

Prof. Dr. José Alberto Quintanilha

Instituição: PTR - Escola Politécnica - Universidade de São Paulo

Julgamento: Aprovada

Prof. Dr. Eduardo Lucas Subtil

Instituição: Universidade Federal do ABC

Julgamento: Aprovada

Prof. Dr. Tobias Bernward Bleninger

Instituição: Universidade Federal do Paraná

Julgamento: Aprovada

DEDICATÓRIA

Para mis hijas Ale y Bria, que me llenan de amor y felicidad a cada instante, para que nunca olviden que no existen límites para lo que una mujer determinada puede conseguir...

A mis padres, Gloria y Eberto, que me enseñaron que los sueños no se conquistan sin esfuerzo...

A mi Guille, que me respaldó, cuidó de mí y me dió la fuerza necesaria...

A mis abuelos que, aunque por diferentes motivos ya no pueden disfrutar este momento conmigo, construyeron la base segura de mi existencia, lo que me hizo ser la persona determinada que soy hoy...

A mis hermanos Yenly-Orly y a mi pequeña Dany, una muestra más de que la vida recomienza a toda hora, solo se necesitan ganas...

A mi familia toda...

AGRADECIMENTOS

Ao Prof. Dr. Jayme Pinto Ortiz, que nos anos de convivência muito me apoiou, contribuindo para meu crescimento científico; pelo o seu empenho e paciência.

Ao Prof. Dr. José Rodolfo Scarati Martins, pela atenção e paciência durante o processo de aprendizado do Delft-3D. Extensivo o agradecimento para a aluna Laís Amorim.

Ao Prof. Dr. Joseph Harari do Laboratório de Simulação e Previsão Numérica Hidrodinâmica (LABSIP) do IOUSP, que disponibilizou dados indispensáveis para a consecução das simulações com o Delft-3D.

À Escola Politécnica da Universidade de São Paulo, pela oportunidade de realização do mestrado e do doutorado, contribuindo para a minha formação profissional.

À CAPES pelo apoio financeiro para a realização deste doutorado.

À Companhia de Saneamento Básico do Estado de São Paulo (SABESP), na pessoa do MSc. Eng. Edward Brambilla Marcellino pelo fornecimento dos dados indispensáveis para esta pesquisa.

À Andréia, indiscutível campeã derrubando gigantes, eficiente profissional e inestimável amiga.

À Maria Helena e o Valin, queridos amigos que me ofereceram um lar em São Paulo onde descansar, repor minhas forças e passar momentos inesquecíveis e divertidos.

À Lucy, sempre disposta a receber-me com os braços abertos, carinhosa e amiga, apoiando cada um dos meus passos, meu lar familiar em São Paulo, onde sempre posso tanto trabalhar quanto curtir minha família em férias.

Aos professores do DCTEF da Universidade Federal de São João Del Rei por me acolher como uma colega mais, durante os anos de realização do doutorado.

Ao meu cunhado José Alberto, que me iniciou no caminho da análise estatística aqui empregada, e que esteve sempre disposto a escutar, discutir e aprimorar minha experiência.

Às minhas filhas por desculpar os muitos momentos nos quais a mamãe não estava por perto, e tirar o cansaço do meu corpo com tanto amor e sorrisos.

Ao Guillermo, por apoiar-me, incentivar-me e dar-me a coragem necessária para seguir em frente.

Ao Brasil, por me acolher mais uma vez.

Muito Obrigada!!

RESUMO

As simulações computacionais são comumente empregadas no estudo do processo da dispersão da pluma de efluente de esgoto no mar como suporte no projeto de sistemas de emissários submarinos. Os modelos de campo próximo são uma ferramenta eficiente para prever o comportamento desses sistemas, através da previsão da diluição inicial, das principais dimensões da pluma e da concentração final de poluentes, informações úteis para o projeto do difusor. Usando modelos de campo próximo, como o NRFIELD e o UM3 do Visual Plumes, é possível simular diferentes alternativas de emissários. No entanto, a realização de muitas simulações resulta numa grande quantidade de informações que impede a obtenção de conclusões objetivas, consumindo muito tempo do projeto. Uma estratégia para um processo de simulação eficiente que permita a obtenção da máxima informação possível com um número mínimo de simulações é fundamental. Na análise dos resultados de simulações nas quais seus parâmetros de entrada são modificados de forma controlada, as causas das mudanças na resposta podem ser facilmente identificadas. Devido a isto, o uso da análise estatística foi considerado. As ferramentas estatísticas podem ser úteis na organização das simulações e na análise subsequente dos resultados. O Planejamento de Experimentos (*DOE*) é a metodologia estatística para uma experimentação eficiente, permitindo a identificação das variáveis estatisticamente significativas em qualquer sistema ou processo e, a Metodologia de Superfície de Resposta permite a otimização de sistemas a partir de suas variáveis estatisticamente significativas. Considerando isso, o objetivo principal desta pesquisa foi apresentar uma nova abordagem para otimizar, por meio da simulação computacional com modelos de campo próximo e da utilização das ferramentas estatísticas: Planejamento de Experimentos e Superfícies de Resposta, a quantidade de simulações necessárias para a obtenção do valor de diluição inicial mais próximo do ótimo, no projeto de emissários submarinos, através da identificação das variáveis estatisticamente significativas, na predição da diluição inicial, nos modelos de campo próximo do Visual Plumes. Os resultados do trabalho mostraram que só três variáveis geométricas, da configuração do difusor de um emissário, são estatisticamente significativas para a previsão da diluição inicial, e que apenas umas poucas simulações, estatisticamente planejadas, são indispensáveis para a obtenção de uma configuração de emissário mais eficiente.

ABSTRACT

The computational simulations are commonly employed in the study of the process of dispersion of sewage plume at sea as support in the design of submarine outfall systems. The near field models are an efficient tool to predict the behavior of these systems, by predicting the initial dilution, the main dimensions of the sewage plume and the final concentration of pollutants, useful information for the design of the diffuser. Using near field models such as NRFIELD and UM3 from Visual Plumes, it is possible to simulate different submarine outfall alternatives for their posterior comparison and analysis. However, when many simulations are conducted, it is resulted a large amount of information, which make more difficult to obtain objective conclusions and it is much more time consuming solution. A strategy for an efficient simulation process, that allows obtaining the maximum possible information with a minimum number of simulations, is quite fundamental. In the analysis of the results of simulations in which its input parameters are modified in a controlled way, the causes of the changes in the response can be easily identified. Because of this, the use of statistical analysis was considered. Statistical tools can be useful in organizing the simulations and in the subsequent analysis of the results. The Design of Experiments (DOE) is the statistical methodology to guarantee an efficient experimentation, allowing the identification of the statistically significant variables in any system or process, and the Response Surface Methodology allows the optimization of the systems using their statistically significant variables. Considering this, the main objective of this research was to present a new approach to optimize, through computational simulation with near field models and the use of statistical tools: Design of Experiments and Response Surfaces Methodology, the number of necessary simulations to obtain the initial dilution value closer to the optimum, in the design of submarine outfalls, through the identification of the statistically significant variables, in the prediction of the initial dilution, in the near field models. The results of the work showed that only three of the diffuser geometric variables are statistically significant for the initial dilution prediction, and that only a few statistically planned simulations are indispensable for obtaining a more efficient submarine outfall configuration.

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	10
1.1. Motivação	11
1.2. Problema da Pesquisa	16
1.3. Objetivos	19
1.4. Hipótese Científica	20
2. REVISÃO DA LITERATURA	21
2.1. Simulação computacional aplicada ao estudo de emissários submarinos	21
2.2. Planejamento de experimentos e Superfície de resposta aplicada à simulação computacional	26
3. EMISSÁRIOS SUBMARINOS	33
3.1. Tratamento e disposição de esgotos em áreas costeiras	33
3.2. Processo de dispersão de um efluente no mar	36
3.3. Legislação ambiental e monitoramento	38
4. METODOLOGIA E MODELOS	40
4.1. Metodologia estatística	40
4.1.1. Planejamento de experimentos	40
4.1.2. Metodologia de Superfícies de resposta	56
4.2. Modelos para a simulação computacional da dispersão do efluente de um ES no mar	69
5. ESTUDO DE CASO	76
5.1. Resposta, Fatores e Níveis	76
5.1.1. Resposta	76
5.1.2. Parâmetros importantes para a Resposta. Possíveis fatores	77
5.1.3. Estudo de caso	
5.2. Definição dos níveis do fator de bloco	91
5.2.1. Simulação com Delft-3D	94
6. DESENVOLVIMENTO DO ESTUDO	103
6.1. Modelo NRFIELD	103
6.1.1. Análise de sensibilidade	103
6.1.2. Experimentos exploratórios	105
6.1.3. Experimentos confirmatórios e escolha dos fatores significativos	109
6.1.4. Metodologia de Superfície de resposta	115
6.2. Modelo UM3	125
6.2.1. Análise de sensibilidade	125
6.2.2. Experimentos exploratórios e escolha dos fatores significativos	127
6.2.3. Metodologia de Superfície de resposta	133
6.3. Proposta de utilização dos resultados do estudo	138
6.3.1. Metodologia aplicada no estudo de caso	140
7. ANÁLISE DOS RESULTADOS	143
7.1. Influência do diâmetro das saídas na previsão da D_i em ES com P_d maior e menor a 20 metros	145
7.2. Comportamento dos fatores estatisticamente significativos dos modelos em ES com P_d menor a 20 metros	148
8. CONCLUSÕES	150
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	152
ANEXO	162

1. INTRODUÇÃO.

O interesse social na proteção do meio ambiente tem aumentado nas últimas décadas de forma notável. A avaliação do impacto ambiental em projetos de engenharia, considerando a solução de uma grande e crescente quantidade de problemas ambientais, é cada vez mais importante em todo o mundo.

Com a escassez cada vez maior da água potável e de alimentos naturais de boa qualidade, a proteção de rios, lagos e do meio ambiente marinho, se torna indispensável para a vida humana. A contaminação de corpos de água, como consequência da descarga de efluentes industriais ou esgoto doméstico, prática comum através da história da humanidade, é um dos aspectos mais preocupantes na gestão do saneamento ambiental.

Desde sempre o homem tem utilizado a água do mar nos processos de depuração de efluentes domésticos e industriais provenientes das regiões urbanizadas de zonas costeiras, seja através de canais naturais, emissários submarinos ou diretamente nas praias.

O oceano, devido à sua elevada capacidade de diluição pode ser considerado ideal para lidar com este tipo de efluentes, exceto aqueles muito estáveis que necessitam grandes taxas de diluição. Contudo, esses efluentes devem ser dispostos adequadamente para evitar a contaminação, e não comprometer os múltiplos usos dos corpos de água receptores (Ortiz et al., 2006).

O esgoto doméstico precisa ser coletado e tratado recebendo um destino final adequado. A matéria orgânica e inorgânica presentes nele, ao entrar em contato com um sistema hídrico pode provocar, dentre outros muitos problemas, a proliferação de bactérias aeróbias, que incrementam o consumo de oxigênio dissolvido no corpo de água (que pode reduzir-se a valores muito baixos) ou a eutrofização do meio, impactos esses que causam desequilíbrio ecológico.

Com a crescente utilização do ambiente costeiro, devido ao aumento da população nestas áreas, a preservação das águas costeiras é um campo cuja importância tem-se acentuado muito.

Mais de 50% da população mundial, ou seja, três bilhões de pessoas, se concentra atualmente a menos de 60 km da costa (Roberts et al., 2010), valores que podem variar sazonalmente em países como o Brasil, onde a população litorânea aumenta

significativamente no verão. A concentração de pessoas nas zonas costeiras pode ser observada a partir de imagens noturnas de satélites na figura 1.1.

Figura 1.1: Composição de imagens de satélite noturnas ressaltadas às áreas costeiras densamente povoadas.

Fonte: Subtil (2012).

No Brasil a grande extensão do litoral e a alta densidade populacional das cidades litorâneas colocam os estudos nesta área em grande prioridade. A qualidade das águas costeiras brasileiras é bastante influenciada pelas condições de saneamento básico existente nas cidades litorâneas.

Dados do Sistema Nacional de Informações de Saneamento (SNIS) em 2015 e do Instituto Trata Brasil em 2016, indicaram que a coleta através de redes de esgoto no Brasil atendia apenas a 50,3% da população, deixando mais de 100 milhões de brasileiros sem atendimento. Todo o esgoto produzido por essa população é despejado *in natura*.

A situação tornou-se ainda mais alarmante quando foi verificado que o tratamento desses efluentes é feito em apenas 42,67% dos esgotos coletados, sendo despejada grande parte desse esgoto restante no meio hídrico mais próximo. Esses fatos não são apenas um enorme problema ambiental, mas também, um importante problema social e de saúde pública.

Segundo dados do Banco Mundial, em 2011 o Produto Interno Bruto (PIB) brasileiro equivalia a 18% do PIB norte-americano, o que o colocava na sétima posição dentre as maiores economias mundiais. Contraditoriamente, no Relatório de Desenvolvimento Humano (IDH) de 2014 do Programa das Nações Unidas para o Desenvolvimento (PNUD), que comparou 185 dos 192 estados membros da Organização das Nações Unidas, o Brasil ficou em 79º lugar, com um IDH de 0,744

de um máximo de 1. Esse índice avalia basicamente a expectativa de vida ao nascer, o acesso à educação e o padrão de vida, sendo, que expectativa de vida ao nascer é determinada em grande medida pelo acesso ao saneamento básico da população.

O Brasil como um dos membros do BRICS a caminho de se constituir em um país desenvolvido nas próximas décadas, precisa superar sua condição atual de baixo índice de desenvolvimento humano. Nesse sentido, pela extensão de sua costa e as condições de saneamento nessas áreas, onde se concentra grande parte da população brasileira, a ampliação de sistemas de coleta e tratamento de esgoto é urgente.

1.1. Motivação.

O Brasil possui aproximadamente 8.000 km de costa, grande parte de suas metrópoles estão situadas à beira mar e na maioria dos casos não possuem infraestrutura de saneamento suficiente para sua população. Dessa forma o aporte de esgotos domésticos para as praias se torna um fato rotineiro. Segundo o Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística (IBGE), em 2014 perto de um quarto da população do país, 42 milhões de brasileiros, viviam nas áreas litorâneas, concentrados principalmente em 13 capitais que se encontram à beira mar. Fato que justifica claramente a deterioração das águas litorâneas nos últimos anos.

Considerando as possíveis soluções tecnológicas para o tratamento do esgoto nas cidades costeiras, a disposição oceânica através de emissários submarinos, como parte integrante do sistema de tratamento, sempre é avaliada.

Os emissários submarinos são uma alternativa sustentável para a conservação e recuperação da qualidade da água de corpos receptores (Echavarri-Erasun et al., 2010) (Roberts et al., 2010) e pode reduzir substancialmente os custos de investimento, operação e manutenção do sistema de tratamento, alcançando os mesmos níveis de diluição da matéria orgânica dos tratamentos convencionais, apenas otimizando a eficiência na descarga (Juanes et al., 2005).

Um emissário bem projetado, com um ponto de descarga bem selecionado que considere a inter-relação entre o tipo de efluente e o tratamento prévio, com o projeto do difusor e a hidrodinâmica própria do corpo receptor, é um caminho para conseguir-se uma relação vantajosa do custo-benefício.

Entretanto, vários pesquisadores e entidades de pesquisas ambientais seguem mostrando preocupação pelos impactos no meio ambiente destes sistemas, fato que está refletindo nas legislações ambientais.

Otimizar os múltiplos usos das zonas costeiras exige acomodar conflitos de interesse em um quadro regulamentar que assegure que os distúrbios para o meio marinho sejam mínimos ou reversíveis, no intuito da preservação dos recursos. Tal conceito exige que um grande número de variáveis e processos de interação entre eles sejam considerados. Qualquer tomada de decisão em ambientes costeiros é uma avaliação de problemas complexos.

O caso particular da descarga de efluentes no mar é controlado por normas estabelecidas por órgãos de regulamentação. Essas normas visam assegurar que a concentração de bactérias no efluente tenha níveis seguros para a saúde humana e que as substâncias nocivas ao meio ambiente não modifiquem o ecossistema local, principalmente.

Segundo Ortiz e Sobrinho (2013), existem duas abordagens diferentes para o controle da poluição da água e para o gerenciamento de águas residuárias. A primeira abordagem é o Valor Limite de Emissão (concentração máxima permitida de poluição de certa substância que pode ser lançada a partir de uma fonte específica em um ambiente aquático) e a segunda é o Padrão de Qualidade Ambiental, baseada na qualidade da água e que permite estabelecer limites de emissão adicional.

Nesse caso se incorpora o conceito de Zona de Mistura, que é definida como uma região de não conformidade com os padrões de qualidade da água e que está diretamente ligada ao processo físico da mistura do efluente com o mar, e que deve ser avaliada para cada caso de lançamento, pois não pode ser considerada uma área fixa. No Brasil foi introduzido na resolução CONAMA 430 de 2011. Esse conceito foi incorporado também às legislações modernas de qualidade da água como à USEPA (USEPA, 1991) e à Diretiva Europeia de Qualidade da Água (EC, 2008).

A CONAMA 430/2011 aporta uma regulamentação específica para o lançamento de esgotos sanitários através de emissários submarinos estabelecendo, entre outros requisitos, a remoção de um mínimo de 20% dos sólidos em suspensão presentes no esgoto antes da descarga. Para obedecer a esse critério é necessário incrementar o nível de tratamento preliminar até um tratamento primário

convencional, mais oneroso e com implicações para a digestão de lodo (Jordão, 2013).

Segundo Lamparelli (2013), o que determinou essa exigência na CONAMA 430/2011 foram os resultados do monitoramento dos sistemas de emissários em funcionamento no litoral do Estado de São Paulo, que mostraram que o litoral não tem condições favoráveis para a diluição e dispersão de efluentes de esgoto com tratamento inferior ao primário, devido fundamentalmente às fracas correntes marinhas e à pequena profundidade da costa.

Na opinião de outros pesquisadores esse é um requisito desnecessário. Segundo Ortiz e Sobrinho (2013), a simples aplicação da legislação não garante necessariamente a melhor solução para a preservação ambiental, continuam sendo necessários estudos específicos para cada estudo de caso. Também segundo os autores, a legislação ambiental deve ser instrumentada a partir da geração de informações tecnológicas e da gestão de gerência em P&D nos órgãos ambientais e nas empresas responsáveis pelos emissários submarinos, que permitam que estudos e pesquisas no tema, possam fluir com mais rapidez e eficácia entre os grupos que atuam na área.

Segundo Ortiz et. al. (2006), a resposta às incertezas e o incremento do suporte científico desta alternativa, dependem de um maior investimento na busca de informações tecnológicas a partir do desenvolvimento e da utilização de técnicas de modelagem computacional, monitoramento ambiental costeiro e rotinas de trabalho que permitam uma melhoria no desempenho desses emissários, e que ofereça a informação necessária para uma legislação mais aprimorada. Os autores também consideram que há necessidade de se estabelecer algumas metas de estudo que favoreçam a opção por emissários submarinos, por exemplo:

- Análise de custo-benefício para a tomada de decisão na escolha entre Estação de Tratamento de Esgoto convencional (ETE) e Emissário Submarino (ES);
- Sistematização de parâmetros de projetos e de operação de emissários submarinos com Estação de Pré-condicionamento;
- Modelagem física e/ou computacional aplicada ao processo de diluição do efluente de esgoto na saída do emissário;
- Subsídios aos órgãos ambientais na regulamentação da zona de mistura e no monitoramento da pluma de efluente na saída do emissário.

Sendo assim, todas as pesquisas que possam fornecer subsídios neste sentido, colaborarão de forma importante na melhoria do sistema de saneamento do litoral brasileiro.

Diversos trabalhos abordam esse tema, e as opiniões sobre o desempenho de sistemas de ES, sobre os impactos ao meio ambiente e sobre seus custos, variam muito entre engenheiros e biólogos. Contudo, trabalhos recentes e a implementação de novas ferramentas no projeto desses sistemas, apontam-na como uma alternativa das mais atrativas e seguras para as cidades costeiras (Ortiz et al., 2006) (Arasaki e Ortiz, 2006) (Souza et al., 2007) (Roberts et al., 2010) (Freitas et al., 2011).

Em 2016, trabalhos apresentados num número especial da Revista DAE, apóiam também essa afirmação. Baptistelli e Marcellino (2016) explanaram como a Companhia de Saneamento Básico de Estado de São Paulo (SABESP) tem monitorado desde 2005, a região costeira do Estado de São Paulo sob a influência dos vários emissários submarinos. Apesar das diferenças de opinião expressadas nos trabalhos da revista DAE, 2016, os principais resultados desses monitoramentos mostram que a influência das descargas dos emissários submarinos na costa do estado está limitada, principalmente, à zona de mistura, próxima ao trecho difusor destes emissários.

Em Roberts (2016), o autor discute sobre os impactos e custos ambientais. Assegura que os requisitos de qualidade da água, incluindo os de produtos tóxicos e bactérias, podem ser atendidos por um emissário eficaz, ou seja, aquele que descarrega longe da costa, com alta diluição e um tratamento preliminar com minipeneiras. Também assegura que o tratamento secundário ou outro tratamento avançado raramente é necessário, e que o custo de um ES eficaz com tratamento preliminar é da ordem de um décimo do tratamento secundário quando amortizado em 25 anos.

No mesmo sentido, Ortiz et al., (2016) apresentam um estudo comparativo entre os custos econômicos e ambientais de um ES e uma ETE. Os autores analisaram o custo-benefício dos projetos e o seu impacto ambiental, concluindo que os sistemas de emissários submarinos são mais baratos e seguros, e que a aceitação desse fato poderia ajudar no desenvolvimento sustentável das regiões costeiras.

Outros trabalhos publicados nesse número especial, como o de Bleninger et al. (2016), Libhaber (2016), Yang e Harari (2016) e Jordão e Rossman (2016) sustentam esse critério.

Contudo, sistemas de tratamento e disposição de esgotos domésticos com emissários submarinos, construídos com critérios inadequados ou então, que saem dos parâmetros ótimos de projeto por variadas causas, são comuns. Nesses casos, o monitoramento dos ES por parte das autoridades responsáveis é fundamental e a adequação dos sistemas às novas condições de operação é necessária.

Pode ser visto em publicações sobre esse tema, que comumente os sistemas acabam sendo modificados, basicamente, aumentando o grau de tratamento em terra, incrementando o tamanho do difusor ou incrementando o comprimento do emissário buscando uma maior profundidade de descarga. Na verdade, não é conhecido ou avaliado, qual dessas mudanças é mais efetiva.

Partindo desse fato, seria interessante comprovar quais características, do projeto de um sistema de tratamento de esgoto com emissário submarino, influem em maior ou menor grau sobre a eficiência de funcionamento do sistema.

1.2. Problema de Pesquisa.

A simulação computacional desempenha um importante papel no desenvolvimento de tecnologias. É usada na validação de tecnologias em desenvolvimento ou na otimização de tecnologias existentes.

Umas das razões fundamentais para a popularidade da simulação computacional é a sua vantagem em termos de custo e tempo de pesquisa, fazendo com que seja utilizada como alternativa a experimentos físicos, que são habitualmente custosos e que precisam, às vezes, de muito tempo para se obter resultados fiáveis. Como exemplos poderiam ser mencionadas as simulações de acidentes automotivos ou da aviação.

A simulação computacional do processo de dispersão da pluma de um efluente sanitário, reproduzindo a zona de mistura em qualquer tipo de corpo de água, constitui hoje uma ferramenta imprescindível no processo de tomada de decisão, tanto para os órgãos ambientais quanto para as empresas operadoras dos sistemas (Ortiz e Bessa, 2004).

No caso, são utilizados programas computacionais que usam modelos matemáticos desenvolvidos para simular os fenômenos que ocorrem na diluição dos poluentes

(Berzin, 2003) (Jirka et al., 1996). Esses modelos estimam a diluição em função de parâmetros como a profundidade, as dimensões e características do difusor e a velocidade de saída do efluente, a diferença de densidade entre o efluente e o meio receptor, a estrutura das correntes com ou sem estratificação, entre outros.

Atualmente existem vários softwares que podem ser utilizados na simulação da dispersão da pluma de efluente como o Visual Plumes ou o CORMIX, que são disponibilizados pela Agencia Ambiental Federal Americana (*Environment Protection Agency* - USA), para determinar a diluição inicial do efluente e o comportamento da pluma no campo próximo.

Também existem outros programas que simulam as características hidrodinâmicas de corpos receptores, o comportamento da pluma de efluentes no campo próximo e distante, a qualidade da água ou auxiliam no projeto do difusor, como o Mike 21, o Delft-3D, o Qual2E, o Aqualab, o SisBaHiA e o Chemmap. A combinação de alguns deles, se necessário, é possível.

Com a utilização desta ferramenta, é possível simular inúmeros sistemas com emissários submarinos com diferentes condições de descarga, características do efluente e características do meio receptor para a sua posterior comparação e análise.

No entanto, às vezes, o tempo de simulação e análise pode ser muito grande e em muitos casos com resultados não conclusivos, devido ao fato de estarem envolvidas uma grande quantidade de variáveis, com influência nos resultados. Uma estratégia para a simulação eficiente, que possibilite obter a maior quantidade de informação com a menor quantidade de simulações, é imprescindível.

Enquanto a ciência não experimental proporciona dados que são produtos da observação dos fenômenos, a realização de experimentos aporta dados experimentais que proporcionam a descrição aproximada de como se comportam processos, produtos ou sistemas, restringidos a uma região de interesse.

Às vezes é difícil adjudicar causa e efeito no estudo dos dados de uma observação, todavia, dados experimentais obtidos de testes onde tem sido controlados ou modificados logicamente alguns fatores, oferecem certezas a favor ou contra essas modificações, com respeito ao resultado obtido.

Assumindo as simulações como testes ou experimentos, existem basicamente três estratégias para experimentar: a *Best Guess* (melhor acerto), a *One fator at a time*

(*OFAT*) (um fator por vez) ou, seguindo uma metodologia estatística, o *Design of Experiments (DOE)* ou Planejamento de Experimentos.

A primeira estratégia modifica as variáveis envolvidas utilizando o conhecimento prévio sobre o processo em estudo, conduzindo os testes sob condições nas quais são esperados os melhores resultados. A segunda estratégia consiste em modificar uma variável de cada vez para distinguir os efeitos que tem sobre a resposta cada variável em separado. Embora seja a mais utilizada, a *OFAT* é pouco eficiente para achar as melhores condições de um processo ou sistema e não detecta as possíveis interações que possam existir entre as variáveis.

O Planejamento de Experimentos, no entanto, é a metodologia estatística por excelência para aperfeiçoar a experimentação, pois ajuda a obter a melhor informação possível com a menor quantidade de experimentos, e é basicamente a forma mais eficaz de fazer testes.

O *DOE* pode ser definido como um teste ou série de testes no qual são feitas mudanças propositalmente nas variáveis de entrada de um processo, de modo que possam ser observadas e identificadas, as mudanças correspondentes na resposta (característica de interesse para o pesquisador) (Montgomery e Runger, 2011), determinando quais experimentos devem ser realizados e de que jeito, para obter resultados que, quando analisados estatisticamente, proporcionem evidências objetivas que permitam responder às incertezas de um processo, resolver um problema ou lograr uma melhora (Gutierrez e Vara, 2008).

As vantagens do *DOE* sobre as outras estratégias podem ser resumidas em: redução do número de ensaios sem prejuízo da qualidade da informação; estudo simultâneo de diversas variáveis, separando seus efeitos; determinação da confiabilidade dos resultados; seleção das variáveis que mais influem no processo (variáveis estatisticamente significativas), com um número reduzido de ensaios e a elaboração de conclusões a partir de resultados qualitativos, entre outras (Button, 2016).

O *DOE* não é apenas aplicado no aperfeiçoamento de serviços e processos ou na fabricação de produtos, também pode ser útil em atividades de projeto na engenharia ou na pesquisa científica, com algumas diferenças, fundamentalmente, no processamento dos resultados.

Algumas aplicações típicas de experimentos planejados estatisticamente incluem a avaliação e comparação de configurações básicas de projeto, avaliação de materiais

diferentes, seleção de parâmetros de projeto de modo que o produto trabalhe bem sob uma ampla variedade de condições de campo, ou de modo que o projeto seja robusto, ou a determinação das variáveis significativas do projeto, aquelas que mais influência tiver sobre o desempenho do produto ou sistema.

Enquanto as técnicas do Planejamento de Experimentos identificam os parâmetros significativos e a melhor configuração dentre todas as testadas (a melhor resposta na área experimental), a Metodologia de Superfície de Resposta (MSR) (*Response Surface Methodology - RSM*) é aplicada com o objetivo de otimizar o sistema ou processo.

A MSR é um conjunto de técnicas avançadas de Planejamento de Experimentos usadas, com frequência, para refinar modelos após a determinação dos fatores significativos por meio de experimentos fatoriais (Montgomery, 2012).

Em essência, esta metodologia consiste em estimar coeficientes de regressão polinomial para a geração de um modelo empírico que aproxime uma relação entre as variáveis significativas e a resposta (Barros et al., 2001). Após ajustado o modelo matemático aos resultados do planejamento, é possível deslocar-se sobre a superfície de resposta (representada pelo modelo ajustado), a fim de localizar regiões nas quais a resposta encontra seu ótimo.

As técnicas antes apresentadas podem ajudar na otimização do tempo de projeto de emissários, limitando a quantidade de simulações necessárias para a obtenção de um sistema de ES mais eficiente, com maiores valores de diluição inicial.

Esse conhecimento seria uma importante ferramenta na tomada de decisão, no projeto ou afeiçoamento de sistemas de emissários submarinos, possibilitando a construção de sistemas com o menor custo econômico e ambiental possível.

1.3. Objetivos.

O objetivo principal desta pesquisa foi apresentar uma nova abordagem para otimizar, por meio da simulação computacional com modelos de campo próximo e da utilização das ferramentas estatísticas: Planejamento de Experimentos e Superfícies de Resposta, a quantidade de simulações necessárias para a obtenção do valor de diluição inicial mais próximo do ótimo, no projeto de emissários submarinos, através da identificação das variáveis estatisticamente significativas, na predição da diluição inicial, nos modelos de campo próximo.

O trabalho visou o auxílio na tomada de decisão tanto na otimização do projeto do emissário, procurando maiores valores de diluição inicial, quanto a otimização do tempo de projeto do emissário, diminuindo as simulações de campo próximo apenas as necessárias.

1.3.1. Objetivos Específicos.

- Identificar os fatores estatisticamente significativos para a diluição inicial nos modelos de campo próximo do Visual Plumes.
- Obter o modelo de regressão para a previsão da diluição inicial em função dos fatores estatisticamente significativos.
- Obter o valor de diluição inicial mais próximo do ótimo para o sistema estudado, a partir do modelo de regressão.

1.4. Hipótese Científica.

É possível, aplicando técnicas de Planejamento de Experimentos e de Superfície de Resposta à simulação computacional, definir quais são os parâmetros de projeto desses sistemas, estatisticamente significativos para a previsão da diluição inicial de um efluente sanitário no mar em modelos de campo próximo, no intuito de identificar a melhor configuração que garanta o melhor desempenho do sistema de emissário submarino projetado? Será possível diminuir a quantidade de simulações necessárias para o projeto desses sistemas? Será possível obter uma configuração do sistema projetado que garanta um valor de diluição inicial perto do ótimo?

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.

Neste capítulo procura-se resumir o que há de mais recente na literatura sobre a utilização da simulação hidrodinâmica no melhoramento do desempenho de sistemas com emissários submarinos assim como a utilização de técnicas de Planejamento de Experimentos e Superfícies de Respostas aplicadas a trabalhos com simulação computacional e a otimização de sistemas ou processos.

2.1. Simulação computacional aplicada ao estudo de emissários submarinos.

A simulação computacional desempenha um importante papel no desenvolvimento de tecnologias. É usada na validação das tecnologias em desenvolvimento e na otimização de tecnologias, entre outras importantes aplicações.

Uma das razões, para a popularidade da simulação computacional, são suas vantagens em termos de custo e tempo de pesquisa, motivos pelos quais vem sendo utilizada como alternativa aos experimentos físicos, habitualmente custosos, e que precisam às vezes demasiado tempo para obter resultados fiáveis para serem considerados. Como exemplos, poderiam ser mencionadas, as simulações de acidentes automotivos ou da aviação.

As técnicas da simulação computacional consistem em transformar situações da realidade em modelos matemáticos. Uma modelagem eficiente permite fazer previsões, tomar decisões, explicar e entender a realidade, fornecendo subsídios para influenciar suas mudanças (Bassanezi, 2006).

Os modelos matemáticos, em permanente estado de evolução, associados à ferramenta computacional, e às técnicas de programação adequadas para a otimização de sistemas na busca de soluções para problemas complexos, viabilizam os estudos com elevado número de variáveis (Costa, 2002).

Para a obtenção de bons resultados e sua correta interpretação, é necessário que o pesquisador conheça a essência do fenômeno de interesse, ou seja, é necessário conhecer suas causas e efeitos, compreender as interações e relevância dos agentes intervenientes na sua ocorrência (Rosman et al., 2001).

Essas técnicas vêm sendo amplamente aplicadas nos projetos de emissários submarinos, e são objetivo de pesquisas na área da Engenharia Hidráulica, Engenharia Ambiental e Engenharia Mecânica, procurando apoio para ações de

controle e a otimização dos sistemas já construídos (Arasaki e Ortiz, 2006) (Ortiz et al., 2011).

Em projetos de emissários submarinos, a simulação computacional permite otimizar a localização do ponto de descarga através de programas computacionais que aplicam modelos matemáticos desenvolvidos para simular os fenômenos que ocorrem na diluição dos poluentes (Berzin, 2003; Jirka et al., 1996), reproduzindo a zona de mistura em qualquer tipo de corpo de água.

Essa abordagem constitui hoje uma ferramenta imprescindível no processo de tomada de decisão, tanto para órgãos ambientais quanto para as empresas operadoras dos sistemas de ES (Ortiz e Bessa, 2004) e na dispersão de efluentes no mar.

Os primeiros estudos sistemáticos sobre diluição de efluentes com empuxo positivo foram realizados por Cederwall (1968) e completados por Fan e Brooks (1969). Roberts (1977) complementou a análise para meio não-estratificado e saída única. Durante a década de 1980, devido à regulamentação norte-americana da Environmental Protection Agency (EPA) com respeito às descargas de esgoto em águas marinhas, foi dada grande atenção à disposição final dos efluentes em corpos de água através de emissários submarinos.

Nesse sentido, foram utilizados uma série de modelos e dados de campo para demonstrar a conformidade com a variedade de requisitos regulamentares, mas também para o auxílio na elaboração de programas de monitoramento do meio marinho e em projetos de novos emissários submarinos, e ainda para propor modificações em sistemas de emissários já em operação (Baumgartner et al., 1994). Posteriormente, estudos sucessivos analisaram descargas com estratificação linear, diferentes ângulos de descarga, saída única e corrente ambiental como os de Brooks (1984), Wright (1984), Wong (1985) e Lee e Neville-Jones (1987).

Akyarli e Arisoy (1995) consideraram as fortes inter-relações entre as condições hidrodinâmicas e o desempenho dos emissários submarinos, avaliando o impacto de introduzir modificações no sistema difusor. Al-Muzaini et al. (1999) propuseram aumentar o comprimento do emissário em Kuwait para reduzir o impacto do efluente na zona costeira. Noutsopoulos et al. (1999) analisaram o impacto de três pontos de descarga alternativos sobre a qualidade das águas receptoras no golfo de Saronicos na Grécia.

No caso de descargas com saída múltipla, é possível encontrar trabalhos como os de Liseth (1976), Roberts (1977), Harleman e Joseph (1982), Wright (1984), Tian et al. (2004 (a) e (b)), Daviero e Roberts (2006) ou Tian et al. (2006). Esses trabalhos contemplaram a influência do espaçamento entre as saídas da tubulação difusora e a influência do ângulo da corrente com respeito ao difusor.

Os experimentos realizados por Roberts (1979), Baumgartner et al., (1994) e Roberts et al. (1989 (a), (b) e (c)), além de contemplarem diferentes ângulos de ação das correntes em relação à tubulação difusora, são classificados por um tipo de número de *Froude* definido como F ($F = u^3/b$), onde u é a velocidade das correntes atuantes sobre a tubulação difusora e b corresponde a fluxo de empuxo.

Todos esses trabalhos derivaram nas diversas formulações para o cálculo da diluição inicial, em função da configuração do tramo difusor e das condições ambientais no corpo receptor, atualmente usadas, na tomada de decisão em projetos de ES.

Na literatura também é possível encontrar estudos que avaliam a eficiência dos modelos mais usados ou esclarecem incertezas a respeito das melhores alternativas de tratamento prévio ou a objetividade da legislação vigente.

Berzin et al. (1997) realizaram a simulação da hidrodinâmica do Estuário de Santos com base no modelo MOHID-2D. O MOHID-2D é um modelo hidrodinâmico, bi-dimensional e integrado na vertical que simula a circulação de maré em estuários e zonas costeiras, sendo os seus resultados aplicáveis tanto a problemas de engenharia costeira, como aos problemas ambientais. Este modelo começou por ser desenvolvido para o Estuário do Sado em Portugal em 1985, e desde então têm sido adicionados diversos módulos de cálculo (advecção – difusão, sedimentos, qualidade da água, temperatura, etc.). O trabalho deu impulso às simulações tridimensionais.

Huang et al. (1998) utilizaram os softwares CORMIX e Plumes para determinar as características da pluma dos emissários de Hollywood e de Miami Central no sul da Florida. O trabalho mostrou previsões realistas da diluição inicial.

Montenegro (1999) conduziu simulações numéricas utilizando o modelo POM com o objetivo de descrever a circulação barotrópica forçada por maré e vento na Baía de Todos os Santos na Bahia. Também foi avaliada a importância relativa da maré e do vento, e os efeitos da variação da direção e intensidade do vento na circulação.

Carvalho et al. (2002), compararam resultados de simulações com os modelos NRFIELD, CORMIX e UM3 com medições realizadas em campo na região de lançamento do emissário submarino de esgotos de Ipanema no Rio de Janeiro com meio estratificado e não estratificado. Os três modelos se mostraram eficientes para determinar as principais características da pluma, mas o NRFIELD se mostrou mais acertado com respeito à estimativa da altura alcançada pela pluma.

Baptistelli (2003) caracterizou a hidrodinâmica das águas do litoral de Praia Grande em São Paulo, para o estudo da dispersão de efluentes, usando o MIKE21.

Fortis et al. (2005) realizaram uma análise comparativa entre o modelo CORMIX e o FLUENT, estimando a diluição do emissário da Petrobrás-TEBAR (efluente com empuxo negativo) no Canal de São Sebastião em São Paulo. Ambos os modelos apresentaram resultados satisfatórios.

Bleninger (2006) descreveu os resultados de um projeto hidráulico de difusores multi-orifícios e a previsão de impactos do emissário submarino no meio, usando CORMIX para simular o campo próximo e o Delft-3D para o campo afastado. Os resultados derivaram na proposta de um sistema regulatório para o licenciamento e monitoramento desses sistemas.

Em 2007, Ortiz et al., publicaram um estudo comparativo de imagens de satélite do emissário submarino de Santos para diferentes distâncias a partir do sistema difusor usando CORMIX, mostrando maiores concordâncias a medida que a distância era maior.

Feitosa e Rosman (2008) apresentaram uma metodologia de acoplamento entre modelos de campo próximo e campo afastado, integrados a um modelo de decaimento bacteriano e radiação solar. O procedimento adotado incluiu a combinação dos modelos de campo próximo NRFIELD, com os modelos de circulação hidrodinâmica e de transporte Lagrangeano para avaliação de qualidade de água no campo afastado contidos no SisBaHiA. O acoplamento dos modelos foi aplicado na avaliação do impacto provocado pelo lançamento conjunto de efluentes dos emissários submarinos de esgotos do Rio Vermelho e Rio Jaguaribe, localizados na cidade de Salvador.

Baptistelli (2008) apresentou uma análise crítica da utilização da ferramenta de modelagem matemática na avaliação da dispersão de efluentes leves. Para a análise utilizou três modelos hidrodinâmicos, o MIKE21, o POM e o Delft-3D. Os resultados com os três se mostraram satisfatórios.

Gregório (2009) estudou a dispersão dos efluentes do emissário de Santos - São Vicente por meio de modelagem numérica, acoplando modelos hidrodinâmicos com dispersão de campo próximo e afastado. Essa técnica tem sido amplamente aplicada em projetos de emissários submarinos, com o intuito de subsidiar ações de controle e melhoramento dos sistemas (Arasaki e Ortiz, 2006) (Ortiz et. al., 2011).

Em 2010, Hunt et al., compararam as estimativas feitas com o NRFILD da diluição inicial da pluma do efluente do emissário de Boston com medições em campo, reportando uma concordância significativa entre os valores.

Em 2011, Ortiz et al. utilizaram o módulo hidrodinâmico do MIKE 21 para avaliar duas opções de comprimento, 4 e 5 km, para o emissário de Santos-São Vicente no litoral de São Paulo. Previamente, tinha sido realizada a modificação do difusor, implantando um novo difusor à extremidade do antigo no intuito de solucionar o problema de recirculação da pluma dentro da baía de Santos. Os resultados confirmaram resultados prévios obtidos com um modelo físico (Ortiz et al., 2007 e FEHIDRO, 2008) da influência do comprimento do emissário no comportamento da pluma.

Subtil (2012) e Subtil et al. (2012) avaliaram a necessidade de remoção de nutrientes dos efluentes dos emissários de Santos e São Vicente com o objetivo de atender a CONAMA 357 e a possibilidade de algum benefício, no caso do emissário submarino de Santos, em relação à eutrofização, utilizando um modelo numérico de eutrofização integrado verticalmente e o CORMIX, para determinar as características da pluma no campo próximo e verificando os resultados, acoplados a um modelo de campo distante considerando a conservação do fluxo de massa.

Mesmo que os resultados fornecidos pela técnica computacional sejam limitados pelos parâmetros utilizados na simulação como no método experimental, diferentemente o usuário tem grande facilidade para alterar parâmetros como geometria, temperatura e velocidade, que são dados de entrada em qualquer simulador (Fortuna, 2000), fato que é uma grande vantagem na simulação do processo de dispersão do efluente de um emissário submarino ou na otimização desses sistemas.

Contudo, a quantidade de variáveis envolvidas nesse processo é muito grande, pelo que uma estratégia para uma simulação eficiente e a comparação das diversas combinações, envolvendo todos os parâmetros possíveis e alguma técnica de

organização e análise dos resultados, possibilitará a obtenção de informações relevantes com a menor quantidade de simulações necessárias.

Nesse sentido, por exemplo, Bleninger et al. (2016) apresentaram um estudo que combinou a metodologia TOPSIS (*Technique for Order Preference by Similarity to Ideal Solution*), modelos de campo próximo e modelos de campo afastado para identificar dentre 42 alternativas possíveis a melhor configuração para um sistema de gerenciamento de águas residuárias. A metodologia TOPSIS é uma técnica de tomada de decisão bastante usada que avalia o desempenho das alternativas através da similaridade com uma solução ideal. Os resultados mostram que o método foi capaz de encontrar soluções ótimas a partir de dezenas de alternativas, fornecendo importantes informações aos tomadores de decisão, companhias de saneamento ou órgãos ambientais interessados.

No entanto, na atualidade, a utilização de técnicas estatísticas para a organização e análise dos resultados de experimentos simulados é muito considerada.

2.2. Planejamento de Experimentos e Superfícies de Respostas na simulação computacional.

A utilização destas técnicas estatísticas não é nova, mas sua aplicação na área da simulação computacional é bem recente.

O Planejamento de Experimentos pode ser definido como o processo para que dados apropriados sejam coletados e depois analisados por métodos estatísticos, resultando em conclusões válidas e objetivas (Montgomery, 2012), sendo que qualquer problema experimental deve ser sustentado por dois elementos: o projeto de experimentos e a análise estatística dos dados (Costa et al., 2010) (Gomes. 2013).

As bases do que se conhece atualmente como o título do seu livro: “*The design of experiments*” (DOE) foi apresentado pelo autor Sir Ronald A. Fisher, há mais de 70 anos. Nele explica como usando experimentos planejados podem ser determinadas quais, dentre muitas variáveis, têm a maior influência no desempenho de sistemas ou processos.

Segundo Montgomery (1991), a primeira aplicação do Planejamento de Experimentos que se conhece ocorreu na área da agricultura e das ciências biológicas e pouco depois, na década de 1930, se reportam as primeiras aplicações na indústria. Durante as décadas entre 1950 e 1980 o DOE foi uma ferramenta de

uso frequente, mas apenas nas áreas de pesquisa e desenvolvimento. A partir de 1980 esteve mais difundido em nível de empresas e fábricas, devido fundamentalmente à sua participação na qualidade da indústria japonesa.

Há muito tempo se vem afirmando que as técnicas computacionais são muito mais próximas das experimentais do que as teóricas. Tanto que, atualmente, é comum encontrarmos a expressão experimentos numéricos, em referência às simulações de um fenômeno.

Já em 1999, Box, Hunter e Hunter expuseram que o Planejamento de Experimentos poderia ser utilizado na análise da sensibilidade de um modelo de simulação (Box et al., 1999)(Box et al., 2005).

Nesse mesmo sentido, Kleijnen publica dois trabalhos, explicando que a possibilidade de aplicação do *DOE* em qualquer modelo de simulação, sejam determinísticos ou estocásticos, discretos ou contínuos, é uma grande vantagem (Kleijnen et al., 1998) (Kleijnen, 1999).

Em 2000, Law e Kelton fizeram referência à importância que pode ter essa ferramenta estatística, quando aplicada à análise de qualquer modelo de simulação, considerando que oferece a possibilidade de decidir quais configurações simular antes de realizar as mesmas. Também mencionaram como relevante, a possibilidade de controlar os fatores que são analisados no modelo, o que permite fazer combinações ótimas com os níveis dos fatores, visando maximizar ou minimizar a variável resposta.

Também segundo Law e Kelton (2000), a experimentação através da simulação computacional apresenta algumas vantagens sobre experimentos físicos, industriais ou de laboratórios devido a que na simulação é possível controlar fatores que na realidade são incontroláveis, controlando a origem básica de cada variação.

Kelton e Barton (2003) afirmaram que programas de simulação são dotados de geradores de números aleatórios pelo que, do ponto de vista experimental, pode-se dispensar a preocupação com a aleatorização das rodadas experimentais (modelos estocásticos). Por sua parte, Maruri-Aguiar (2010) afirmava que ao modelar um experimento computacional, as discrepâncias entre as previsões do modelo e os dados das simulações são devidas, unicamente, ao viés existentes entre o modelo para o experimento computacional e o simulador computacional determinista. Motivo pelo qual, conceitos usuais do planejamento como: a réplica e a aleatorização deixam de ter utilidade.

Montevecchi et al. (2007) concluíram que os benefícios do Planejamento de Experimentos na simulação incluem a possibilidade da melhoria do desempenho no processo, evitando a técnica da tentativa e erro, para a busca de soluções.

Montevecchi et al. (2010) afirmam que além dos efeitos nos resultados mostrados pelas variações nos níveis de cada variável de entrada, uma grande vantagem do *DOE* é que os resultados estatísticos obtidos dele mostram as interações ou efeitos combinados dos fatores, onde o efeito de cada fator depende do nível dos outros fatores.

Outros trabalhos que podem ser encontrados dentro do tema da utilização do *DOE* na simulação são: *Designing Simulation Experiments* (Barton, 2001), *The use of Simulation and Design of Experiments for Productivity Improvement in the Sawmill Industry* (Sepúlveda et al., 2004), *Application of Design of Experiments to Computer Simulation Study* (Yamada, 2007), *A Grammar of Design of Experiments in Computer Simulation* (Yamada, 2008) e *Smart Electromagnetic Simulations: Guidelines for Design of Experiments Technique* (Bouchekara et al., 2011).

Do ponto de vista da otimização de processos ou sistemas, a simulação computacional não é, por si só, uma técnica de otimização (Law e McComas, 2002), pelo que o analista precisará simular várias configurações do sistema real e escolher, dentre todos os resultados alcançados, aquele que apresente o maior desempenho.

A otimização, via simulação computacional, pode ser definida como o processo de testar diferentes combinações de valores, com as variáveis que podem ser controladas, objetivando encontrar a combinação de valores que forneça o resultado mais desejável para os resultados de saída em um modelo de simulação (Harrel et al., 2002).

Segundo Andradóttir (1998), para localizar-se a solução ótima ou quase ótima, é necessário verificar diversas configurações de valores para os parâmetros de entrada de um modelo, pelo que a otimização, via simulação, costuma ser extremamente exaustiva do ponto de vista do esforço computacional.

Fu (2002), Harrel et al. (2002) e Banks et al. (2005) afirmaram que o uso da otimização em conjunto com a simulação estava crescendo de forma contínua, devido principalmente aos pacotes de simulação que possuem rotinas de otimização integradas.

Porém, de acordo com Banks et al. (2009), na otimização, via simulação, não é possível concluir seguramente que uma configuração seja melhor que outra, isso porque o desempenho de uma configuração específica é estimado, pois ele não pode ser determinado exatamente.

Biles (1984) já afirmava que nem todas as variáveis são igualmente importantes com relação ao seu efeito sobre a resposta. Uma análise de sensibilidade baseada nas técnicas do *DOE* deve ser conduzida no modelo de simulação de modo a selecionar as variáveis que formarão parte do processo de otimização.

Nesse sentido, pode-se dizer que a Metodologia de Superfície de Resposta é o caminho mais lógico para se atingir a otimização, já que ao usar as técnicas de Planejamento de Experimentos na realização das simulações, os resultados obtidos são facilmente relacionados às mudanças que os produziram.

Embora desenvolvida por George Box e alguns dos seus colaboradores da Universidade de Princeton na década de 1950, somente a partir da década de 1980 foi que essa metodologia passou a ser aplicada pelas empresas das indústrias americana e japonesa. O sucesso alcançado pela indústria incentivou outros setores a usar a metodologia e atualmente é utilizada em áreas tão distintas como a Física, a Engenharia, a Indústria de Alimentos ou as Ciências Sociais e a Biologia (Myers et al, 2016).

A MSR é definida como “uma coleção de técnicas matemáticas e estatísticas que são úteis para a análise de problemas nos quais a resposta de interesse é influenciada por diversas variáveis e onde o objetivo é otimizar esta resposta” (Montgomery et al., 2012).

George E.P. Box trabalhou durante vários anos na indústria química na Inglaterra e desenvolveu a Metodologia de Superfícies de Respostas e a técnica da experimentação sequencial (Box e Wilson, 1951) (Box e Draper, 1969) (Box, 1976) (Box e Draper, 1987). Com a MSR obtém-se uma relação funcional aproximada entre a resposta de interesse e as variáveis de entrada.

Embora, a utilização desta técnica de otimização continua sendo mais utilizada na área industrial, recentemente começou a ser usada para refinar modelos após a determinação das variáveis significativas dos processos por meio de experimentos planejados

Unal et al. (1997) realizaram uma série de simulações computacionais planejadas através de matrizes ortogonais para a geração de modelos de superfície de

resposta, tendo em vista a aplicação de procedimentos de otimização multi-objetivo (onde existem mais de uma resposta para o mesmo processo que precisa ser otimizado).

Venter et al. (1998) utilizou o método da MSR na formulação de um problema de otimização. As respostas associadas ao comportamento estrutural de um modelo de elementos finitos, obtidas para diferentes configurações de uma placa com espessura variável, permitiram a elaboração dos modelos aproximados.

Lynn (2000) descreveu uma abordagem baseada na utilização conjunta da MSR para auxiliar na otimização do desempenho de veículos de competição, elaborando modelos empíricos baseados em simulações de veículos completos, permitindo a avaliação em tempo-real de parâmetros de influência e suas interações no incremento no desempenho dinâmico do veículo.

Rosen et al. (2007) usaram a MSR na simulação e otimização multi-objetivo, comparando esta técnica de otimização com outras, como por exemplo, a estratégia de tomada de decisão multi-critério. Os autores conseguiram provar que a otimização por meio da MSR gera respostas de melhor qualidade que as outras técnicas de otimizações multi-objetivo consideradas.

Leal et al. (2007) usaram o *DOE* como uma forma de melhorar a performance da simulação, evitando a tentativa e erro como técnica usada para buscar uma otimização do modelo simulado, mostrando que essa técnica permite fazer uma análise de sensibilidade das variáveis de entrada a fim de diminuir o número de variáveis que serão inseridas no software de otimização, diminuindo o tempo usado no programa, além de verificar se há ou não interações entre elas.

Segundo Hu, Yao e Hua (2008) a MSR gerada de funções de segunda ordem é eficiente na resolução da maioria dos problemas e usa pouco esforço computacional, sendo rápida e barata. É ainda importante na comparação dos coeficientes dos parâmetros, eliminando as variáveis não importantes.

Yalcinkaya e Bayhan (2009) usam a MSR para otimizar a simulação de uma linha de metrô. O objetivo dos autores era variar o tempo entre partida de dois trens (que seria a variável de entrada) a fim de otimizar duas variáveis: o tempo de viagem de um passageiro desde que ele entra na estação de metrô e o nível de lotação do trem.

Montevecchi et al. (2010) definiram um fluxograma que serve como guia para conduzir um projeto de simulação. Esse fluxograma apresenta os passos gerais para

condução de um projeto de simulação com a integração do *DOE* como forma de ajuda na otimização através da *RSM*. Em Miranda (2012) esse fluxograma foi usado para a otimização de modelos de simulação de eventos discretos.

Fernandes et al. (2013) afirmaram que para usar a simulação na avaliação e na melhoria do desempenho de um processo, é necessário construir cenários, executá-los e analisar os resultados adequadamente pelo que realizaram um estudo da aplicabilidade da técnica de Superfície de Resposta na otimização da simulação com excelentes resultados.

Zhang, Chiang e Wu (2014), usaram a MSR aplicada à simulação de um processo produtivo. Conseguiram relacionar as variáveis de entrada (velocidade de produção, taxa de defeitos e manutenção de cada máquina) com a variável de saída (custo de manufatura) que seria minimizada. A partir daí, os resultados estimados para minimizar o custo de manufatura puderam ser relacionados com o investimento a ser realizado para a realização do cenário que geraria o ponto ótimo, ou seja, o custo mínimo de manufatura.

Em 2015, Silveiro et al. publicaram um trabalho onde avaliaram através de simulações o escoamento de partículas em secadores rotatórios convencionais utilizando o Método de Elementos Discretos (DEM). Com a utilização das técnicas do *DOE* e da MSR e, a comparação com dados experimentais conseguiram avaliar o efeito de cada parâmetro e da combinação deles no escoamento de fertilizantes granulados.

Até a finalização desta revisão bibliográfica, não tinha sido verificado nenhum estudo que aplicara o *DOE* e a MSR à simulação da dispersão de efluentes sanitários em sistemas de ES pelo que consideramos interessante, desde o ponto de vista acadêmico e prático, o desenvolvimento desta pesquisa de doutorado.

Em 2016, e como preâmbulo ao trabalho que estava sendo desenvolvido para a pesquisa deste doutorado, foi realizado um estudo, aplicando o *DOE* à simulação da diluição inicial. O objetivo do trabalho foi comparar duas alternativas de emissário, no intuito de obter aquela que seria a mais eficiente. Os resultados do estudo foram publicados em Pedrera Yanes et al. (2016). No caso foi usado o modelo UM3 do Visual Plumes para a simulação da diluição inicial conjuntamente ao Planejamento de Experimentos para a organização e análise das simulações. Apenas 32 simulações permitiram identificar que uma combinação de ambas as alternativas

estudadas forneceria uma diluição inicial 30% superior à melhor das alternativas avaliadas.

Os dados do projeto original do emissário usados no estudo foram fornecidos pela SABESP (SABESP, 2003). Nesse relatório técnico, tinham sido comparadas três alternativas possíveis para o emissário Itaquanduba de Ilhabela-São Paulo, para diferentes condições ambientais, sendo necessárias mais de 600 simulações para, ao longo de extensa análise, obter a melhor opção dentre as três avaliadas.

O trabalho publicado em Pedrera Yanes et al. (2016) mostrou o potencial das técnicas estatísticas para avaliar os parâmetros significativos na predição da diluição inicial do efluente, demonstrado que a aplicação do *DOE* à simulação hidrodinâmica permite chegar a conclusões claras sobre o sistema em estudo facilitando a comparação de alternativas com o menor número de simulações necessárias.

3. EMISSÁRIOS SUBMARINOS

Este capítulo tem como objetivo apresentar os conceitos fundamentais do funcionamento dos sistemas de emissários submarinos assim como os mecanismos existentes para o controle e regulamentação de tais sistemas.

3.1. Tratamento e disposição de esgotos em áreas costeiras.

O esgoto sanitário é composto em mais de 99% de água, sendo o restante composto de materiais em suspensão e dissolvido assim como microrganismos, que são os que conferem às águas residuárias suas características físicas, químicas e biológicas típicas (Jordão e Pessoa, 1995).

Segundo Von Sperling (1996) o esgoto sanitário é formado por esgoto doméstico, águas de infiltração e despejos industriais. O esgoto doméstico é proveniente de residências, restaurantes, bares, hotéis, hospitais, etc. As águas de infiltração são as que penetram na rede coletora de esgoto através de juntas defeituosas das tubulações, paredes de poços, etc. Os despejos industriais são efluentes de indústrias que são admitidos na rede de esgoto. Os esgotos industriais ocorrem em pontos específicos da rede coletora e suas características dependem da indústria.

O tratamento de esgoto convencional é usualmente classificado através dos seguintes níveis:

- Tratamento preliminar: objetiva apenas a remoção de sólidos grosseiros;
- Tratamento primário: visa à remoção de sólidos sedimentáveis e parte da matéria orgânica em suspensão, predominando os mecanismos físicos;
- Tratamento secundário: onde predominam mecanismos biológicos, com objetivo principal de remoção de matéria orgânica, em suspensão ou dissolvida, sólidos não sedimentáveis e, a remoção parcial de nutrientes e patogênicos;
- Tratamento terciário: objetiva a remoção de poluentes específicos (usualmente tóxicos ou compostos não biodegradáveis) ou ainda, a remoção complementar de poluentes não suficientemente removidos no tratamento secundário.

Para a seleção do sistema de tratamento de esgotos mais adequado é importante considerar: a eficiência, a confiabilidade, a disposição do lodo, os impactos ambientais, os custos de operação, os custos de implantação, a sustentabilidade e a simplicidade (Von Sperling, 1996). Cada sistema deve ser analisado

individualmente, adotando-se a melhor alternativa técnica e econômica para cada caso.

Em áreas costeiras, em geral, duas alternativas básicas para a disposição dos esgotos sanitários coletados costumam ser consideradas: tratamento de esgotos, normalmente feito a um nível secundário com desinfecção final e posterior disposição em corpo receptor relativamente próximo ao mar, como rios ou baías, ou a disposição do efluente no mar através de um emissário submarino, precedido por um pré-tratamento dos esgotos a nível preliminar ou primário. No entanto, o nível de pré-tratamento antes do lançamento pode variar em função do nível de desenvolvimento do país e da disponibilidade de recursos, sendo essa sempre uma questão polêmica no estabelecimento de critérios de decisão.

A segunda opção aproveita a capacidade potencial de autodepuração das águas marinhas para a promoção da redução dos poluentes a níveis admissíveis, antes que o campo de mistura esgotos-águas marinhas possa, nas condições mais adversas de deslocamento, atingir áreas de usos benéficos, especialmente aquelas relacionadas ao banho e esportes aquáticos, ou a atividade de aquicultura (Gonçalves e Souza, 1997).

O objetivo principal do emissário é dispor o efluente de uma forma segura, econômica e confiável com o menor impacto possível no corpo receptor (Roberts et al., 2010). Os emissários submarinos quando projetados apropriadamente e combinados com o condicionamento prévio necessário, podem atingir os objetivos de qualidade das águas e minimizar os impactos adversos ao ambiente e à saúde pública (Freitas, 2010).

Um sistema de emissário submarino, incluindo o campo próximo, pode ser considerado uma planta de tratamento de esgotos. O sistema providencia um alto nível de tratamento equivalente a uma eficiência de tratamento de 99% numa planta de tratamento físico, valor que normalmente não é alcançado nas plantas convencionais de tratamento de esgotos (Roberts et al., 2010).

Um difusor apropriadamente projetado pode atingir valores de Diluição Inicial de 100:1, ou superiores, quando combinado com uma profundidade de descarga razoável (Roberts et al., 2010).

Esses sistemas são compostos, basicamente, de uma estação de condicionamento prévio dos efluentes, um emissário terrestre, uma câmara ou chaminé de equilíbrio, o emissário submarino e uma tubulação difusora (Figura 3.1).

Basicamente, os esgotos coletados são conduzidos através das redes de esgoto até uma estação de tratamento, onde o efluente passa por um tratamento prévio à sua disposição no mar. O nível de tratamento é definido em função da legislação vigente e do projeto do sistema.

Figura 3.1: Representação de um sistema de emissário submarino.

A partir daí o efluente tratado é conduzido a uma torre de carga, hidraulicamente projetada para o transporte do efluente através da parte submarina do emissário e descartado no mar através do difusor.

O emissário é constituído de uma parte terrestre e outra oceânica assentada no assoalho marinho onde é ancorada. O difusor é o tramo final do emissário. Possui um conjunto de orifícios de saída, espaçados a uma determinada distância, pelos quais o efluente é lançado em alta velocidade no corpo receptor. Os orifícios podem ser feitos na própria estrutura da tubulação, podem encontrar-se em tubulações verticais fixadas no tubo (*risers*) ou ainda dispor de válvulas, que abrem ou fecham pela diferença de pressão (interna e externa), entre outros.

O número de orifícios de saída, o diâmetro desses orifícios de saída, o espaçamento entre as saídas e a orientação da seção difusora devem ser dimensionados adequadamente para produzir as melhores taxas de diluição. Um projeto ideal de difusores deve ser calculado para que a vazão efluente seja distribuída uniformemente através de todas as saídas.

Para uma adequada operação e aumento da vida útil do sistema, a configuração da seção difusora deve também maximizar a vazão, minimizar a perda de carga e, ao mesmo tempo, gerar suficiente velocidade do jato para impedir a intrusão da cunha salina (água do mar, que possui maior densidade que o efluente) e de sedimentos marinhos para dentro da tubulação.

Segundo Ortiz et. al. (2006), estes sistemas têm vantagens e desvantagens na sua

implantação quando comparados às estações de tratamentos de esgotos convencionais, como mostrado na Tabela 3.1. Nessa tabela pode ser observado que várias são as razões para que, como afirmam os autores, os sistemas de emissários submarinos sejam uma alternativa a ser considerada na fase de concepção de projetos de tratamento e disposição de efluentes sanitários em regiões costeiras.

Tabela 3.1: Vantagens e desvantagens dos emissários submarinos.

Vantagens	Desvantagens
Eficiência na disposição do esgoto	Dificuldade na construção
Menor poluição visual ou problemas de odor fora da área de mistura	Danos estruturais podem ser difíceis de reparar
Tem custo de capital menor ao longo da vida útil	Pode oferecer riscos à navegação e à pesca
A parte terrestre do sistema requer menor área	Difícil de detectar descargas tóxicas ilegais
Precisa poucos funcionários para a sua operação	Perda da qualidade da água na zona de mistura
O problema com a disposição de lodo é mínimo e tem gasto menor de energia	Requer monitoramento periódico e inspeções subaquáticas
Preserva rios costeiros	Enfrenta objeções de ambientalistas

3.2. Processo de dispersão do efluente no mar.

Uma vez que os efluentes sanitários são descarregados no mar, passam por três etapas de mistura turbulenta ou difusão, que são as responsáveis pela dispersão total do efluente: a Diluição Inicial, a Dispersão Horizontal e os processos químicos devido aos efeitos adversos do contato da água do mar com os organismos contaminantes existentes nos esgotos sanitários como bactérias e vírus, denominado, comumente, Decaimento Bacteriano (Gonçalves e Souza, 1997).

A Diluição Inicial é a máxima diluição alcançada no campo próximo ou *Near Field* e depende, basicamente, das condições ambientais, das características geométricas do tramo difusor e da profundidade de descarga. Quando o efluente é descarregado no mar, a intensa mistura que ocorre próxima à saída do jato, deve-se à turbulência gerada por ela própria, causada pela quantidade de movimento e pelo empuxo (Carvalho, 2003) ou, mais especificamente, pela diferença de quantidade de movimento entre o jato e o escoamento do ambiente.

O efluente ejetado em forma de jato passa a misturar-se com a massa do corpo d'água receptor pelo fenômeno de carreamento (*entrainment*), que se processa por toda a superfície externa do jato (Feitosa e Rosman, 2008). Desta forma, a água do

mar penetra no interior do jato efluente, modificando sua distribuição de concentrações ao longo da seção transversal da pluma, resultando numa rápida diminuição na concentração do efluente.

O termo pluma é usado para descrever a forma do efluente se o empuxo é o efeito principal e o termo jato é usado quando o efeito da quantidade de movimento é o mais importante na determinação do grau de mistura (Grace (1978) apud Freitas (2010)). O jato se torna pluma depois de certo tempo de viagem.

Como o efluente, cuja massa específica é próxima a da água doce, é mais leve que a água marinha; o jato eleva-se na coluna d'água devido ao empuxo. Neste ponto, e sob o efeito da corrente do meio, o efluente passa a espalhar-se lateralmente criando uma camada de espalhamento horizontal ou pluma.

Se as águas marinhas possuírem estratificação térmica ou salina e, consequentemente, estratificação de densidade, a camada de espalhamento horizontal pode encontrar-se submersa. Por outro lado, se a coluna estiver homogênea ou fracamente estratificada, a pluma continuará emergindo, espalhando-se ao longo da superfície da água (Gonçalves e Souza, 1997) (Carvalho, 2003) (Figura 3.2).

Figura 3.2: Comportamento típico das descargas submarinas, (a) em meios homogêneos, (b) em meios estratificados.

Fonte: Modificado de Ramírez et. al., 2002.

Após o processo de diluição inicial a pluma de dispersão estabelecida é advectada e difundida pelas correntes marinhas. Esta região é chamada de campo distante (*far-field*). A diminuição da concentração do efluente, a partir deste ponto, estará condicionada por dois processos naturais que atuam no campo de mistura formado: o transporte pelas correntes e a difusão.

No transporte pelas correntes marinhas, o campo de mistura, submetido às forças horizontais dessas correntes, começa a se deslocar passando a atuar como um campo de dispersão horizontal, que se alarga na direção do escoamento, resultando na dispersão horizontal das concentrações das substâncias presentes nesse campo (Freitas, 2010).

Ao mesmo tempo em que ocorrem a diluição inicial e a dispersão horizontal, ocorre também o decaimento bacteriano, que não é mais que a diminuição dos organismos contaminantes não conservativos existentes nos esgotos sanitários.

A determinação da taxa de decaimento bacteriano é de extrema importância nos projetos de emissários submarinos, para garantir o atendimento aos padrões de balneabilidade das praias. Esse processo depende de inúmeros fatores ambientais como a radiação solar, sedimentação, temperatura, pH, salinidade, falta de nutrientes, entre outros. (Occhipinti, 1973).

O decaimento de 90% desses organismos identificado pela sigla T_{90} tem sido bastante utilizado nos projetos, no entanto são necessárias pesquisas de campo para a determinação mais precisa desse valor. O conhecimento desse valor é imprescindível para o dimensionamento racional de um sistema de disposição oceânica, conduzindo a uma ótima relação entre o tratamento prévio, a desinfecção e as características geométricas do difusor.

3.3. Legislação ambiental e monitoramento.

Segundo a CETESB (2007), a legislação ambiental brasileira determina que todo empreendimento, que se apresente como potencialmente modificador do ambiente, deve ser examinado segundo suas alternativas locais e tecnológicas, em função dos potenciais impactos ambientais que possam vir a ser gerados.

A legislação prevê três tipos de licenças ambientais: a primeira denominada Licença Prévia (LP), que se preocupa em examinar as alternativas locais e tecnológicas que possam ser consideradas em relação ao empreendimento para o qual se solicita o licenciamento ambiental, elaborando-se relatórios de estudos de impactos

ambientais. A etapa seguinte é a concessão da Licença de Instalação (LI), quando o órgão de controle ambiental se preocupa em verificar se o projeto final do empreendimento foi desenvolvido segundo as diretrizes, recomendações e exigências dos relatórios ambientais. E, por último, a Licença de Operação (LO), quando o órgão de controle ambiental se preocupa em verificar se as obras foram executadas segundo o projeto aprovado.

O projeto do emissário deve atender aos padrões de emissão estabelecidos pelo Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) através de suas resoluções. Durante muito tempo no Brasil, para o controle da disposição de efluentes no mar, era adotada a Resolução CONAMA 20/1986. Esta resolução estabelecia padrões de qualidade para as águas salinas. Posteriormente, foi complementada pela CONAMA 274/2000 que definiu critérios para a balneabilidade das praias e pela CONAMA 357/2005 que introduziu pela primeira vez, o conceito de zona de mistura, ampliando a quatro, as classes de água salinas e salobras e definindo os seus usos e os respectivos padrões de qualidade.

Segundo a resolução, a zona de mistura é a *“região do corpo receptor onde ocorre a diluição inicial de um efluente”*, e determina em outro artigo que: *“Na zona de mistura de efluentes, o órgão ambiental competente poderá autorizar, levando em conta o tipo de substância, valores em desacordo com os estabelecidos para a respectiva classe de enquadramento, desde que não comprometam os usos previstos para o corpo d’água”*. Este conceito, embora mostre alguma flexibilidade das condições do padrão de lançamento pressupõe, por outro lado, que as empresas públicas e privadas tenham uma maior preocupação tecnológica no sentido de quantificar as concentrações de seus efluentes nesta região.

Por último, em 2011, a Resolução CONAMA 430/2011 forneceu uma classificação, e diretrizes ambientais, para o enquadramento dos corpos de águas superficiais, bem como estabeleceu as condições e padrões de lançamento de efluentes, alterando parcialmente e complementando a Resolução CONAMA 357/2005. Esta resolução inclui orientações para análise da capacidade de suporte do corpo de água receptor para recebimento dos efluentes, bem como para o detalhamento do processo de avaliação da ecotoxicidade dos efluentes e das ações de gestão necessárias ao seu controle e, apresenta um item específico relativo aos lançamentos através de emissários submarinos (Artigo 22).

4. METODOLOGIA E MODELOS

Para alcançar os objetivos definidos na introdução desta pesquisa, deve ser definida, cuidadosamente, a metodologia a ser usada. Um primeiro passo será a definição da metodologia estatística, visto que ela pode impor limites específicos à pesquisa. Posteriormente, será definida a metodologia de simulação assim como os *softwares* que serão usados.

4.1. Metodologia Estatística

Para facilitar a compreensão do estudo, a metodologia estatística foi dividida em duas partes: Planejamento de Experimentos e Superfície de Resposta.

4.1.1. Planejamento de Experimentos.

Segundo Montgomery e Runger (2011), a realização de experimentos é uma parte importante da maneira de aprendermos sobre como um sistema ou processo funciona e, a validade das conclusões que são tiradas de um experimento depende em grande medida, de como o experimento foi conduzido. Por conseguinte, o planejamento prévio dos experimentos desenvolve um papel importante.

Existem vários tipos de planejamentos experimentais que são classificados segundo seu objetivo. Na figura 4.1 mostram-se algumas dessas classificações com seus casos mais representativos. Eles são classificados de acordo com o número de fatores, com o tipo de efeito que se pretende estudar e segundo as restrições que serão impostas (Gutierrez e Vara, 2008).

Os experimentos fatoriais são os mais utilizados no campo da pesquisa, sendo muito úteis em pesquisas exploratórias (referido na literatura como *screening experiments* ou *screening*) em que pouco se sabe acerca de muitos fatores. Também são muito usados em pesquisas comparativas (Gutierrez e Vara, 2008).

Um experimento é denominado fatorial quando cada tratamento combina simultaneamente níveis de dois ou mais fatores. Os valores qualitativos ou quantitativos que compõem cada fator são chamados níveis do fator e as combinações entre os níveis dos fatores formam os tratamentos do experimento fatorial.

Os planejamentos fatoriais estudam, simultaneamente, o efeito de todas as combinações possíveis dos fatores e seus respectivos níveis, e é a única maneira de avaliar as interações entre os mesmos (Peralta - Zamora et al., 2005). Devido ao fato

de serem eficazes em diversas situações é possível utilizá-los em inúmeros planejamentos experimentais, como pode ser verificado na figura 4.1.

Figura 4.1. Classificação de alguns planejamentos de experimentos.

Fonte: Adaptada de Gutierrez e Vara (2008).

Como o Planejamento de Experimentos foi criado por matemáticos e estatísticos, possui uma linguagem própria que é necessária conhecer para a melhor compreensão da metodologia. Na continuação serão descritos os termos mais importantes:

Fator: é cada variável do sistema ou processo em estudo que pode ser manipulada entre diferentes níveis provocando mudanças na resposta estudada. São as variáveis independentes.

Níveis: são valores que podem ter os fatores durante o estudo, que definem as suas condições de operação e limitam a área experimental. Podem ser qualitativos ou quantitativos.

Área experimental: é a área de operação do sistema ou processo limitada pelos níveis dos fatores, onde os resultados da pesquisa são válidos.

Combinação ou tratamento: é a atribuição de um nível a cada fator para a realização de uma rodada (experimento, teste, simulação).

Resposta: é a variável que está sendo estudada e que depende dos níveis nos quais são avaliados os fatores em cada tratamento. É a variável dependente do estudo.

Fatores perturbadores: são aquelas variáveis que podem ter, ou não, efeito considerável sobre a resposta, mas que não são de interesse no estudo. Costumam ser classificados como fatores controláveis (aqueles que o experimentador conhece e pode ajustar seus níveis) e não controláveis (aqueles que não podem ser controladas pelo experimentador e às vezes nem identificados). Para diminuir esses

efeito ou variabilidade indesejável, é importante considerar todos os fatores que possam influir na resposta (Gutierrez e Vara, 2008).

Efeito principal: é a mudança ocorrida na resposta quando se muda um fator de um nível para outro.

Efeito da interação: é o efeito combinado de dois ou mais fatores. O efeito da interação é um efeito diferente daquele que eles provocam quando atuam independentemente. A interação é um dos elementos mais importantes dos resultados da utilização do planejamento de experimentos (Barros et al., 2001).

Matriz de experimentação: é a listagem das possíveis combinações de níveis dos fatores ou tratamentos, e é o plano formal construído para conduzir os experimentos.

Unidade experimental: é a unidade onde são aplicados os tratamentos e na qual é medida a Resposta.

No conceito do *DOE* são usados três princípios básicos: a esparsidade, a hierarquia e a hereditariedade (Montgomery e Runger, 2011). A esparsidade indica que apenas alguns efeitos de primeira ordem, ou efeitos dos fatores principais, bem como algumas interações de segunda ordem influenciam a resposta. A hierarquia diz que os efeitos de primeira ordem representam a maior fonte de variabilidade na maioria dos processos ou sistemas, sendo seguidos pelos efeitos de segunda ordem. Por último, a hereditariedade que afirma que onde se observam fatores com efeitos principais baixos é comum não ter efeitos de interação significativos e, que quando se tem uma interação significativa isto quer dizer que pelo menos um dos efeitos principais correspondentes será significativo (Hamada e Wu, 1991) (Goss e Jones, 2011). Estes três princípios são comumente usados nas experiências do *screening planning*.

Ainda, para que os resultados obtidos de ensaios experimentais ou simulações possam ser analisados através de métodos estatísticos, possibilitando a elaboração de conclusões objetivas, sua execução deverá ser realizada seguindo três princípios estatísticos fundamentais: a réplica, a aleatorização e a formação de blocos, que são a única forma objetiva de avaliar os erros experimentais que afetam esses resultados.

A réplica é o processo de repetir cada um dos tratamentos ou das combinações da matriz experimental sob as mesmas condições de experimentação em mais de uma unidade experimental.

Segundo Montgomery e Runger (2011), este conceito permite encontrar uma estimativa do erro experimental, que é utilizada para determinar se as diferenças observadas entre os dados são estatisticamente significativas.

No entanto, quando o número de fatores é moderadamente grande, maior que 4, uma prática comum é rodar apenas uma réplica do planejamento e logo combinar as interações de ordem superior como uma estimação da média quadrática do erro, aplicando o princípio da esparsidade dos efeitos supracitado. Isto é conhecido como planejamento fatorial sem réplica (Montgomery e Runger, 2011).

A aleatorização é o processo para definir a ordem dos tratamentos na unidade experimental e é realizada para considerar a variabilidade devida aos fatores perturbadores (as variáveis não conhecidas ou controláveis - erro sistemático - e as variáveis controláveis não consideradas - erro aleatório -). A aleatorização tenta garantir que todas as variáveis não consideradas no estudo influenciem de forma balanceada a resposta.

Em experimentos simulados com modelos estocásticos, nos quais alguma variável (ou variáveis) incorpora uma determinada distribuição de elementos probabilísticos (eventos aleatórios) ou sequência de números pseudo-aleatórios, que geram uma imprevisibilidade, impossibilitando a previsão do próximo valor de resposta, é considerado que o princípio da aleatoriedade é cumprido.

Porém, em experimentos simulados com modelos determinísticos, nos quais para as mesmas condições de simulação (dados de entrada) apenas será obtido um valor de resposta, este princípio deixa de ter utilidade. Em este tipo de modelos, todos os fatores são controláveis, pelo que a variabilidade considerada com a aleatorização não existe.

Por último, a formação de blocos, também conhecido como controle local, é a técnica utilizada para considerar a variabilidade produzida por fatores cuja influência sobre a resposta é reconhecida, mas não interessa estudar.

Através da formação de blocos procura-se criar um experimento mais homogêneo e aumentar a precisão das respostas que são analisadas, o que garante que os dados obtidos sejam úteis para responder as incertezas estudadas.

Segundo Maruri-Aguiar (2013), tanto a réplica como a aleatorização e a formação de blocos, deixam de ter sentido em experimentos simulados com modelos determinísticos. Não obstante, outros autores continuam considerando a formação de blocos um princípio útil.

O procedimento para a aplicação do Planejamento de Experimentos e a análise dos resultados, foi definido por Montgomery em 1991 e adaptado inúmeras vezes. Pode ser resumido como:

1. Definição do problema. Quando se sabe exatamente o alvo da investigação, as conclusões aparecem mais consistentes e rapidamente.
2. Escolha da resposta. Deve-se escolher uma ou mais variáveis de resposta que possam realmente fornecer alguma informação a respeito do problema. A escolha deve garantir a objetividade na análise dos resultados. Um critério importante é que o erro experimental de medida da resposta seja mínimo, permitindo a análise estatística dos dados, com um número mínimo de réplicas.
3. Escolha dos fatores e níveis. Em geral, essa escolha é uma combinação de conhecimentos práticos sobre o fenômeno e conhecimentos teóricos. É importante investigar todos os fatores que possam ser de importância para o estudo do problema. Os níveis dos fatores podem ser quantitativos ou qualitativos.
4. Seleção do tipo de Planejamento de Experimentos: o enfoque correto para trabalhar com vários fatores é fazer um experimento fatorial, que é a estratégia na qual todos os fatores variam em conjunto ao invés de um por vez. A escolha do planejamento adequado para cada pesquisa está em função do objetivo do estudo e do alcance esperado.
5. Definição da Matriz de Experimentação e aplicação dos princípios básicos da estatística, com a identificação dos fatores perturbadores do sistema e a definição de como serão minimizados.
6. Execução dos experimentos. Esta fase é muito importante e deve ser efetuada conforme ao planejado nos passos anteriores para garantir a validade dos experimentos.
7. Análise dos resultados. Cálculo dos efeitos. Identificação dos fatores significativos.

4.1.1.1. Planejamento fatorial completo.

Um planejamento fatorial completo inclui todas as combinações possíveis entre os níveis dos fatores. Neste tipo de planejamento o número de experimentos necessários ou rodadas n , para um dado número k de fatores e L quantidade de

níveis dos fatores é calculado pela expressão $n = L^k$. Esse valor fornece o número de experimentos necessários para estudar os k fatores.

Um caso especial de planejamento fatorial, pelo considerável valor prático que tem em pesquisas, é aquele com apenas dois níveis por fator. Uma réplica completa desse planejamento requer 2^k experimentos, lembrando que uma réplica completa é a quantidade total de combinações possíveis sob as mesmas condições experimentais. Para a construção da matriz de experimentação esses níveis são representados por +1 para o nível superior do fator e por -1 para o nível inferior do fator.

Para a melhor compreensão do tema será desenvolvido um exemplo. Considere um experimento contendo quatro fatores (A, B, C e D), cada um com dois níveis. Na matriz de planejamento, são incluídos os fatores, os níveis e os tratamentos do experimento.

O número de rodadas n é igual a 16 e o número de colunas representando todos os efeitos possíveis (graus de liberdade) é $n-1=15$, totalizando os 4 efeitos principais ou de 1ª ordem, os 6 efeitos das interações de dois fatores ou de 2ª ordem, os 4 efeitos das interações de três fatores ou de 3ª ordem e o efeito da interação dos quatro fatores ou efeito de 4ª ordem.

Os graus de liberdade correspondem à quantidade de informação que os dados fornecem para a estimativa da média da Resposta e a sua variabilidade. Um grau de liberdade estima a média e os restantes ($n-1$) estimam a variabilidade da Resposta (efeitos).

A matriz de planejamento lista os ensaios na ordem padrão. Todas as colunas começam com o nível inferior (-1) do fator e depois vão se alternando (-1+1-1+1....) na primeira coluna, na segunda coluna dois a dois (-1-1+1+1), na terceira coluna quatro sinais negativos e quatro sinais positivos (-1-1-1-1+1+1+1+1) e na quarta coluna oito negativos e oito positivos.

Com um total de k fatores cada coluna deve ter sempre 2^{k-1} sinais negativos e 2^{k-1} sinais positivos (Montgomery, 2004) e a distribuição deles não deve ser repetida. Lembrando-se disso, podemos escrever facilmente a matriz de planejamento de qualquer fatorial de dois níveis na sua ordem padrão.

Segundo Devor et al. (1992), esta forma de organizar os experimentos que é chamada de ordem padrão (*standard order*) garante que todas as colunas da matriz sejam ortogonais entre si. O conceito de ortogonalidade é importante no

planejamento de experimentos porque a sua análise é geralmente direta, sendo possível estimar cada efeito, principal e de interação, independentemente. Se o experimento não for ortogonal, seja proposital ou devido à perda acidental dos dados, a interpretação poderá não ser direta.

Na Tabela 4.1 é representada a matriz de planejamento do exemplo acima descrito.

Tabela 4.1: Matriz de um planejamento do exemplo

Rodada	Fatores principais				Resposta
	A	B	C	D	
1	-1	-1	-1	-1	Y1
2	1	-1	-1	-1	Y2
3	-1	1	-1	-1	Y3
4	1	1	-1	-1	Y4
5	-1	-1	1	-1	Y5
6	1	-1	1	-1	Y6
7	-1	1	1	-1	Y7
8	1	1	1	-1	Y8

Rodada	Fatores principais				Resposta
	A	B	C	D	
9	-1	-1	-1	1	Y9
10	1	-1	-1	1	Y10
11	-1	1	-1	1	Y11
12	1	1	-1	1	Y12
13	-1	-1	1	1	Y13
14	1	-1	1	1	Y14
15	-1	1	1	1	Y15
16	1	1	1	1	Y16

Para a realização dos experimentos serão usados os (-1) e os (+1) da matriz para definir os valores dos níveis dos fatores em cada rodada. Por exemplo, na rodada 4 os fatores A e B serão usados nos seus níveis superiores e os fatores C e D nos seus níveis inferiores, e será obtida uma resposta com valor Y_4 .

Depois de realizadas todas as rodadas planejadas seguindo a matriz, os efeitos podem ser calculados. Existem duas formas rápidas de calcular os efeitos $E_f()$: o Algoritmo *Box, Hunter and Hunter* e o Algoritmo *Yates*. O primeiro é o mais usado e permite calcular tanto o efeito dos fatores quanto das interações, a partir dos sinais utilizados para definir os níveis dos fatores na matriz do planejamento.

O efeito se obtém calculando a diferença entre a média das respostas obtidas quando o fator interveio com nível superior e a média das respostas obtidas quando o fator interveio com nível inferior. O resultado mostrará o efeito que tem sobre a resposta média, a variação do fator do seu nível inferior ao seu nível superior.

$$E_f(X) = \frac{\sum Y_i(X_{nível+})}{n/2} - \frac{\sum Y_i(X_{nível-})}{n/2} \quad (4.1)$$

Por exemplo, na Tabela 4.1 é possível ver que quando o fator A interveio no experimento no seu nível (+1) as respostas obtidas foram: $Y_2, Y_4, Y_6, Y_8, Y_{10}, Y_{12}, Y_{14}$ e Y_{16} e quando o fez no seu nível (-1) foram: $Y_1, Y_3, Y_5, Y_7, Y_9, Y_{11}, Y_{13}$ e Y_{15} , logo o efeito do fator A pode-se calcular como:

$$E_f(A) = \frac{(Y_2+Y_4+Y_6+Y_8+Y_{10}+Y_{12}+Y_{14}+Y_{16})}{8} - \frac{(Y_1+Y_3+Y_5+Y_7+Y_9+Y_{11}+Y_{13}+Y_{15})}{8} \quad (4.2)$$

e, do mesmo jeito, é possível calcular os efeitos dos outros fatores como:

$$E_f(B) = \frac{(Y_3+Y_4+Y_7+Y_8+Y_{11}+Y_{12}+Y_{15}+Y_{16})}{8} - \frac{(Y_1+Y_2+Y_5+Y_6+Y_9+Y_{10}+Y_{13}+Y_{14})}{8} \quad (4.3)$$

$$E_f(C) = \frac{(Y_5+Y_6+Y_7+Y_8+Y_{13}+Y_{14}+Y_{15}+Y_{16})}{8} - \frac{(Y_1+Y_2+Y_3+Y_4+Y_9+Y_{10}+Y_{11}+Y_{12})}{8} \quad (4.4)$$

$$E_f(D) = \frac{(Y_9+Y_{10}+Y_{11}+Y_{12}+Y_{13}+Y_{14}+Y_{15}+Y_{16})}{8} - \frac{(Y_1+Y_2+Y_3+Y_4+Y_5+Y_6+Y_7+Y_8)}{8} \quad (4.5)$$

O efeito das interações entre os fatores principais é calculado usando a distribuição dos sinais na matriz de planejamento das interações e os efeitos de terceira ordem e superior seguem a mesma rotina, usando a distribuição de sinais da tabela de interações (Tabelas 4.2 e 4.3).

As colunas das interações têm o sinal resultante da multiplicação dos sinais das colunas dos fatores que interatuam, e serão usadas apenas para o cálculo dos efeitos dessas interações (Montgomery, 2004).

Tabela 4.2: Matriz das Interações 2ª Ordem.

Rodada	Interações de segunda ordem					
	AB	AC	AD	BC	BD	CD
1	1	1	1	1	1	1
2	-1	-1	-1	1	1	1
3	-1	1	1	-1	-1	1
4	1	-1	-1	-1	-1	1
5	1	-1	1	-1	1	-1
6	-1	1	-1	-1	1	-1
7	-1	-1	1	1	-1	-1
8	1	1	-1	1	-1	-1

Rodada	Interações de segunda ordem					
	AB	AC	AD	BC	BD	CD
9	1	1	-1	1	-1	-1
10	-1	-1	1	1	-1	-1
11	-1	1	-1	-1	1	-1
12	1	-1	1	-1	1	-1
13	1	-1	-1	-1	-1	1
14	-1	1	1	-1	-1	1
15	-1	-1	-1	1	1	1
16	1	1	1	1	1	1

Tabela 4.3: Matriz das interações de 3ª e 4ª ordem.

Rodada	Interações de terceira e quarta ordem				
	ABC	ABD	ACD	BCD	ABCD
1	-1	-1	-1	-1	1
2	1	1	1	-1	-1
3	1	1	-1	1	-1
4	-1	-1	1	1	1
5	1	-1	1	1	-1
6	-1	1	-1	1	1
7	-1	1	1	-1	1
8	1	-1	-1	-1	-1

Rodada	Interações de terceira e quarta ordem				
	ABC	ABD	ACD	BCD	ABCD
9	-1	1	1	1	-1
10	1	-1	-1	1	1
11	1	-1	1	-1	1
12	-1	1	-1	-1	-1
13	1	1	-1	-1	1
14	-1	-1	1	-1	-1
15	-1	-1	-1	1	-1
16	1	1	1	1	1

Uma vez calculados os efeitos é possível deduzir que o valor absoluto dos efeitos principais (sem importar se – ou +) e das interações é a medida da importância do efeito sobre a resposta, assim como, que o sinal positivo ou negativo indica a direção do efeito, isto é, se a resposta aumenta ou decresce com a variação do nível inferior (-1) para o nível superior (+1) do fator.

Segundo Montgomery (2004), embora o planejamento experimental seja uma etapa obrigatória na realização dos experimentos, a análise estatística dos resultados não.

O pesquisador pode optar por uma análise descritiva dos resultados e não realizar testes de hipóteses estatísticas.

Entretanto, em pesquisa experimental, se alguma inferência sobre o comportamento da variável resposta em função dos fatores é buscada, devem ser usados métodos estatísticos para analisar os dados, de modo que os resultados e conclusões sejam objetivos e não opinião. Se o experimento foi planejado corretamente, e realizado de acordo com o planejamento, então o tipo de análise estatística necessária não será complicada (Montgomery e Runger, 2011).

Sendo assim, uma vez calculados todos os efeitos, deverão estudar-se quais deles são estatisticamente significativos. O efeito de um fator é estatisticamente significativo quando se pode assegurar, com baixa probabilidade de erro, que o fator influi realmente na resposta, ou seja, que seu efeito não é devido ao acaso. A maior parte da variabilidade na Resposta é explicada pelas mudanças nos níveis dos fatores estatisticamente significativos.

O método tradicional para identificar os efeitos estatisticamente significativos é a Análise de Variância (ANOVA). ANOVA é utilizada para aceitar ou rejeitar estatisticamente as hipóteses investigadas com o planejamento de experimentos (Landsheer et al., 2006). O objetivo desta técnica é analisar a variação média dos resultados dos testes e demonstrar quais são os fatores que realmente produzem efeitos (principais e de interações) significativos nas variáveis de resposta do sistema.

No entanto, quando se analisam experimentos sem réplica, como são os experimentos simulados, há apenas um único resultado para cada combinação de níveis dos fatores. A principal consequência disto é o fato de não haver informação suficiente para estimar o erro experimental. Ao não se conseguir estimar o erro experimental, os efeitos ativos não podem ser identificados pela ANOVA formal.

Segundo Montgomery (2004) e Box, Hunter e Hunter (2005) nestes casos existem três possibilidades de análise. A primeira possibilidade seria considerar as interações de alta ordem como não significativas e utilizá-las para estimar o erro experimental visto que, segundo o princípio da esparsidade de efeitos supracitado, em termos gerais apenas alguns efeitos de primeira e segunda ordem são significativos.

Em planejamentos fatoriais com mais de 4 fatores, quando seja difícil ou custoso a realização de réplicas, ou em experimentos simulados em que a réplica não tenha

sentido, as interações de ordens superiores (3ª para acima) são usadas para calcular um tipo de erro que permite realizar uma ANOVA aproximada. Esse erro é calculado assumindo que sua soma de quadrados (SQ_E) é a soma de quadrados desses efeitos de ordem superior e, os graus de liberdade são tantos quantos a quantidade de efeitos usados para o cálculo do erro.

Quanto mais efeitos pequenos e negligenciáveis conformem o erro, maiores probabilidades existem de que os resultados sejam mais robustos. Não obstante, se é considerado para o cálculo do erro um efeito significativo (não devido ao acaso), isto reduziria a potencia da ANOVA, podendo ser identificado como significativos efeitos que não são.

O procedimento é, basicamente:

- Cálculo do contraste do efeito: $C(X) = \sum Y(X^+) - \sum Y(X^-)$, sendo: $\sum Y(X^+)$ a somatória das respostas quando o fator X estava no seu nível superior e $\sum Y(X^-)$ a somatória das respostas quando o fator X estava no seu nível inferior.
- Cálculo da soma dos quadrados de cada fator: $SQX = \frac{[C(X)]^2}{n}$, sendo: n a quantidade de simulações e X, os diferentes fatores.
- Cálculo da soma dos quadrados totais: $SQT = \sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2$, sendo: Y_i cada valor de resposta simulado e $\bar{Y}$ o valor médio das respostas.
- Cálculo da soma dos quadrados do erro: $SQE = SQT - \sum SQX$
- Graus de liberdade GL: $GL_{SQE} = GL_{SQT} - \sum GL_{SQX}$, sendo: GL_{SQE} os graus de liberdade do erro (quantidade de efeitos de ordem superior passados ao cálculo do erro), GL_{SQT} os graus de liberdade da amostra (n-1) e GL_{SQX} os graus de liberdade do fator (dois níveis por fator, apenas 1 grau de liberdade).
- Cálculo dos quadrados médios: $QMX = \frac{SQX}{GL_{SQX}}$ e $QME = \frac{SQE}{GL_{SQE}}$
- Cálculo do estatístico de teste F_o : $F_o = \frac{SQX}{SQE}$ (segundo Gutierrez e Vara (2008) a distribuição de probabilidade F é a mais usada no DOE)

Desta maneira é possível realizar uma análise de variância formal usando o *p-value* (valor-p). O *p-value* representa a chance ou a probabilidade do efeito observado ser devido ao acaso, e não à mudança no fator que está sendo estudado. Se o valor-p de um fator na amostra estudada, for maior que um determinado nível de significância α , se afirma que o efeito apresenta distribuição normal. Ao definir um intervalo de confiança de 95%, admite-se uma margem de erro de até 5%, ou, em

outras palavras, há 95% de chance dos resultados terem sido causados pela manipulação dos dados experimentais, em vez de serem causados pelo acaso. Para um intervalo de confiança de 95% o valor α seria igual a 0,05.

Usando a tabela F-Snedecor para o valor-p escolhido e os graus de liberdade usados para o cálculo dos quadrados médios, é possível identificar um valor F tabelado para comparar com o F_o calculado. Se $F_o \geq F_{\text{tabelado}}$ para esse nível de significância é possível se afirmar que esse efeito é estatisticamente significativo.

A segunda possibilidade, para a identificação dos efeitos significativos é a utilização de distribuições de probabilidade como o Gráfico de Probabilidade Normal (GPN) ou método de Daniel. O GPN tem duas vantagens relevantes; a primeira é que não é necessária uma grande quantidade de experimentos para a sua utilização pelo que é útil em planejamentos fatoriais, e a segunda é que não possui hipóteses importantes que devam ser demonstradas. As informações necessárias para a construção e fundamentação dos gráficos de probabilidade normal são facilmente encontradas na literatura de análise estatística (Montgomery, 2004).

Esse gráfico permite visualizar os efeitos significativos já que quando representados os efeitos numa escala de probabilidade normal, aqueles que forem negligenciáveis estarão normalmente distribuídos ao longo de uma linha reta com média zero e o mesmo desvio padrão (o desvio padrão é o resultado positivo da raiz quadrada da variância). A variância e a medida de dispersão que indica a regularidade de um conjunto de dados em função da média aritmética. Quanto maior for a variância, mais distantes da média estarão os valores, e quanto menor for a variância, mais próximos os valores estarão da média.

Os efeitos significativos não terão média zero e estarão afastados da linha de tendência (Montgomery e Runger, 2011). Quanto mais distante um ponto estiver dessa reta, maiores serão as evidências a favor da significância estatística do efeito que este representa (Wu e Hamada, 2000). Na figura 4.2 pode-se ver um exemplo genérico de GPN.

E por último, foram desenvolvidos e propostos novos testes formais que permitem quantificar o que é visualizado nos gráficos de probabilidade, neste caso podem ser mencionados o Método Box e Meyer (1986), o Método de Lenth (1989), o Método de Lawson, Grimshaw e Burt (1998) ou o Método de Lenth Descendente (2001) (Ye, Hamada e Wu, 2001).

Figura 4.2. Exemplo de gráfico de probabilidade normal.

Fonte: Adaptado do MINITAB.

Depois de definidos os efeitos estatisticamente significativos eles devem ser devidamente analisados. Conhecer as interações ou efeitos de segunda ordem, às vezes é mais útil que conhecer os efeitos principais devido a que neste caso, o efeito de um fator depende do valor que toma o outro, que é o significado da interação entre eles.

Uma interação significativa, frequentemente obscurece a significância dos efeitos principais pelo que nem sempre é fácil definir qual é realmente o fator que produz uma diferença significativa na resposta, pelo que é preciso usar gráficos lineares para descobri-lo (Devor et al., 1992). Uma interação significativa indica que todos os fatores envolvidos na interação são potencialmente significativos, mesmo que seus efeitos principais possam, eventualmente, não ter mostrado significância.

A representação do efeito principal de um fator x_i pode ser realizada como mostrado na figura 4.3. Esse gráfico conhecido como Gráfico Linear ilustra a variação média da resposta em função da mudança de nível do fator, mantendo os outros fatores fixos.

Figura 4.3. Representação gráfica do efeito principal x_i .

Na figura 4.4 é analisado o efeito sobre a resposta de dois fatores. No gráfico da esquerda (a) é possível ver como a variação da resposta provocada pela variação de nível, do fator x_1 , depende do nível do fator x_2 .

Figura 4.4. Representação gráfica dos efeitos de dois fatores x_1 e x_2 .

(a) quando há interação (b) quando não há interação.

Quando o fator x_1 muda do seu nível inferior (-1) para o nível superior (+1), o valor da resposta aumenta se o fator x_2 estiver no nível inferior (-1), mas, se pelo contrário, o fator x_2 estiver no nível superior (+1) a resposta diminui o que evidencia a interação.

De forma geral e graficamente falando, a interação observa-se quando as linhas que representam o comportamento da Resposta no gráfico não são paralelas. Essas linhas podem chegar a cruzar-se dentro da área gráfica limitada pelos níveis dos fatores, se a interação tivesse um efeito significativo grande quando comparado com os efeitos principais.

Quando a interação, embora significativa, não é muito forte, ou seja, o valor do efeito da interação é pequeno quando comparado aos valores dos efeitos dos fatores principais, essas linhas não chegam a cruzar-se na área experimental.

Do ponto de vista analítico, o gráfico de uma interação mostra que o incremento ou diminuição na Resposta, provocado pela mudança de nível do fator x_1 é diferente, para cada nível do fator x_2 . Isto quer dizer que a variação da Resposta, quando x_1 muda do nível inferior ao nível superior enquanto x_2 encontra-se no nível inferior, é diferente da mudança da Resposta quando x_1 muda do nível inferior ao nível superior enquanto x_2 encontra-se no nível superior.

No caso de não interação as linhas do gráfico são paralelas. No gráfico da direita da figura 4.4(b) pode ver-se como não existe interação entre os fatores já que a mudança na Resposta quando o fator x_1 muda do nível inferior (-1) ao superior (+1) é a mesma, porque é independente do nível do fator x_2 .

4.1.1.2. Planejamento fatorial fracionário.

À medida que cresce o número de fatores de um experimento fatorial, o número de rodadas (n) necessárias aumenta rapidamente. Um experimento 2^k com cinco fatores resulta em 32 rodadas. Dos 31 graus de liberdade, ou seja, dos 31 efeitos possíveis de calcular-se ($n-1$), apenas cinco são efeitos principais e dez são efeitos de segunda ordem, os 16 efeitos restantes correspondem às interações de três, quatro e cinco fatores (interações de ordem superior) (Hunter e Hunter, 1978).

Sabendo de fato, que certas interações de ordens altas são negligenciáveis, de acordo com os princípios da esparsidade e da hierarquia antes mencionados, um planejamento fatorial envolvendo menos rodadas que um conjunto completo 2^k , poderia ser usado. Esses planejamentos são conhecidos como Planejamento Fatorial Fracionário 2^{k-p} (Montgomery e Runger, 2011).

Os fatoriais fracionários têm um uso importante nos experimentos de seleção (*screening experiments*), quando é provável que muitos dos fatores considerados inicialmente tenham pouco ou nenhum efeito sobre a resposta. Permitem estudar o maior número possível de fatores, mesmo aqueles que não parecem ser muito importantes, para logo descobrir que apenas alguns apresentarão influência significativa na variação da resposta (Montgomery, 2004). Esse tipo de planejamento geralmente é usado quando o número de fatores analisados *a priori* é igual ou superior a 5.

Com essa técnica é possível analisar os efeitos sobre a resposta de interesse, realizando-se apenas uma parte dos experimentos. O número de rodadas neste caso seria $n = L^{k-p}$, onde p seria 1 para a $\frac{1}{2}$ fração, 2 para $\frac{1}{4}$ de fração, 3 para $\frac{1}{8}$ de fração e 4 para $\frac{1}{16}$ de fração. Para entender o que isto significa voltaremos ao exemplo citado anteriormente.

Se no exemplo fosse aplicada uma meia fração, seriam necessárias apenas 16 rodadas que forneceria 15 graus de liberdade para o cálculo dos efeitos. Esses graus de liberdade permitiriam o cálculo dos efeitos dos 5 fatores principais e das 10 interações de segunda ordem, possibilitando a redução dos custos e do tempo de duração dos experimentos.

Embora, os outros tipos de fatorial fracionários antes descritos, pudessem ser aplicados também, e a quantidade de rodadas seria ainda menor, é necessário aplicar esta técnica considerando cuidadosamente o fato de que a redução do

tamanho do experimento, de grande vantagem em muitas situações, não poderá ser levada a efeito impunemente. Os resultados de um experimento fatorial fracionado exigem, para sua interpretação, cuidados de outra ordem que os encontrados nos delineamentos fatoriais completos (Montgomery e Runger, 2011).

Devido ao fato de que um experimento fatorial fracionado usa um subconjunto de um experimento fatorial completo, alguns dos efeitos principais e interações de segunda ordem podem estar confundidos ou superpostos entre si, ou com interações de ordens superiores. Essa confusão, ou *confundimento*, é causada pela diminuição do número de experimentos, o que provoca que certos fatores, ou interações de fatores, não possam ser individualizados no momento da análise, para se identificar quais deles, realmente, são a fonte de variação na resposta (Montgomery e Runger, 2011).

Confundimento, embora não dicionarizada, é uma expressão reconhecida e utilizada na terminologia médica e estatística em português, para explicar uma situação de erro de interpretação (ou de associação), na qual ocorre a confusão entre o efeito de duas variáveis, de maneira que o efeito atribuído a uma delas é, na verdade, decorrente da ação da outra. Originado do latim *confusione*, o termo significa misturar.

O investigador deve ficar atento para controlar a influência da confusão de efeitos. Com esta finalidade, o primeiro passo é identificar os possíveis fatores que podem estar associados e, que também podem ser causadores do efeito em estudo.

Para a compreensão da confusão de efeitos é mostrado a seguir, nas tabelas 4.4 (a) e 4.4 (b), um exemplo de um planejamento fracionado simples, no caso um 2^{3-1} .

Tabela 4.4: (a) Matriz de um planejamento 2^3 . (b) Duas frações do fatorial fracionário e esquema de confusão.

Rodada	Efeitos						
	A	B	C	AB	AC	BC	ABC
1	-1	-1	-1	1	1	1	-1
2	1	-1	-1	-1	-1	1	1
3	-1	1	-1	-1	1	-1	1
4	1	1	-1	1	-1	-1	-1
5	-1	-1	1	1	-1	-1	1
6	1	-1	1	-1	1	-1	-1
7	-1	1	1	-1	-1	1	-1
8	1	1	1	1	1	1	1

(a)

(b)

Na tabela 4.4 (a) é mostrada a matriz de experimentação e na tabela 4.4 (b) foram reorganizadas as rodadas juntando aquelas nas quais a interação de terceira ordem

tem a mesma distribuição de sinais em cada metade, o que permite visualizar com facilidade como são confundidos os efeitos.

Como o software precisará escolher qual fração da matriz deverá ser executada, é provável que, por acaso, selecione a primeira fração de experimentos, ou seja, as rodadas 2, 3, 5 e 8. Ao observar-se essa fração do planejamento, é possível perceber que a distribuição de sinais do fator A e da interação BC é a mesma, logo quando os efeitos de ambos forem calculados, o valor seria o mesmo. O mesmo aconteceria com B e AC e C e AB. Logo, o responsável desse efeito, em cada caso, não estaria explícito.

Analiticamente, a estrutura de confusão pode ser determinada por meio da multiplicação da letra do fator com a relação definidora I eliminando, posteriormente, o termo quadrático. A relação definidora não é mais que a relação de todos os fatores.

No planejamento 2^{3-1} do exemplo I = ABC, a estrutura de confusão do efeito principal A pode ser obtida como $ABC * A = A^2 BC$ e ao eliminar A^2 é possível concluir que o efeito de A, estaria confundido com o efeito da interação BC. Do mesmo jeito B estará confundido com AC e C estará confundido com AB. Os resultados são iguais aos obtidos da análise da tabela 4.4.

Em outros tipos de planejamento fatoriais fracionário, pode não acontecer confusão entre os efeitos principais, mas esses efeitos estarão confundidos com os efeitos das interações de segunda ordem ou superiores, logo é impossível definir se é o fator principal ou a interação, quem tem o efeito significativo. Sendo assim, um aspecto importante que deve ser considerado nos experimentos fatoriais fracionados é a resolução do planejamento que está sendo utilizado.

Segundo Montgomery (1991), a resolução de um planejamento fatorial fracionário está relacionada ao padrão de confusão entre os efeitos dos fatores. O autor recomenda a utilização da maior resolução possível na hora de selecionar o planejamento, porque com isso é possível desprezar os efeitos das interações de ordem maior. A resolução do fatorial fracionário é classificada com os números romanos I, II, III, IV e V.

Em Montgomery e Runger (2011) estão disponíveis as estruturas de confusão para esse tipo de planejamento, em dependência da quantidade de fatores e da fração escolhida. Em Gutierrez e Vara (2008) ou Montgomery e Runger (2011) é explanado amplamente a confusão de efeitos e sua utilização. Os tipos de resolução III, IV e V

são considerados como os mais importantes e utilizados. Os de resolução III e IV são particularmente úteis em experimentos de seleção de fatores (*screening experiments*).

Na Resolução III nenhum efeito principal é confundido com qualquer outro efeito principal, mas os efeitos principais são confundidos com interações de 2 fatores. Na Resolução IV nenhum efeito principal é confundido com qualquer outro efeito principal ou com interações de 2 fatores, mas algumas interações de 2 fatores são confundidas com outras interações de 2 fatores, e os efeitos principais são confundidos com interações de 3 fatores. Na Resolução V nenhum efeito principal ou interação de 2 fatores é confundido com qualquer outro efeito principal ou com interações de 2 fatores, mas as interações de 2 fatores são confundidas com interações de 3 fatores, e os efeitos principais são confundidos com interações de 4 fatores.

Finalmente, a análise estatística dos efeitos principais e das interações dos fatores segue os mesmos princípios apresentados para o Fatorial Completo.

Uma vez reduzido por esta via, o número de fatores potencialmente significativos à resposta, é possível executar um fatorial completo considerando os fatores significativos obtidos no fatorial fracionário.

4.1.2. Metodologia de Superfície de Resposta (MSR).

Como conclusão dos experimentos realizados usando o *DOE* é possível determinar a melhor combinação de níveis dos fatores estudados, que resulta na melhor resposta na região experimental. A região experimental é a área delimitada pelos níveis dos fatores no estudo.

A melhor resposta possível, dentro da região experimental, pode ser o ponto experimental mais próximo ao verdadeiro ponto ótimo, se o planejamento inicial teve uma adequada seleção da região experimental. De fato, às vezes a melhor resposta possível dentro da região experimental é quase tão boa quanto à resposta do ponto ótimo (Gutierrez e Vara, 2008).

Não obstante, o ponto ótimo implica que é a melhor combinação possível em toda a região de operabilidade, sendo que, a região de operabilidade é delimitada pelas possibilidades do sistema estudado. Portanto, determinar esse ponto requer uma estratégia mais completa, com a realização de vários experimentos em forma sequencial e a utilização de outras técnicas de análise.

Segundo Montgomery e Runger (2011), o conjunto de técnicas matemáticas e estatísticas úteis para modelagem e análise nas aplicações em que a resposta de interesse seja influenciada por vários fatores e o objetivo seja otimizar essa resposta, é conhecida como Metodologia da Superfície de Resposta (MSR) ou *Response Surface Methodology (RSM)*.

A MSR é a estratégia experimental e de análise que permite encontrar as condições de operação ótimas de um processo ou sistema (Gutierrez e Vara, 2008). É um método sequencial, onde o pesquisador inicia com uma combinação de níveis dos fatores que podem estar afastados do ponto ótimo e a partir dessa combinação são gerados novos níveis para atingir o ponto ótimo (se existir).

Esta estratégia pode ser dividida em duas fases. A primeira fase seria identificar uma função matemática que modele a variação da resposta em função da variação dos fatores significativos do sistema identificados através da utilização do *DOE*. Esse modelo matemático será a função objetivo do processo de otimização. A segunda fase seria o processo de otimização dessa função objetivo.

Suponha que para uma variável resposta Y , foram identificados determinados fatores estatisticamente significativos. Se fosse possível descrever a relação entre Y e esses fatores através de um modelo matemático, esse modelo poderia ser usado tanto com propósitos de predição e controle da resposta quanto para a otimização do processo ou sistema (Gutierrez e Vara, 2008).

Segundo Myers et al. (2016) a relação entre a resposta estudada Y e as variáveis controláveis do sistema (ex: $X_1, X_2, X_3, \dots, X_k$) pode ser representada como:

$$Y = f(X_1, X_2, X_3, \dots, X_k) + \varepsilon \quad (4.6)$$

sendo que, a forma da função f é desconhecida, e ε é o resíduo da função, um termo que representa as outras formas de variabilidade que não foram consideradas como fatores e que, na maioria das vezes, nem podem ser identificadas. O resíduo não é mais que a diferença entre a observação e o resultado do modelo. Se o modelo é bem ajustado, esse resíduo também tem distribuição normal, logo se pode dizer que a superfície de resposta η é:

$$\eta = f(X_1, X_2, X_3, \dots, X_k) \quad (4.7)$$

As variáveis ($X_1, X_2, X_3, \dots, X_k$) são usualmente chamadas de variáveis naturais pelo fato delas serem usadas em suas unidades de medidas naturais ($^{\circ}\text{C}$, Kg/m^3 , etc.). Na MSR é conveniente a transformação dessas unidades em variáveis codificadas

$x_1, x_2, x_3, \dots, x_k$, definidas como adimensionais. Em termos dessas variáveis codificadas a função da superfície de resposta agora pode ser escrita como:

$$\eta = f(x_1, x_2, x_3, \dots, x_k) \quad (4.8)$$

Devido ao fato dessa função ser desconhecida é necessário aproximá-la cuidadosamente. O sucesso da utilização da MSR para a obtenção do ponto de operação ótimo depende fortemente da qualidade da função aproximada (Myers e Montgomery, 2016). Para a aproximação da função f se utiliza uma análise de regressão. Uma análise de regressão tem como objetivo modelar de forma matemática o comportamento de uma variável dependente em função de uma ou mais variáveis independentes ou controláveis.

O modelo de regressão linear simples é o modelo mais simples para descrever a relação entre uma variável resposta e um fator significativo. Se em vez de um, forem identificados mais de um fator significativo, ou seja, o modelo precisaria definir a relação da resposta com mais de uma variável independente, então o modelo passa a denominar-se modelo de regressão linear múltipla.

Os modelos de regressão linear supõem que o valor médio da variável resposta é uma função linear dos fatores, que a variância da resposta é constante e que a variação aleatória da variável resposta para qualquer valor fixo dos fatores segue uma distribuição normal. Geralmente, o modelo de regressão linear para dois fatores, por exemplo, é representado como:

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 \quad (4.9)$$

Sendo que η é a função da superfície, x_1 e x_2 são as variáveis independentes, β_0 é a constante de regressão do modelo e β_1 e β_2 são os coeficientes de regressão do modelo. Nesse caso, procura-se verificar se a variação da resposta em função das variáveis x_1 e x_2 é bem modelada por uma superfície plana, conforme a figura 4.5.

Figura 4.5: Gráfico de superfície do modelo de primeira ordem de dois fatores.
Superfície plana.

Fonte: Adaptado de Gutierrez e Vara, 2008.

Esse modelo às vezes também é chamado de modelo de efeitos principais porque apenas inclui os efeitos dos fatores. Se o efeito da interação fosse identificado como significativo, o termo dessa interação deve estar presente no modelo como a seguir:

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 \quad (4.10)$$

O modelo da equação 4.10 é conhecido como modelo de primeira ordem com interação, sendo que o termo $\beta_{12} x_1 x_2$ representa a interação

A presença do termo de interação no modelo, introduz curvatura na superfície de resposta. Às vezes essa curvatura é forte o suficiente como para que o modelo de primeira ordem não aproxime adequadamente a função, sendo necessária a utilização de um modelo de segunda ordem (Myers e Montgomery, 2016). Nesses casos, a equação 4.10 é modificada para incluir os termos não-lineares, o que é representado pela equação 4.11 como:

$$\eta = \beta_0 + \beta_1 x_1 + \beta_2 x_2 + \beta_{12} x_1 x_2 + \beta_{11} x_1^2 + \beta_{22} x_2^2 \quad (4.11)$$

Neste caso, a superfície de resposta poderia ter formas similares aos exemplos da figura 4.6.

Figura 4.6: Gráficos de superfície de modelos de segunda ordem de dois fatores.
Superfície curva.

Fonte: Adaptado de Gutierrez e Vara, 2008.

Para mais de dois fatores, as superfícies não podem ser representadas de uma vez só, porque seriam necessárias quatro dimensões ou mais. Para $k > 2$ o modelo de primeira ordem representa um hiperplano e o de segunda ordem um hiperbolóide. Para $k=3$ é possível construir gráficos com dois fatores de cada vez e o terceiro constante (Gutierrez e Vara, 2008).

De forma geral, um modelo de primeira ordem para k fatores é escrito como:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i \quad (4.12)$$

e o modelo de segunda ordem como:

$$\eta = \beta_0 + \sum_{i=1}^k \beta_i x_i + \sum_{i=1}^k \beta_{ii} x_i^2 + \sum_{i=1}^k \sum_{j=1}^k \beta_{ij} x_i x_j \quad (4.13)$$

O procedimento mais utilizado para ajustar a melhor função é o Método de Mínimos

Quadrados (MMQ). O MMQ é uma técnica de otimização matemática que procura encontrar o melhor ajuste para um conjunto de dados tentando minimizar a soma dos quadrados das diferenças entre o valor estimado e os dados observados (resíduos), de forma a maximizar o grau de ajuste do modelo aos dados observados. Os fatores significativos de qualquer processo ou sistema são os fatores que serão usados no processo de otimização e eles só podem ser identificados aplicando as técnicas de Planejamento de Experimentos. A identificação dos fatores significativos, através do *screening experiments*, é conhecida como a fase zero da MSR.

Partindo desse ponto, podemos então aplicar a MSR dividida em outras duas fases. Uma primeira fase na qual o objetivo é caracterizar de maneira preliminar a superfície de resposta com um modelo de 1ª ordem e detectar a curvatura, e uma segunda fase na qual o objetivo é caracterizar adequadamente a superfície de resposta através de um modelo de 2ª ordem incluindo a curvatura e otimizar a resposta. O processo pode ser representado como na figura 4.7.

Figura 4.7: Fases da Metodologia de Superfícies de Resposta.

Fonte: Adaptado de Gutierrez e Vara, 2008.

Modelo de primeira ordem

Segundo Myers e Montgomery (2016), os planejamentos fatoriais 2^k são amplamente usados para aproximar o modelo de primeira ordem da superfície de resposta e, posteriormente, também são importantes na aproximação do modelo de segunda ordem, como parte fundamental dos planejamentos usados nesta fase, como é o Planejamento de Composição Central ou Central Composto.

O fato de ser um planejamento com apenas dois níveis facilita muito a análise de regressão de seus resultados. As variáveis codificadas apenas podem ter os valores -1 e 1 (código dos níveis inferior e superior dos fatores), o que simplifica muito a obtenção do modelo de regressão.

Ao aplicarmos o MMQ para o cálculo dos coeficientes do modelo de regressão de um conjunto de dados obtidos aplicando este tipo de planejamento fatorial com 2 níveis, é fácil comprovar que os resultados serão exatamente iguais do que serão ao calcular a constante de regressão do modelo (β_0) como a média das respostas obtidas de todos os experimentos ($\bar{Y}$) e, os coeficientes de regressão do modelo os β_i , β_j e β_{ij} , como a metade do efeito calculado do fator ou da interação que eles representam ($\frac{E_f}{2}$) (Werkema e Aguiar, 1996).

Para codificar as variáveis naturais, é usada uma relação simples que é explanada em seguida com um exemplo. Imaginemos que a variável codificada x_1 representa a temperatura do processo, a forma geral de calcular referida variável seria (Myers e Montgomery, 2016):

$$x_1 = \frac{X_1 - ((Temp_{nível-} + Temp_{nível+})/2)}{(Temp_{nível-} - Temp_{nível+})/2} \quad (4.14)$$

Sendo que X_1 é o valor de temperatura que se quer codificar, $Temp_{nível-}$ é o nível inferior do fator temperatura e $Temp_{nível+}$ o nível superior do fator temperatura.

Em planejamentos 2^k , os X_i apenas podem ter dois valores possível, o nível superior e o nível inferior, logo x_i será +1 quando X_i seja igual ao valor do nível superior do fator e -1 quando X_1 seja igual ao valor do nível inferior do fator.

Logo, se considerarmos dois fatores significativos X_1 e X_2 e uma interação significativa X_1X_2 , a função estimada que aproxime a resposta pode ser escrita, inicialmente, como na equação 4.15:

$$\hat{Y} = \bar{Y} + \frac{E_f(X_1)}{2} * x_1 + \frac{E_f(X_2)}{2} * x_2 + \frac{E_f(X_1X_2)}{2} * x_1x_2 \quad (4.15)$$

Agora esse modelo pode ser usado para calcular todos os valores possíveis de $\hat{Y}$,

testando todas as combinações possíveis das variáveis codificadas e calcular os resíduos do modelo, usando a mesma distribuição de sinais que foram utilizadas para as simulações ou experimentos.

Como dito, o resíduo é a diferença entre os valores observados da resposta (Y) (obtidos dos experimentos ou simulações) e os valores obtidos pelo modelo ($\hat{Y}$), para a mesma combinação de níveis dos fatores (equação 4.16).

$$\varepsilon = Y - \hat{Y} \quad (4.16)$$

Esse conjunto de resíduos deve ser analisado para garantir que o modelo se ajuste realmente ao fenômeno que descreve.

Essa análise é feita usando três métodos gráficos, o Gráfico de Probabilidade Normal de Resíduos, que deve mostrar que todos os valores estão distribuídos numa linha reta, ou seja, que os resíduos se distribuem normalmente; o Gráfico de Resíduos vs Predição, que não deve mostrar nenhuma ordem estruturada, os pontos devem estar distribuídos aleatoriamente em torno do zero sem estrutura visível; e o Gráfico de Resíduos vs. Observação. Os três gráficos ajudam a detectar valores atípicos na resposta. Esses gráficos serão utilizados no capítulo 6.

Outro critério mais quantitativo é aquele que proporciona o Coeficiente de determinação R^2 ou o Coeficiente de determinação ajustado R_{aj}^2 . Ambos os coeficientes medem a proporção ou porcentagem da variabilidade nos dados experimentais que é explicada pelo modelo considerado.

Na maioria dos casos, é possível que o ajuste deste modelo de primeira ordem seja adequado, pois se a área pesquisada se encontra afastada da área onde se encontra o ótimo, pode ser perfeitamente descrita por um plano como o mostrado na Figura 4.5.

Uma vez concluído que na região experimental, a variação da resposta é bem representada pelo modelo matemático obtido, é possível iniciar um procedimento de busca da melhor condição de operação. Para avançar rapidamente para a região do ponto ótimo, utiliza-se o Método de Máxima Inclinação ou Gradiente Ascendente (Descendente).

Este é um procedimento experimental simples e eficiente utilizado para se avançar sequencialmente ao longo do caminho ascendente (descendente) de maior inclinação, ou seja, no qual $\hat{Y}$ cresce (decresce) mais rapidamente, conforme mostrado na figura 4.8.

Os experimentos são conduzidos ao longo da linha que passa através do centro da região de interesse e que é normal aos contornos da superfície ajustada, ou seja, proporcionais aos coeficientes da regressão, até que mais nenhum aumento seja observado na resposta. Para 3 fatores significativos as linhas se convertem em planos e o caminho do gradiente seria normal a esse plano.

Figura 4.8: Esquema do método do gradiente ascendente para dois fatores.

Fonte: Adaptado de Montgomery e Runger, 2011.

Com o modelo ajustado se determina qual é a direção ótima de movimento a partir do centro do planejamento. O valor, dos coeficientes do modelo, mostra qual seria o fator mais importante (o fator de maior efeito sobre a resposta) e, os sinais dos coeficientes indicam se os fatores se devem incrementar ou diminuir para encontrar um melhor valor de resposta. Durante esta etapa, os fatores que não se mostraram significativos são fixados nos seus níveis mais econômicos.

Agora é necessário definir qual o comprimento do passo em unidades codificadas e reais. É recomendado utilizar um passo unitário (em unidades codificadas) no fator mais importante com o qual se assegura que o incremento nos outros fatores seja de magnitude inferior e proporcional aos seus coeficientes. Um passo unitário equivale à metade da faixa de teste em unidades naturais.

Por exemplo, se o modelo ajustado fosse (Gutierrez e Vara, 2008):

$$\hat{Y} = 223 + 28x_2 - 13x_3 - 8x_4 \quad (4.17)$$

o caminho do gradiente ascendente seria na direção positiva de x_2 , conforme definido pelo sinal positivo do termo $28x_2$, e na direção negativa de x_3 e x_4 , segundo análise similar para os termos $-13x_3$ e $-8x_4$. Além disso, x_2 se moverá 2,15 vezes

mais rápido do que x_3 e 3,5 vezes mais rápida do que x_4 .

Assumamos que no exemplo anterior, os níveis de X_2 e X_3 , ou seja, das variáveis naturais, são iguais a 4,75 e 3 metros (ambas as variáveis) e os de X_4 são 2 e 1,25 metros.

Ao ser X_2 o fator mais importante, toda a análise começa a partir dele. A metade do intervalo experimental utilizado para X_2 é igual a $\frac{4,75-3}{2} = 0,875$ metros, o que seria o passo de incremento em unidades naturais. O passo de incremento para a variável codificada se assume a unidade, logo $\Delta x_1 = 1$ e $\Delta X_1 = 0,875$ m.

Agora, para calcular o passo Δx_3 divide-se o coeficiente da variável x_2 pelo o coeficiente da variável mais importante, no caso x_2 e multiplicamos por Δx_2 .

$$\Delta x_3 = \frac{\beta_3}{\beta_2} \Delta x_2 = \frac{-13}{28} * 1 = -0,46 \quad (4.18)$$

A metade do intervalo experimental utilizado para X_3 é novamente igual a $\frac{4,75-3}{2} = 0,875$ m, logo podemos calcular o passo em unidades naturais como: $\Delta X_3 = 0,875 \text{ m} * -0,46 = -0,40$ m.

Do mesmo jeito, para calcular o passo Δx_4 divide-se o coeficiente da variável x_4 entre o coeficiente de x_2 e multiplicamos por Δx_2 .

$$\Delta x_4 = \frac{\beta_4}{\beta_2} \Delta x_2 = \frac{-8}{28} * 1 = -0,28 \quad (4.19)$$

A metade do intervalo experimental utilizado para X_4 é igual a $\frac{2-1,25}{2} = 0,375$ m logo podemos calcular o passo em unidades naturais como $\Delta X_4 = 0,875 * -0,28 = -0,1$ m.

Agora com os passos calculados e conhecida a direção da melhor resposta, é possível construir a tabela do caminho de máximo incremento da resposta, para definir os níveis em que serão testados os fatores nos próximos testes para calcular os novos valores de Resposta (Tabela 4.5).

Tabela 4.5: Caminho de máxima inclinação para o caso do exemplo.

	Variáveis Codificadas			Variáveis Naturais			Resposta Y
	x1	x2	x3	X1	X2	X3	
Centro (*)	0	0	0	3,875 m	3,875 m	1,625 m	236
Passo (P)	1	0,46	0,28	0,875	-0,4	-0,1	
Teste 1	1	0,46	0,28	4,75	3,475	1,725	311
Teste 2	2	0,92	0,56	5,625	3,075	1,825	356
Teste 3	3	1,38	0,84	6,5	2,675	1,925	321

(*) Valor intermediário entre o nível superior e o nível inferior dos fatores

Seguindo a tabela, deve-se realizar uma rodada de cada vez e analisar o valor resultante, até que o valor da Resposta mude de tendência.

Se a região experimental foi bem definida, é muito provável que apenas uma ou duas etapas ou passos, sejam usados. No caso do exemplo, é possível ver no gráfico que o teste 2 foi o último em mostrar uma tendência ascendente para os valores da resposta, logo esse deve ser o ponto considerado como centro ou base da nova área experimental (Figura 4.9).

Figura 4.9: Representação gráfica dos resultados do exemplo.

Fonte: Adaptado de Gutierrez e Vara, 2008.

Neste ponto será necessário realizar outro planejamento fatorial 2^k ou uma fração deste, na vizinhança deste ponto, e tentar ajustar outro modelo de primeira ordem. Se um modelo de primeira ordem se ajusta aos dados de planejamento, será necessário aplicar novamente o Método de Máxima Inclinação Ascendente (descendente), calculando uma nova direção e um novo passo. Isto significaria que a área experimental ainda está longe da área do ponto máximo (mínimo).

Não obstante, é bem comum que neste segundo planejamento alguma interação de segunda ordem se mostre mais forte e um modelo de primeira ordem não se ajuste adequadamente, indicando que teria chegado o momento de usar um modelo de segunda ordem.

Para isto, o primeiro passo seria realizar um planejamento fatorial centralizado no último ponto que mostrou a melhor resposta, pelo fato de que cada fator deve ter pelo menos três níveis para estimar os termos quadráticos puros e as interações do modelo. Neste caso, é usado um Planejamento Central Composto, muito popular para detectar curvatura e ajustar superfícies de resposta de segunda ordem (Montgomery e Runger, 2011).

Também é possível que desde o momento inicial, quando se constrói o modelo de primeira ordem com os fatores significativos e alguma interação, o modelo não mostre ajuste aos dados, o que seria causado pela proximidade da área experimental à área do ponto ótimo. Neste caso, seria desnecessária a utilização do modelo de primeira ordem e se passaria diretamente ao ajuste de um modelo de segunda ordem com níveis codificados, usando um Planejamento Central Composto (PCC) com os fatores significativos.

O PCC é composto por um fatorial completo 2^k ou fatorial fracionário 2^{k-p} com resolução V, mais n_o pontos centrais com $n_o \geq 1$ e $n_a = 2k$ pontos axiais (2 por cada eixo central) a uma distância α do centro. Para visualizar o antes definido pode ver-se na figura 4.9 a representação da construção de um PCC com dois fatores ($k=2$).

Para um experimento considerando k fatores, o número total de rodadas n seria igual a $2^k + 2k + n_o$.

A quantidade de pontos centrais depende fortemente da quantidade de réplicas que possam ser realizadas. No caso de experimentos sem réplica a quantidade de pontos centrais é $n_o=1$.

Figura 4.10: Representação gráfica da construção de um Planejamento Central Composto com dois fatores.

Fonte: Adaptado de Gutierrez e Vara, 2008.

Como a finalidade da MSR é a otimização e a localização do ponto ótimo que não se conhece antes de fazer os experimentos, é preciso usar um planejamento que proporcione uma precisão de estimação da resposta igual em todas as direções (Montgomery, 2004). A propriedade que garante isto é conhecida como a rotatividade do planejamento. Segundo Montgomery e Runger (2011), um planejamento central composto pode tornar-se rotacionável escolhendo-se apropriadamente o espaçamento axial (α). O espaçamento axial pode ser calculado como: $\alpha = (2^k)^{\frac{1}{4}}$. O valor de α é dado em unidades codificadas, pelo que no momento de preparar os experimentos devem ser transformados em suas unidades naturais correspondentes usando a equação 4.14.

Como exemplo, mostraremos a matriz de experimentação de um planejamento central composto para $k = 3$ sem réplica. Neste caso a parte fatorial é $2^k = 2^3 = 8$, $n_0 = 1$ e $n_a = 2k = 2 \cdot 3 = 6$, logo $n = 2^k + 2k + n_0 = 15$. O espaçamento axial para $k=3$ é $\alpha = 1,682$ (Tabela 4.6).

Tabela 4.6. Matriz de um Planejamento Central Composto sem réplica e com 1 ponto central para 3 fatores.

Parte Fatorial					Ponto central e pontos axiais				
Rodada	Fatores principais			Resposta	Rodada	Fatores principais			Resposta
	A	B	C			A	B	C	
1	-1	-1	-1	Y1	9	0	0	0	Y9
2	1	-1	-1	Y2	10	-1,682	0	0	Y10
3	-1	1	-1	Y3	11	1,682	0	0	Y11
4	1	1	-1	Y4	12	0	-1,682	0	Y12
5	-1	-1	1	Y5	13	0	1,682	0	Y13
6	1	-1	1	Y6	14	0	0	-1,682	Y14
7	-1	1	1	Y7	15	0	0	1,682	Y15
8	1	1	1	Y8					

Outro tipo de PCC é aquele com centros nas fases. Neste, os pontos axiais se localizam no centro das fases do planejamento, ou seja, $\alpha=1$. Esta variante é particularmente útil quando é complicado fazer experimentos com níveis além dos limites superior (+1) e inferior (-1) dos fatores, devido a restrições do processo ou sistema.

Se o modelo ajustado for uma aproximação adequada da função de resposta, a análise de superfície de resposta será aproximadamente equivalente à análise do sistema real (Montgomery e Runger, 2011). A análise do modelo ajustado fornecerá a localização do ponto estacionário e o tipo de superfície de resposta (Máximo, Mínimo, Sela, etc.). Na figura 4.11 é mostrado um exemplo de superfície de resposta com um ponto de mínimo.

Figura 4.11: Gráfico de superfície e gráfico de contorno com o ponto estacionário para um ponto de resposta mínima.

Fonte: Adaptado de Gutierrez e Vara, 2008.

O ponto estacionário é o ponto no espaço dos fatores sobre o qual o plano tangente à superfície tem coeficiente angular zero e é um candidato ao ótimo. Segundo Myers e Montgomery (2016), se esse ponto existe, de x_1 e x_2 (coordenadas codificadas do ponto estacionário) serão obtidas, em notação matemática, como as derivadas parciais de $\hat{Y}$:

$$\frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_1} = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_2} = \frac{\partial \hat{Y}}{\partial x_k} = 0 \quad (4.20)$$

Embora, na maioria dos casos, apenas através da visualização gráfica pode-se identificar com boa precisão o ponto estacionário, existem casos nos quais, o ponto estacionário deve ser encontrado de maneira analítica usando notação matricial. O procedimento pode ser consultado em Gutierrez e Vara (2008) ou Myers e Montgomery (2016).

As coordenadas codificadas do ponto estacionário podem ser decodificadas usando a equação:

$$X_i = \frac{(X_i^+ - X_i^-) + (X_i^+ + X_i^-)}{2} \quad (4.21)$$

Sendo que: X_i é o nível do fator no ponto ótimo em unidades naturais, X_i^+ é o nível superior do fator em unidades naturais e X_i^- é o nível inferior do fator em unidades naturais (Gutierrez e Vara, 2008).

Em alguns problemas de otimização, principalmente aqueles em que estão envolvidas muitas variáveis, o tipo de superfície de resposta não é tão evidente. Nesses casos é necessária a utilização da Análise Canônica ou Análise de Cordilheira (AC). A AC estuda a sensibilidade de cada uma das variáveis no modelo de segunda ordem.

A idéia seria transformar o modelo da superfície em novas coordenadas com a origem no ponto estacionário e rotar os eixos até que eles fiquem paralelos ao eixo principal da superfície de resposta estimada. Esse novo modelo será da forma:

$$\hat{Y} = \hat{Y}_o + \lambda_1 \omega_1^2 + \lambda_2 \omega_2^2 + \dots \lambda_k \omega_k^2 \quad (4.22)$$

Onde $\hat{Y}_o$ é valor predito pelo modelo para o ponto estacionário, os ω_i são as variáveis independentes transformadas ou variáveis canônicas e os λ_i são os coeficientes da equação, constantes que se calculam através da análise matricial dos coeficientes do modelo.

A superfície é caracterizada pelos sinais e pela magnitude dos λ_i . Obviamente, o ponto estacionário deve estar dentro da região estudada e nessa condição se os λ_i

são todos positivos, o ponto estacionário seria um ponto de mínimo; se os λ_i são todos negativos, o ponto estacionário é um ponto de máximo e se os λ_i têm sinais diferentes, o ponto estacionário seria um ponto de sela.

Além desses três casos, é possível encontrar outros dois tipos de superfícies, derivadas dos três casos antes mencionados, aquela que ladeira ascendente (superfície que tem um máximo fora da área experimental) e a cordilheira estacionária (superfície que tem uma infinidade de máximos e mínimos).

Embora a maioria das referências encontradas, de trabalhos desenvolvidos com o método de superfície de resposta, envolve a modelagem matemática de apenas uma resposta (*single-response analysis*), esta metodologia pode ser aplicada ao estudo de problemas em que são observadas várias respostas (*multi-response experimental design*) (Myers e Montgomery, 2016).

A informação supra discutida dá fundamento à metodologia estatística que será utilizada neste trabalho no intuito de, a partir dos parâmetros que caracterizam os projetos dos emissários submarinos, determinar quais os parâmetros são mais influentes no desempenho desses sistemas, de forma a determinar uma relação entre eles, o modelo preditivo da resposta dentro da área experimental, que possa ser utilizada, para otimizar o desempenho do sistema ampliando os limites dessa relação à região operacional, utilizando a menor quantidade de simulações possíveis.

Para realizar este tipo de pesquisa podem ser usados diferentes ferramentas ou *softwares* ou combinação delas, tais como: EXCELL, MINITAB ou STATISTICA. Muitos pacotes estatísticos excelentes estão disponíveis para ajudar, tanto no planejamento dos experimentos e na análise dos resultados, quanto na otimização das respostas. Nesta pesquisa será usado o MINITAB versão 16.1.0.

4.2. Modelos para a simulação computacional da dispersão do efluente de um ES no mar

4.2.1. Modelos de campo próximo.

A modelagem no campo próximo visa determinar as principais características da pluma tais como diâmetro, diluição inicial e a distância horizontal da fonte (Feitosa e Rosman, 2008). Atualmente existe um grande número de modelos de campo próximo, também denominados modelos de pluma, capazes de prever o comportamento da pluma nessa região sob diferentes configurações de descarga.

Segundo Subtil (2012), de maneira geral esses modelos estão agrupados em três categorias: os modelos de escala de comprimento, os modelos de entranhamento (eulerianos ou lagrangianos) e os modelos de turbulência. Dentre eles merecem destaque o CORMIX (Jirka, 2004) e o Visual Plumes (Frick et al., 2003) amplamente usados.

Carvalho et al. (2002), compararam medições realizadas na região de lançamento do emissário submarino de Ipanema em Rio de Janeiro, com resultados dos modelos CORMIX, UM3-Visual Plumes e NRFIELD-Visual Plumes, em situações de coluna de água estratificada e homogênea, mostrando que, de forma geral, os três modelos são eficientes na determinação das principais características da pluma e da diluição inicial. Outros muitos trabalhos têm observado uma boa concordância dos resultados obtidos por esses modelos com medições realizadas em campo.

Nesta pesquisa, e considerando que do ponto de vista da metodologia estatística, a grande quantidade de dados de entrada assim como a facilidade de manuseio desses dados é importante, foi decidido usar os modelos do Visual Plumes.

O Visual Plumes incorpora, como dados de entrada, características ambientais como, a velocidade e a direção de correntes e os perfis de densidade do corpo d'água, além das características do difusor e do efluente. A partir destas informações calcula, dentre outros, a diluição inicial, a altura da pluma em relação ao difusor, a máxima concentração de poluentes e a espessura da pluma (Carvalho, 2003).

O Visual Plumes para Windows é uma evolução da antiga versão PLUMES para DOS (disponibilizado pela Agência de Proteção Ambiental Norte-americana - USEPA). Dentre as novas características, uma ferramenta que permite a entrada de séries temporais de dados foi incorporada ao programa possibilitando, assim, análises ao longo do tempo comparando os melhores e piores cenários possíveis.

Nesta versão, existem três diferentes modelos para a previsão da dispersão da pluma de efluente no campo próximo (UM3, DKHW e o NRFIELD. Esses modelos adotam algumas simplificações comuns nas equações de governo, como são: fluxo incompressível, efeitos viscosos negligenciados considerando os jatos totalmente turbulentos e a Hipótese de Boussinesq.

4.2.1.1. Modelo NRFIELD.

O modelo NRFIELD é baseado nos estudos de Roberts (1979) e Roberts et al. (1989 I,II,III) que abordam as descargas através de difusores com saídas múltiplas, em

ambientes estratificados e homogêneos, variando as velocidades de corrente e as características geométricas dos mesmos. A partir dos resultados desses estudos, foram elaboradas formulações empíricas consistentes, baseadas em análise dimensional, argumentos de escalas de comprimento e extensos experimentos de laboratório.

Para este modelo as variáveis primárias envolvidas são os fluxos cinemáticos de volume, quantidade de movimento, e empuxo. Quando as saídas do difusor estão muito espaçadas entre si, predominam as características de descargas individuais.

$$Q_p = u_p A \quad (4.23)$$

$$M = u_p Q_p \quad (4.24)$$

$$B = g'_e Q_p \quad (4.25)$$

Onde, Q_p , o fluxo inicial de volume, é a descarga individual do orifício, u_p é a velocidade de saída do orifício, A é a área do orifício, $g'_e = g \frac{\Delta\rho}{\rho}$ é a aceleração da gravidade modificada (ou gravidade reduzida), $\Delta\rho = \rho - \rho_e$ é a diferença entre as densidades do efluente (ρ_e), e a do corpo d'água (ρ) receptor na profundidade do orifício de saída.

No entanto, quando as saídas estão muito próximas, as descargas individuais se comportam como uma descarga só e será descrita pelos fluxos de volume, empuxo e quantidade de movimento por unidade de comprimento do difusor:

$$q = \frac{Q}{L} = \frac{2Q_p}{s} \quad (4.26)$$

$$m = u_p q \quad (4.27)$$

$$b = g'_e q \quad (4.28)$$

Onde $Q = \sum Q_p$ é a descarga total do difusor, L é o comprimento do difusor, e s é o espaçamento entre as saídas.

Wright et al. (1984) (apud Feitosa e Rosman (2008)), definiram as seguintes escalas de comprimento para as condições de fonte pontual (l_M e l_Q) e fonte em linha (l_m e l_q):

$$\begin{aligned} l_M &= \frac{M^{\frac{3}{4}}}{B^{\frac{1}{2}}} & l_Q &= \frac{Q_p}{M^{\frac{1}{2}}} \\ l_m &= \frac{m}{b^{\frac{2}{3}}} & l_q &= \frac{q^2}{m} \end{aligned}$$

Onde l_M e l_m representam a distância sobre a qual o fluxo de quantidade de movimento do efluente é dominante em relação ao fluxo de empuxo, e l_Q e l_q caracterizam a distância na qual a vazão do efluente exerce influência sobre o escoamento ambiente.

As características da descarga dependem ainda de certas propriedades do corpo receptor tais como velocidade da corrente e estratificação de densidades.

Roberts (1979) definiu um número adimensional, como uma variante do número de Froude:

$$F = \frac{u^3}{b} \quad (4.29)$$

Onde, u é a velocidade das correntes atuantes sobre a tubulação difusora e b corresponde a fluxo de empuxo, descrito anteriormente. O valor de F descreve as magnitudes relativas, das forças sobre o efluente, devido ao empuxo, e a inércia do escoamento ambiente. Para pequenos valores de F , o escoamento é governado pelo empuxo da descarga efluente, ao passo que para elevados valores de F , o escoamento é governado pelos efeitos da corrente ambiente.

A estratificação de densidades, pela sua parte, tende a inibir movimentos verticais, as flutuações turbulentas verticais são suprimidas diminuindo a diluição e a altura de ascensão da pluma. A estratificação, sendo linear ou não, pode ser caracterizada pela freqüência de Brünt-Vaisala, N :

$$N = \left(-\frac{g}{\rho_o} \frac{d\rho_a}{dz} \right)^{\frac{1}{2}} \quad (4.30)$$

Onde, ρ_a a massa específica ambiente na profundidade z e 0 é a massa específica ambiente no nível de lançamento.

A disposição oceânica de esgotos é geralmente efetuada através de difusores multi-saídas. Qualquer variável dependente em um problema deste tipo pode ser expressa como:

$$\Phi = f(u_p, g, \rho_a, \rho_e, \nu, D, s, H, u, \theta, N)$$

Onde, ν é a viscosidade cinemática da fonte, D é o diâmetro do orifício de saída, s é o espaçamento entre as saídas, H é a profundidade da descarga e θ é o ângulo da corrente em relação ao eixo do difusor.

Adotando simplificações, e efetuando análise dimensional através dos experimentos realizados as formulações para os valores dos parâmetros de saída (diâmetro da

pluma, diluição inicial, distância horizontal da fonte, altura de elevação da pluma, dentre outros) foram obtidas a partir dessa formulação geral mostrada acima.

O modelo é apropriado para descargas submersas através de tramo difusor com múltiplas saídas, duas saídas por *riser* e jatos bilaterais em forma de T.

4.2.1.2. Modelo UM3.

O UM3 é um modelo baseado na teoria de carreamento (PAE-*Projected-Area-Entrainment*) que segue um referencial lagrangeano. No UM3, é calculada a taxa com que a massa (água) é incorporada à pluma através do carreamento forçado devido à presença das correntes, e do carreamento de Taylor.

O modelo considera estado estacionário que combinado ao referencial lagrangeano implica no cálculo de sucessivos elementos de pluma seguindo a mesma trajetória. Esses elementos de pluma sucessivos que foram formados permanecem invariáveis até a formação da pluma como um todo, pois se considera que a escala de tempo em que a pluma se forma é bem menor do que a escala de tempo das mudanças das condições ambientais e da descarga dos emissários (Frick et al., 2003).

Equações de governo

- Equação da continuidade. Nela o primeiro termo se refere ao carreamento (*entrainment*) forçado, e o segundo ao carreamento de Taylor:

$$\frac{dm}{dt} = -\rho \bar{A}_p \bar{U} + \rho A_T v_t \quad (4.31)$$

Onde, $\frac{dm}{dt}$ é a taxa com que a massa de água é incorporada à pluma; ρ é a massa específica do fluido ambiente; $\bar{A}_p$ é a área projetada, $\bar{U}$ é a velocidade da corrente com direção normal a área projetada, A_T é a área de contato lateral da pluma com o ambiente, e v_t é a velocidade média da pluma.

- Equação da variação da quantidade de movimento:

$$\frac{dmv_t}{dt} = \bar{U} \frac{dm}{dt} - mg \frac{(\rho - \rho_e)}{\rho_e} \quad (4.32)$$

Sendo ρ a massa específica do meio receptor, ρ_e a massa específica do efluente, m a massa de poluente na parcela de efluente e g a aceleração da gravidade.

- Equação da conservação da energia:

$$\frac{d[mC_\infty(T - T_{ref})]}{dt} = C_\infty(T_\infty - T_{ref}) \frac{dm}{dt} \quad (4.33)$$

Sendo C_∞ concentração no meio receptor e T_∞ a temperatura do meio.

- Equação da conservação da massa de poluente:

$$\frac{dmC_o}{dt} = C_o \frac{dm}{dt} - kmC_o \quad (4.34)$$

Sendo C_o concentração de poluente inicial no efluente e k o coeficiente de decaimento.

Em cada passo de tempo, é calculada a nova massa aplicando:

$$m_{t+dt} = m_t + (-\rho \bar{A}_p \bar{U} + \rho A_T v_t) dt \quad (4.35)$$

E do mesmo jeito nas outras equações obtendo-se novos valores de quantidade de movimento mv_t , de energia $mC_o(T - T_{ref})$ e mC_o .

Tomado o passo de tempo da integração $dt = \frac{ds}{v} = \frac{h}{v}$, o que leva a $\Delta h = d\bar{v}dt$, logo $h_{t+dt} = h_t \left(\frac{v_{t+dt}}{v_t} \right)$.

Seguindo esse procedimento obtém-se a trajetória e dimensões da pluma, considerando na diluição as correntes, a temperatura e a salinidade do meio.

4.2.2. Modelo hidrodinâmico.

Os modelos de campo próximo, em geral, são vinculados a softwares com módulo hidrodinâmico que possibilitam uma análise mais apurada da pluma, com o fornecimento das condições hidrodinâmicas do corpo receptor. Nesta pesquisa, os dados ambientais de entrada aos modelos de campo próximo foram gerados no Delft-3D.

O Delft-3D, desenvolvido pela Deltares na Holanda, é um avançado sistema de modelos numéricos para duas e três dimensões, dividido em vários módulos que possibilitam a simulação de processos costeiros complexos, tais como a geração e a propagação de ondas (Delft-3D WAVE), a hidrodinâmica (Delft-3D FLOW), a qualidade da água (Delft-3D WAQ) ou o transporte de sedimentos (módulo SED), entre outros.

O módulo hidrodinâmico, o Delft-3D FLOW, resolve um sistema de equações de águas rasas em modo bidimensional (ou integrado na vertical) ou quase tridimensional. O sistema de equações consiste nas equações horizontais de movimento (variação da quantidade de movimento), na equação de continuidade, nas equações de transporte para constituintes conservativos e num modelo de fechamento turbulento.

A equação vertical de quantidade de movimento é reduzida à relação da pressão hidrostática e as acelerações verticais são assumidas como sendo muito pequenas em relação à aceleração da gravidade. Isso faz com que o Delft-3D FLOW seja

adequado para a predição de fluxos em mares rasos, áreas costeiras, estuários, lagos, rios e lagoas.

As principais simplificações e equações de governo deste modelo são explanadas no Anexo.

4.2.3. Metodologia de simulação

A metodologia de simulação computacional desta tese está dividida em duas partes. Na primeira parte são obtidos os perfis de velocidade de corrente com variação temporal no local da descarga do emissário submarino com ajuda do Delft-3D, para duas estações do ano: o inverno e o verão. Os valores temporais das componentes da velocidade por camada, obtidos dessas simulações são processados, no Excel, para a obtenção de valores absolutos de velocidade e ângulo das correntes, constantes por camada. Esses valores conformam finalmente os perfis de velocidade que são usados como dados de entrada aos modelos de campo próximo. Na segunda parte, por meio dos modelos de campo próximo NRFIELD e UM3 do Visual Plumes e os perfis de velocidade resultantes da primeira parte, são realizadas as simulações de predição da resposta em todos os estágios da pesquisa.

5. ESTUDO DE CASO

Neste capítulo são selecionados os dados fundamentais da pesquisa. Primeiramente são selecionados a resposta, os fatores e seus níveis, com a necessária definição do estudo de caso.

5.1. Resposta, fatores e níveis.

5.1.1. Resposta.

Os micro-organismos presentes no esgoto e que podem causar doenças ao ser humano, podem ser reduzidos a níveis seguros através da combinação dos três processos que ocorrem após a descarga do efluente no mar, descritos no capítulo 3: a Diluição Inicial (D_i), a Dispersão Horizontal (D_h) e o Decaimento (D_b) (Roberts et al., 2010).

Como se sabe, a Diluição Inicial é bastante influenciada pelas características do difusor, a velocidade do fluxo ejetado e a hidrodinâmica, a temperatura e a salinidade no corpo receptor. A Dispersão Horizontal, pela sua parte, é função, principalmente, das correntes, da turbulência e da estrutura de densidade do meio receptor. Já o Decaimento é função de fatores como a radiação solar, a sedimentação, a temperatura, a transparência, o pH, a salinidade e a concentração de nutrientes no local de influência do emissário.

A Dispersão Horizontal e o Decaimento, embora afetem o projeto do emissário, uma vez definido o local do empreendimento, não podem ser controladas ou modificadas. A Diluição Inicial, no entanto, é a única parcela da dispersão total do efluente que é uma variável dependente de fatores controláveis, motivo pelo qual foi selecionada como a Resposta nessa pesquisa.

5.1.2. Parâmetros importantes para a Resposta. Possíveis fatores.

Os dados de entrada no Visual Plumes podem ser divididos em duas partes fundamentais: os dados sobre o difusor e as características da descarga (aba *Diffuser*, Figura 5.1) e, os dados hidrodinâmicos do corpo receptor (aba *Ambient*, Figura 5.2).

Como explanado no capítulo anterior, do ponto de vista da experimentação planejada, um fator pode ser qualquer variável do sistema em estudo que possa ser controlada para provocar mudanças na resposta, sendo desejável considerar todas

analisando o projeto do sistema do emissário e as variáveis de entrada do modelo e, posteriormente, realizando uma análise de sensibilidade.

Aplicando uma metodologia simples sugerida por Ludwig em 1998 (apud Freitas, 2010), para o projeto de um emissário submarino, foram identificadas aquelas variáveis importantes para o dimensionamento do emissário e do difusor, que poderiam ser relevantes no cálculo da diluição.

5.1.2.1. Comprimento do emissário e lugar da disposição do efluente.

A localização do ponto de disposição tem grande importância porque afetará diretamente as condições nas quais a diluição ocorrerá e o tempo que precisará a pluma de efluente para alcançar a área protegida.

Durante os estudos prévios ao projeto do emissário, deve ser realizada a caracterização da área de influência do emissário, desde a hidrodinâmica do meio receptor até as condições meteorológicas e hidrográficas, determinando entre outros parâmetros, as velocidades mais frequentes na direção da costa, para a seleção do ponto de descarga adequado para o sistema de emissário.

O emissário precisa ter um comprimento mínimo $L(m)$ tal que garanta que, na condição mais desfavorável possível, quando a velocidade das correntes $u(m/s)$ aponte para a praia, a pluma precise viajar T horas para atingir a área protegida, com as concentrações de poluentes com os valores exigidos pela lei (Ludwig, 1988).

$$L = u * T * 3600 \quad (5.1)$$

Segundo a Resolução CONAMA 274/2000, na zona protegida de 300 metros da costa os valores de *e-coli* (parâmetro comumente utilizado para este tipo de estudo), não devem exceder 10^3 NMP/100 mL em 80% do tempo.

A condição mais desfavorável é definida como aquela na qual as correntes são perpendiculares à linha de costa, na direção da área protegida (300 m da costa), com um valor de velocidade (u) que não seja excedido em mais de 20% do tempo. Esse valor de velocidade é obtido na fase prévia ao projeto, quando são realizados estudos para a caracterização do meio receptor (Ludwig (1988) apud Souza et al., 2007).

O local de disposição é calculado como:

$$L_E = L + 300 \quad (5.2)$$

O tempo $T(s)$ é função da taxa de decaimento bacteriano local (T_{90}) e do valor do Decaimento Bacteriano necessário para que a pluma alcance a zona protegida com

o valor de concentração permitido.

$$T = T_{90} * \log D_b \quad (5.3)$$

Admitindo-se que a redução total é $D_T = D_i * D_h * D_b$, pode-se calcular D_b como:

$$D_b = \frac{D_T}{D_i * D_h} \quad (5.4)$$

O valor de coliformes fecais num esgoto com pré-tratamento está na ordem de 10^8 NMP/100 ml (C_o) pelo que seria necessária uma Diluição Total ($D_T = \frac{C_o}{C}$) de 10^5 até a área protegida, para que a concentração de *e.coli* na pluma seja igual a 10^3 NMP/100ml. O valor de Diluição Inicial desejado pode ser tomado entre 100 e 150, e um valor comumente usado para a Dispersão Horizontal é 2 (Salas, 2000) (Ludwig, 1988 apud Freitas, 2010).

É importante ressaltar que o verdadeiro valor de comprimento do emissário estará em dependência da declividade do fundo marinho, já que o valor L_E na verdade define a distância em planta desde a costa até o ponto de disposição.

Figura 5.3: Representação esquemática de um emissário submarino e da sua área de influência.

5.1.2.2. Profundidade da disposição do efluente (P_d).

A profundidade em que acontece a descarga do efluente é muito importante para a Diluição Inicial e o desenvolvimento da pluma. Segundo Ludwig (1988) e Roberts et al. (2010), quando a topografia natural o permitir, é recomendado que a descarga do efluente seja realizada a uma profundidade de 20 metros ou mais, mas sem exceder aquela necessária.

Nem sempre a profundidade de descarga é uma variável relevante. Se o local de descarga tiver grande profundidade, mas baixa circulação, estabelecida pelo campo de velocidades, os valores da diluição poderiam ser menores que os encontrados para uma descarga mais rasa, mas com maior circulação. Com uma boa circulação no corpo receptor, a profundidade não precisa ser tão grande.

Por outro lado, do ponto de vista do projeto, as características do sistema difusor são as variáveis mais importantes de um emissário, pois o tramo difusor é a estrutura de maior impacto na Diluição Inicial do efluente. As características do difusor são: o diâmetro das saídas (d_o), o número de saídas (n_o), o espaçamento entre as saídas ou os *risers* (e_o), o comprimento do difusor (L_D) e a altura das saídas ou comprimento dos *risers* (h_o).

5.1.2.3. Diâmetro das saídas e número de saídas do difusor.

O diâmetro das saídas e o número de saídas são calculados relacionando-os diretamente com a área da seção transversal do emissário. Vários autores citam relações, entre a área da seção transversal do emissário A_E e a área total dos orifícios de saída A_o , que variam entre 50%, 70% ou 80% (Freitas, 2010).

Do ponto de vista físico, sabe-se que se a área total dos orifícios de saída excede A_E , a velocidade média na descarga através das saídas seria menor que a velocidade dentro da tubulação do emissário, pelo que a descarga por alguns dos orifícios não aconteceria, impossibilitando o bom desempenho do tramo difusor.

Segundo Fisher et al. (1979) (apud Freitas, 2010), a área total dos orifícios de saída não deve ultrapassar 80% da A_E , e o valor ótimo é encontrado quando essa relação está entre 33% e 66%, mas um valor aceitável seria de até 75% (Equação 5.5).

$$\frac{n_o * A_o}{A_E} = (0,33 \div 0,66) \quad (5.5)$$

onde:

$$A_E = \frac{\pi * d_E^2}{4} \quad (5.6)$$

$$A_o = \frac{\pi * d_o^2}{4} \quad (5.7)$$

A seleção do diâmetro do emissário (d_E) é um problema hidráulico normal, que deve considerar as velocidades adequadas para as vazões mínimas que ocorrerão nos primeiros anos de operação do emissário e limitar as perdas de carga ao máximo quando a vazão de operação alcance os valores de projeto (Gonçalves e Souza, 1997).

Segundo os autores, para que não existam problemas de depósito de material na tubulação ou golpe de aríete, a velocidade dentro da tubulação do emissário deve estar entre 0,6 m/s e 3,0 m/s. Usando as vazões, mínima e máxima, calculadas nos estudos prévios ao projeto com os valores de população a ser atendida, e os diâmetros comerciais disponíveis, é possível calcular as velocidades, mínima e

máxima, e selecionar o diâmetro de tubulação mais adequado. Da mesma maneira, a seleção do diâmetro do tramo difusor requer cuidados com os problemas construtivos, a necessidade de limpeza e o respeito às velocidades mínimas necessárias.

O diâmetro das saídas também depende do tipo de condicionamento prévio. Segundo Wilkinson e Wareham (1996), em sistemas que recebem efluentes com tratamento primário ou secundário, obtêm-se bons resultados com a utilização de pequenos diâmetros de 0,05 m, mas recomendam um mínimo entre 0,07 m e 0,1 m para tratamento primário simples (peneira e sedimentação). No entanto, se o efluente apenas recebe tratamento preliminar, o diâmetro deveria ser mantido em 0,15 m para evitar entupimentos. Por outro lado, quando a disposição é realizada a uma profundidade razoável, um diâmetro do orifício de saída menor que 0,15 m não afeta em demasiado a diluição, motivo pelo qual, quando se projetam emissários submarinos para águas profundas, não são recomendados diâmetros menores a 0,08 m, já que teria pouca ou nenhuma vantagem, e os riscos de obstrução se incrementam.

O projeto hidráulico de um difusor é um processo que se realiza passo a passo, calculando os fluxos desde o orifício terminal até o primeiro, testando vários diâmetros, para manter a vazão nas descargas tão uniforme quanto possível.

5.1.2.4. Espaçamento entre as saídas (e_o)

Segundo Ludwig (1988), pequenos diâmetros com um espaçamento menor, produzirão uma maior diluição inicial que saídas com maior diâmetro e maior espaçamento entre elas, para uma mesma descarga por unidade de comprimento.

Segundo Liseth (1976) (apud Gonçalves e Souza, 1997), os valores máximos de diluição inicial são encontrados quando o espaçamento entre as saídas difusoras é tal que a relação entre a altura máxima que pode alcançar a pluma até a superfície (Y) e o espaçamento entre as saídas (e_o) se encontra entre 5 e 10. Quando não existe estratificação a altura máxima é igual à P_d , ou seja:

$$\frac{Y}{e_o} = (5 \div 10) \quad (5.8)$$

O comprimento do difusor é simplesmente o resultado da combinação do número de saídas do difusor ou *risers* (no caso de difusores multi-orifícios) e o espaçamento entre eles e_o : $L_D = (n_o - 1) * e_o$.

Outra característica do tramo difusor é a elevação dos orifícios de saída (h_o). A

orientação do difusor com respeito às correntes e a declividade do fundo marinho podem fazer com que o tramo difusor seja mais propenso ao ingresso de sedimentos. Na figura 5.4 foi representado um tramo de difusor com *risers* com duas saídas cada, distribuição T-shape.

Figura 5.4: Difusor tipo *T-shape*.

É bastante comum que o tramo difusor seja orientado de forma tal que seu eixo principal seja perpendicular às correntes preferenciais para incrementar a diluição, mas isso pode provocar que em função do transporte natural de sedimentos no fundo marinho, que algumas saídas sejam enterradas, impossibilitando o desempenho adequado do difusor. Em outros casos, a tubulação principal do emissário deve ser enterrada para ser protegida, ou casos nos quais o difusor tem saídas multi-orifícios. Para resolver essas situações, são colocadas extensões nos orifícios de saída do difusor chamadas *risers* e a altura deles (h_o) é selecionada segundo as necessidades do projeto.

Segundo Frick et al. (2003), a altura dos *risers* não tem influência nenhuma na predição da Diluição Inicial pelos modelos, mas sim para a predição das dimensões da pluma.

5.1.2.5. Ângulos de descarga: *ângulo de descarga com respeito ao fundo marinho (Ângulo vertical de descarga A_V) e ângulo de descarga com respeito às correntes marinhas (Ângulo horizontal A_H).*

Outras duas características importantes dos difusores são os ângulos relacionados à descarga do efluente no mar.

O ângulo vertical de descarga, ou ângulo com respeito ao fundo do mar pode aumentar ou diminuir a diluição em função do percurso da pluma. Segundo Roberts (2016) em descargas paralelas ao fundo do mar obtém-se valores maiores de Diluição Inicial, porque o percurso da pluma até a superfície é maior. Não obstante, quando a intensidade das correntes é maior, como no outono e no inverno, as

correntes desviam o jato na sua própria direção e, quanto maior a sua velocidade, maior será a dispersão horizontal, o que pode resultar num incremento da diluição, embora a altura que será capaz de atingir a pluma seja menor.

Segundo Jirka et al. (1996), no caso do ângulo horizontal, ou ângulo de descarga com respeito às correntes marinhas, nas descargas paralelas à direção das correntes a Diluição Inicial é maior.

Já Carvalho et al., (2002), afirmam que de maneira geral as descargas típicas de emissários submarinos possuem fluxo de quantidade de movimento reduzido. Isso torna pouco relevante a orientação dos jatos lançados no ambiente marinho na determinação das características da pluma no campo próximo.

Contudo, Tian et al. (2004 a, b), realizaram experimentos com a corrente marítima perpendicularmente ao difusor baseando-se em técnicas de análise dimensional para estudar a Diluição Inicial, com base nos estudos desenvolvidos por Roberts em 1989 (a, b, c), e os resultados mostraram que para velocidades de correntes normais ao difusor obtêm-se valores de Diluição Inicial maiores e, que quando as correntes atuam perpendicular ao jato, a pluma alcança maior altura.

Não obstante, segundo Roberts et al., (2010), o que é realmente importante é que o ângulo entre as correntes preferenciais e o eixo central da tubulação difusora seja perpendicular, sendo que o ângulo entre a corrente e as descargas tem importância relativamente menor.

5.1.2.6. Características do efluente: vazão, temperatura e concentração.

As propriedades do efluente que afetam sua dispersão na água do mar são: a vazão do efluente, a temperatura e a salinidade.

Vazão Q_e : A vazão de efluente pode ser uma variável importante, pois quanto mais volume de efluente seja disposto por unidade de tempo, menor será a capacidade de diluição do meio.

No entanto, uma determinada combinação de vazão, velocidade da corrente e nível de estratificação do meio podem às vezes propiciar as condições necessárias para que plumas com maiores valores de vazão entrem em camadas não estratificadas e continuem o processo de diluição (Carvalho, 2002).

Temperatura T_e : A temperatura e a salinidade determinam a massa específica do efluente, e a massa específica do efluente tem grande importância quando relacionada à sua diferença com respeito ao perfil de massa específica ou

densidades do meio receptor, o que pode afetar o percurso da pluma até a superfície e limitar a Diluição Inicial.

Segundo a resolução CONAMA 430/2011 a temperatura dos efluentes descarregados no mar não deve ser superior a 40 °C.

Concentração C_e : A concentração do efluente não é importante para a hidrodinâmica da pluma, para a dinâmica de mistura ou para a Diluição Inicial, mas afeta a diluição efetiva (Roberts e Williams, 1992). É útil lembrar que a diluição efetiva é a razão entre a concentração do efluente e a concentração da pluma em um ponto de interesse, muitas vezes um ponto no limite da zona de mistura ou na área protegida da costa. Quanto maior o valor da Diluição Inicial, menor será a concentração final na mistura efluente-água do mar.

Para avaliar o fator C_e são comumente utilizados alguns coliformes termotolerantes, por serem encontrados em grandes quantidades nas fezes. Dentre esses coliformes o grupo mais representativo é a bactéria fecal *escherichia coli* (*e-coli*), cuja técnica de determinação permite resultados mais precisos sobre sua concentração no ambiente marinho, pelo que são mundialmente usados para o monitoramento da qualidade das águas. Outro grupo de bactérias que vem sendo utilizado são os *enterococos*, mais resistentes ao ambiente marinho, o que as tornam mais adequadas para o monitoramento da qualidade das águas marinhas. Altas densidades de coliformes (*e-coli* ou *enterococos*) em águas marinhas indicam um elevado nível de contaminação por esgotos, o que coloca em risco a saúde dos banhistas (Sartor e Degaspari, 2000).

Neste estudo, foi usada a concentração média da bactéria *e-coli* para avaliar o fator C_e , por existirem registros dos valores de concentração dessa bactéria, relacionados aos diferentes tipos de tratamento dos esgotos, nos dados fornecidos pela SABESP para esta pesquisa.

No esgoto bruto a concentração de *e-coli* é de 10^7 a 10^8 NMP/100 mL. No entanto, a concentração de *e-coli* no efluente de um sistema de ES está relacionada diretamente ao nível de tratamento prévio. Segundo dados da SABESP a concentração média de *e-coli* num efluente sanitário sem desinfecção é de $7,5 \times 10^7$ NMP/100ml, no efluente clorado $3,75 \times 10^6$ NMP/100ml e no efluente tratado é de 10^5 NMP/100ml (SABESP, 2003).

5.1.2.7. Características do corpo receptor.

No caso em estudo, podemos dizer que, assim como as características do difusor afetam a mistura do efluente com a água do mar, as propriedades do meio receptor também a afetam. Parâmetros tais como: a velocidade e a direção das correntes, a variação da temperatura e a salinidade do mar e, a estrutura vertical da densidade, são variáveis incontáveis dentro do processo de dispersão de efluentes, de imensa importância para a Diluição Inicial.

A corrente ambiental é um parâmetro que tem uma influência não desprezível no processo de diluição. À medida que a intensidade da corrente ambiental aumenta também aumenta a Diluição Inicial (Baumgartner et al., 1994)

Por outro lado, a estratificação de densidades tende a inibir movimentos verticais, as flutuações turbulentas verticais são suprimidas diminuindo a diluição e a altura de ascensão da pluma. Para baixas estratificações da coluna da água, pelo contrário, a diluição do efluente tende a ocorrer preenchendo toda a coluna d'água, sendo que a direção do transporte e a dimensão do campo próximo também dependerão do padrão de circulação hidrodinâmica.

Dentro da construção do estudo de caso, as características do meio receptor serão consideradas um fator de bloco, lembrando que o fator de bloco é aquele parâmetro que pode ter influência ou não sobre a Resposta, mas que não interessa estudar, ou então, aquela característica que se sabe que tem muita influência na Resposta, mas que não podemos controlar. Sendo este último o caso das características do meio receptor a serem adotadas.

Nesta pesquisa serão considerados dois blocos, considerando os pontos extremos das condições do meio receptor: inverno (sem estratificação) e verão (estratificação por temperatura). Para isso serão simulados com o Delft-3D dois perfis de velocidade de corrente, um para o verão e um para o inverno e outros dados serão tomados de pesquisas anteriores sobre a hidrodinâmica da área de estudo, baseadas em campanhas de medições.

5.1.2.8. Seleção dos possíveis fatores.

Combinando a análise dos dados de entrada dos modelos campo próximo no Visual Plumes, com os principais parâmetros obtidos da análise anterior, podem-se definir as variáveis que serão efetivamente avaliadas na análise de sensibilidade do modelo por serem possíveis.

Dados do sistema difusor (possíveis fatores):

- diâmetro das saídas (m) (d_o)
- número de saídas (n_o)
- espaçamento entre os *risers* (m) (e_o)
- profundidade da disposição do efluente (m) (P_d)
- ângulo vertical de descarga (A_V)
- ângulo horizontal de descarga (A_H)

Dados do efluente (possíveis fatores):

- vazão de efluente (m^3/s) (Q_e)
- temperatura do efluente ($^{\circ}\text{C}$) (T_e)
- concentração do efluente (C_e)

Fatores constantes:

Do ponto de vista estatístico se diz que em qualquer sistema ou processo existem variáveis que por alguma razão não podem ser incluídas no estudo. Esses parâmetros que não fazem parte dos fatores do estudo, mas que precisam estar nos experimentos, foram mantidos constantes durante todas as rodadas. Nesse caso incluiremos:

- altura dos *risers* (m) (h_o)
- salinidade do efluente (psu)

No caso da salinidade do efluente, é uma variável que varia pouco de um efluente sanitário para outro, sendo muito comum a sua utilização como uma constante para simulações deste tipo. A densidade ou massa específica do efluente variará em função do valor da temperatura do efluente.

Dados do meio ambiente receptor (fator de bloco):

- perfis de velocidade (m^3/s) e ângulo das correntes (graus); perfis de salinidade (psu) e de temperatura ($^{\circ}\text{C}$) do corpo receptor.

5.1.3. Estudo de caso.

O caso de estudo selecionado para aplicar a metodologia proposta é o emissário submarino de Itaquanduba em Ilhabela, no litoral do Estado de São Paulo, que entrou em operação no ano 2010.

O licenciamento do projeto deste emissário cumpriu cabalmente as etapas definidas como imprescindíveis para o bom funcionamento deste tipo de empreendimento: o estudo ambiental da área de influência do emissário para o adequado projeto

hidráulico e estrutural (Fevereiro-2006), o monitoramento da área de influência durante o assentamento do emissário para o controle de possíveis impactos no meio ambiente marinho (Dezembro-2009), assim como, o monitoramento ambiental após o início da operação do sistema (informações oferecidas pela SABESP).

Para este último, foram realizadas campanhas mensais, entre agosto de 2012 e julho de 2013, para coleta de amostras de esgoto afluyente e efluente à EPC, de água do mar em dois pontos localizados nas praias próximas ao emissário e, também, em dois córregos que deságuam nestas praias (SABESP, 2013).

O principal objetivo deste monitoramento foi identificar alterações da qualidade da água e do sedimento após o início da operação do emissário submarino, comparando os resultados atuais com aqueles obtidos durante a fase de assentamento do mesmo, em 2009, e trabalhos anteriores. Os resultados mostraram que a entrada em operação do emissário não impactou até a data, a qualidade das águas na área de influência do emissário.

O Itaquanduba localiza-se no Bairro Itaquanduba, no município de Ilhabela. É composto de uma Estação de Pré-Condicionamento (EPC) seguido do sistema do emissário submarino, dividido num trecho terrestre e num trecho submarino (Figura 5.4).

Figura 5.4. Localização do emissário Itaquanduba.

Fonte: Modificado de SABESP, 2013.

O trecho submarino é formado por tubulação de polietileno de alta densidade com diâmetro externo de 0,45 m, espessura 25,5 mm e extensão de 941 m (a distância em planta, desde a costa até o ponto da descarga, é de 800 m). O emissário opera com vazão máxima inicial de $0,0935 \text{ m}^3/\text{s}$ e até 2026, esta vazão alcançará $0,154 \text{ m}^3/\text{s}$. A profundidade de lançamento referenciada ao Nível Médio das Marés é de aproximadamente 36 metros (SABESP, 2013).

O sistema difusor multi-orifícios é composto por 8 *risers* com duas saídas a 180° cada (16 orifícios de saída, distribuição *T-shape*) de 0,075 m de diâmetro e um espaçamento entre *risers* de 4,5 m, resultando num comprimento do difusor de 32 m. O difusor está disposto perpendicular à corrente preferencial do CSS e as descargas são realizadas de forma paralela a ela.

A EPC oferece um tratamento em nível preliminar composto por peneiras de seção trapezoidal, rotativas e inclinadas, de limpeza automática, com abertura de 1 mm e sistema de lavagem, compactação e “ensacamento” dos sólidos removidos; desarenadores do tipo canal, com remoção mecanizada, com lavagem e “ensacamento” da areia, e desinfecção por cloração, com o uso de hipoclorito de sódio (SABESP, 2013).

Segundo o relatório SABESP (2013) o efluente sai da EPC com uma concentração de coliformes de $1,7 \times 10^6 \text{ NMP}/100 \text{ ml}$ e sua temperatura acompanha o ciclo sazonal da temperatura do ar. Nos meses de inverno foram observadas temperaturas mínimas de até 22°C , e nos meses de verão, temperaturas mais altas, de até 29°C .

5.1.3.1. Definição dos níveis dos fatores.

Para a definição dos níveis dos fatores foram usados, como ponto de partida, os dados de projeto do emissário Itaquanduba. No caso dos fatores: diâmetro das saídas d_o e número de saídas n_o do difusor foi usada a mesma relação de áreas do Itaquanduba na equação 5.5. Definindo outros dois possíveis valores para d_o , é possível obter o número de saídas correspondentes para cada caso.

Com uma relação das áreas de 50%, um diâmetro de saídas dos difusores de 0,075m e, considerando que a área interna da tubulação do emissário é de $0,1415 \text{ m}^2$, o número de saídas resultante foi 16. Fazendo esse mesmo cálculo, para os diâmetros 0,07m e 0,08m, foram calculados os números de saídas necessários para manter a mesma relação de áreas (Tabela 5.1).

Tabela 5.1. Cálculo dos níveis dos fatores d_o e n_o .

$A_E(m^2)$	$d_o (m)$	$A_o (m^2)$	$\frac{0,5 * A_E}{A_o}$	n_o
0,1415	0,07	0,00384	18,42	18
	0,075	0,00442	16,00	16
	0,08	0,00503	14,06	14

Pelas características próprias da análise estatística que será usada na metodologia, serão simulados alguns cenários, onde coincidirão o menor diâmetro de saída e o menor número de saídas (ou o maior diâmetro com o maior número de saídas). Devido a esse fato, foram analisados se esses casos ainda estariam dentro da faixa ótima de relação entre as áreas considerada, definida com anterioridade como entre 0,33 e 0,66 e, nunca maior que 0,75.

Usando a relação da equação 5.5 novamente, pode ser calculado para ambos os casos o valor da relação das áreas. Se $n_o = 14$ e $d_o = 0,07$ m, obtemos uma relação entre as áreas de 0,38. No caso de $n_o = 18$ e $d_o = 0,08$ m, a relação entre as áreas é de 0,64.

Ambos os resultados se encontram na faixa ótima de relação entre áreas, logo ambas as combinações seriam possíveis sob os limites determinados na literatura.

Para o cálculo do espaçamento entre saídas ou *risers* no projeto do Itaquanduba, foi considerada uma relação entre a altura máxima que pode alcançar a pluma, ou profundidade de descarga, e o espaçamento entre as saídas (Equação 5.8) igual a 8 ($36 \text{ m}/4,5 \text{ m} = 8$). Avaliando duas novas possíveis profundidades de descarga, 40 m e 32 m e usando a mesma relação $\frac{P_d}{e_o} = 8$ obtém-se, para a primeira profundidade, que o espaçamento entre os *risers* deve ser de 5 m, e para a segunda de 4 m.

Fazendo a mesma análise que no fator anterior, combinando neste caso a maior profundidade com o menor espaçamento (ou a menor profundidade e o maior espaçamento) é possível comprovar se ambas as combinações ainda estão dentro da faixa definida na literatura, sendo que: $40/4 = 10$ e $32/5 = 6,4$. Ambos os valores cumprem os limites entre 5 e 10, logo ambas as combinações podem ser usadas.

O Itaquanduba, enterrado na maior parte do seu comprimento e com duas saídas por *risers*, tem 8 *risers* de 1 m cada (fator constante). Esse será o valor utilizado em todas as simulações.

Com respeito aos ângulos de descarga, o Itaquanduba tem um ângulo vertical de

descarga de 0° (paralelo ao fundo) e um ângulo horizontal de descarga paralela à direção preferencial das correntes.

Dentro do Visual Plume é definido que uma descarga com ângulo horizontal igual a 0° é uma descarga realizada paralela à corrente e no mesmo sentido. Um ângulo horizontal de descarga de 90° é uma descarga na direção perpendicular à corrente, no sentido anti-horário. Já o ângulo vertical é definido como o ângulo de descarga em relação ao fundo, assumindo que quando o ângulo é 0° a descarga ocorre paralela ao fundo e, que quando o ângulo é igual a 90° a descarga é normal ao fundo.

Nesta pesquisa, o ângulo horizontal é considerado um fator qualitativo, onde seus níveis serão: descarga paralela (nível inferior) à corrente ou descarga perpendicular (nível superior) à corrente. Quando o fator estiver no seu nível inferior o ângulo horizontal será igual a 0° e, quando estiver no nível superior, o valor do ângulo será igual a 90° .

Os valores de vazão que serão utilizados para as simulações serão os valores máximos e mínimos de projeto do Itaquanduba. Para a concentração do efluente, usaremos para os valores inferior e superior do fator, os valores de concentração média da bactéria fecal *e-coli* para efluente tratado (10^5 NMP/100ml) e a concentração média num efluente sanitário sem desinfecção ($7,5 \times 10^7$ NMP/100ml) (SABESP, 2003).

Os valores de temperatura do efluente foram assumidos considerando que, segundo a SABESP (2013), a temperatura do esgoto é $\pm 2,28^\circ\text{C}$ a temperatura média do ar. Segundo CPEA (2011), as temperaturas médias do ar no CSS são em torno de $19,9^\circ\text{C}$ no inverno e $25,3^\circ\text{C}$ no verão. Considerando esses dados foram assumidos os valores de temperatura do efluente em 22°C para o inverno e 27°C para o verão, valores consistentes com os valores registrados no monitoramento de 2013 do emissário Itaquanduba (SABESP, 2013).

Na tabela 5.2 foram colocados finalmente os fatores que participarão da análise de sensibilidade com os seus respectivos níveis.

O próximo passo foi definir os valores do fator de bloco, os perfis de velocidade e ângulo das correntes e, a temperatura e salinidade do mar para ambos os níveis.

Tabela 5.2. Fatores e níveis.

Fator	Nível Inferior	Nível Superior
Diâmetro das saídas, d_o (m)	0,07	0,08
Ângulo vertical de descarga A_V	0°	90°
Ângulo horizontal de descarga A_H	Paralela (0°)	Perpendicular (90°)
Número de saídas, n_o	14	18
Espaçamento entre <i>risers</i> , e_o (m)	4	5
Profundidade da disposição P_d (m)	32	40
Vazão de efluente Q_e (m³/s)	0,0935	0,154
Temperatura de efluente T_e (°C)	22	27
Concentração de efluente C_e (NMP/100ml)	10 ⁵	7,5 x 10 ⁷
Fator de bloco (Ambiente)	Inverno	Verão
Fator constante Comprimento dos <i>risers</i> h_d		1
Fator constante Salinidade do efluente s_e		1

5.2. Definição dos níveis do fator de bloco.

A descarga do efluente do emissário Itaquanduba é realizada no Canal de São Sebastião (CSS). O CSS está situado na Plataforma Continental Norte de São Paulo, entre o município de São Sebastião e a Ilha de São Sebastião, município Ilhabela. (Figura 5.5).

Figura 5.5. Canal de São Sebastião.

Fonte: Modificado de SABESP, 2013.

Tem quase 22 km de comprimento e uma configuração encurvada, com o eixo orientado para NE na parte sul e para N na saída norte.

A largura do canal é maior nas duas entradas (7,2 km e 5,6 km no norte e no sul, respectivamente) e menor na parte central (1,9 km). Dentro do canal, há um conduto com profundidades maiores do que 20 m (profundidade máxima de até 45 m), denominado canal de navegação, deslocado para o lado insular (Castro et al., 2008). O CSS encontra-se numa região caracterizada pelo clima tropical, com duas estações bem diferenciadas: a de verão quente e chuvoso e, a de inverno frio e seco. A temperatura média anual é de 22 °C, sendo Janeiro e Fevereiro os meses mais quentes com temperatura média de 25,3 °C, e Julho e Agosto os meses mais frios com temperatura média de 19,9 °C. A umidade relativa apresenta média anual alta de 82,6% e, a precipitação anual gira em torno de 1456 mm, sendo Fevereiro o mês mais chuvoso e, Agosto o mês mais seco (CPEA, 2011).

A topografia do fundo marinho e a geometria do canal condicionam correntes mais intensas no sentido longitudinal do lado insular, com valores de até 1 m/s para o Norte e 0,7 m/s para o Sul (CPEA, 2011).

O CSS está localizado na parte central da Plataforma Continental Sudeste Brasileira (PCSE) e ao largo dessa região encontra-se a Corrente do Brasil que transporta, ao longo do talude continental, massas de água de origens distintas: a Água Tropical (AT) e a Água Central do Atlântico Sul (ACAS). Contudo, o CSS está situado na plataforma interna, sendo preenchido principalmente pela Água Costeira (AC). Consequentemente, sua estrutura termohalina é definida pela mistura dessas três massas de água (Castro e Miranda, 1998).

A Água Costeira (AC) ocupa a franja costeira e apresenta tipicamente baixas salinidades, devido ao aporte fluvial e é verticalmente homogênea. A Água Tropical (AT) é caracterizada pela alta salinidade e por temperaturas maiores de 20 °C. A Água Central do Atlântico Sul (ACAS) é caracterizada pelas baixas temperaturas e uma alta salinidade (Castro e Miranda, 1998).

Dependendo do grau de intrusão em direção à costa das duas massas de águas oceânicas (AT e ACAS), e da extensão e características físicas (particularmente a baixa salinidade) da AC, a PCSE apresentará maiores ou menores volumes de cada uma dessas três massas de água, definindo o formato das superfícies isotérmicas, isohalinas e, consequentemente, isopicnais.

Quando não são observadas intrusões da ACAS, o CSS é dominado pela AC. Nas intrusões pouco desenvolvidas a parte norte, e possivelmente central, do canal é dominada pela AC e, a parte sul, pela estratificação vertical de AC na camada superficial e ACAS na de fundo.

Nas intrusões bem desenvolvidas, a AC predomina em todo o CSS acima da termoclina, e a ACAS abaixo. Neste caso o canal de navegação é preenchido na parte mais profunda por essa massa, devido ao fato de ser a massa mais densa da plataforma continental (Miranda, 1982).

Devido ao ciclo sazonal dessas massas de água, durante o verão as águas do CSS apresentam, em média, forte estratificação térmica. Nessa época do ano, observam-se, com frequência, intrusões de águas relativamente frias, com temperaturas inferiores a 20°C, pela entrada sul do canal.

Em contraste, durante o inverno, as águas do CSS são quase isotérmicas. As condições de primavera são semelhantes às de verão, enquanto as de outono parecem-se mais com aquelas do inverno.

As intrusões de ACAS no CSS estão intimamente associadas às inversões do campo de vento (Silva et al., 2005). Os ventos predominantes na região sopram da direção dos quadrantes SE (39% do tempo) e do NE (37% do tempo), sendo os de SW e NE, os de maior intensidade.

Os ventos são a força mais importante das condições determinantes das correntes no canal, pelo que no verão a direção preferencial das correntes é para SW acompanhando o campo de ventos.

A corrente profunda, no entanto, é preferencialmente para NE, independente do vento local por causa da penetração da massa de água ACAS (Água Central do Atlântico Sul) pelo extremo sul do canal. No restante do ano, o fluxo é numa camada unidirecional, com predominância de correntes no sentido NE. Contudo, outra característica diferenciada no CSS é a inversão das correntes costeiras na margem continental, em relação à direção do fluxo no centro do canal (Castro e Miranda, 1998).

A maré, entretanto, influencia na circulação não pela presença de correntes, mas sim modificando intensidades, defletindo rumos e acarretando represamentos que, pelas alterações do nível do mar local, podem gerar correntes de desnível (Castro, 1996).

A maior parte da estrutura vertical de densidade das águas do CSS é determinada pela temperatura, isto é, a temperatura, durante a maior parte do ano, controla a densidade. A estratificação vertical de densidade é máxima no verão, quando a diferença de temperatura e de salinidade entre superfície e fundo é maior, principalmente nos extremos do canal. Por outro lado, no inverno, as águas apresentam tendência à homogeneidade vertical em quase todo o canal (Coelho, 1997).

5.2.1. Simulação com o Delft-3D.

O modelo hidrodinâmico FLOW do Delft-3D, simula a hidrodinâmica do corpo receptor usando como dados de entrada a batimetria local, os harmônicos de maré, os campo de ventos, temperatura e salinidade, entre outros. Como resultados das simulações são obtidos, entre outros, o perfil e o mapa de velocidades de corrente além da variação do nível do mar.

Para a simulação hidrodinâmica é necessário cumprir uma série de etapas. A primeira delas é a geração da grade numérica sobre o domínio da pesquisa e a interpolação dos dados batimétricos nos pontos da malha.

Posteriormente, são definidas as condições iniciais, as condições de contorno e as forçantes do modelo. Uma vez concluídas essas etapas são executadas as etapas de calibração e validação do modelo. Finalmente, podem ser gerados os perfis.

O primeiro passo na construção da grade computacional é a definição dos limites externos do domínio a ser modelado. Pelas características particulares do CSS o domínio está limitado por duas fronteiras terrestres: Município de São Sebastião na fronteira esquerda e o Município Ilhabela na fronteira direita, e duas fronteiras marinhas: a Sul e a Norte, extremos do Canal de São Sebastião.

A grade numérica foi criada com uso do módulo RGFRID, ferramenta também integrada ao pacote de modelagem Delft-3D, a qual permite a geração e a manipulação de grades numéricas para uso no FLOW. Devido às características morfológicas da área de estudo optou-se pela utilização de uma grade ortogonal curvilínea no plano horizontal, visando um aumento da eficiência computacional durante as simulações. Posteriormente, foram interpolados os dados batimétricos no módulo QUICKIN através do método de interpolação triangular linear.

A grade construída possui uma dimensão horizontal de 50 x 96 células, com distâncias variando entre 170 m (máximo) e 50 m (mínimo) na área de interesse. Na

vertical foram consideradas 5 camadas sigma de 20% cada. As camadas sigma não são exatamente horizontais, seguem a batimetria e o nível d'água de tal forma, que o número de camadas seja constante em todo o domínio, independentemente da profundidade local.

Os dados batimétricos utilizados foram obtidos a partir de dados do Projeto de Preparação da Base Batimétrica Digitalizada para a Costa do Estado de São Paulo (Alfredini e col., 2002) onde aparecem digitalizadas: cartas náuticas, folhas de bordo da Marinha do Brasil e levantamentos batimétricos. Esses dados, que constam de valores de latitude-longitude em coordenadas UTM, e de profundidade em metros para cada ponto, foram filtrados numa planilha Excel para isolar os dados correspondentes à área de estudo. A Figura 5.6 apresenta a batimetria final da área de estudo após interpolação na grade numérica.

Para os dados de temperatura e salinidade foram utilizados dados da climatologia disponível de Leandro (1999), coletadas nas proximidades do ponto de disposição (apud SABESP, 2007).

Figura 5.6. Grade computacional e Batimetria.

Fonte: Delft 3D-FLOW

Como condições iniciais, a altura média do nível do mar foi considerada zero, uma vez que o modelo necessita de um tempo de estabilização relativamente curto. A temperatura inicial utilizada igual a 20 °C e a salinidade igual a 31 ppt. A intensidade média dos ventos provenientes de NE (verão) e SW (inverno) utilizada para forçar o modelo na superfície livre foi definida a partir de Fontes (1995) e Castro et al. (2008)

Nas fronteiras marinhas do domínio foi definido o tipo de borda aberta como elevação da superfície sendo que os valores de nível médio do mar foram especificados a partir de dados de modelagem fornecidos pelo Laboratório de Meteorologia Aplicada a Sistemas de Tempo Regionais (MASTER) (Camargo e Harari, 2014).

A forçante do modelo foi à elevação da superfície do mar provocada pelas marés. Apesar da baixa intensidade das correntes de maré no CSS, o nível do mar é dominado pela oscilação da maré (Castro, 1996) pelo que foram utilizadas quatro constituintes de maré, duas semi-diurnas (M_2 e S_2) e duas diurnas (K_1 e O_1), as quais segundo Pereira et al. (2007), são as mais energéticas na região.

A utilização de um número reduzido de componentes de maré nas modelagens numéricas é muito usual e tem apresentado bons resultados. Esse enfoque foi usado nos trabalhos realizados por: Harari e Camargo (1994), Yassuda (1991), Montenegro (1999), Baptistelli (2003), Picarrelli (2006) e Baptistelli (2008).

As amplitudes e fases das constituintes de maré utilizadas são resultado da análise harmônica realizada nas séries temporais de nível do mar coletadas para o projeto HIDROCAS do IOUSP e foram tomadas de Ansanelli (2014).

Na Tabela 5.3, são listadas as constituintes e respectivas amplitudes e fases usadas.

Tabela 5.3. Constantes harmônicas para os contornos abertos.

Harmônico	Sul		Norte	
	Amplitude (m)	Fase (°)	Amplitude (m)	Fase (°)
M_2	0,312	264,51	0,319	255,15
S_2	0,178	246,99	0,189	271,28
O_1	0,109	184,16	0,187	179,11
K_1	0,060	223,15	0,060	263,37

5.2.1.1. Calibração e Validação

O uso de modelos numéricos possibilita que, após a calibração em um único ponto ou mais, seja possível extrapolar as informações para todo o domínio de cálculo. O processo de calibração se realiza a partir da comparação entre os resultados do modelo com outras fontes de dados, de forma que quanto melhor o ajuste entre os valores, melhor o resultado fornecido pelo modelo.

A calibração é o processo no qual os parâmetros físicos do modelo são ajustados dentro de limites fisicamente aceitáveis, para assegurar que as simulações representem com precisão o caso específico de estudo (Tobón, 2002). A validação posterior permite comprovar que as simulações mantêm a precisão alcançada através da calibração, num período de tempo diferente, mas utilizando os mesmos parâmetros ajustados no processo de calibragem.

Nas etapas de calibração e validação do modelo, na falta de dados de medições de nível de mar e intensidade e direção das correntes na área de estudo, foram usados como valores de referência, dados pertencentes ao Laboratório de Simulação e Previsão Numérica Hidrodinâmica (LABSIP) do IOUSP (Batista, 2016).

Para a calibração do modelo, o Delft-3D permite a utilização de diferentes coeficientes de dissipação de energia (modelos de fechamento turbulento) (Anexo). Após a realização de diversos testes, optou-se por utilizar o Coeficiente de rugosidade do fundo (Chezy 3D), um dos principais parâmetros que afetam as características da propagação da onda de maré em áreas rasas, por apresentar resultados de simulação mais próximos com os valores previstos para a oscilação de maré nas coordenadas 45° 24' W - 23° 49' S, perto do ponto de descarga do emissário.

O coeficiente Chezy é inversamente proporcional à rugosidade, ou seja, quanto mais fino for o sedimento, menor a rugosidade, e maior será o coeficiente de Chezy. Com isso, o parâmetro de rugosidade de fundo, além de controlar a estabilidade numérica do modelo, tem papel significativo na distribuição de energia dentro do sistema, regulando a magnitude das correntes e a alturas da maré simuladas (Deltares, 2013). A fim de comparar os valores de nível do mar e de corrente dos dados de referência com os dados simulados no ponto de observação (próximo ao ponto de disposição do efluente do Itaquanduba), foram realizadas simulações com diferentes valores deste coeficiente no mesmo período dos dados, janeiro e julho de 2009. O melhor ajuste dos dados foi obtido com um valor de Chezy de $45 \text{ m}^{0.5}/\text{s}$ para u e de $65 \text{ m}^{0.5}/\text{s}$ para v .

O ajuste dos resultados das simulações aos dados de referência fornecidos pelo LABSIP (Batista, 2016) foi comprovado através do cálculo do coeficiente *Root Mean Square Error* (RMSE) ou Raiz do Erro Quadrático Médio, comumente usado para expressar a precisão dos resultados numéricos, que resulta em valores do erro nas

mesmas dimensões da variável analisada. O valor ideal seria zero, mas valores abaixo 0,2 são considerados excelentes (Walstra et al., (2001) apud Yang (2016)).

O RMSE é calculado como:

$$RMSE = \sqrt{\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n (Obs_i - Mod_i)^2} \quad (5.9)$$

Nas figuras a seguir, percebe-se que o modelo se ajusta aos dados de referência (identificados nas figuras como Observado) de forma adequada com RMSE de 0,05 m para elevação de nível do mar e de 0,15 m/s e 0,07 m/s em média, para as correntes nas componentes u e v, respectivamente.

Figura 5.7: Elevação do nível do mar no período compreendido entre os dias 5 e 15 de julho de 2009 (RMSE= 0,052 m).

Figura 5.8: Velocidade média da corrente Inverno componente u no período compreendido entre os dias 18 e 27 de julho de 2009 (RMSE= 0,141 m/s).

Figura 5.9: Velocidade média da corrente Inverno componente v no período compreendido entre os dias 18 e 27 de julho de 2009 (RMSE=0,043 m/s).

Figura 5.10: Velocidade média da corrente Verão componente u no período compreendido entre os dias 2 e 11 de janeiro de 2009 (RMSE= 0,152m/s).

Figura 5.11: Velocidade média da corrente Verão componente v no período compreendido entre os dias 2 e 11 de janeiro de 2009 (RMSE= 0,094m/s).

Esses valores permitem afirmar que os resultados do modelo são válidos com um alto grau de confiança e representam bem os regimes de correntes no ponto de descarga do efluente para as condições de verão e inverno.

5.2.1.2. *Perfis de velocidades*

Segundo Roberts et al. (1989), os experimentos de laboratório que deram suporte ao desenvolvimento de modelos de campo próximo como o NRFIELD, foram conduzidos com perfis uniformes de correntes, e mesmo mediante esta simplificação, os resultados obtidos por este modelo são satisfatórios quando comparados às observações realizadas.

Isto significa, que embora no Delft-3D são obtidas series temporais de velocidade, o cálculo de valores médios destes parâmetros por camadas, para a sua utilização no Visual Plumes é adequado, o que facilita a simulação dos casos, diminuindo o tempo de cada simulação. Sendo assim, para as simulações do campo próximo foram usados dados de corrente, temperatura e salinidade invariantes no tempo.

Usando o trabalho de Leandro (1999), foram estabelecidos os valores para as estruturas verticais de temperatura e de salinidade para cada bloco nas profundidades de 33 metros e 41 metros que foram usados nas simulações do campo próximo (Tabela 5.4).

Os valores correspondentes aos valores médios (médias estatísticas) encontrados por Leandro (1999) para ambas as estações do ano, numa profundidade local de 32 metros, foram considerados para os perfis de 33 metros de profundidade. Para o caso da maior profundidade (41 metros), e considerando que os valores médios foram referenciados por Leandro (1999) a uma profundidade de 32 metros, foram considerados os valores médios e o desvio padrão.

Tabela 5.4. Dados de temperatura e salinidade do mar (SABESP, 2003)

Época	Profundidade	Temperatura Média (°C)	Desvio Padrão (°C)	Salinidade Média (psu)	Desvio Padrão (psu)
Verão	Superfície 2 m	27,55	1,80	33,90	1,15
	Fundo 32 m	20,50	1,30	35,00	0,90
Inverno	Superfície 2 m	20,58	1,24	32,72	1,25
	Fundo 32 m	20,44	1,18	32,80	1,25

Os valores de velocidade e ângulo da corrente por camada foram calculados usando o valor médio das componentes da velocidade por camada. o Teorema de Pitágoras

e a decomposição vetorial clássica, sendo que se: , a magnitude da velocidade da corrente é $V = \sqrt{u^2 + v^2}$ e a direção ou ângulo das correntes seria $\theta = \arctg \left[-\frac{v}{u} \right]$, considerando que v coincide com o norte geográfico e u com o leste.

Nas tabelas 5.5, 5.6, 5.7 e 5.8 são mostrados os perfis de velocidade média temporal de correntes, de salinidade e de temperatura construídos a partir da análise antes realizada.

Tabela 5.5. Inverno (33 metros de profundidade local)

Profundidade (m)	Velocidade (m/s)	Ângulo (°)	Temperatura (°C)	Salinidade (psu)
0	0,4924	78,91	20,58	32,72
8	0,4416	70,94		
16	0,3523	68,28		
24	0,2802	68,05		
33	0	0	20,44	32,80

Tabela 5.6. Inverno (41 metros de profundidade local)

Profundidade (m)	Velocidade (m/s)	Ângulo (°)	Temperatura (°C)	Salinidade (psu)
0	0,4924	78,91	20,58	32,72
10	0,4305	68,66		
20	0,3002	67,91		
30	0,2502	68,29		
41	0	0	19,26	34,05

Tabela 5.7. Verão (33 metros de profundidade local)

Profundidade (m)	Velocidade (m/s)	Ângulo (°)	Temperatura (°C)	Salinidade (psu)
0	0,2532	255,09	27,55	33,90
8	0,3483	252,59		
16	0,3471	250,63		
24	0,2864	249,20		
33	0	0	20,50	35

Tabela 5.8. Verão (41 metros de profundidade local)

Profundidade (m)	Velocidade (m/s)	Ângulo (°)	Temperatura (°C)	Salinidade (psu)
0	0,2532	255,09	27,55	33,90
10	0,3722	252,17		
20	0,3306	249,47		
30	0,2202	248,60		
41	0	0	19,20	35,90

6. DESENVOLVIMENTO DO ESTUDO

Neste capítulo é realizada a análise de sensibilidade dos modelos e aplicada a metodologia definida do capítulo 4 para o cumprimento dos objetivos propostos.

6.1. Modelo NRFIELD

6.1.1. Análise de Sensibilidade.

A análise de sensibilidade de um modelo irá avaliar o impacto provocado na variável de saída pelas variações nas variáveis de entrada. Neste trabalho, a análise de sensibilidade é usada como ferramenta para avaliar todas as variáveis de entrada do modelo (possíveis fatores do estudo).

A análise de sensibilidade usualmente é realizada aplicando o método *One fator at a time (OFAT)* ou um fator por vez (Almeida, 2013). Esse método consiste em fixar uma configuração, das variáveis e seus níveis, para depois variar, sucessivamente, cada fator mantendo os outros no valor fixado. Neste caso, foi usada a configuração atual do Itaquanduba como ponto de partida e, posteriormente, avaliada cada variável, uma de cada vez, usando o nível superior definido com anterioridade (Tabela 6.1).

Tabela 6.1. Parâmetros do Itaquanduba (Dados base) e o nível superior dos fatores para a análise de sensibilidade.

Fator	Base	Nível Superior
Diâmetro das saídas, d_o (m)	0,075	0,08
Ângulo vertical de descarga A_V	0°	90°
Ângulo horizontal de descarga A_H	paralela	perpendicular
Número de saídas, n_o	16	18
Espaçamento entre <i>risers</i> , e_o (m)	4,5	5
Profundidade da disposição P_d (m)	36	40
Vazão de efluente Q_e (m ³ /s)	0,050	0,154
Temperatura de efluente T_e (°C)	22	27
Concentração de efluente C_e (NMP/100ml)	1,7 x 10 ⁶	7,5 x 10 ⁷
Altura dos <i>risers</i> h_d (m)		1
Salinidade do efluente s_e (psu)		1

Para os dados de corpo receptor, foram utilizados os perfis de velocidade da corrente, temperatura e salinidade do mar para o inverno, antes obtidos no Delft-3D.

A análise de sensibilidade está composta por 10 simulações. A primeira é a simulação base. A partir dessa, foi realizada uma simulação para cada um dos fatores, avaliando-os no nível superior definido, usando os outros fatores no valor base. Os resultados são mostrados na tabela 6.2.

Tabela 6.2. Resultados da análise de sensibilidade.

Simulação	Diluição Inicial	Mudança (%)
1 Base	1035	
2 d_o (0,08 m)	1035	0
3 A_V (90°)	1035	0
4 A_H (Perpendicular)	1035	0
5 n_o (18)	1169	12,9
6 e_o (5 m)	1111	7,3
7 P_d (40 m)	1146	10,7
8 Q_e (0,154 m ³ /s)	469	-54,7
9 T_e (27 °C)	1042	0,7
10 C_e (7,5 x 10 ⁷ NMP/100ml)	1035	0

6.1.1.1. Análise dos resultados.

Segundo a análise de sensibilidade das 9 variáveis avaliadas, apenas 5 mostraram alguma influência relativa à Diluição Inicial.

A Diluição Inicial é muito sensível às mudanças no fator Q_e , o incremento no valor de vazão diminuiu bastante o valor da mesma. Já as mudanças nos fatores n_o , P_d e e_o , mostraram uma influência positiva na resposta, um incremento nos valores destas variáveis aumenta o valor da diluição.

No caso do fator T_e a diluição mostrou pouca sensibilidade, quando comparados os resultados, com os obtidos para os fatores anteriores. Por sua parte, a Diluição Inicial não mostrou sensibilidade alguma às mudanças de valor dos fatores d_o , A_V , A_H e C_e .

Embora, os resultados da análise de sensibilidade tenham mostrado que existem fatores com pouca ou nenhuma influência sobre a resposta, foi decidido incluí-los mesmo assim no estudo, no intuito de se houver, achar alguma interação de fatores interessante, lembrando que diferentemente da análise de sensibilidade, a análise fatorial da metodologia, verifica a significância estatística dos fatores, assim como as interações entre eles.

6.1.2. Experimentos exploratórios (*Screening Experiments*).

Para facilitar o entendimento da análise dos resultados e dos gráficos que serão mostrados, foram substituídos os nomes dos fatores por letras simples, que é a nomenclatura que usa o MINITAB (Tabela 6.3). Nesta nomenclatura os fatores passam a ser:

Tabela 6.3. Nomes dos fatores e as letras correspondentes com as quais serão identificados nos gráficos e tabelas.

A	Diâmetro das saídas, d_o (m)	F	Profundidade da disposição P_d (m)
B	Ângulo vertical de descarga A_V ($^\circ$)	G	Vazão de efluente Q_e (m^3/s)
C	Ângulo horizontal de descarga A_H	H	Temperatura de efluente T_e ($^\circ C$)
D	Número de saídas, n_o	J	Concentração efluente C_e (NMP/100ml)
E	Espaçamento entre <i>risers</i> , e_o (m)		

Devido a que nesta fase temos 9 fatores com dois níveis cada, um planejamento fatorial completo resultaria na necessidade de realização de 512 simulações. Não obstante, para realizar o *screening experiments* é possível aplicar um planejamento fatorial fracionário. Neste caso, foi utilizado um planejamento fatorial fracionário com $p = 4$ (ou $\frac{1}{16}$ fração) de resolução IV (ver página 56), resultando em $2^{9-4} = 32$ rodadas.

O planejamento escolhido, com suas 32 rodadas, fornece os dados necessários para calcular os efeitos dos 9 fatores e de apenas 23 das 36 interações de segunda ordem possíveis. Na tabela 6.4 são mostradas as interações de 2ª ordem possíveis.

Tabela 6.4. Relação de fatores e interações de 2ª ordem do planejamento fatorial 2^9 .

A	AB	AC	AD	AE	AF	AG	AH	AJ
B	BC	BD	BE	BF	BG	BH	BJ	
C	CD	CE	CF	CG	CH	CJ		
D	DE	DF	DG	DH	DJ			
E	EF	EG	EH	EJ				
F	FG	FH	FJ					
G	GH	GJ						
H	HJ							
J								

Como o planejamento fracionário 2^{9-4} tem uma resolução IV, os efeitos dos fatores principais e das interações de 2ª ordem não são confundidos entre eles, apenas poderão estar confundidos com as interações de 3ª e 4ª ordem. Não obstante, algumas interações de 2ª ordem poderiam estar confundidas com outras interações

de 2ª ordem.

O MINITAB, auxiliando-se da relação definidora conforme explanado no item 4.1.1.2 (no caso I = ABCDEFGHJ), fornece o padrão de confusão do planejamento escolhido para auxiliar na análise dos resultados. Segundo o MINITAB, as interações confundidas são: (AB-FG), (AC-FH), (AD-FJ), (AF-BG-CH-DJ), (AG-BF), (AH-CF), (AJ-DF), (BC-GH), (BD-GJ), (BJ-DG), (CD-HJ) E (CJ-DH).

Na tabela 6.5 é mostrada a matriz de planejamento das simulações. A matriz foi construída no MINITAB, fornecendo a quantidade e nome dos fatores com seus respectivos níveis, assim como a quantidade de blocos definidos para as simulações. As unidades dos fatores são as mesmas definidas na tabela 6.3.

Tabela 6.5. Matriz do planejamento.

Rodada	Bloque	A	B	C	D	E	F	G	H	J
1	Verão	0,08	90	Paralela	14	4	32	0,0935	27	75000000
2	Verão	0,07	0	Paralela	14	5	32	0,0935	22	10000
3	Verão	0,08	0	Paralela	18	5	40	0,0935	22	75000000
4	Verão	0,08	90	Perpendicular	18	4	32	0,0935	22	10000
5	Verão	0,07	0	Perpendicular	18	5	32	0,0935	27	75000000
6	Verão	0,08	90	Paralela	14	5	40	0,154	22	10000
7	Verão	0,08	0	Perpendicular	14	5	40	0,0935	27	10000
8	Verão	0,07	90	Paralela	18	5	32	0,154	22	75000000
9	Verão	0,08	0	Perpendicular	14	4	32	0,154	22	75000000
10	Verão	0,07	90	Perpendicular	14	5	32	0,154	27	10000
11	Verão	0,07	90	Perpendicular	14	4	40	0,0935	22	75000000
12	Verão	0,07	0	Paralela	14	4	40	0,154	27	75000000
13	Verão	0,08	0	Paralela	18	4	32	0,154	27	10000
14	Verão	0,07	0	Perpendicular	18	4	40	0,154	22	10000
15	Verão	0,08	90	Perpendicular	18	5	40	0,154	27	75000000
16	Verão	0,07	90	Paralela	18	4	40	0,0935	27	10000
17	Inverno	0,08	90	Paralela	18	5	32	0,0935	27	10000
18	Inverno	0,08	0	Perpendicular	18	5	32	0,154	22	10000
19	Inverno	0,08	90	Paralela	18	4	40	0,154	22	75000000
20	Inverno	0,08	90	Perpendicular	14	5	32	0,0935	22	75000000
21	Inverno	0,08	0	Perpendicular	18	4	40	0,0935	27	75000000
22	Inverno	0,07	0	Paralela	18	4	32	0,0935	22	75000000
23	Inverno	0,07	0	Paralela	18	5	40	0,154	27	10000
24	Inverno	0,08	0	Paralela	14	4	40	0,0935	22	10000
25	Inverno	0,08	0	Paralela	14	5	32	0,154	27	75000000
26	Inverno	0,07	90	Perpendicular	18	5	40	0,0935	22	10000
27	Inverno	0,07	90	Paralela	14	4	32	0,154	22	10000
28	Inverno	0,08	90	Perpendicular	14	4	40	0,154	27	10000
29	Inverno	0,07	90	Perpendicular	18	4	32	0,154	27	75000000

(continua)

(conclusão)

Rodada	Bloque	A	B	C	D	E	F	G	H	J
30	Inverno	0,07	0	Perpendicular	14	4	32	0,0935	27	10000
31	Inverno	0,07	90	Paralela	14	5	40	0,0935	27	75000000
32	Inverno	0,07	0	Perpendicular	14	5	40	0,154	22	75000000

6.1.2.1. Análise dos resultados.

Na tabela 6.6 são mostrados os resultados das 32 simulações.

Tabela 6.6. Diluição Inicial por rodada.

Rodada	Diluição Inicial	Rodada	Diluição Inicial	Rodada	Diluição Inicial	Rodada	Diluição Inicial
1	502	9	352	17	663	25	389
2	537	10	394	18	461	26	874
3	889	11	661	19	564	27	348
4	594	12	484	20	530	28	476
5	671	13	436	21	805	29	431
6	526	14	574	22	587	30	497
7	750	15	651	23	641	31	738
8	466	16	818	24	650	32	517

Esses valores de D_i foram introduzidos de volta no MINITAB e analisados, considerando um intervalo de confiança de 95% (margem de erro de 5%), ou seja, um nível de significância de 0,05, valores comumente usados para este tipo de análise.

É importante lembrar, que ao aplicar os princípios da esparsidade e da hierarquia, explanados na metodologia, é possível afirmar que apenas alguns efeitos de primeira ordem (efeito de fatores principais) e algumas interações de segunda ordem influenciam a resposta, sendo que os efeitos de primeira ordem representam a maior fonte de variabilidade na maioria dos processos ou sistemas, seguidos pelos efeitos de segunda ordem.

Comumente, os valores dos efeitos de ordem superiores são expressivamente inferiores aos efeitos dos fatores principais e interações de segunda ordem e são usados em experimentos sem réplicas, como explanado na metodologia estatística, para o cálculo do erro experimental e a identificação daqueles dados que se afastam da normalidade (efeitos significativos), motivo pelo qual apenas são analisados os efeitos principais e de 2ª ordem.

Na tabela 6.7 são mostrados os valores dos efeitos dos fatores e das interações de 2ª ordem calculados, e na figura 6.1 é mostrado o gráfico de probabilidade normal desses efeitos.

Tabela 6.7. Efeitos dos fatores e interações de 2ª ordem.

Fatores	Efeito	Fatores	Efeito	Interação	Efeito	Interação	Efeito	Interação	Efeito
A	0,25	G	-190,75	AD-FJ	0,375	BC-GH	-2	CJ-DH	0,125
B	0	H	13,75	AE	2,37	BD-GJ	0,125	DE	6,25
C	0,25	J	-0,375	AF-BG-CH-DJ	0,25	BE	-1,625	EF	11,625
D	110,62	Interação	Efeito	AG-BF	-0,25	BJ-DG	-18,375	EG	-10,125
E	57,63	AB-FG	-28,25	AH-CF	-0,5	CD-HJ	-0,125	EH	-1,625
F	172,75	AC-FH	-0,25	AJ-DF	16,12	CE	-0,375	EJ	1

Segundo os resultados, os fatores significativos são: o número de saídas n_o (D), o espaçamento entre risers e_o (E), a profundidade de descarga P_d (F), a vazão de efluentes Q_e (G) e a temperatura do efluente T_e (H). Desde a análise de sensibilidade podiam-se inferir esses resultados.

Figura 6.1. Gráfico de probabilidade normal dos efeitos.

A vazão do efluente (Q_e) e a profundidade de descarga (P_d) são os fatores que maiores efeitos causam na Resposta. O aumento da P_d favorece a Diluição Inicial e o incremento da Q_e tem um efeito negativo sobre a mesma.

Os fatores número de saídas (n_o) e espaçamento entre saídas (e_o) também têm uma importante influência sobre a D_i . Já o fator T_e , embora estatisticamente significativo, parece ter uma influência relativamente inferior, quando comparado com os outros fatores e não aparece em nenhuma interação importante.

As interações de segunda ordem significativas são varias. As primeiras que analisaremos são as que estão relacionadas com o fator d_o (A). As interações AJ e

AB se mostraram significativas, mas nem o fator d_o (A), nem o fator A_v (B) e nem o fator C_e (J) são significativos, logo essas interações não poderiam ser significativas respeitando o princípio de hereditariedade. Segundo, o princípio da hereditariedade, sabe-se que onde se observam com efeitos principais baixos é comum não ter efeitos de interação significativos e, que quando se tem uma interação significativa, pelo menos um dos efeitos principais correspondentes tem que ser significativo. Sendo assim, é necessário considerar a confusão de efeitos.

Como definido no padrão de confusão, a interação AJ é confundida com a interação DF e, a interação AB é confundida com a interação FG. Os fatores n_o (D), P_d (F) e Q_e (G) sim se mostraram significativos, logo as interações significativas seriam na realidade DF e FG.

O mesmo acontece com a interação BJ (os fatores A_v (B) e C_e (J) não são significativos), seu efeito estaria confundido com o efeito da interação DG. O restante das interações significativas mostradas EF, DE, e EG são todas interações de fatores significativos.

Concluindo, segundo a análise dos resultados, apenas cinco dos nove fatores envolvidos no sistema analisado, são realmente importantes para a Reposta. Contudo, considerando que a temperatura do efluente é um parâmetro que depende basicamente da temperatura ambiental e que controlá-la seria um processo complexo e oneroso, não justificado pelo pequeno efeito positivo que causa na Diluição Inicial, para a continuação do estudo seu efeito foi negligenciado.

Finalmente, com os quatro fatores significativos foi organizado um novo planejamento fatorial do tipo completo, mantendo as outras variáveis num nível fixo. No caso particular da T_e seu valor acompanhou o fator de bloco (estação do ano), sendo seu nível inferior usado para o inverno e seu nível superior usado para o verão. No caso dos fatores d_o e C_e foram usados os valores atuais do Itaquanduba.

6.1.3. Experimentos confirmatórios e seleção de fatores significativos.

Para validar os resultados obtidos com planejamento fatorial fracionário do *screening* foi organizada outra serie de testes com os fatores selecionados no epigrafe anterior. Na tabela 6.8 mostram-se os fatores e seus respectivos níveis como foram usados nesta fase de experimentos confirmatórios.

Tabela 6.8. Fatores e níveis para os experimentos confirmatórios.

Fator	Nível Inferior	Nível Superior
Fator fixo d_o (m)	0,075	
Fator fixo A_V	0°	
Fator fixo A_H	Paralela	
Número de saídas, n_o	14	18
Espaçamento entre risers, e_o (m)	4	5
Profundidade da disposição P_d (m)	32	41
Vazão de efluente Q_e (m³/s)	0,0935	0,154
Fator fixo C_e (NMP/100ml)	$1,7 \times 10^6$	
Fator de bloco (Ambiente/ T_e (°C))	Inverno/22°C	Verão/27°C
Fator fixo h_d (m)	1	
Fator fixo s_e (psu)	1	

Para os experimentos confirmatórios foi organizado um planejamento fatorial completo, que considerando os quatro fatores e seus dois níveis resulta em $2^4 = 16$ rodadas. Estas 16 rodadas permitiram avaliar todos os efeitos possíveis: os 4 efeitos principais, os 6 efeitos de 2ª ordem e os 6 efeitos de ordens superiores.

Na tabela 6.9 é apresentada a nova matriz. Os valores da matriz têm as mesmas unidades definidas para cada fator na tabela 6.8.

Tabela 6.9. Matriz de experimentação.

Rodada	Bloque	A	B	C	D	Rodada	Bloque	A	B	C	D
1	Inverno	18	5	32	0,154	9	Verão	14	4	40	0,154
2	Inverno	14	5	40	0,154	10	Verão	18	5	32	0,0935
3	Inverno	14	4	40	0,0935	11	Verão	14	5	40	0,0935
4	Inverno	14	4	32	0,154	12	Verão	18	4	40	0,0935
5	Inverno	18	5	40	0,0935	13	Verão	18	4	32	0,154
6	Inverno	18	4	40	0,154	14	Verão	18	5	40	0,154
7	Inverno	14	5	32	0,0935	15	Verão	14	5	32	0,154
8	Inverno	18	4	32	0,0935	16	Verão	14	4	32	0,0935

Os resultados das simulações são mostrados nas tabelas 6.10, assim como o valor do efeito de cada fator e interação, até as de 3ª ordem, são mostrados na tabela 6.11.

Tabela 6.10. Diluição Inicial por rodada.

Rodada	Diluição Inicial	Rodada	Diluição Inicial	Rodada	Diluição Inicial	Rodada	Diluição Inicial
1	461	5	874	9	481	13	433
2	517	6	564	10	672	14	647
3	650	7	530	11	745	15	391
4	348	8	587	12	813	16	499

Tabela 6.11. Efeitos dos fatores e interações de 2ª ordem.

Fatores	Efeito	Interação	Efeito	Interação	Efeito
A	111.25	AB	6.5	BD	-10.25
B	57.75	AC	15	CD	-27.25
C	171.25	AD	-19.25		
D	-191.00	BC	11		

Segundo os resultados, os maiores valores de efeitos são os dos fatores D, C e A seguidos do efeito do fator B.

Os efeitos das interações parecem ser muito inferiores aos dos fatores principais, não obstante quando representados num gráfico de probabilidade normal (Figura 6.2), pode-se ver claramente, como todas as interações de 2ª ordem também são estatisticamente significativas para a Resposta.

Nos gráficos de efeitos principais é possível constatar com quais níveis de cada fator obtêm-se os maiores valores de Resposta (Figura 6.3).

Figura 6.2. Gráfico de probabilidade normal dos efeitos (4 fatores).

Figura 6.3. Gráfico de efeitos principais.

A $P_d(C)$ e a $Q_e(D)$ são os fatores que maior influência tem sobre a Diluição Inicial do efluente, tanto que, a interação entre eles (CD) é a interação mais forte estatisticamente.

Voltando no caso base do Itaquanduba, utilizado na análise de sensibilidade do modelo, é possível comparar os valores de Resposta obtidos. No caso base, a Diluição Inicial foi de 1035, quase o dobro dos valores obtidos nas simulações do planejamento. Sabendo que o fator mais significativo para a Diluição, é o fator Q_e e que sua influência é negativa sobre a Resposta, é facilmente explicado esse comportamento.

A Q_e atual do Itaquanduba, e que foi usada para o caso base, é de $0,050 \text{ m}^3/\text{s}$, inferior ao nível inferior do fator nas simulações do *screening*. Esse valor de vazão foi usado em todas as simulações da análise de sensibilidade, menos naquela simulação na qual se avaliou a sensibilidade do modelo à mudança da vazão.

Na simulação 8 da análise de sensibilidade, a vazão foi de $0,154 \text{ m}^3/\text{s}$ e o valor de Diluição Inicial foi de 469, bem inferior aos valores de Resposta de todas as outras simulações, mas muito similar aos obtidos nas simulações do *screening*, quando o fator estava sendo usado no seu nível superior. Obviamente, os melhores valores de Diluição Inicial de um sistema de emissários submarinos serão obtidos quando a vazão seja a mínima, fato bem documentado na literatura.

Nas tabelas 6.12 e 6.13 são mostrados os valores médios da Diluição Inicial para ambos os níveis dos quatro fatores.

Para os fatores A, B e C, os maiores valores de Diluição Inicial são alcançados quando eles intervêm no seu nível superior: maior profundidade de descarga, maior número de saídas e maior espaçamento entre os *risers*.

Tabela 6.12. Valores médios da Resposta nos diferentes níveis do fator Q_e (a) e P_d (b).

Vazão de Efluente	Diluição Inicial Média	Profundidade de Descarga	Diluição Inicial Média
Nível Superior	480,25	Nível Superior	661,38
Nível Inferior	671,25	Nível Inferior	490,13

(a) (b)

Tabela 6.13. Valores médios da Resposta nos diferentes níveis do fator n_o (a) e e_o (b).

Número de Saídas	Diluição Inicial Média	Espaçamento entre risers	Diluição Inicial Média
Nível Superior	631,38	Nível Superior	604,63
Nível Inferior	520,13	Nível Inferior	546,88

(a) (b)

Outra análise necessária é a análise das interações significativas através dos seus gráficos e valores médios. Na figura 6.4 é possível observar a variação da Diluição Inicial média com os diferentes níveis dos fatores que interagem.

Figura 6.4. Gráfico dos efeitos das interações entre fatores.

Sabe-se que o conceito de interação pressupõe que a variação da Resposta quando um fator da interação passa do seu nível inferior ao seu nível superior, é diferente

para cada nível do outro fator, motivo pelo qual as linhas do gráfico não são paralelas.

Essas linhas, em nenhum dos casos se cortam, devido ao fato dos valores dos efeitos das interações serem muito inferiores que os efeitos dos fatores principais que interagem, são interações fracas, não obstante, os valores de Resposta são influenciados por elas.

Para entender melhor as interações analisaremos especificamente os resultados.

No caso particular dos fatores n_o (A), e_o (B) e P_d (C), cuja influência sobre a Resposta é positiva, ou seja, um incremento no número de saídas, no espaçamento entre eles ou na profundidade de disposição, favorece a Diluição Inicial; os valores de Diluição serão ainda maiores se a simulação é realizada no nível superior do outro fator da interação.

Nas interações com o fator Q_e (D) cujo efeito é negativo, os maiores valores de Resposta são atingidos nas simulações nas quais ele interveio no nível inferior e o outro fator da interação no seu nível superior.

Na tabela 6.14 é possível verificar os valores médios da Diluição Inicial obtidos daquelas simulações nas quais cada fator interveio no seu melhor nível.

Tabela 6.14. Valores médios da Resposta considerando as interações de fatores.

Fatores (Melhor Nível)	Diluição Inicial Média	Interação	Diluição Inicial Média	Interação	Diluição Inicial Média
A (+)	631.38	AB	663.50	BC	695.75
B (+)	604.63	AC	724.50	BD	705.25
C (+)	661.38	AD	736.50	CD	770.50
D (-)	671.25				

Tomando como exemplo o fator n_o (A) constata-se que o valor médio da Resposta das simulações nas quais A foi usado no seu nível superior foi de 631,38. Ao comparar esse valor ao valor médio da Resposta de todas as simulações nas quais A (n_o) e B (e_o) intervieram nos seus respectivos nível positivo, ou seja, quando ambos os fatores interagem no seu melhor nível (Diluição Inicial média de 663,50) é possível constatar que o valor de Resposta é superior. Igualmente acontece com quaisquer uma das outras interações: AC – 724,50 e AD – 736,50.

No caso das interações com o fator Q_e (D), o valor médio da Resposta analisado é a média da Diluição Inicial obtida nas simulações nas quais D interveio no seu nível inferior. O valor é de 671,25. Quando comparado esse valor ao valor de Resposta

média das interações do fator D, verifica-se que os valores da D_i também são superiores: (AD) – 736,50; (BD) – 705,25 ou (CD) – 770,50.

A mesma análise pode ser feita para os fatores B e C. Os resultados mostram a importância das interações dos fatores. O valor médio da Resposta em todas as interações é superior aos valores médios da Diluição Inicial considerando apenas a influência do fator isolado.

O maior valor de Diluição Inicial é obtido quando os fatores P_d , n_o e e_o são usados nos seus níveis superiores e, o fator Q_e no seu nível inferior ao mesmo tempo. O caso corresponde à simulação 5 (Tabela 6.9) que resultou numa Diluição Inicial de 874 (Tabela 6.10), valor bem superior à média de todos os valores da Resposta, calculada sem incluir esse valor, que é de 555,87. O aumento no valor da D_i é de mais de 36% com respeito à média obtida com as outras configurações. Esse valor da diluição é a melhor Resposta dentro da área experimental.

6.1.4. Metodologia de Superfície de Resposta.

Para começar a procura do ponto ótimo de operação do sistema é imprescindível obter o modelo matemático da melhor resposta na área experimental. Uma vez identificados os fatores significativos é fácil definir o modelo matemático que represente a Resposta usando a equação 4.15. No caso desta pesquisa resultou em:

$$\hat{Y} = 575,75 + 55,625 * x_1 + 28,875 * x_2 + 85,625 * x_3 - 95,5 * x_4 + 3,25 * x_1x_2 + 7,5 * x_1x_3 - 9,625 * x_1x_4 + 5,5 * x_2x_3 - 5,125 * x_2x_4 - 13,625 * x_3x_4$$

onde: x_1 , x_2 , x_3 e x_4 são as variáveis codificadas dos fatores A, B, C e D, respectivamente.

Posteriormente, é necessário avaliar o ajuste do modelo, ou seja, se o modelo descreve adequadamente a Resposta, através da análise dos resíduos do modelo, lembrando que os resíduos são a diferença entre os valores simulados e os valores calculados pelo modelo para as mesmas condições de experimentação (equação 4.16).

Na tabela 6.15 são mostrados os valores de D_i calculados com o modelo ($\hat{Y}$) para cada combinação de níveis dos fatores. Para sua posterior comparação com os valores obtidos das simulações (Y), é necessário que esses valores tenham sido calculados usando a mesma ordem da matriz de experimentação usada nas simulações.

Um primeiro critério para avaliar a qualidade do ajuste é observar a forma em que esses valores de resíduos são representados no Gráfico de Probabilidade Normal de Resíduos, no Gráfico de Resíduos vs. Predição e no gráfico de Resíduos vs. Observação (Figura 6.5, Figura 6.6 e Figura 6.7).

Tabela 6.15. Valores da Resposta simulada (Y), valores da Resposta com o modelo ($\hat{Y}$) e Resíduos do modelo ε (4 fatores).

Rodada	Diluição Inicial (Y)	Diluição Inicial ($\hat{Y}$)	Resíduos (ε)	Rodada	Diluição Inicial (Y)	Diluição Inicial ($\hat{Y}$)	Resíduos (ε)
1	461	478,5	-17,5	9	481	472,75	8,25
2	517	524,75	-7,75	10	672	661,5	10,5
3	650	661,5	-11,5	11	745	734,01	11,01
4	348	354,75	-6,75	12	813	800,5	12,5
5	874	886,01	-12,01	13	433	425,25	7,75
6	564	573,3	-9,3	14	647	638,25	8,75
7	530	539,5	-9,5	15	391	384,75	6,25
8	587	608,25	-21,25	16	499	489,01	10,01

No GPN (Figura 6.5) os dados devem situar-se tendendo a uma reta para mostrar normalidade (Gutierrez e Vara, 2008).

Figura 6.5. Gráfico de probabilidade normal dos Resíduos.

No gráfico de dispersão da Figura 6.6 a normalidade é indicada quando os dados plotados situam-se entre os valores -2 e 2 no eixo dos resíduos e sem nenhuma estrutura visível (Gutierrez e Vara, 2008).

O terceiro gráfico pela sua parte (Figura 6.7) demonstra normalidade quando os dados não ultrapassam os limites -2 e 2, não apresentando configurações lineares constantes (crescentes ou decrescentes) e quando apresentam boa dispersão dos dados (Gutierrez e Vara, 2008).

No estudo de caso, os resíduos avaliados observam a normalidade nos três gráficos.

Figura 6.6. Gráfico de Resíduos vs. Predição ($\hat{Y}$) modelo com 4 fatores.

Figura 6.7. Gráfico de Resíduos vs. Observação (Y) com 4 fatores.

Do ponto de vista quantitativo, e quando são analisados muitos fatores, é preferível utilizar o R_{aj}^2 devido ao fato de que o R^2 é uma função não decrescente do número de regressores presentes no modelo e costuma incrementar seu valor artificialmente por cada termo que é adicionado ao modelo.

O R_{aj}^2 não obstante, é ajustado para os graus de liberdade associados às somas dos quadrados, e unicamente aumentará de valor se os termos adicionados ao modelo pertencem a fatores estatisticamente significativos. Este coeficiente é calculado como:

$$R_{aj}^2 = 1 - \left(\frac{n-1}{n-k} \right) \frac{\sum_{i=1}^n (\hat{Y}_i - Y_i)^2}{\sum_{i=1}^n (Y_i - \bar{Y})^2} \quad (6.1)$$

Geralmente, se considera um modelo adequado quando R_{aj}^2 é maior que 90% (Czitrom e Spagon, 1997).

O ajuste do modelo do estudo de caso é muito bom, com um R_{aj}^2 de 99,94% (calculado como parte da análise de resultados dentro do MINITAB), o que mostra que o modelo explica em mais de 99,9% as mudanças na Resposta, o que significa que os fatores incluídos no modelo, junto com as suas interações, são responsáveis por grande parte da variabilidade observada na Resposta. Desta forma, o efeito atribuível aos fatores não incluídos no modelo e daqueles não estudados, assim como, o efeito do erro experimental, é pequeno em comparação com o efeito dos fatores considerados.

O modelo ajustado permite prever a Resposta para quaisquer valores dos fatores, sempre que os mesmos se encontrem dentro dos limites impostos pelos níveis superior e inferior, usados nas simulações.

Uma vez concluído que na região experimental, a variação da resposta é bem representada pelo modelo matemático obtido, é possível iniciar um procedimento de busca da melhor resposta fora da área experimental.

Contudo, no caso de estudo, e embora identificada a Vazão de Efluente como o fator de maior efeito sobre a Diluição Inicial, foi necessário acrescentar outra análise antes de continuar com o método.

Em sistemas de emissários submarinos, inevitavelmente, o sistema transitará por diferentes valores de vazão de efluente durante toda a vida útil do sistema, em função do crescimento da população atendida em longo prazo. Mais que isso, os valores de vazão de efluente também oscilarão em dependência do consumo de água da população em curto prazo.

Sendo assim, otimizar a Resposta procurando o valor ótimo de vazão que otimize a resposta dentro do intervalo experimental seria pouco prático, pelo que foi ajustado outro modelo a partir dos resultados obtidos de um novo planejamento fatorial agora para 3 fatores, fixando o valor do fator Q_e no seu nível superior (valor de máxima vazão de projeto). Um sistema de emissário submarino projetado de forma ótima para a máxima vazão de projeto desenvolveria valores de D_i maiores que a do ponto ótimo do sistema durante toda sua vida útil.

Na tabela 6.16 foram reunidos os dados dos fatores como foram usados nas simulações subsequentes.

Tabela 6.16. Fatores e níveis para ajuste de novo modelo.

Fator	Nível Inferior	Nível Superior
Fator fixo d_o (m)	0,075	
Fator fixo A_V	0°	
Fator fixo A_H	Paralela	
Número de saídas, n_o	14	18
Espaçamento entre risers, e_o (m)	4	5
Profundidade da disposição P_d (m)	32	41
Fator fixo Q_e (m³/s)	0,154	
Fator fixo C_e (NMP/100ml)	$1,7 \times 10^6$	
Fator de bloco (Ambiente/ T_e (°C))	Inverno/22°C	Verão/27°C
Fator fixo h_d (m)	1	
Fator fixo s_e (psu)	1	

A nova matriz de experimentação é apresentada na figura 6.17 assim como os valores de Resposta obtidos como resultados das simulações. A partir deste momento a letra A identificará a n_o , a B identificará o e_o (m) e a letra C identificará a o P_d (m).

Tabela 6.17. Matriz de experimentação, valores de Resposta e efeitos.

Rodada	Bloque	A	B	C	Diluição Inicial
1	Inverno	14	5	40	517
2	Inverno	18	4	40	564
3	Inverno	14	4	32	348
4	Inverno	18	5	32	461
5	Verão	14	4	40	481
6	Verão	18	5	40	647
7	Verão	14	5	32	391
8	Verão	18	4	32	433
Efeito		27,5	26,2	56,5	

Como era de se esperar, os três fatores são significativos à Resposta, mas o modelo resultante é diferente do anterior. Ao retirarmos o fator com maior significância estatística (Q_e), desapareceram também as suas interações com os outros fatores, que eram as interações mais fortes e, embora os três fatores restantes continuassem sendo estatisticamente significativos, nenhum termo de interação entre eles mostrou-se significativa, pelo que também desaparecem do modelo.

Figura 6.8. Gráfico de probabilidade normal dos efeitos (3 fatores).

Contudo, é importante lembrar que essas interações ainda acontecem, apenas não são estatisticamente significativas. Agora a interação mais forte é aquela entre o número de saídas e a profundidade de disposição (ponto azul no gráfico de probabilidade normal).

Nesta nova serie de testes, o maior valor de Diluição Inicial também é obtido quando os fatores P_d (C), n_o (A) e e_o (B) são usados nos seus níveis superiores ao mesmo tempo. O caso corresponde à simulação 6 (Tabela 6.18) que resultou numa Diluição Inicial de 647, valor superior à média de todos os valores da Resposta, calculada sem incluir esse valor, que é de 456,4.

O incremento no valor da D_i é de mais de 29% com respeito à média obtida com as outras configurações. Esse valor da diluição é a melhor Resposta dentro da área experimental, limitada pelos níveis destes três fatores avaliados.

O modelo que agora prediz a resposta é um modelo de efeitos principais:

$$\hat{Y} = 480,25 + 46 * x_1 + 23,75 * x_2 + 72 * x_3$$

A análise de resíduos do modelo revela um ajuste adequado. Na Tabela 6.18 aparecem os resíduos calculados e a seguir os gráficos da análise de resíduos. O Coeficiente de determinação ajustado R_{aj}^2 é de 96,96% (calculado como parte da análise de resultados dentro do MINITAB).

Tabela 6.18. Valores da Resposta simulada (Y), valores da Resposta com o modelo ($\hat{Y}$) e Resíduos do modelo ε (3 fatores).

Rodada	Diluição Inicial (Y)	Diluição Inicial ($\hat{Y}$)	Resíduos (ε)	Rodada	Diluição Inicial (Y)	Diluição Inicial ($\hat{Y}$)	Resíduos (ε)
1	517	530,1	-13,1	5	481	482,5	-1,5
2	564	574,5	-10,5	6	647	622,0	25,0
3	348	338,5	9,5	7	391	386,0	5,0
4	461	478,1	-17,1	8	433	430,5	2,5

Figura 6.9. GPN de Resíduos modelo com 3 fatores

Figura 6.10. Gráfico de Resíduos vs. Predição ($\hat{Y}$) modelo com 3 fatores.

Figura 6.11. Gráfico de Resíduos vs. Observação (Y) com 3 fatores.

Agora sim, o modelo está em função de fatores que podem ser modificados de forma tal a otimizar a Resposta durante toda a vida útil do sistema.

6.1.4.1. Condições de operação mais próximas da ótima.

Como foi explicado na metodologia estatística, para avançar rapidamente para a região do ponto ótimo, e quando o objetivo é maximizar a Resposta, utiliza-se o Método de Máxima Inclinação ou Gradiente Ascendente. Aplicando o método e utilizando o modelo antes definido, está na hora de identificar a direção da melhor resposta e o passo com o qual serão modificados os valores dos níveis dos fatores (passo da experimentação) nessa direção.

Os três fatores têm um efeito positivo sobre a Diluição Inicial, representados pelo valor positivo dos seus coeficientes no modelo de regressão pelo que, para mover-se no sentido do incremento da resposta, é necessário aumentar o valor do nível dos fatores.

Para calcular o passo da experimentação é imprescindível definir primeiramente qual dos fatores significativos terá um passo unitário em unidades codificadas. Partindo desse, e com a ajuda da relação entre os coeficientes do modelo, será possível calcular o passo dos fatores restantes.

Embora seja recomendado, que o passo unitário em unidades codificadas seja atribuído ao fator mais importante, no caso P_d , neste estudo de caso particular isto não é possível, devido às características específicas do fator n_o .

O fator quantidade de saídas (n_o) tem que ser considerado um número exato e par (difusor com duas saídas por *risers* com distribuição em forma de T) diferente da profundidade de disposição ou do espaçamento entre *risers* que podem tomar quase qualquer valor. Devido a isto, o passo unitário em unidades codificadas foi atribuído ao fator n_o , lembrando que um passo unitário equivale à metade da diferença entre o nível superior e inferior do fator em unidades naturais.

Sendo assim, se os níveis naturais de X_1 , ou seja, do fator n_o , são 18 e 14, a metade do intervalo experimental utilizado para X_1 é igual a $\frac{18-14}{2} = 2$, e esse seria o passo de incremento em unidades naturais. Logo, para a quantidade de saídas $\Delta x_1 = 1$ (passo em unidades codificadas) e $\Delta X_1 = 2$ (passo em unidades naturais).

Agora, para calcular o passo do fator e_o , Δx_2 , divide-se o coeficiente da variável x_2 pelo coeficiente da variável x_1 e se multiplica por Δx_1 :

$$\Delta x_2 = \frac{\beta_2}{\beta_1} \Delta x_1 = \frac{23,75}{46} * 1 = 0,52$$

e, se a metade do intervalo experimental utilizado para X_2 é igual a $\frac{5-4}{2} = 0,5$ m, podemos calcular o passo em unidades naturais de X_2 como $\Delta X_2 = 0,5 * 0,52 = 0,26$ m.

O mesmo procedimento é empregado para o fator P_d ou X_3 .

$$\Delta x_3 = \frac{\beta_3}{\beta_1} \Delta x_1 = \frac{72}{46} * 1 = 1,56$$

Se a metade do intervalo experimental utilizado para X_3 é igual a $\frac{40-32}{2} = 4$ m, podemos calcular o passo em unidades naturais de X_3 como $\Delta X_3 = 4 * 1,56 = 6,24$ m.

Com os passos calculados e conhecida a direção da melhor resposta, foi construída a tabela do caminho de máxima inclinação da Resposta, que define os níveis em que serão testados os fatores nos próximos testes, na procura de um ponto de mudança de tendência ou ponto estacionário (Tabela 6.19).

Tabela 6.19: Caminho de máxima inclinação da Resposta.

	Variáveis Codificadas			Variáveis Naturais			Resposta Y
	x1	x2	x3	X1	X2	X3	
Centro (*)	0	0	0	16	4,5 m	36 m	472
Passo (P)	1	0,52	1,56	2	0,26 m	6,24 m	
Teste 1	1	0,52	1,56	18	4,76 m	42,24 m	654
Teste 2	2	1,04	3,12	20	5,02 m	48,48 m	844
Teste 3	3	1,56	4,68	22	5,28 m	54,72 m	1070
Teste 10	10	5,2	10,92	36	7,1 m	98,4 m	3480

(*) Valor intermediário entre o nível superior e o nível inferior dos fatores

Seguindo a tabela, foram realizados até 10 simulações e os resultados mostraram que a relação entre os fatores significativos e a Resposta é um plano ascendente.

Considerando os resultados, o fato de emissários serem empreendimentos caros e que o objetivo desses sistemas não é só alcançar a máxima Diluição Inicial possível, mas também, aquela que respeite uma combinação de fatores econômicos, físicos e ambientais, foi necessário neste ponto achar limites complementares para a análise.

Segundo foi colocado, o Canal de São Sebastião tem profundidades máximas em torno de 45 metros e já no teste 2 (Tabela 6.19) a profundidade do teste supera a profundidade possível no canal. No teste 1, com P_d de 42,24 m, n_o igual a 18 e e_o igual a 4,76 m foi obtido um valor de Resposta de 654, levemente superior ao valor obtido para a Melhor Resposta na área experimental que foi de 647.

Sendo assim, pode-se afirmar que a Melhor Resposta é quase tão boa quanto a do Ponto Ótimo deste sistema, pelo que pode-se considerar que a melhor resposta na área experimental é a melhor resposta na área operacional deste sistema.

Seguindo a direção do incremento da Diluição Inicial, ou seja, aumentando o valor do nível dos fatores, segundo foi definido, a Resposta cresce infinitamente. A Superfície de Resposta é um plano para qualquer combinação dos três fatores como no caso do NRFIELD.

Nas figuras 6.12, 6.13 e 6.14 são mostradas a três superfícies.

Figura 6.12. Superfície de Resposta NRFIELD: Diluição Inicial vs n_o e e_o (m).

Surface Plot Diluição Inicial vs Espaçamento entre risers e Número de orifícios

Figura 6.13. Superfície de Resposta NRFIELD: Diluição Inicial vs n_o e $P_d(m)$.

Surface Plot Diluição Inicial vs Profundidade de descarga e Número de orifícios

Figura 6.14. Superfície de Resposta NRFIELD: Diluição Inicial vs P_d e e_o .

Surface Plot Diluição Inicial vs Profundidade de descarga e Espaçamento

6.2. Modelo UM3.

6.2.1. Análise de sensibilidade.

A análise de sensibilidade do modelo UM3 também foi realizada aplicando o método *One fator at a time (OFAT)* e usando os mesmos dados de entrada que foram usados no NRFIELD.

Contudo, e considerando as particularidades do modelo UM3, algumas variações precisaram ser feitas. Desta vez foram realizadas 20 simulações ao todo: a simulação Base e uma simulação para cada um dos fatores analisados, para verão e para inverno, por razões que são explicadas na análise dos resultados.

Por outro lado, embora o modelo UM3 possa ser usado na simulação de emissários de duas saídas por *risers* tanto quanto o NRFIELD, o UM3 assume sempre saídas simples. Quando utilizado para a previsão da Diluição Inicial em sistemas com duas saídas por *riser*, como é o caso do Itaquanduba, o indicado é usar o número de saídas totais, mas com a metade do espaçamento real. Desta forma os resultados de ambos os modelos, para as mesmas condições de simulação, são muitos similares.

6.2.1.1. Análise dos resultados.

Os dados de entrada ao modelo assim como os resultados podem ser consultados na Tabela 6.20.

Tabela 6.20. Resultados da análise de sensibilidade.

Simulação		Diluição Inverno	Mudança (%)	Diluição Verão	Mudança (%)
1	Base	656,0		227,3	
2	d_o (0,08 m)	656,7	0,1	227,8	0,2
3	A_V (90°)	669,8	2,1	231,8	2,0
4	A_H (Perpendicular)	415,4	-36,7	202,4	-11,0
5	n_o (18)	682,9	4,1	238,7	5,0
6	e_o (5 m) [2,5m]	682,2	4,0	238,5	4,9
7	P_d (40 m)	839,4	28,0	222,4	-2,2
8	Q_e (0,154 m ³ /s)	431,0	-34,3	142,9	-37,1
9	T_e (27 °C)	678,6	3,4	233,9	2,9
10	C_e (7,5 x 10 ⁷ NMP/100ml)	656,0	0,0	227,3	0,0

Dos 9 fatores avaliados, 7 têm alguma influência sobre a Diluição Inicial. Os fatores concentração do efluente C_e e diâmetro de saída d_o mostraram não ter influência alguma sobre a D_i . Comportamento similar ao encontrado com o modelo NRFIELD.

A maioria das variáveis apresentou a mesma tendência de influência sobre a Resposta que a encontrada com o NRFIELD, exceto na variável profundidade de descarga, devido à estratificação do corpo receptor durante o verão.

Durante o inverno, o corpo receptor tem características quase homogêneas de temperatura e salinidade, ou seja, o corpo não apresenta estratificação. Neste caso é possível ver que o incremento na profundidade de disposição do efluente influi

positivamente na D_i , pois o efluente tem maior percurso até a superfície para diluir-se.

Durante o verão, quando a estratificação é máxima, um incremento na profundidade é contraproducente para a Diluição Inicial visto que, quanto mais profundo o corpo receptor maior a estratificação, o que acaba retendo a pluma de efluente a certo nível de densidade do corpo receptor, longe da superfície, dificultando a diluição.

O modelo NRFIELD, concebido sobre experiências realizadas em ambientes estratificados, consegue lidar de forma mais consistente com esse fenômeno, mostrando resultados que não interferem na análise estatística. No UM3, no entanto, o fato de que no inverno a Resposta é influenciada positivamente pela profundidade de descarga, e no verão de forma negativa, confunde o significado dessa variável para a D_i , dificultando a aplicação do método estatístico.

Devido a isto, foi decidido realizar as simulações subsequentes em ambientes mais homogêneos, apenas mudando um pouco os perfis de salinidade do meio receptor no caso do verão, conservando apenas o efeito de estratificação por temperatura. Segundo Roberts et al. (2010), a diluição inicial é muito mais sensível à estratificação salina, fato constatado durante estas simulações.

Com a experiência obtida na análise realizada usando o modelo NRFIELD, e valorando os resultados da análise de sensibilidade com o modelo UM3, foram definidos os fatores neste novo caso. Foram negligenciados o diâmetro de saída e a concentração do efluente (com nenhuma influência sobre a Resposta), assim como a temperatura do efluente e a vazão de efluente (pelos motivos explanados na análise com o NRFIELD).

Para a aplicação da metodologia ao modelo UM3, foram considerados como fatores, apenas aquelas variáveis geométricas que mostraram influência sobre a Resposta.

6.2.2. Experimentos Exploratórios e escolha dos fatores significativos

Para realizar o *screening experiments* foi utilizado um planejamento fatorial fracionário com $p = 1$ (ou $\frac{1}{2}$ fração) de resolução V, resultando em $2^{5-1} = 16$ rodadas.

Num planejamento com resolução V, os efeitos dos fatores principais e das interações de 2ª ordem não são confundidos entre eles, apenas poderão estar confundidos com efeitos de interações de ordem superior (3ª e 4ª).

Neste caso, o padrão de confusão é: (A-BCDE), (B-ACDE), (C-ABDE), (D-ABCE), (E-ABCD), (AB-CDE), (AC-BDE), (AD-BCE), (AE-BCD), (BC-ADE), (BD-ACE),

(BE-ACD), (CD-ABE), (CE-ABD) e (DE-ABC). Sendo que os fatores são representados como mostrado na tabela 6.21.

Tabela 6.21. Nomes dos fatores e as letras correspondentes com as quais serão identificados nos gráficos e tabelas.

A	Ângulo vertical de descarga $A_V(^{\circ})$	D	Espaçamento entre <i>risers</i> , e_o (m)
B	Ângulo horizontal de descarga $A_H(^{\circ})$	E	Profundidade da disposição P_d (m)
C	Número de saídas, n_o		

Este planejamento, com suas 16 rodadas, fornecerá os dados necessários para calcularmos os efeitos dos 5 fatores e das 10 interações de 2ª ordem (AB, AC, AD, AE, BC, BD, BE, CD, CE, DE) que são os efeitos mais importantes.

Na tabela 6.22 é mostrada a matriz de planejamento das simulações e os resultados das mesmas.

Tabela 6.22. Matriz de planejamento e resultados.

Rodada	Bloco	A	B	C	D	E	Diluição Inicial
1	Inverno	0	Paralela	14	4	40	529,9
2	Inverno	90	Paralela	14	5	40	584,9
3	Inverno	90	Paralela	18	4	40	581,6
4	Inverno	0	Paralela	18	5	40	599,1
5	Inverno	90	Perpendicular	18	5	40	624,0
6	Inverno	90	Perpendicular	14	4	40	550,1
7	Inverno	90	Paralela	18	5	32	470,9
8	Inverno	90	Perpendicular	14	5	32	437,9
9	Verão	90	Perpendicular	18	4	32	435,1
10	Verão	0	Paralela	18	4	32	414,6
11	Verão	0	Paralela	14	5	32	409,6
12	Verão	90	Paralela	14	4	32	406,8
13	Verão	0	Perpendicular	18	5	32	258,3
14	Verão	0	Perpendicular	14	4	32	234,1
15	Verão	0	Perpendicular	18	4	40	321,4
16	Verão	0	Perpendicular	14	5	40	323,6

Com uma resolução V, os resultados deste planejamento são tão consistentes quanto os que seriam obtidos num planejamento completo para 5 fatores, não precisando experimentos confirmatórios.

Os valores de D_i foram introduzidos de volta no MINITAB e analisados, considerando um intervalo de confiança de 95% (margem de erro de 5%), nível de significância de 0,05.

Na tabela 6.23 foram colocados os valores dos efeitos dos fatores e da interação que resultaram significativos. Na figura 6.15 pode ser consultado o gráfico de probabilidade normal dos efeitos.

Tabela 6.23. Efeitos dos fatores, e interações de 2ª, ordem significativos (*screening experiments* Modelo UM3).

Fatores	Efeito	Fatores	Efeito
A	125,09	E	130,91
B	-101,61		
C	28,51	Interação	Efeito
D	29,36	AB	102,34

6.2.2.1. Análise dos resultados e escolha dos fatores significativos.

Segundo o gráfico de probabilidade normal de efeitos (Figura 6.15), todos os fatores são significativos para a Resposta, não sendo possível descartar nenhum deles para a construção do modelo de predição da mesma.

Figura 6.15. Gráfico de probabilidade normal dos efeitos.

Contudo, como pode ser observado nas figuras 6.15 e 6.16, os fatores mais importantes são a Profundidade de descarga e os ângulos de descarga, tanto o Vertical quanto o Horizontal. Os fatores n_o e e_o também mostraram ter um efeito significativo sobre a Resposta, mas substancialmente inferior.

A análise dos efeitos revela que a média do incremento na D_i , quando a profundidade de descarga passa do seu nível inferior ao seu nível superior é de 130,91 unidades sendo o efeito mais forte. Já quando o fator A_v passa do nível

inferior (descarga paralela ao fundo) ao nível superior (descarga perpendicular ao fundo) a D_i aumenta em média 125,09 unidades.

Figura 6.16. Gráfico de efeitos principais.

Já no caso do A_H , essa influência é negativa, ou seja, quando este fator passa do seu nível inferior (descarga paralela à corrente) para o seu nível superior (descarga perpendicular à corrente) a Resposta diminui em média -101,61 unidades. A interação entre os fatores A_V e A_H também é significativa.

Analisando os efeitos, pode-se concluir que o maior valor de Resposta deverá ser obtido quando os fatores A, C, D e E estejam nos seus níveis superiores e o fator B no seu nível inferior. Ou seja, quando A_V seja 90° , n_o seja 18, e_o seja 5 m, P_d seja 40 m e o A_H seja 0° , ou descarga paralela à corrente, será obtida a Melhor Resposta na área experimental. Não obstante, essa combinação não foi testada no *screening* devido ao fato do planejamento ter sido apenas uma fração de todas as possíveis combinações.

Contudo, uma simulação posterior, testando essa combinação resultou num valor de D_i de 624 unidades. Ao consultar a tabela 6.23 é possível comprovar, que embora na rodada número 5, o fator B interveio no seu nível superior (ou seja, descarga perpendicular à corrente - pior nível) o valor da Resposta é o mesmo.

Para verificar esse comportamento foram calculados, usando os valores da tabela 6.23, os valores médios da Resposta para: A_V (90°) e A_H (0°) (simulações: 2, 3, 7 e 12) e A_V (90°) e A_H (90°) (simulações: 5, 6, 8 e 9) e os resultados foram muito similares, 511,1 e 511,8, respectivamente. Como foi realizada apenas uma fração das possíveis combinações de níveis dos fatores (planejamento fatorial fracionário), esses valores não são idênticos como era de se esperar. Isto pode ser entendido ao observar-se o gráfico da interação entre os ângulos de descarga (Figura 6.17).

Ao observar-se a figura 6.17 é possível verificar que como o valor médio da Diluição Inicial das simulações em que o fator A_V interveio com valor 90° é praticamente o mesmo para ambos os níveis do fator A_H , no gráfico, ambas as linhas se unem no ponto correspondente ao nível superior do ângulo vertical. Se tivesse sido realizada uma réplica completa, o valor médio da resposta para ambos os níveis seria exatamente igual.

Figura 6.17. Gráfico da interação entre A_v e A_H .

Novos valores de A_H foram testados, dentro da faixa possível, e foi constatado que para quaisquer valores de ângulo horizontal, exemplo: 45° e 60° dentro da área experimental, ou 135° e 180° fora da área experimental, o valor de Resposta manteve-se constante, mostrando que no UM3, sempre que a descarga seja perpendicular ao fundo, o ângulo horizontal não interfere no resultado.

Isto é justificado pelo fato que quando a descarga é vertical ao fundo, logicamente o ângulo de descarga respeito às correntes preferenciais dentro do modelo fica inabilitado.

Do mesmo jeito, ao analisarmos o ângulo vertical de descarga, comprova-se que qualquer valor de ângulo possível, diferente de 90° , devolve valores inferiores de Resposta que aquele obtido como melhor resposta.

Resumindo, em função dos efeitos destes dois fatores é possível afirmar que para sistemas de emissários submarinos com difusores de saídas simples uma descarga vertical ao fundo seria mais eficiente que uma descarga paralela ao fundo e paralela às correntes preferenciais.

Quando, como no estudo de caso, o ângulo vertical (descarga respeito ao fundo) é 0° (descarga paralela ao fundo), os maiores valores de D_i são obtidos quando a

descarga é paralela às correntes preferenciais (Figura 6.17).

Como no estudo de caso, o difusor é do tipo T, descarga paralela ao fundo e paralela à corrente preferencial, os fatores ângulos de descarga foram fixados nos seus melhores níveis e foi realizado um novo planejamento fatorial completo com três fatores para a construção do modelo de predição (Tabela 6.24). Agora os fatores são representados como: A - n_o , B - e_o e C - P_d .

Desta vez, os resultados mostraram os três fatores avaliados como significativos, mas sem interação (Figura 6.18). Os valores dos efeitos significativos são mostrados na Tabela 6.25.

Tabela 6.24. Matriz do planejamento fatorial completo para três fatores.

Rodada	Bloco	A	B	C	Diluição Inicial
1	Inverno	14	4	40	529,9
2	Inverno	18	5	40	599,0
3	Inverno	18	4	40	581,6
4	Inverno	14	5	40	584,9
5	Verão	18	5	32	470,9
6	Verão	14	5	32	437,9
7	Verão	18	4	32	435,1
8	Verão	14	4	32	406,8

Tabela 6.25. Efeitos dos fatores significativos.

Fatores	Efeito
A	32,98
B	36,02
C	147,47

Figura 6.18. Gráfico de probabilidade normal dos efeitos (MINITAB).

A Profundidade de descarga continua sendo o fator mais influente, seguido do Espaçamento entre risers e do Número de saídas, nessa ordem, embora com efeitos muito próximos. Nas tabelas 6.26 e 6.27 (a) e (b) pode-se observar a variação média da D_i para cada nível de cada fator.

Tabela 6.26. Valores médios da Resposta nos diferentes níveis do fator P_d .

Profundidade de Descarga	Diluição Inicial Média
Nível Superior	585,2
Nível Inferior	437,7

Tabela 6.27. Valores médios da Resposta nos diferentes níveis do fator e_o e n_o .

Espaçamento entre risers	Diluição Inicial Média	Número de Saídas	Diluição Inicial Média
Nível Superior	529,4	Nível Superior	527,9
Nível Inferior	493,4	Nível Inferior	494,9

(a)

(b)

Para os três fatores, os maiores valores de Diluição Inicial do sistema são alcançados quando eles intervêm no seu nível superior.

Com os resultados desse grupo de simulações, é possível passar à análise de superfície de respostas.

6.2.3. Metodologia de Superfície de Resposta.

O modelo que descreve a Resposta neste caso é:

$$\hat{Y} = 511,41 + 16,49 * x_1 + 18,01 * x_2 + 73,74 * x_3$$

Para avaliar o ajuste do modelo foram calculados os valores de $\hat{Y}$. Na tabela 6.28 são mostrados os valores de D_i calculados com o modelo para cada uma das combinações de níveis dos fatores do planejamento fracionário utilizado. Nas figuras 6.19, 6.20 e 6.21 são analisados os resíduos no intuito de avaliar o ajuste do modelo à Resposta.

Tabela 6.28. Valores da Resposta simulada (Y), da Resposta do modelo ($\hat{Y}$) e os Resíduos ε .

Rodada	Diluição Inicial (Y)	Diluição Inicial ($\hat{Y}$)	Resíduos (ε)	Rodada	Diluição Inicial (Y)	Diluição Inicial ($\hat{Y}$)	Resíduos (ε)
1	550,1	550,7	-0,55	5	470,9	472,2	-1,27
2	624,0	619,7	4,35	6	437,9	439,2	-1,29
3	581,6	583,6	-2,03	7	435,1	436,2	-1,05
4	584,9	586,7	-1,77	8	406,8	403,2	3,63

No caso, os resíduos avaliados observam a normalidade nos três gráficos (6.19, 6.20 e 6.21), e o R^2_{aj} é de 99,88% (calculado como parte da análise de resultados dentro do MINITAB), mostrando que o modelo explica em mais de 99% as mudanças na Resposta.

Figura 6.19. Gráfico de Probabilidade Normal de Resíduos (MINITAB).

Figura 6.20. Gráfico de Resíduos vs. Predição ($\hat{Y}$).

Figura 6.21. Gráfico de Resíduos vs. Observação (Y).

Esse modelo permite prever a Resposta para quaisquer valores dos fatores dentro da área experimental, logo é possível agora aplicar o Método do Gradiente Ascendente na busca da melhor resposta fora da área experimental, ou o melhor ponto de operação.

6.2.3.1. Obtenção das condições de operação mais próximas da ótima.

Para calcular agora o passo da experimentação é imprescindível definir primeiramente qual dos fatores significativos terá um passo unitário em unidades codificadas.

Como já explanado, embora seja recomendado, que o passo unitário em unidades codificadas seja atribuído ao fator mais importante, no caso P_d , no caso de estudo isto não é possível devido às características específicas do fator n_o .

No UM3, o fator quantidade de saídas (n_o), embora não precise ser um número par, precisa ser um número inteiro (considera o difusor com saídas simples equidistantes). Devido a isto, o passo unitário em unidades codificadas deve ser atribuído ao fator n_o .

Contudo, como o passo unitário em unidades codificadas equivale à metade da diferença entre o nível superior e inferior do fator em unidades naturais, um passo unitário para o Número de saídas representa um passo em unidades naturais igual a 2. Não obstante, como no UM3 isto não é necessário, assumiu-se um passo

$\Delta x_1 = 0,5$ (metade do passo unitário) que equivale a um $\Delta X_1 = \frac{18-14}{2} * 0,5 = 1$. Logo, para o fator n_o a $\Delta x_1 = 0,5$ e $\Delta X_1 = 1$.

Seguidamente, o passo do fator e_o , Δx_2 seria:

$$\Delta x_2 = \frac{\beta_2}{\beta_1} \Delta x_1 = \frac{18,01}{16,49} * 0,5 = 0,54$$

e,

$$\Delta X_2 = \frac{5-4}{2} * 0,54 = 0,27 \text{ m}$$

O mesmo procedimento é empregado para o fator P_d ou X_3 .

$$\Delta x_3 = \frac{\beta_3}{\beta_1} \Delta x_1 = \frac{73,74}{16,49} * 0,5 = 2,23$$

e,

$$\Delta X_3 = \frac{40-32}{2} * 2,23 = 8,9 \text{ m}$$

Com os passos calculados e conhecida a direção da melhor resposta, foi construída a tabela do caminho que define os níveis em que serão testados os fatores nos próximos testes (Tabela 6.29).

Tabela 6.29: Caminho de máxima inclinação da Resposta. Modelo UM3.

	Variáveis Codificadas			Variáveis Naturais			Resposta Y
	x1	x2	x3	X1	X2	X3	
Centro (*)	0	0	0	16	4,5 m	36 m	451,0
Passo (P)	0,5	0,54	2,23	1	0,26 m	8,9 m	
Teste 1	0,5	0,54	2,23	17	4,77 m	44,9 m	628,8
Teste 2	1,0	1,08	4,46	18	5,04 m	53,8 m	680,2
Teste 3	1,5	1,62	6,69	19	5,31 m	62,7 m	734,7
Teste 10	5,0	5,33	17,96	26	7,20 m	125,0 m	971,8

(*) Valor intermediário entre o nível superior e o nível inferior dos fatores

Seguindo a tabela, foram realizadas até 10 simulações e os resultados mostraram, que assim como no modelo NRFIELD, a relação entre qualquer dos três fatores significativos e a Resposta é um plano. Devido a isto, quando a direção do melhor incremento da Diluição Inicial é seguida, ou seja, aumentando o valor do nível dos fatores segundo os seus passos respectivos, a Resposta cresce infinitamente (Figuras 6.22, 6.23 e 6.24).

Comparando os resultados ao caso de estudo, é possível observar que no teste 2 da tabela 6.29, a profundidade atinge um valor incompatível com as profundidades no CSS e o projeto do experimento (altura do riser).

Contudo, no teste 1 com P_d de 44,90 m, n_o igual a 17 e e_o igual a 4,77 m foi obtido um valor de Resposta de 628,8, superior apenas em 4,8 unidades ao valor obtido para a Melhor Resposta na área experimental que foi de 624. A Melhor Resposta dentro da área experimental é tão boa quanto a do Ponto Ótimo deste sistema.

Pode-se considerar que a melhor resposta na área experimental é a melhor resposta na área operacional deste sistema.

Figura 6.22. Superfície de Resposta UM3: Diluição Inicial vs n_o e e_o (MINITAB).

Surface Plot Diluição Inicial vs Espaçamento e Número de saídas

Figura 6.23. Superfície de Resposta UM3: Diluição Inicial vs n_o e P_d (MINITAB).

Surface Plot Diluição Inicial vs Profundidade de descarga e Número de saídas

Figura 6.24. Superfície de Resposta UM3: Diluição Inicial vs P_d e e_o (MINITAB).

Surface Plot Diluição Inicial vs Profundidade de descarga e Espaçamento

6.3. Proposta de utilização dos resultados do estudo.

A utilização do conhecimento obtido pode simplificar o projeto de um sistema de emissário submarino e otimizar a D_i dentro da área operacional de cada sistema projetado. A seguir é proposto um simples roteiro de como poderiam ser aplicados os resultados do estudo desenvolvido nesta tese.

O primeiro passo seria o projeto do sistema do emissário usando a metodologia usual. O projeto adequado do emissário, considerando os critérios necessários, como foi colocado no capítulo 4 deste trabalho, fornecerá o diâmetro do emissário e seu comprimento mínimo, dois parâmetros fundamentais para a aplicação do método.

Passos:

1. Definir os níveis do fator P_d :

O comprimento mínimo do emissário fixa, segundo a batimetria do lugar da disposição, a profundidade de descarga. Como na construção de um emissário, o comprimento da tubulação principal detém grande parte do custo do sistema, ainda sabendo que a profundidade de descarga é dos três fatores geométricos significativos, o mais importante para a Diluição Inicial, deve ser mantido no valor mínimo necessário, e o valor de P_d correspondente será considerado o nível superior deste fator.

Para definir o nível inferior deste fator deve-se considerar que como o objetivo da otimização do sistema, seria encontrar a melhor combinação do número de saídas e

do espaçamento entre *risers*, para uma profundidade determinada (profundidade de descarga de projeto), o passo de incremento no fator profundidade deve ser pequeno, para que a profundidade máxima não seja superada no primeiro teste do método do gradiente.

Uma diferença de 3 metros entre os níveis, superior e inferior, deste fator é suficiente para detectar e avaliar o seu efeito sobre a Resposta, e permite que o passo de incremento seja pequeno.

2. Definir os níveis do fator e_o :

A profundidade de descarga está relacionada ao espaçamento entre *risers* pela relação (Eq. 5.8): $\frac{P_d}{e_o} = (5 \div 10)$. Usando essa relação e os níveis do fator P_d , é possível calcular os dois níveis do fator e_o , considerando o valor meio da relação (8), valor comumente usado.

Desta forma os níveis do espaçamento seriam: $e_o^+ = \frac{P_d^+}{8}$ e $e_o^- = \frac{P_d^-}{5}$.

3. Definir os níveis do fator n_o :

O fator n_o está relacionado à área da seção transversal do emissário A_E e à área da seção transversal dos orifícios de saída A_o , pela relação das áreas (Eq. 5.5): $\frac{n_o * A_o}{A_E} = (0,33 \div 0,66)$. Usando os diâmetros de saídas recomendados na literatura, segundo o tipo de efluente e demais considerações, podem ser selecionados dois valores de diâmetro, e calcular o número de saídas correspondentes segundo a relação das áreas.

Como o fator n_o é aquele fator ao qual é atribuído um passo unitário no método de otimização, no modelo NRFIELD, para assegurar que o passo em unidades naturais seja igual a 2, a diferença entre os níveis do fator deve ser 4. No caso, do modelo UM3 no qual o passo em unidades codificadas é 0,5, para garantir um passo em unidade naturais de 1, a diferença entre os níveis pode ser 2.

4. Definir a matriz do planejamento 2^3 e executar as simulações.

5. Calcular os efeitos e ajustar o modelo.

$$\text{Modelo: } \hat{Y} = \beta_0 + \beta_1 * x_1 + \beta_2 * x_2 + \beta_3 * x_3$$

Sendo:

β_0 - valor médio da resposta

β_i - a metade do efeito do fator i correspondente

6. Aplicar o Método do Gradiente Ascendente.

A variável Q_e deve ser avaliada no seu valor máximo de projeto e as simulações deverão ser feitas para o verão, pior condição do corpo receptor no que diz respeito à Diluição Inicial, ou aplicar o princípio da formação de blocos, realizando 4 simulações no bloco verão e 4 no bloco inverno.

Os valores dos outros parâmetros de entrada do Visual Plumes acompanharão os critérios antes discutidos. A melhor resposta obtida por este caminho será o máximo valor que o sistema alcançará, para quaisquer condições ambientais e de vazão de efluente, e pode ser considerado o ponto ótimo do sistema projetado.

6.3.1. Metodologia aplicada no estudo de caso.

Para a compreensão do método proposto, será agora aplicado ao estudo de caso e utilizando o modelo NRFIELD.

1. Definir os níveis do fator P_d :

O Itaquanduba foi projetado para dispor o efluente a 800 metros da costa, pelo que a sua descarga acontece a 37 metros de profundidade local. Com *risers* de 1 metro, a descarga efetiva acontece a 36 metros. Sendo assim, foram considerados os valores, 30 m e 36 m, nível inferior e superior deste fator, respectivamente.

2. Definir os níveis do fator e_o :

$$e_o^- = \frac{33}{8} = 3,3 \text{ m}$$

$$e_o^+ = \frac{36}{8} = 3,6 \text{ m}$$

3. Definir os níveis do fator n_o :

A área da seção transversal da tubulação principal do Itaquanduba é igual a 0,1415 m² e, considerando que valores de 0,08 m e 0,07 m são diâmetros típicos para as saídas, calculam-se os valores de números de saídas correspondentes com a mesma relação de áreas do Itaquanduba que é de 0,5 (valor muito usado em projetos deste tipo) (SABESP, 2003).

Os valores de A_o são: 0,0038 m² para o diâmetro 0,07 m e 0,005 m² para o diâmetro 0,08 m. Os níveis do fator número de saídas são:

$$n_o = \frac{0,5 * A_E}{A_o}$$

$$n_o^- = 14,15 = 14$$

$$n_o^+ = 18,61 = 18.$$

4. Definir a matriz do planejamento 2³ e executar as simulações.

Rodada	A	B	C	Diluição Inicial
1	14	4,1	33	375
2	18	4,1	33	454
3	14	4,5	33	390
4	18	4,5	33	473
5	14	4,1	36	417
6	18	4,1	36	505
7	14	4,5	36	435
8	18	4,5	36	527

5. Calcular os efeitos e ajustar o modelo.

Fator	Efeito	Coeficiente
A	86	43,0
B	18,5	9,3
C	48	24,0

$$\text{Modelo: } \hat{Y} = 447 + 42,8 * x_1 + 9,3 * x_2 + 24 * x_3$$

6. Aplicar o Método do Gradiente Ascendente.

	Variáveis Codificadas			Variáveis Naturais			Resposta Y
	x1	x2	x3	X1	X2	X3	
Centro (*)	0	0	0	16	4,30	34,5	448
Passo (P)	1	0,2	0,6	2	0,04	0,84	
Teste 1	1	0,2	0,6	18	4,34	35,3	507
Teste 2	2	0,4	1,2	20	4,38	36,1	568

(*) Valor intermediário entre o nível superior e o nível inferior dos fatores

Para a melhor compreensão e comparação dos resultados, foi construída uma tabela, mostrada na continuação, que resume os resultados das várias etapas do estudo.

			%
Itaquanduba (16/4,5m/36m)			472
Melhor Resposta na área experimental = Ponto Ótimo no NRFIELD (18/5m/40m)			37,1
Teste	Usando a Metodologia		
1	(18/4,37m/35,3m)	507	7,4
2	(20/4,41m/36,2m)	568	20,3
Melhor configuração (20/4,5m/36m)			20,8

O primeiro valor na tabela, é o valor da Resposta prevista pelo NRFIELD para a configuração real do Itaquanduba (16/4,5m/36m) que foi de 472 (mostrada com anterioridade na Tabela 6.19).

Como resultado da utilização do Planejamento de Experimentos e da otimização desse resultado, por meio da Metodologia de Superfície de Resposta, foi concluído que a melhor resposta na área experimental poderia ser considerada também o valor ótimo para o estudo de caso. O valor obtido foi de 647 com uma configuração de 18/5m/40m, valor 37% superior ao valor obtido com a configuração real do emissário.

Aplicando a metodologia proposta, na qual são realizadas apenas 8 simulações (Simulações Planejadas - *DOE*), considerando que unicamente a Profundidade de descarga, o Número de saídas e o Espaçamento são fatores estatisticamente significativos à previsão da diluição, e mais 2 simulações na fase de otimização (Superfície de Resposta), é possível obter, já no segundo teste do Método do Gradiente, um incremento na Resposta de 20%.

O teste 2, é o último realizado como parte de Método do Gradiente, devido ao fato de ter superado a profundidade máxima desejada, lembrando que essa profundidade é definida no projeto como a correspondente ao comprimento mínimo necessário segundo a batimetria local.

Por último, aproximando esse último valor do espaçamento entre *risers* a um valor mais prático de 4,5 m, e a profundidade de descarga ao valor de 36 m desejado, foi realizada uma última simulação com resultado igual a 570. Importante ressaltar, que a relação entre a P_d e o e_o continua na faixa ótima, visto que na alternativa final os valores desses fatores são iguais aos valores de projeto do emissário, não obstante, as outras possíveis alternativas avaliadas, também se encontram na faixa ótima.

Como resultado tem-se que, com apenas 11 simulações ao todo, com o mesmo Espaçamento entre *risers*, e respeitando a profundidade máxima desejada, no intuito de controlar o custo econômico que representaria a utilização de um emissário mais cumprido, foi possível obter uma configuração alternativa para o sistema em estudo que fornece um incremento na diluição entorno de um 21%.

Durante a etapa de projeto do emissário Itaquanduba foram realizadas mais de 600 simulações com o modelo NRFIELD.

7. ANÁLISE FINAL DOS RESULTADOS

Primeiramente, a análise de sensibilidade dos modelos estudados resultou na identificação das variáveis de entrada que influem na previsão da diluição inicial nos modelos de campo próximo do Visual Plumes.

No modelo NRFIELD, apenas 5 variáveis mostraram influência, de alguma forma, sobre a previsão da diluição inicial: o Número de saída n_o , o Espaçamento entre *risers* (ou saídas) e_o , a Profundidade de descarga P_d , a Vazão de efluente Q_e e a Temperatura do efluente T_e . No modelo UM3, além dessas cinco variáveis, os ângulos de descarga, tanto vertical quanto horizontal, e o diâmetro de saída, também influem na previsão da diluição inicial.

Após a utilização das técnicas estatísticas, definidas na Metodologia da tese, assim como a análise dos resultados com o conhecimento fornecido pela literatura estudada, apenas a Vazão de efluente, a Profundidade de descarga, o Número de saídas e o Espaçamento entre os *risers* foram identificados como os fatores estatisticamente significativos para a previsão da Diluição Inicial nos modelos de campo próximo do Visual Plumes.

Para ambos os modelos, a Vazão de efluente mostrou ser o parâmetro de maior influência na diluição inicial, e com um efeito negativo. Obviamente, quanto maior quantidade de efluente seja disposto no mar num instante de tempo, maior dificuldade se encontrará em dissolver-se, para as mesmas condições do meio receptor. Constata-se, todavia, que essa influência negativa é menor, quanto maior for a velocidade das correntes.

O fator P_d , pela sua vez, mostrou ser o fator de maior efeito positivo sobre a Resposta. Quanto mais profunda seja a descarga, maiores valores de D_i são verificados. É o segundo efeito mais forte.

O Número de saídas e o Espaçamento entre *risers*, embora significativos em ambos os modelos, têm um nível de significância menor quando comparados aos fatores anteriores. Por outro lado, seu efeito varia de um modelo ao outro para os mesmos níveis, no caso do NRFIELD, o efeito do fator n_o é maior que o efeito do fator e_o , já no UM3, o comportamento é o oposto. Contudo, o valor dos efeitos é muito similar.

Com respeito aos fatores ângulos de descarga, no UM3, ambos mostraram-se estatisticamente significativos. O ângulo vertical de descarga mostrou-se muito importante, sendo possível observar que os maiores valores de diluição inicial são

encontrados quando a descarga é realizada perpendicular ao fundo. Saídas simples e descargas verticais mostraram maiores valores de diluição inicial que aqueles com duas saídas e descargas paralelas ao fundo. No entanto, no NRFIELD, os ângulos de descarga não interferem na previsão da Diluição Inicial, visto que, o modelo foi concebido para emissários com descargas paralelas ao fundo do mar e às correntes marinhas (difusor tipo T).

Os outros fatores estudados não mostraram significância estatística:

- no NRFIELD a Diluição Inicial não é sensível às mudanças do parâmetro Diâmetro das saídas. Já no UM3, embora a diluição aumente assim que o diâmetro das saídas aumenta, este incremento é muito pequeno. A seleção do diâmetro das saídas do difusor deve ser realizada pelos critérios hidráulicos habituais e não ser relacionada à Diluição Inicial;
- a Temperatura do efluente também influi no valor da Diluição Inicial, mas essa influência também é pouco significativa com apenas 0,2% de incremento para cada 1°C de diferença entre o corpo receptor e a temperatura do efluente, em ambos os modelos. Esse fator é um caso típico do que é conhecido na análise de resultados de experimentos planejados como efeito estatisticamente significativo, mas não praticamente significativo.

Posteriormente, os resultados da aplicação da Metodologia de Superfícies de Resposta com os fatores estatisticamente significativos identificados, em ambos os modelos, mostraram que a Diluição Inicial é uma superfície plana, ou seja, não tem ponto estacionário e a Diluição Inicial cresce infinitamente na direção de máximo incremento da Resposta, identificada no Método do Gradiente Ascendente.

No estudo de caso, emissário Itaquanduba, a Melhor Resposta na área experimental resultou ser também a Melhor Resposta na área operacional, ou ponto ótimo desse sistema, em função das limitantes em profundidade do Canal de São Sebastião.

Posteriormente, foi proposta uma metodologia, que aplica o conhecimento gerado na pesquisa, para auxiliar na realização das simulações de campo próximo, de forma que possa ser obtida uma configuração ótima para o sistema projetado, com a realização da menor quantidade de simulações.

No caso de estudo, a utilização dessa metodologia resultou numa configuração do emissário que garante um incremento de 36% no valor da Diluição Inicial, em apenas 11 simulações.

Contudo, e considerando que as configurações de emissário, testadas no caso de estudo, correspondem a emissários considerados de águas profundas (>20 metros), no intuito de generalizar os resultados antes explanados, decidiu-se realizar novos testes.

A primeira análise ajuda entender o comportamento da influência do diâmetro de saída sobre a diluição, considerando diferentes valores de profundidade de descarga e, a segunda análise aplica a metodologia proposta a um sistema de emissários com descarga em águas pouco profundas.

7.1. Influência do diâmetro das saídas na previsão da D_i em ES com profundidade de descarga maior e menor que 20 metros.

Nas tabelas 7.1, 7.2, 7.3 e 7.4 foram resumidos os resultados das simulações realizadas usando o estudo de caso, para o inverno e vazão máxima de projeto, nas quais, para diferentes valores de diâmetros das saídas, foi variado o valor da profundidade de descarga e calculada a diluição inicial.

Os resultados da Tabela 7.1 mostram que, no NRFIELD, a influência do diâmetro de saída na previsão da diluição inicial, em sistemas nos quais a descarga acontece em águas profundas (maior a 20 metros), o diâmetro de saída não tem influência na previsão da diluição inicial, assim como verificado no desenvolvimento do estudo de caso desta tese.

Tabela 7.1: Variação da diluição inicial em função da variação do diâmetro de saída e da profundidade de descarga. Modelo NRFIELD/ >20 metros.

NRFIELD	Profundidade de descarga (m)		
	20	25	30
diâmetro de saída (m)	Diluição Inicial		
0,05	221	304	370
0,06	221	304	370
0,07	221	304	370
0,075	221	304	370
0,08	221	304	370
0,09	221	304	370
0,15	221	304	370

No entanto, para emissários com descarga a uma profundidade menor de 20 metros (Tabela 7.2), é possível verificar que o diâmetro de saída sim tem influência na previsão da diluição inicial.

Tabela 7.2: Variação da diluição inicial em função da variação do diâmetro de saída e da profundidade de descarga. Modelo NRFIELD/ < 20 metros.

NRFIELD	Profundidade de descarga (m)						Média da diluição	%
	9	11	13	15	17	19		
diâmetro de saída (m)	Diluição Inicial							
0,05	151	158	166	175	206	230	181	20.1
0,06	132	141	149	158	183	208	162	7.4
0,07	120	131	139	148	176	204	153	1.5
0,075	116	127	136	145	176	204	151	
0,08	112	124	135	145	176	204	149	-0.9
0,09	107	124	135	145	176	204	149	-1.4
0,15	106	124	135	145	176	204	148	-1.5

Os maiores valores de diluição inicial são encontrados nos casos nos quais o diâmetro de saída é 0,05 m, com um incremento na diluição de 20% em média, respeito ao valor médio da diluição para um diâmetro de 0,075 m. Comportamento que, segundo a literatura, já tem sido verificado (Wilkinson e Wareham, 1996).

Em geral, é possível verificar que os melhores valores de diluição são observados nos menores diâmetros (0,05 m e 0,06 m) e maiores profundidades. Contudo, é importante lembrar que, o diâmetro das saídas deve considerar, fundamentalmente, o tratamento prévio do efluente e as velocidades mínimas recomendadas nas saídas, para cada sistema projetado. Diâmetros de saída tão pequenos só podem ser usados nos casos nos quais o efluente tenha um alto nível de tratamento. Sendo muito recomendados, em geral, diâmetros superiores a 0,06 metros.

Para efluentes com tratamento primário simples, Wilkinson e Wareham (1996) recomendaram diâmetros entre 0,07 m e 0,1 m. Quanto menor seja o nível de tratamento, maiores devem ser os diâmetros considerados.

No caso, de diâmetros iguais ou superiores a 0,07 m, os dados da Tabela 7.2 mostram que, a influência do diâmetro na diluição inicial, é pequena, com valores entre 1,5% e -1,5%.

Esses resultados validam os resultados do estudo de caso, no qual foi afirmado que, para a maioria dos casos, a influência desta variável, na previsão da Diluição Inicial, com o modelo NRFIELD, poderia ser negligenciada e que, a seleção do diâmetro das saídas do difusor deve ser realizada pelos critérios hidráulicos habituais e não ser relacionada à previsão da Resposta. Segundo esses resultados, é possível afirmar que as conclusões do estudo são válidas tanto para sistemas com descargas profundas (>20 metros) quanto para sistemas com descargas a profundidades menores a 20 metros.

Pela sua parte, no modelo UM3, para sistemas com descargas a profundidades maiores de 20 metros (Tabela 7.3), diferentemente do modelo NRFIELD, a diluição inicial é levemente influenciada pelo diâmetro de saída, como verificado no desenvolvimento do estudo de caso.

Os melhores valores de diluição são encontrados também para as maiores profundidades e o diâmetro de 0,05 metros, com um incremento na diluição de 7,4% em média, com respeito ao valor médio da diluição para um diâmetro de 0,075m.

Tabela 7.3: Variação da diluição inicial em função da variação do diâmetro de saída e da profundidade de descarga. Modelo UM3/ > 20 metros.

UM3	Profundidade de descarga (m)						Média da diluição	%
	20	21	22	23	24	25		
diâmetro de saída (m)	Diluição Inicial							
0,05	359	372	386	403	416	430	394	7.4
0,06	333	351	364	376	396	409	372	1.1
0,07	332	342	362	376	395	407	369	0.5
0,075	329	345	358	374	389	409	367	
0,08	327	347	361	374	390	410	368	0.2
0,09	329	344	358	375	394	404	367	0.0
0,15	324	344	357	373	390	402	366	-0.4

Contudo, e seguindo a análise usada no modelo anterior, os diâmetros mais recomendados ($d_o \geq 0,07$ m) apenas provocam uma variação entre 0,5 e -0,4 em média.

Em sistemas com descarga a profundidades menores de 20 metros (Tabela 7.4) os valores de diluição inicial previstos pelo modelo, têm um comportamento similar ao verificado com o modelo NRFIELD.

Tabela 7.4: Variação da diluição inicial em função da variação do diâmetro de saída e da profundidade de descarga. Modelo UM3/ < 20 metros.

UM3	Profundidade de descarga (m)						Média da diluição	%
	9	11	13	15	17	19		
diâmetro de saída (m)	Diluição Inicial							
0,05	197	226	256	283	311	340	269	14.0
0,06	179	208	234	262	291	321	249	5.7
0,07	166	191	222	250	280	314	237	0.6
0,075	158	189	218	253	282	315	236	
0,08	160	190	219	252	284	313	236	0.2
0,09	156	187	218	249	280	310	233	-1.1
0,15	150	182	214	247	279	310	230	-2.3

Os melhores valores de diluição inicial também são encontrados nos casos em que o diâmetro de saída é 0,05 m, com uma variação da diluição de 14% em média, quando comparados com o diâmetro de 0,075 metros. Para diâmetros iguais ou

superiores a 0,07 metros, sua influência também é consideravelmente inferior, entre -2,3% e 0,2%. Embora, essa influência seja superior à verificada com o NRFIELD, continua tendo valores muito inferiores daqueles que foram considerados estatisticamente significativos.

Finalmente, e considerando os resultados obtidos da análise estatística do estudo de caso, assim como a análise supra realizada é possível concluir que, tanto para sistemas com descarga profunda (> 20 metros) quanto para sistemas com descarga a profundidades inferiores, o diâmetro das saídas não terá uma influência estatisticamente significativa para a previsão da diluição inicial em ambos os modelos estudados.

No projeto de sistemas de emissários submarinos, independentemente da profundidade de descarga, a seleção do diâmetro das saídas do difusor deve ser realizada pelos critérios hidráulicos habituais e não ser relacionada à previsão da Diluição Inicial.

7.2. Comportamento dos fatores estatisticamente significativos dos modelos em ES com profundidade de descarga menor a 20 metros.

Para verificar se o comportamento da influência dos três fatores geométricos, identificados como estatisticamente significativos: a Profundidade de descarga, o Número de saídas e o Espaçamento entre os *risers* (ou saídas), sobre a Resposta, em sistemas com descargas a profundidades menores de 20 metros, é a mesma que para sistemas com descarga a profundidades maiores a 20 metros, foi usada a metodologia proposta no item 6.3.

Para isto foram definidas, seguindo os critérios antes definidos, outras duas profundidades e os espaçamentos correspondentes, segundo as relações $e_o^+ = \frac{p_d^+}{8}$ e $e_o^- = \frac{p_d^-}{8}$, antes introduzidas. Os dados do número de saídas foram considerados os mesmos que no estudo de caso, visto que os valores de diâmetro das saídas, diâmetro do emissário e vazão de efluente não mudaram.

Na tabela 7.5 são mostrados os dados usados, os resultados das simulações e os efeitos dos fatores sobre a Resposta para cada um dos modelos estudados.

Tabela 7.5: Resultados das simulações planejadas, sistema similar ao Itaquanduba com descarga de efluente a profundidades inferiores a 20 metros.

Rodada	Número de Saída	Espaçamento	Profundidade	Diluição Inicial	
				NRFIELD	UM3
1	18	2,38	13	114	154
2	18	2,38	19	184	219
3	14	2,38	13	101	127
4	18	2	19	164	173
5	18	2	13	103	120
6	14	2	13	90	99
7	14	2,38	19	156	180
8	14	2	19	135	143
Efeito NRFIELD	21	16	58		
Efeito UM3	29	36	54		

Ambos os modelos continuam mostrando a mesma tendência de comportamento encontrada no estudo de caso. O efeito da profundidade continua sendo o mais forte, seguido dos efeitos dos outros dois fatores, com valores similares.

Assim como no estudo de caso, o efeito do fator Número de saídas é um pouco maior que o efeito do Espaçamento, no modelo NRFIELD e, no modelo UM3, é ao contrário.

Os resultados mostraram que, tanto para emissários de descarga profunda quanto para emissário com descarga a profundidades menores, o comportamento dos fatores significativos à predição da diluição inicial, em ambos os modelos, é similar. Podendo-se afirmar que as conclusões desta tese são aplicáveis no projeto de emissários submarinos com disposição de efluente a qualquer profundidade e para os valores de diâmetro de saídas mais recomendados.

8. CONCLUSÕES

Prever o comportamento da dispersão de um efluente sanitário no mar após a sua disposição através de um emissário submarino, usando a simulação computacional, é uma ferramenta muito útil para garantir o adequado dimensionamento desses sistemas.

A previsão da diluição inicial, como única parcela da dispersão total do efluente que pode ser realmente controlada com pequenas variações no projeto do emissário, a converte no alvo das etapas mais longas do projeto desses sistemas. Modelos de campo próximo que calculam tanto a diluição inicial quanto as principais características da pluma de efluente, são usados nesta etapa.

Habitualmente, são realizadas inúmeras simulações seguindo determinados padrões decididos pelos pesquisadores, procurando testar as mais variadas combinações das variáveis de projeto dos emissários, no intuito de encontrar a melhor alternativa para o sistema que está sendo projetado.

Esta Tese estudou os modelos NRFIELD e UM3 do Visual Plumes, aplicando técnicas de Planejamento Experimental e Superfícies de Resposta, com o objetivo de encontrar, dentre os inúmeros parâmetros de entrada aos modelos, aqueles fatores estatisticamente significativos para a previsão da Diluição Inicial e, por meio deles aperfeiçoá-la. Os parâmetros estatisticamente significativos retêm a maior responsabilidade sobre a variabilidade da resposta.

A utilização do Planejamento de Experimentos do tipo Fatorial 2^k identificou como fatores estatisticamente significativos à Diluição Inicial, dentre todas as variáveis de entrada desses modelos de campo próximo, a Vazão do efluente, a Profundidade de descarga, o Número de saídas e o Espaçamento entre *risers* (ou saídas).

Outras variáveis de entrada aos modelos, como o diâmetro de saída e a temperatura do efluente mostraram-se pouco importantes para previsão da Diluição Inicial pelos modelos estudados.

Uma vez identificados os fatores estatisticamente significativos, a utilização da simulação de campo próximo, tanto para o monitoramento destes sistemas (durante a fase de operação) como no seu aprimoramento (durante a fase de projeto), pode ser muito simples.

Para o monitoramento destes sistemas, é possível construir um modelo matemático para a previsão da Diluição Inicial em função dos 4 fatores significativos com apenas

16 simulações. Esse modelo oferecerá um valor de diluição aproximado para diferentes valores de vazão, sempre que o valor da vazão se encontre entre os níveis: inferior e superior, usados nas simulações planejadas. Esse valor pode ser útil no gerenciamento do sistema.

Na fase de otimização de projetos, a vazão de efluente deverá ser considerada um fator fixo de valor igual à vazão máxima de projeto, visto que os sistemas de ES são projetados para trabalhar numa faixa de vazões durante toda sua vida útil. Usando os três fatores significativos restantes, variáveis geométricas do difusor, foi proposta uma metodologia simples para a otimização do projeto, tanto do ponto de vista ambiental (melhor desempenho do sistema, melhor proteção ambiental) quanto do ponto de vista econômico (otimizando o comprimento do emissário e o número de saídas no difusor, itens que retêm os maiores custos do emissário).

Com apenas 8 simulações planejadas, será possível obter um modelo matemático que permita otimizar a resposta, por meio do Método do Gradiente de Máxima Inclinação da Metodologia de Superfície de Resposta. Esse método consegue, em mais umas poucas simulações, achar um ponto ótimo de operação para os limites impostos por cada caso em particular (configuração que devolva o melhor valor de diluição possível).

Pela sua parte, a utilização da Metodologia de Superfície de Resposta mostrou que o comportamento da Diluição Inicial em função desses três fatores é uma superfície plana para cada dupla de fatores, sendo que seu incremento sempre acontece no sentido dos maiores valores dos três fatores no sentido de máximo incremento definido pelo método do Gradiente Ascendente.

Os resultados mostraram-se aplicáveis para qualquer sistema de ES projetado utilizando os modelos estudados, independentemente da profundidade de descarga e, para todos os possíveis diâmetros de saída.

Acredita-se que esta pesquisa contribuiu para a obtenção de conhecimentos práticos nas simulações de campo próximo, com os modelos NRFIELD e UM3, que permitirão abreviar o tempo de projeto de emissários submarinos, aportando uma ferramenta simples e clara para o suporte ao dimensionamento do sistema.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- AKYARLI, A.; ARISOY, Y.: Evaluation of hydrodynamic characteristics of the Bosphorus regarding the performance of the marine outfall systems. *Water Science Technology*. 32. 1995.
- ALFREDINI, P.; GARCIA, P. D.; ARAUJO, R. N.; AMARAL, F. R.; GIRELI, T. Z.: Projeto de preparo de base batimétrica digitalizada para a costa do Estado de São Paulo. Laboratório de Hidráulica da Escola Politécnica da Universidade de São Paulo. Convênio DAEE-USP. 2002.
- ALMEIDA, A.T: Processo de decisão nas organizações: Construindo modelos de decisão multi-critério. São Paulo: Atlas. 1 ed. 2013.
- AL-MUZAINI, S.; BEG, M.; MUSLAMANI, K.; AL-MUTAIRI, M.: Quality of marine water around a sewage outfall. *Water Science and Technology*. 1999.
- ANDRADÓTTIR, S.: Simulation optimization. In: Banks, J. Editor, *Handbook of Simulation*. New York: John Wiley & Sons. p. 307-333. 1998.
- ANSANELLI, L.C.: Correntes Residuárias de maré no Canal de São Sebastião. Trabalho de Conclusão de Curso. LHiCo. IOUSP. 2014.
- ARASAKI, E.; ORTIZ, J.P.: Emissários Submarinos: Projeto, Avaliação de Impacto Ambiental e Monitoramento: Critérios de Decisão Aplicados aos Emissários Submarinos no Litoral Paulista. Cetesb. São Paulo. 2006.
- BANKS, J.; CARSON, J. S.; NELSON, B. L.; NICOL, D. M.: *Discrete Event System Simulation*. 4 ed. New Jersey: Prentice Hal. 2005.
- BANKS, J.; CARSON, J. S.; NELSON, B. L.; NICOL, D. M.: *Discrete Event System Simulation*. 5 ed. Upper Saddle River, NJ: Prentice Hall. 2009.
- BAPTISTELLI, S.C.: Modelação numérica da circulação de correntes de maré e induzidas pelo vento, aplicada a estudos de disposição oceânica de efluentes na Praia Grande – São Paulo. Dissertação de mestrado. Escola Politécnica, Universidade de São Paulo. 2003.
- BAPTISTELLI, S.C.: Análise crítica da utilização de modelagem matemática na avaliação da dispersão de efluentes leves no litoral da baixada santista (SP). Tese de doutorado. Escola Politécnica. Universidade de São Paulo. 2008.
- BAPTISTELLI, S.C; MARCELLINO E.B.: Seawater monitoring under the influence of Sabesp sea outfalls in Baixada Santista (South Coast) and North Coast - São Paulo State – Brazil. *International Workshop Coastal Water Quality*. Edição Especial Revista DAE No. 204. p 47-56. Doi: 10.4322/dae.2016.012. 2016.
- BARTON, R.R.: Designing simulation experiments. *Proceedings of the 36th conference on Winter simulation*. Winter Simulation Conference, 2001.
- BARROS, N.B.; SCARMINIO, I.S.; BRUNS, R.E.: *Como Fazer Experimentos*. Pesquisa e desenvolvimento na ciência e na indústria. Editora da UNICAMP. ISBN: 85-268-0544-4. 2001.
- BASSANEZI, R. C.: *Ensino-aprendizagem com modelagem matemática: uma nova estratégia*. 3 ed. Editora Contexto. São Paulo. 2006.
- BATISTA, S.S.: Avaliação dos efeitos de ações antrópicas sobre o sistema costeiro de Ubatuba (SP) através de modelagem ambiental. Dissertação de Mestrado. Curso de Pós-graduação em Ciência Ambiental (PROCAM). Instituto de Energia e Ambiente da USP (IEEUSP). 2016.

- BAUMGARTNER, D.J.; FRICK, W.E.; ROBERTS, P.J.W.: Dilution Models for Effluent Discharges. 3rd ed. EPA Report/600/R-94/086. U.S. Environmental Protection Agency, Pacific Ecosystems Branch. Newport, Oregon. 1994.
- BERZIN, G.; NEVES, R.J.J.; LEITÃO, J.C.: Modelação Matemática no Estuário de Santos e sua Importância no Controle da Poluição por Águas Residuárias. 19o Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária e Ambiental. ABES. 1997.
- BERZIN, G.: Utilização da modelagem matemática para o planejamento e gestão de descargas de águas residuárias utilizando emissários submarinos. O caso do estuário de Santos. Joinville. Santa Catarina. 22º CBESA. 2003.
- BILES, W.E.: Experimental design in computer simulation. In: Winter Simulation Conference Proceedings. Texas. USA. 1984.
- BLENNIGER, T.: Coupled 3D hydrodynamic models for submarine outfalls: Environmental hydraulic design and control of multiport diffusers. Doctoral thesis presented to Institute for Hydromechanics, University Karlsruhe, Alemanha. 2006.
- BLENNIGER, T.; FALKENBERG, A.; TREVISAN, A.; MARANHÃO, M.O.; ISCHIKAWA, M.; RIBERO, P.; BARLETTA, R.: Combining measurements, models and decision support systems to optimize outfall siting. International Workshop Coastal Water Quality. Edição Especial Revista DAE. No. 204. Doi: 10.4322/dae.2016.013. 2016.
- BOUCHEKARA, H.R.E.H.; DAHMAN, G.; NAHAS, M.: Smart Electromagnetic Simulations: Guidelines for Design of Experiments Technique. Progress in Electromagnetic Research. 31. 2011.
- BOX, G.E.P., WILSON, K.B.: On the experimental attainment of optimum conditions. Journal of the Royal Statistical Society. 13. 1951.
- BOX, G.E.P., DRAPER, N.R.: Evolutionary operation. Wiley, Nueva York. 1969.
- BOX, G.E.P.: Science and Statistics. Journal of the American Statistical Association. 71 (356). 1976.
- BOX, G.E.P., DRAPER, N.R.: Empirical model-building and response surfaces. Wiley, Nueva York. 1987.
- BOX, G.E.P., HUNTER, W.G., HUNTER, J.S.: Estadística para investigadores: introducción al diseño de experimentos, análisis de datos y construcción de modelos. Reverté. Barcelona. 1999.
- BOX, G.E.P., HUNTER, W.G., HUNTER, J.S.: Statistics for experimenters: design, innovation and discovery. 2 ed. ISBN: 978-0-471-71813-0. Hoboken, NJ: Wiley Interscience. 2005.
- BROOKS, N.H.: Dispersal of wastewater in the ocean – a cascade of processes at increasing scales. Proceedings of Conference of Water for Resource Development. 1984.
- BUTTON, S. T.: Metodologia para planejamento experimental e análise de resultados. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Eng. Mecânica. 2016. <http://www.fem.unicamp.br/~sergio1/pos-graduacao/IM317/im317.html>
- CAMARGO, R.; HARARI, J.: Tides and Wind-driven Circulation in the Tropical and Southern Atlantic Ocean: The BRAZCOAST System. Atmospheric and Oceanic Science Letters, v. 7, p. 476-480, 2014.
- CARVALHO, J.L.B.; ROBERTS, P.J.W.; ROLDÃO, J.: Field observations of Ipanema Beach Outfall. Journal of Hydraulic Engineering. p128. 2002.
- CARVALHO, J. L. B.: Modelagem e análise do lançamento de efluentes através de emissários submarinos. 2003. 173p. Tese de doutoramento, Departamento de engenharia Oceânica, COOPE/UFRJ. 2003.

CASTRO B.M.: Correntes e massas de água da plataforma continental norte de São Paulo. Tese de Livre-Docência. Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 1996.

CASTRO B.M.; MIRANDA, L.B.: Physical oceanography of the western Atlantic continental shelf located between 4° N and 34° S. In: Robinson, A.R. & Brink, K.H. eds. The sea. Oxford, John Wiley & Sons. p 209-251. 1998.

CASTRO B.M.; MIRANDA, L.B.; SILVA, L.S.; FONTES, R.F.C.; PEREIRA, A.F.; COELHO, A.L.: Oceanografia de um ecossistema subtropical: Plataforma de São Sebastião, SP. Processos físicos: hidrografia, circulação e transporte. Editora da Universidade de São Paulo. 2008.

CEDERWALL, K.: Hydraulics of marine wastewater disposal. Report No. 42. Chalmers Institute of Technology. Goteberg. Sweden. 1968.

CETESB: Relatório de Monitoramento de Emissários Submarinos. Série Relatórios - Secretaria de Estado do Meio Ambiente, ISSN 0103-4103. São Paulo. 2007.

COELHO, A.L.: Massas d'água e circulação no Canal de São Sebastião (SP). Dissertação de mestrado. Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 1997.

CONAMA RESOLUÇÃO 274/2000. Ministério do Desenvolvimento Urbano e do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Brasil. 2000.

CONAMA RESOLUÇÃO 375/2005. Ministério do Desenvolvimento Urbano e do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Brasil. 2005.

CONAMA RESOLUÇÃO 430/2011. Ministério do Desenvolvimento Urbano e do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente. Brasil. 2011.

COSTA, R.F.S.: Abordagem sistemática para avaliação econômica de cenários para modelos de simulação discreta em manufatura. 136 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção) – Instituto de Engenharia de Produção e Gestão, Universidade Federal de Itajubá, Itajubá. 2002.

COSTA, R.F.S.; MONTEVECHI, J.A.B.; PINHO, A.F.: Abordagem sistemática para avaliação econômica de cenários para modelos de simulação discreta em manufatura. XLII SBPO. Anais. Bento Gonçalves – Rio Grande do Sul. 2010.

CPEA: Estudo do Impacto Ambiental e Relatório de Impacto Ambiental – EIA/RIMA da ampliação do Porto de São Sebastião. (PIPC – Plano Integrado Porto Cidade). 1253 – 001/11. 2011.

CZITROM, V.; SPAGON, P.D.: Statistical Case Studies for Industrial Process Improvement ASA-SIAM on Statistics and Applied Probability. United States of America: ASA-SIAM. No 514. 1997.

DAVIERO, G.J.; ROBERTS, P.J.W.: Marine wastewater discharges from multiport diffusers III: Stratified stationary water. Journal of Hydraulic Engineering. 132 (4). 2006.

DELTARES. Delft3D-RGFGRID User Manual. Version 3.15.20508. Delft (Netherlands): Deltares Systems. 325p. 2012.

DELTARES. Delft3D-FLOW User Manual: simulation of multi-dimensional hydrodynamics flows and transport phenomena, including sediments. Version 3.15.26466. Delft (Netherlands): Deltares Systems. 676p. 2013.

DEVOR, R.E.; CHANG, T.; SUTHERLAND, J.W.: Statistical quality design and control. Contemporary concepts and methods. New Jersey. Prentice Hall Inc. 1992.

EC. European Community. Water Framework Directive 2008/105/EC on environmental quality standards in the field of water policy. European Parliament. 2008.

ECHEVARRI-ERASUN, B.; JUANES, J.B.; PUENTE, P.; REVILLA, J.A.: Coastal outfalls, a sustainable alternative for improving water quality in north-east Atlantic estuaries. *Journal of Environmental and Monitoring*. 12. 2010.

FAN, L.N.; BROOKS, N.H.: Numerical solutions of turbulence jet problems. Technical Report KH-R-18. Keck Laboratory of Hydraulics and water Resources. California Institute of Technology. 1969.

FEHIDRO: Aplicação de técnicas para avaliação de impactos regionais oriundos de emissários submarinos da Baixada Santista com suporte de modelação física e numérica. Relatório FCTH. 2008.

FEITOSA, R.C.; ROSMAN, P.C.C.: Emissários Submarinos de Esgotos: Aspectos de Qualidade de Água e Modelagem Computacional. In: Silva RCV, organizador. Métodos Numéricos em Recursos Hídricos VIII. Porto Alegre: ABRH. P 1-170. 2008.

FERNANDES, L. J.; RODRIGUEZ, L. A. O.; CORREA, A. R.; MARINS, F. A. S.: Planejamento e controle da produção de cilindros para laminação: um estudo de caso quantitativo, *Produção*, 23(1). p 120-135. 2013.

FONTES, R.F.C.: As correntes no Canal de São Sebastião. Dissertação de Mestrado. Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 1995.

FORTIS, R.M.; ORTIZ, J.P.; LAMPARELLI, C.C.; NIETO, R.: Modelagem computacional da dispersão da pluma do efluente do Tebar - Petrobras. XVI Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos. João Pessoa, Brasil. 2005.

FORTUNA, A. DE O.: Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 2000.

FREITAS, S.: Proposta de metodologia de projeto de sistemas de Disposição oceânica de esgotos sanitários, em localidades de pequeno porte. Dissertação de Mestrado. Área de Saneamento Ambiental-Control de Poluição Urbana e Industrial. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. 2010.

FREITAS, S; BARBOSA F.O; GIORDANO, G.: Diretrizes para projeto de sistema de disposição oceânica de esgotos para comunidade de pequeno porte. I Coletânea em Saneamento Ambiental. II. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Faculdade de Engenharia. ISBN: 978-85-64386-02-0. 2011.

FRICK, W.E., ROBERTS, P.J.W., DAVIS, L.R., KEYES, J., BAUMGARTNER, D.J., GEORGE, K.P.: Dilution Models for Effluent Discharges. *Visual Plume* 4ª Edição. United State Environmental Protection Agency (USEPA). EPA/600/R-03/025. 2003.

FRICK, W.E.: Visual Plumes mixing zone modeling software. United State Environmental Protection Agency (USEPA) Papers. Paper: 166. 2004.

<http://digitalcommons.unl.edu/usepapapers/166>

FU, M.C.: Optimization for Simulation: Theory vs. Practice. *Journal on Computing*. 14(3). p. 192-215. 2002.

FUNDESPA (Fundação de Estudos e Pesquisas Aquáticas): Estudo de complementação das simulações numéricas da dispersão dos efluentes do Emissário Submarino de Esgoto da Praia de Itaquanduba, Ilha de São Sebastião. Relatório Técnico. Contrato N° 15.725/02. 2003.

GOMES, J. H. F.: Método dos Polinômios Canônicos de Misturas para Otimização Multi-objetivo. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Produção). 141 p. Instituto de Engenharia de Produção e Gestão. Universidade Federal de Itajubá. 2013.

GONÇALVES, F.B.; SOUZA, A.P.: Disposição Oceânica de Esgotos Sanitários: História, Teoria e Prática. Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Engenharia Sanitária e Ambiental, ABES. (1997)

- GOOS, P; JONES, B.: Optimal design of experiments a case study approach. Hoboken, N.J.: Wiley. 2011.
- GREGORIO, H.P.: Modelagem numérica da dispersão da pluma do emissário submarino de Santos. Tese (Doutorado). Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 2009.
- GUTIERREZ, H.P.; VARA, R.S.: Análisis y Diseño de Experimentos. 2ª ed. McGraw Hill, ISBN-10: 970-10-6526-3. New York. USA. 2008.
- HAMADA, M.; WU, C.F.J.: Analysis of Design Experiments with complex aliasing. Journal of Quality Technology. pp. 1-23. 1991.
- HARARI, J.; CAMARGO, R.: Simulação das nove principais componentes de maré na plataforma sudeste brasileira através de um modelo numérico hidrodinâmico. Boletim do Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 42(1). p 35 – 54. 1994.
- HARREL, C.R.; MOTT, J.R.A.; BATEMAN, R.E.; BOWDEN, R.G.; GOGG, T.J.: Simulação: otimizando os sistemas. 2 ed. São Paulo: IMAM, 2002.
- HARLEMAN, D.R.F.; JOSEPH, M.C.: Evaluation of Selected Initial Dilution Models. Journal of Environment Engineering. 109(5). 1982.
- HUANG, H, FERGEN, R.E., PRONI, J.R.; TSAI, J.J.: 1998. Initial dilution equations for buoyancy dominated jets in currents. Journal of Hydraulic Engineering, 124(1), 105-108. 1998.
- HUNT, C.D.; MANSFIELD, A.D.; MICKELSON, M.J.; ALBRO, C.S.; ROCKWELL, W.G.; ROBERTS, P.J.W.: Plume tracking and dilution of effluent from the Boston sewage outfall. Marine Environmental Research. 70. 2010.
- HUNTER, W. G.; HUNTER, J. S.: Statistic for Experimenters: An Introduction to Design, Data Analysis and Model Building. Wiley Inc. New York. USA. 1978.
- HU, W.; YAO, L. G.; HUA, Z. Z.: Optimization of sheet metal forming processes by adaptive response surface based on intelligent sampling method, Journal of Materials Processing Technology, 197, 77–88. 2008.
- JIRKA, G.H.; DONEKER, R.L.; HINTON, S.W.: User's manual for CORMIX. A hydrodynamic mixing zone model and decision support system for pollutant discharges into surface waters. U.S. Environmental Protection Agency. 1996.
- JIRKA, G.H.: Integral model for turbulent buoyant jets in unbounded stratified flows. Part I: Single round jet. Environmental Fluid Mechanics. 4(1), 1-56. 2004.
- JORDÃO, E.P., PESSOA, C.A.: Tratamento de esgotos domésticos. 3ed. Rio de Janeiro: ABES. 348p. 1995
- JORDÃO, E.P.: "Ponto de vista: O tratamento mínimo definido na legislação federal (CONAMA 430/2011) para o lançamento de efluentes sanitários em emissários submarinos é suficiente para garantir a preservação ambiental dos corpos da água?". Revista DAE 193. 2013.
- JORDÃO, E.P.; ROSSMAN, P.C.C.: Submarine Outfalls are an Effective Solution for the Disposal of Properly Treated Sewage of Coastal. International Workshop Coastal Water Quality. Edição Especial, Revista DAE 204. pp 57-63. Doi: 10.4322/dae.2016.016. 2016.
- JUANES, J.B.; REVILLA, J.A.; ALVAREZ, C.; GARCIA, A.; PUENTE, A.; NIKOLOV, K.: Environmental design and monitoring of large submarine outfalls: an integrated approach for coastal protection. C. Zimmermann et al, Environmentally Friendly Coastal Protection. NATO Series 53. 2005.
- KELTON, W.D.; BARTON, R.R.: Experimental design for simulation. Proceedings of the 35th Conference on Winter Simulation: driving innovation. p 59-65. New Orleans. Louisiana. 2003.

- KLEIJNEN, J.P.C., FEELDERS, A.J., CHENG, R.C.H.: Bootstrapping and validation of metamodels in simulation. In: Medeiros, D.J., Watson, E.F., Carson, J.S., Manivannan, M.S. (Eds.), *Proceedings of the 1998 Winter Simulation Conference*, pp. 701–706. 1998.
- KLEIJNEN, J.P.C.: Experimental design for sensitivity analysis, optimization, and validation of simulation models Chapter 6. In: Banks, J. (Ed.), *Handbook of Simulation*. Wiley, New York, p 173–223. 1999.
- LAMPARELLI, C.C.; BEVILACQUA, J.E.; KATAYAMA, P.T.: "Ponto de vista: O tratamento mínimo definido na legislação federal (CONAMA 430/2011) para o lançamento de efluentes sanitários em emissários submarinos é suficiente para garantir a preservação ambiental dos corpos da água?". *Revista DAE* 193. 2013.
- LANDSHEER, J. A.; VAN DEN WITTENBOER; MAASSEN, G. H.: Additive and multiplicative effects in a fixed 2 x 2 design using ANOVA can be difficult to differentiate: demonstration and mathematical reason. *Social Science Research*, v.35, pp.279 - 294. 2006.
- LAW, A.M.; KELTON, W.D.: *Simulation modeling and analysis*. 3rd. ed. New York: McGraw-Hill, 2000.
- LAW, A.M.; MCCOMAS, M.G.: Simulation-Based Optimization In: *Proceedings of the 35th conference on Winter simulation: driving innovation*. Winter Simulation Conference. San Diego, CA. USA. 2002.
- LEAL, F.; MONTEVECHI, J. A. B.; PINHO, A. F.; MARINS, F. A. S.: Application of design of experiments on the simulation of a process in an automotive industry, *Winter Simulation Conference*, 2007.
- LEANDRO, R.P.: *Climatologia das águas do Canal de São Sebastião (SP)*. Dissertação de Mestrado. Instituto Oceanográfico da Universidade de São Paulo. 162p. 1999.
- LEE, J.H.W., NEVILLE-JONES, P.: Initial Dilution of horizontal jet in crossflow. *Journal of Hydraulic Engineering*. ASCE 113(5). 1987.
- LIBHABER, M.: Economic, Regulatory and Social Aspects Related to Wastewater Ocean Disposal through Submarine Outfalls. *International Workshop Coastal Water Quality*. Edição Especial, *Revista DAE* 204. p 5-20. Doi: 10.4322/dae.2016.008. 2016.
- LISETH, P.: Wastewater disposal by submerged manifolds. *Journal of the Hydraulics Division*. ASCE. 11839 (HY1). 1976.
- LUDWIG, R.G.: Environmental impact assessment sitting and design of submarine outfalls. EIA Guidance Document, MARC Report No. 43. Monitoring and assessment Research Centre. King's College. University of London and World Health Organization. 1988.
- LYNN, B.: Response Surface Methodology (RSM) and Design of Experiments applied to race car vehicle Dynamics Simulation and Development. *International ADAMS User's Conference*. 2000.
- MARURI-AGUIAR, H.: *Palestra. Congresso de Jóvenes Investigadores em Estadística: Diseño de Experimentos y Bioestadística*. Toledo. 2010.
(<http://areaestadistica.uclm.es/jede/plenarias/MaruriAguilar.pdf>)
- Miranda, L.B.: *Análise de massas de água da plataforma continental e da região oceânica adjacente: Cabo de São Tomé (RJ) e Ilha de São Sebastião (SP)*. Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 1982.
- MIRANDA, R. C.: *Algoritmo genético adaptativo para otimização de modelos de simulação a eventos discretos*. Dissertação (Mestrado). Instituto de Engenharia de Produção e Gestão. Universidade Federal de Itajubá. 2012.
- MONTENEGRO, A.: *Estudo da circulação forçada por ventos e marés na Baía de Todos os Santos e Plataforma Continental Adjacente*. Simulações com modelo oceânico da

Universidade de Princeton (POM). Dissertação (Mestrado). Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 1999.

MONTEVECHI, J. A. B.; PINHO, A. F. DE; LEAL, F.; MARINS, F. A. S.: Application of design of experiments on the simulation of a process in an automotive industry. In: Proceedings of the Winter Simulation Conference, Washington, D.C., USA, 2007.

MONTEVECHI, J. A. B.; LEAL, F.; PINHO, A. F.; COSTA, R. F. S.; OLIVEIRA, M. L. M.; SILVA, A. L. F.: Conceptual modeling in simulation projects by mean adapted IDEF: an application in a Brazilian tech company, Winter Simulation Conference, 2010.

MONTGOMERY, D.C.: Experimental Design for Product and Process Design and Development. Journal of the Royal Statistical Society. Vol. 48. p 159-177. 1991.

MONTGOMERY, D.C.: Diseño y Análisis de Experimentos. Editorial Limusa, S.A. Grupo Noriega Editores. DF. México. ISBN: 968-18-6156-6. 2004.

MONTGOMERY, D.C.; RUNGER, G.C.: Applied Statistics and Probability for Engineers. 5^a ed. John Wiley & Sons Inc. New York. USA. ISBN 978-85-216-1902-4. 2011.

MONTGOMERY, D.C.: Design and Analysis of Experiments. 8^a ed. John Wiley & Sons, Inc. New York. USA. ISBN: 978-1-118-09793-9. 2012.

MYERS, R.H.; MONTGOMERY, D.C.; ANDERSON-COOK, C.M.: Response surface methodology: process and product optimization using designed experiments. 4^a ed. John Wiley & Sons, Inc. ISBN: 978-1-118-91601-8. New York. USA. 2016.

NOUTSOPOULOS, C., GAVALAKI, E., ANDREADAKIS, A.: Evaluation of the impact from the discharge of treated sewage on the South-East Saronicus Gulf through mathematical water quality modelling. Water Science and Technology. 39(8). 1999.

OCCHIPINTI, A.G.: Análise de Sistemas de disposição Oceânica de Esgotos. Congresso Brasileiro de Engenharia Sanitária. Salvador-Bahia. 1973.

ORTIZ, J.P.; BESSA, K.L.: Modelagem computacional de descarga de efluentes em canal com análise dos campos próximo e distante. IAHR-Congresso Latinoamericano de Hidráulica. São Pedro. São Paulo. 2004.

ORTIZ, J.P.; ARASAKI, E.; MARCELINO, E.B.: Emissários Submarinos: Projeto, Avaliação de Impacto Ambiental e Monitoramento: Visão geral dos Emissários Submarinos no Litoral Paulista. Cetesb. São Paulo. 2006.

ORTIZ, J.P.; ALFREDINI, P.; ARASAKI, E.: Santos submarine outfall wastewater dispersion process: physical and computer modeling evaluation. FLUCOME. Tallahassee, Florida. USA. 2007.

ORTIZ, J.P.; SUBTIL, E.L.; GARCIA, R.S.: New Design of Santos Submarine Outfall: Hydrodynamic Modeling Simulation at the Santos Bay. Proceedings of the International Symposium on Outfall Systems. Mar del Plata, Argentina. 2011.

ORTIZ, J.P.; SOBRINHO, P.A.: "Ponto de vista: O tratamento mínimo definido na legislação federal (CONAMA 430/2011) para o lançamento de efluentes sanitários em emissários submarinos é suficiente para garantir a preservação ambiental dos corpos da água?". Revista DAE. 193. 2013.

ORTIZ, J.P.; PEDRERA YANES, J.; BRAULIO NETO, A.: Wastewater Marine Disposal through Outfalls on the coast of São Paulo State – Brazil: An overview. International Workshop Coastal Water Quality. Edição Especial, Revista DAE 204. pp 29-46. Doi: 10.4322/dae.2016.015. Brasil. 2016.

PEDRERA YANES, J., ORTIZ, J.P., VILALTA, J.A.: Significant variables in initial dilution process in submarine outfalls systems. Alternatives comparison. International Symposium on

Outfall Marine Systems. ISOS. IAHR-IWA Joint Committee on Marine Outfall Systems. Ottawa. Canadá. 2016.

PERALTA-ZAMORA, P.; MORAIS, J.L.; NAGATA, N.: Por que otimização multivariada?. Engenharia Sanitária e Ambiental. 10(2). 2005.

PEREIRA, A.F.; CASTRO, B.M.; CALADO, L.; SILVEIRA, I.C.A.: Numerical simulation of M_2 internal tides in the South Brazil Bight and their interaction with the Brazil Current. J. Geophys. Res., No. 112. Doi:10.1029/2006JC003673. 2007.

PICARELLI, S.S.: Análise da hidrodinâmica da região costeira Centro-Sul do estado de São Paulo através de modelagem numérica: Efeito de maré, de ventos e do campo de densidade. Tese (Doutorado). Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 2006.

RAMÍREZ, H.L.; HERRERA, E.A.; VERGARA, M.A.S.: Análisis de descargas submarinas en medios estratificados con un modelo numérico tridimensional. Ingeniería Hidráulica en México. XVII(2), 43-53. 2002.

ROBERTS, P.J.W.: Dispersion of buoyant wastewater discharge from outfall diffuser of finite length. Report No. KH-R-35. Keck Laboratory of Hydraulics and water Resources. California Institute of Technology. USA. 1977.

ROBERTS, P.J.W.: Line Plume and Ocean Outfall Dispersion. Journal of Hydraulics Division, ASCE. 105 (HY4). 1979.

ROBERTS, P.J.W., SNYDER, W.H., BAUMGARTNER, D.J.: Ocean Outfall I: Submerged Wastefield Formation. Journal of Hydraulics Engineering, ASCE, v. 115, n. 1, p.1-25. 1989 (a).

ROBERTS, P.J.W., SNYDER, W.H., BAUMGARTNER, D.J.: Ocean Outfall II: Spatial Evolution of Submerged Wastefield. Journal of Hydraulics Engineering, ASCE. 115(1). p. 26-48. 1989 (b).

ROBERTS, P.J.W., SNYDER, W.H., BAUMGARTNER, D.J., Ocean Outfall III: Effect of Diffuser Design on Submerged Wastefield. Journal of Hydraulics Engineering, ASCE. 115(1). p. 49-70. 1989 (c).

ROBERTS, P.J.W.; WILLIAMS, N.: Modeling of ocean outfall discharges. Wat. Sci. Tech. 9. p 155-164. 1992.

ROBERTS, P.J.W., HUNT, C.D., MICKELSON, M.J.: Field and model studies of the Boston outfall. Second International Conference on Marine Waste Water Discharges. Istanbul. Turkey. 2002.

ROBERTS, P.J.W.; SALAS, J.H.; REIFF, F.M.; LIBHABER, M.; LABBE, A.; THOMSON, J.C.: Marine wastewater outfalls and treatment systems. IWA Publishing, 2010.

ROBERTS, P.J.W.: Treatment Options for Marine Wastewater Discharges. International Workshop Coastal Water Quality. Edição Especial Revista DAE, no. 204. pp 21-28. Doi: 10.4322/dae.2016.009. Brasil. 2016.

ROSEN, S. L.; HARMONOSKY, C. M.; TRABAND, M. T.: A simulation optimization method that considers uncertainty and multiple performance measures. European Journal of Operational Research. 181. p 315–330. 2007.

ROSMAN, P.C.C.: Um sistema computacional de hidrodinâmica ambiental. Métodos numéricos em recursos hídricos. 5. 2001.

SABESP: Emissário submarino de Itaquanduba, Ilhabela, SP. Relatório Técnico Final Contrato LN nº 15.725/02. Fundação de Estudos e Pesquisas Aquática (FUNDESPA). 2003.

SABESP: Modelagem da dispersão de efluentes lançados pelo emissário submarino de Itaquanduba no Canal de São Sebastião -SP. Relatório Técnico. Grupo ASA. 2007.

SABESP: Prestação de Serviço de Engenharia para o Monitoramento Ambiental do CSS durante a fase de assentamento do emissário Itaquanduba – Município de Ilhabela – SP. Relatório Final RL68/2009RF. 2009.

SABESP: Relatório Ambiental Nº 270924. Monitoramento Ambiental do Canal de São Sebastião no entorno do emissário de Itaquanduba. Relatório Técnico. Grupo Falcão Bauer. 2013.

SALAS, H.J.: Submarine Outfalls a viable alternative for sewage discharge of coastal cities in Latin America and the Caribbean. Pan American Center for Sanitary Engineering and Environmental Sciences (CEPIS). 2000.

SARTOR, S. M.; DEGASPARI, F. A.: A balneabilidade das praias de Santos: discussão dos critérios oficiais de avaliação. Anais Congresso Interamericano de Engenharia Sanitária e Ambiental, Porto Alegre: ABES, 2000.

SEPULVEDA, BAESLER, ARAYA, RAMIS: The Use of Simulation and Design of Experiments for Productivity Improvement in the Sawmill Industry. 2004.

SILVA, L.S.; MIRANDA, L.B.; CASTRO, B.M.: Estudo numérico da circulação e da estrutura termohalina na região adjacente à ilha de São Sebastião (SP). Revista Brasileira de Geofísica. 22(3). p 197-221. ISSN: 0102-261X. 2005.

SILVERIO, B.C.; SANTOS, K.G.; RESENDE, I.A.; BARROSO, M.S.S.: Uso da técnica de superfícies de resposta na avaliação de parâmetros do método de elementos discretos na simulação de secadores rotatórios convencionais com fertilizantes. XXXVII Congresso Brasileiro de Sistemas Particulados 2(1). 2015.

SOUZA, J.F., AZEBEDO, J.L., OLIVEIRA, L.R., SOARES, I.D.: Emissários submarinos, uma alternativa para a disposição final de efluentes em cidades costeiras. Departamento de Física Universidade Federal do Rio Grande. 2007.

SUBTIL, E.L.: Tratamento de águas residuárias utilizando emissários submarinos: avaliação do nível de tratamento para uma disposição oceânica ambientalmente segura. Tese de Doutorado. EPUSP. 2012.

SUBTIL, E.L.; MIERZWA, J.C.; ORTIZ, J.P.: Influência do nível de tratamento de esgoto na qualidade da água do mar na região de lançamento do Emissário Submarino de Santos. Revista Ambiente & Água - An Interdisciplinary Journal of Applied Science. 7(3). Doi:10.4136/1980-993X. 2012.

TIAN, X.; ROBERTS, P.J.W.; DAVIERO, G.J.: Marine Wastewater Discharges from Multiport Diffusers. I: Unstratified Stationary Water, Journal of Hydraulic Engineering 130(1137). 2004 (a).

TIAN, X.; ROBERTS, P.J.W.; DAVIERO, G.J.: Marine Wastewater Discharges from Multiport Diffusers. II: Unstratified Flowing Water, Journal of Hydraulic Engineering 130(1147). 2004 (b).

TIAN, X.; ROBERTS, P.J.W.; DAVIERO, G.J.: Marine Wastewater Discharges from Multiport Diffusers. IV: Stratified Flowing Water. Journal of Hydraulic Engineering 132 (411). 2006.

TOBÓN, C. A. P.: Metodología para la validación de modelos hidrodinámicos utilizando amplia información de campo: aplicación a la bahía de Meldorf en la costa del mar norte Alemán. Tese de Doutorado. Escuela de Geociencias y Medio Ambiente. Facultad de Minas. Universidad Nacional de Colombia. Santa Fé de Bogotá. 2002.

UNAL, R.; BRAUN, R.D.; MOORE, A.A.; LEPSCH, R.A.: Response Surface Model building using orthogonal arrays for computer experiment. 19th Annual International Conference of the international Society of Parametric Analysis. New Orleans. Louisiana. 13 p. 1997.

USEPA: Technical Support Document for Water Quality – Based Toxics Control. EPA 505/2-90-001, U.S. EPA Office of Water, Washington, DC. 1991.

- VENTER, J.H.; HOFTKA, R.T.; STARNEST, J.R.: Construction of Response Surface for design optimization. Applications American Institute of Aeronautics and Astronautics Paper. AIAA-96-4040-CP. p. 548-564. 1998.
- VON SPERLING, M. Princípios básicos do tratamento de esgotos - Princípios do tratamento biológico de águas residuárias. Belo Horizonte, UFMG. 2. 1996.
- WERKEMA, M.C.C.; AGUIAR, S.: Planejamento e análise de experimentos: como identificar as principais variáveis influentes em um processo. Belo Horizontes, Fundação Christiano Ottoni. 8. 1996.
- WILKINSON, D.L.; WAREHAM, D.G: Optimization criteria for design of coastal city wastewater disposal system. Proc. Clean Sea 96, Toyohashi. 1996.
- WONG, D. R.: Buoyant jet entrainment in stratified fluids. Ph.D. Thesis. University of Michigan. 1985.
- WRIGHT, S.J.: Buoyant jets in density-stratified crossflow. Journal Hydraulic Engineering. ASCE 110(5).1984.
- WU, C.F.J.; HAMADA, M.: Experiments: planning, analysis, and parameter design optimization. New York: Jonh Wiley and Sons, Inc. 2000.
- YALCINKAYA, O.; BAYHAN, G. M.: Modeling and optimization of average travel time for a metro line by simulation and response surface methodology. European Journal of Operational Research. 196 p. 225–233. 2009.
- YAMADA, S.: Application of Design of Experiments to Computer Simulation Study. 10th QMOD Conference. Quality Management and Organizational Development. Our Dreams of Excellence. 18-20 June. Helsingborg. Sweden. 2007.
- YAMADA, S.: A Grammar of Design of Experiments in Computer Simulation. Book: The Grammar of Technology Development. Part II. DOI 10.1007/978-4-431-75232-5-7. 2008.
- YANG, S.H.: Análise das condições ambientais e da dispersão de plumas de efluentes na região costeira centro-sul do Estado de São Paulo com uso da modelagem numérica. Dissertação de mestrado. Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 2016.
- YANG, S.H.; HARARI, J.: Modeling extreme conditions of sewage plumes in central: South coastal region of São Paulo State Brazil. International Workshop: Coastal Water Quality. Edição Especial Revista DAE. 204. p 73-80. Doi: 10.4322/dae.2016.017. Brasil. 2016.
- YASSUDA, E.A.: Modelo numérico do transporte de sedimentos no canal principal do estuário de Santos. Dissertação de mestrado. Instituto Oceanográfico. Universidade de São Paulo. 1991.
- YE, K.Q., HAMADA, M.; WU, C.F.J.: A step-down lenth method for analyzing unreplicated factorial design. Journal of Quality Technology. V33. N2. P 140-152. 2001.
- ZHANG, R.; CHIANG, W. C.; WU, C.: Investigating the impact of operational variables on manufacturing cost by simulation optimization. International Journal of Production Economics. 147. p. 634-646. 2014.

ANEXO

Delft-3D (Deltares, 2013).

O Delft-3D é um programa desenvolvido no instituto de pesquisa *WL-Delft Hydraulics* na Holanda e lançado em 1993. É um modelo para o cálculo de escoamentos com superfície livre que calcula fluxos e fenômenos de transporte, resultantes da ação de forçantes meteorológicas e de marés, num domínio cuja grade pode ter bordas retilíneas ou curvilíneas.

As equações hidrodinâmicas do escoamento e do transporte de substâncias são resolvidas através do método de diferenças finitas (Gregorio, 2009), permitindo a simulação do transporte resultante de marés, de descargas fluviais e de efeitos meteorológicos, incluindo o efeito da diferença de densidade devido às vazões fluviais e ao gradiente horizontal dos campos de temperatura e salinidade (Luijendijk, 2001).

O programa está composto por diversos módulos de simulação com ferramentas de pré-processamento, processamento e pós-processamento, que facilitam a implementação do modelo para uma região específica, como são o módulo Hidrodinâmico (FLOW), o de Ondas (WAVE), o de Transporte de Sedimentos (SED), o de Morfologia (MOR) e o de Qualidade da água (WAQ).

O Delft-3D adota um sistema de grade chamado *staggered grid*. As variáveis que descrevem o fluxo, o nível d'água e as componentes de velocidade (u , v , w), são distribuídas numa grade Arakawa Tipo C. Nesta grade os pontos de elevação (pontos de pressão) estão definidos no centro da célula e as componentes da velocidade são perpendiculares aos lados da grade.

O módulo usado nesta tese é o Delft-3D FLOW. Este módulo é capaz de simular fluxos não estacionários em duas ou três dimensões, fenômenos de transporte resultantes de maré, descargas de água e efeitos meteorológicos, incluindo o efeito de diferença de densidade devido aos gradientes horizontais de temperatura e de salinidade. Pode ser usado para prever o fluxo em mares pouco profundos, regiões costeiras, estuários, reservatórios ou rios.

Para simular fenômenos de fluxo nos quais as escalas de comprimento horizontal e de tempo são significativamente maiores que as verticais, o Delft-3D considera as seguintes hipóteses de aproximações:

- Hipótese de águas rasas: a equação da quantidade de movimento na vertical reduz-se à relação da pressão hidrostática, supondo que a aceleração vertical é pequena comparada a aceleração gravitacional, e não é considerada.
- Fluxo incompressível: assume-se que um escoamento é incompressível se a densidade do fluido não muda com a pressão, o qual é usual em líquidos.
- Não considera o efeito da flutuabilidade do fluxo na vertical. No Delft-3D FLOW consideram-se as diferenças de densidade vertical no gradiente de pressão horizontal e nos coeficientes de troca vertical.
- Hipótese de Boussinesq: Como as variações de densidade nos oceanos são muito pequenas, a massa específica pode ser considerada constante (ρ_a), exceto quando as forças de corpo (gravitacionais), devido ao movimento de um fluido estratificado por densidade, estão presentes no termo de pressão hidrostática (equação da variação da quantidade de movimento angular na direção vertical).
- Supõe-se ponto fixo. Não há trocas dinâmicas entre a batimetria e o fluxo.
- Para considerar a aceleração de Coriolis, o termo de Coriolis é adicionado nas equações da quantidade de movimento angular. No sistema de coordenadas cartesianas não se considera a curvatura da Terra, e se considera o efeito de Coriolis uniforme. Em coordenadas esféricas o parâmetro de Coriolis depende da latitude.
- Em simulações de fluxo de grande escala os esforços cisalhantes tangenciais ao longo do contorno fechado podem ser desprezados (parede lisa), sendo reduzidos os coeficientes de viscosidade horizontal a operadores bi-harmônicos ao longo da linha das coordenadas. Em simulações de fluxo de pequena escala a lateral das paredes é calculada segundo a lei logarítmica de velocidades nas paredes.
- Para o cálculo das velocidades supõe-se que um ponto está seco quando a profundidade da água está abaixo de um valor limite, e molhado quando a profundidade da água é maior que duas vezes esse valor limite. A equação da conservação da massa supõe que cada célula está seca quando os quatro pontos dos vértices dela estão secos ou, quando a profundidade da água está abaixo de zero (volume negativo).
- A aceleração da gravidade é considerada uniforme, exceto para os modelos que são definidos em coordenadas esféricas.
- As equações de rugosidade devido ao efeito de ondas e corrente é sensível somente em modelo 2D horizontal.

- Para simulações 3D, o efeito da turbulência na equação da quantidade de movimento e massa na vertical, é calculado por meio de um modelo de turbulência algébrico como o $k-L$ ou o $k-\varepsilon$, com os coeficientes de viscosidade.
- O fluxo é forçado pela maré nas bordas abertas, pela tensão de cisalhamento do vento na superfície do mar, pelo gradiente de pressão devido à inclinação da superfície livre (campo barotrópico), pelos gradientes horizontais de densidade (campo baroclínico) e pela corrente.

As condições hidrodinâmicas resultantes da simulação com Delft-3D FLOW tais como: velocidade de corrente, ângulo da corrente, densidade, salinidade, etc., são usadas como dados de entrada para os outros módulos do Delft-3D. Também podem ser usados como dados de entrada, prévio ajuste, em alguns modelos de campo próximo.

Equações Hidrodinâmicas Governantes

O Delft-3D FLOW resolve equações derivadas das equações de Navier-Stokes como:

- as equações do movimento da água do mar nas direções x e y , para obtenção das componentes zonal e meridional das correntes,
- a equação do movimento da água do mar na direção z , aproximada para a coordenada vertical σ , que é reduzida para a equação da relação hidrostática, para a obtenção da componente vertical das correntes,
- a equação da continuidade para a obtenção da elevação do nível do mar e,
- as equações de difusão de temperatura e de salinidade (Deltares, 2013).

Na horizontal estas equações são formuladas em coordenadas cartesianas retangulares $(x;y)$, ortogonais curvilíneas $(\xi;\eta)$, ou em coordenadas esféricas $(\lambda;\phi)$. As coordenadas esféricas são um caso particular de coordenadas curvilíneas com $\xi = \lambda$, $\eta = \phi$, $\sqrt{G_{\xi\xi}} = \cos \phi$ e $\sqrt{G_{\eta\eta}} = R$, sendo R o raio da Terra, ξ e η as coordenadas curvilíneas horizontais, λ e ϕ as coordenadas esféricas (longitude e latitude), e, $\sqrt{G_{\xi\xi}}$ e $\sqrt{G_{\eta\eta}}$ os coeficientes usados para transformar coordenadas curvilíneas em retangulares (m).

Na vertical o Delft-3D FLOW oferece dois diferentes sistemas de grades: um chamando de sistema de coordenada σ (σ -grid) para modelos do oceano e o sistema de coordenadas cartesianas Z (Z -grid).

O sistema de coordenadas σ foi introduzido pela primeira vez em modelos atmosféricos (Phillips, 1957 apud Deltares, 2013). Funciona considerando que o eixo vertical consiste em camadas limitadas por planos Sigma (σ), os quais não são exatamente horizontais, seguem a batimetria e o nível d'água de tal forma, que o número de camadas seja constante em todo o domínio, independentemente da profundidade local.

A distribuição da espessura relativa de cada camada σ é usualmente não uniforme. Através dessa representação para o eixo vertical, obtém-se uma feição suavizada para a batimetria.

Embora o σ -grid tenha uma borda ajustada (na vertical) poderá nem sempre ter resolução suficiente em torno da pycnoclina. A linha da coordenada corta a interface da densidade podendo produzir erros significativos na aproximação do gradiente de densidade horizontal. Portanto, um segundo sistema vertical de coordenadas, baseado em coordenadas cartesianas (Z-grid) foi introduzido no Delft-3D FLOW para simulações em 3D de sistema fracamente estratificados (Figura 4.12).

Figura 4.12: Comparação entre os sistemas de coordenadas (a) σ -grid e (b) Z-grid (Deltares, 2013).

O sistema de coordenadas σ é definido como:

$$\sigma = \frac{z-\zeta}{d+\zeta} = \frac{z-\zeta}{H} \quad (\text{i.1})$$

onde: z é a coordenada vertical no espaço físico, ζ é a elevação do nível da água acima do plano de referência ($z = 0$), d é a profundidade abaixo do plano de referência, e H é profundidade local total ($H = d + \zeta$).

No sistema de coordenadas σ , a coordenada vertical no fundo é definida como $\sigma = 1$, e na superfície como $\sigma = 0$. As derivadas parciais no sistema de coordenadas cartesianas são expressas em coordenadas σ após modificações (regra da cadeia) e termos adicionais (Stelling e Van Kester, 1994 apud Deltares, 2013).

As equações hidrodinâmicas descritas a seguir são válidas para o sistema de coordenadas σ , mas as equações para o sistema de coordenadas Z , são similares.

O domínio de modelagem tri-dimensional para o fluxo consiste em um plano horizontal, composto pelo corpo da água e contornos terrestre, e vertical composto pelo número de camadas. Para cada camada vertical, um sistema de equações conservativas é resolvido.

Equações governantes.

Equação da continuidade

A Equação da Continuidade verticalmente integrada é representada por:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial [(d+\zeta)U\sqrt{G_{\eta\eta}}]}{\partial \xi} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial [(d+\zeta)V\sqrt{G_{\xi\xi}}]}{\partial \eta} = Q \quad (i.2)$$

onde:

t - é o tempo (s)

U - velocidade na direção ξ (m/s)

V - velocidade na direção η (m/s)

Q - contribuições para o fluxo (fonte ou sumidouro), representa a vazão devida à precipitação ou à evaporação por unidade de área (m/s):

$$Q = H \int_{-1}^0 (q_e - q_s) d\sigma + P - E \quad (i.3)$$

Sendo q_e a vazão de entrada, q_s a vazão de saída, P a precipitação e E a evaporação.

Equação da variação da quantidade de movimento

As equações da quantidade do movimento nas direções ξ e η podem ser dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial t} + \frac{u}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{v}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{w}{d+\zeta} \frac{\partial u}{\partial \sigma} - \frac{uv}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\xi\xi}}}{\partial \eta} + \frac{v^2}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\eta\eta}}}{\partial \xi} - f_v \\ = -\frac{1}{\rho_0 \sqrt{G_{\xi\xi}}} P_\xi + F_\xi + \frac{1}{(d+\zeta)^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(v_v \frac{\partial u}{\partial \sigma} \right) + M_\xi \end{aligned} \quad (i.4)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial v}{\partial t} + \frac{u}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{v}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{w}{d+\zeta} \frac{\partial v}{\partial \sigma} - \frac{uv}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\eta\eta}}}{\partial \xi} + \frac{u^2}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \sqrt{G_{\xi\xi}}}{\partial \eta} - f_u \\ = -\frac{1}{\rho_0 \sqrt{G_{\xi\xi}}} P_\eta + F_\eta + \frac{1}{(d+\zeta)^2} \frac{\partial}{\partial \sigma} \left(v_v \frac{\partial v}{\partial \sigma} \right) + M_\eta \end{aligned} \quad (i.5)$$

As variações da densidade são negligenciadas, exceto nos termos de pressão baroclínica P_ξ e P_η . As forças F_ξ e F_η indicam a força dissipativa de energia devido à viscosidade no plano horizontal (tensões de Reynolds). M_ξ e M_η representam fontes e sumidouros de quantidade de movimento devido a eventuais obstruções ou contribuições ao movimento (forças promovidas por descarga de rios, ondas, estruturas hidráulicas etc.). O termo v_v representa o coeficiente cinemático vertical de viscosidade turbulento. Os termos f_u e f_v são as componentes da força de

Coriolis que depende da latitude geográfica ϕ e da velocidade angular de rotação da Terra Ω ($f = 2\Omega \sin \phi$).

A velocidade vertical ω , referente à superfície sigma- σ , é obtida adaptando a componente vertical σ da equação da variação da quantidade de movimento com a equação da continuidade:

$$\frac{\partial \zeta}{\partial t} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}\sqrt{G_{\eta\eta}}}} \frac{\partial[(d+\zeta)u\sqrt{G_{\eta\eta}}]}{\partial \xi} + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}\sqrt{G_{\eta\eta}}}} \frac{\partial[(d+\zeta)v\sqrt{G_{\xi\xi}}]}{\partial \eta} + \frac{\partial \omega}{\partial \sigma} = H(q_e - q_s) \quad (i.6)$$

Os efeitos da precipitação e evaporação na superfície são considerados nos termos q_e e q_s . A componente vertical ω é relacionada ao movimento das iso - superfícies de σ , sendo interpretada como a velocidade associada a movimentos ascendentes ou descendentes.

Por outro lado, no sistema cartesiano a velocidade vertical w no sistema de coordenadas cartesianas não está considerada no sistema de equações do modelo, apenas é considerada na fase de pós - processamento. Nesse caso a velocidade vertical w é expressa em função das velocidades horizontais (u, v), da profundidade da coluna de água (H), da elevação do nível d'água (ζ) e da velocidade vertical (ω), de acordo com:

$$w = \omega + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}\sqrt{G_{\eta\eta}}}} \left[u\sqrt{G_{\eta\eta}} \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial \xi} + \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} \right) + v\sqrt{G_{\xi\xi}} \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial \eta} + \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} \right) \right] + \left(\sigma \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{\partial \zeta}{\partial t} \right) \quad (i.7)$$

Pressão hidrostática

Considerando a aproximação de águas rasas, a componente vertical da equação de quantidade de movimento se reduz à equação fundamental do equilíbrio hidrostático, não sendo consideradas as acelerações verticais devido à fluatibilidade e devido às variações abruptas do campo batimétrico. Assim:

$$\frac{\partial P}{\partial \sigma} = -\rho g H \quad (i.8)$$

Integrando, a pressão hidrostática pode ser escrita como:

$$P = P_{atm} + gH \int_{\sigma}^0 \rho(\xi, \zeta, \sigma', t) d\sigma' \quad (i.9)$$

Ao adotar a densidade da água como sendo constante e, considerando-se a pressão atmosférica (gradiente de pressão barotrópico) têm-se:

$$\frac{1}{\rho_o \sqrt{G_{\xi\xi}}} P_{\xi} = \frac{g}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} + \frac{1}{\rho_o \sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial P_{atm}}{\partial \xi} \quad (i.10)$$

$$\frac{1}{\rho_o \sqrt{G_{\eta\eta}}} P_{\eta} = \frac{g}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} + \frac{1}{\rho_o \sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial P_{atm}}{\partial \eta} \quad (i.11)$$

O gradiente de pressão devido à inclinação da superfície do mar é conhecido como gradiente de pressão barotrópico. A pressão atmosférica é incluída no sistema para

permitir simulações de tempestades, sendo, nestas simulações, importante considerar a variação espaço-temporal do vento e campos de pressão. Para massas de água que apresentem campo de densidade variado, a densidade local é relacionada aos valores de temperatura e salinidade através da equação do estado. Nessas condições a equação para gradientes horizontais de pressão pode ser escrita como:

$$\frac{1}{\rho_o \sqrt{G_{\xi\xi}}} P_{\xi} = \frac{g}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial \zeta}{\partial \xi} + g \frac{d+\zeta}{\rho_o \sqrt{G_{\xi\xi}}} \int_{\sigma}^0 \left(\frac{\partial \rho}{\partial \xi} + \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \xi} \right) d\sigma' \quad (i.12)$$

$$\frac{1}{\rho_o \sqrt{G_{\eta\eta}}} P_{\eta} = \frac{g}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \zeta}{\partial \eta} + g \frac{d+\zeta}{\rho_o \sqrt{G_{\eta\eta}}} \int_{\sigma}^0 \left(\frac{\partial \rho}{\partial \eta} + \frac{\partial \rho}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \eta} \right) d\sigma' \quad (i.13)$$

O primeiro termo do lado direito das equações representa o gradiente de pressão barotrópico (sem gradientes de pressão atmosférica) e o segundo termo o gradiente de pressão baroclínico.

Tensões de Reynolds

As forças F_{ξ} e F_{η} nas equações da quantidade de movimento representam o desequilíbrio horizontal nas tensões de Reynolds. As tensões de Reynolds são determinadas usando o conceito de viscosidade turbulenta. Dentro deste conceito, as componentes das tensões de Reynolds são o produto entre o fluxo dependente do coeficiente de viscosidade turbulenta e sua correspondente componente média devido ao tensor raio de deformação.

Em um fluxo tri-dimensional o tensor de cisalhamento é anisotrópico. O coeficiente de viscosidade horizontal v_H é muito maior que o componente de viscosidade turbulenta na vertical v_v . O coeficiente de viscosidade turbulento horizontal é composto por três partes: uma parte devido à turbulência bi-dimensional, uma parte devido à turbulência tri-dimensional e uma parte devido à viscosidade molecular.

A parte bi-dimensional v_{2D} é associada às contribuições dos movimentos horizontais que não são resolvidas devido à resolução espacial da grade (médias de Reynolds). A parte tri-dimensional v_{3D} é conhecida como viscosidade turbulenta tri-dimensional e é estimada segundo um modelo de fechamento turbulento. A viscosidade molecular é representada por v_{mol} . Dentro do Delft-3D FLOW o coeficiente de viscosidade turbulenta v_H é definido por:

$$v_H = v_{2D} + v_v = v_{2D} + v_{3D} + v_{mol} \quad (i.14)$$

O sistema de coordenadas σ , gira o tensor de cisalhamento em relação ao sistema de coordenadas cartesiano. O tensor de cisalhamento é redefinido assumindo-se

que a escala horizontal é muito maior do que a profundidade (Blumberg e Mellor (1985) apud Deltares (2013)). Então, as forças F_ξ e F_η são utilizadas na forma:

$$F_\xi = \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial \tau_{\xi\xi}}{\partial \xi} + \frac{1}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \tau_{\xi\eta}}{\partial \eta} \quad (\text{i.15})$$

$$F_\eta = \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial \tau_{\eta\xi}}{\partial \xi} + \frac{1}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial \tau_{\eta\eta}}{\partial \eta} \quad (\text{i.16})$$

sendo que: $\tau_{\xi\xi}$, $\tau_{\eta\eta}$, $\tau_{\eta\xi}$ e $\tau_{\xi\eta}$ são as componentes dos esforços de Reynolds.

Para pequenas escalas, onde a tensão de cisalhamento está próxima aos contornos, tem-se:

$$\tau_{\xi\xi} = \frac{2\nu_H}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \xi} \right) \quad (\text{i.17})$$

$$\tau_{\xi\eta} = \tau_{\eta\xi} = \nu_H \left[\frac{1}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \left(\frac{\partial u}{\partial \eta} + \frac{\partial u}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \eta} \right) + \frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}} \left(\frac{\partial v}{\partial \xi} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \xi} \right) \right] \quad (\text{i.18})$$

$$\tau_{\eta\eta} = \frac{2\nu_H}{\sqrt{G_{\eta\eta}}} \left(\frac{\partial v}{\partial \eta} + \frac{\partial v}{\partial \sigma} \frac{\partial \sigma}{\partial \eta} \right) \quad (\text{i.19})$$

Para condições de grande escala para malhas menos refinadas, ex: quando os esforços cortantes ao longo do contorno fechado podem ser desprezados, as forças podem ser simplificadas e o termo de viscosidade horizontal é reduzido pelo operador de Laplace, logo:

$$F_\xi = \nu_H \left(\frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial^2 u}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\sqrt{G_{\eta\eta}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial^2 u}{\partial \eta^2} \right) \quad (\text{i.20})$$

$$F_\eta = \nu_H \left(\frac{1}{\sqrt{G_{\xi\xi}}\sqrt{G_{\xi\xi}}} \frac{\partial^2 v}{\partial \xi^2} + \frac{1}{\sqrt{G_{\eta\eta}}\sqrt{G_{\eta\eta}}} \frac{\partial^2 v}{\partial \eta^2} \right) \quad (\text{i.21})$$

Equação de Estado:

A densidade da água ρ é uma função da salinidade s e da temperatura T e o Delft-3D utiliza uma relação empírica (Eckart (1958) apud Deltares (2013)):

$$\rho = \frac{1000P_o}{\lambda + \alpha_o P_o} \quad (\text{i.22})$$

Onde:

- $\lambda = 1779,5 + 11,25T - 0,0745T^2 + (3,80 + 0,01T)s$, com a salinidade (s) em ppt e a temperatura T em $^\circ\text{C}$,

- $\alpha_o = 0,698$

- $P_o = 5890 + 38T - 0,37sT^2 + 3s$

Turbulência.

A turbulência tem um papel importante nos processos dissipativos em corpos de água. Não é uma tarefa fácil incorporar a turbulência nas equações governantes através de uma parametrização. Usualmente isto é feito considerando que as

tensões de Reynolds são proporcionais às taxas de deformação médias do fluido. Em analogia à viscosidade molecular, a constante de proporcionalidade é chamada de coeficiente de viscosidade turbulenta.

Considerando que as dimensões horizontais são muito maiores que as dimensões verticais, é necessário definir os coeficientes com valores diferentes para as direções vertical e horizontal.

A temperatura e a salinidade têm seu transporte descrito por coeficientes de difusividade turbulentos, também diferentes nas direções vertical ou horizontal.

No Delft-3D FLOW normalmente a grade é muito grosseira e o passo de tempo muito grande para resolver as escalas de movimento turbulento. Para grades 2D, a turbulência é simulada utilizando valores constantes para o coeficiente de viscosidade horizontal ν_{2D} e para o coeficiente de difusividade turbulenta ν_H . Estes devem ser escolhidos dependendo do tamanho da grade. Os coeficientes horizontais são uma ordem de grandeza maior que os coeficientes verticais.

Para o caso 3D a viscosidade vertical turbulenta ν_v e a difusividade vertical turbulenta ν_{3D} são determinadas com a implementação de quatro modelos de turbulência diferentes: o modelo de coeficiente constante, o modelo algébrico, o modelo $k - L$ e o modelo $k - \varepsilon$.

Os modelos de turbulência diferem quanto a sua prescrição de energia cinética turbulenta k , a taxa de dissipação de energia cinética turbulenta e/ou o comprimento de mistura L .

Condições iniciais e de contorno.

Um conjunto de condições iniciais e de contorno para o nível da água e as velocidades horizontais deve ser especificado para obter uma boa aproximação matemática do problema com uma única solução. Os contornos do domínio do modelo consistem em linhas ao longo da interface terra-água que são chamados de contornos fechados e partes através do campo de fluxo que são chamados de contornos abertos. As velocidades normais próximas aos contornos fechados são estabelecidas em zero. Em um modelo numérico, os contornos abertos são introduzidos para restringir a área e o esforço computacional.

Assume-se inicialmente que o modelo está em repouso (*cold start*), mas também é possível que o modelo seja iniciado usando os resultados de uma simulação anterior (*hot start*). O início da simulação irá gerar ondas curtas e progressivas com um comprimento de onda proporcional ao comprimento da área do modelo.

Condições de contorno verticais

Na direção vertical as equações do movimento são parabólicas. O perfil vertical de velocidades é determinado pela viscosidade vertical turbulenta e pelas condições de contorno no leito (tensão do leito) e na superfície livre (tensão do vento). O passo de tempo do perfil vertical é dependente da viscosidade vertical turbulenta. Quando o tamanho da grade próximo aos contornos é maior que a espessura das camadas do contorno que ocorrem no fluxo, as tensões de cisalhamento ao longo dos contornos laterais podem ser desprezadas.

Condições de fronteira abertas

Em um contorno aberto, o nível de água, a componente normal da velocidade ou a combinação destes, podem ser definidos para obter uma boa imposição matemática para o problema de valor inicial de contorno. Para um contorno de entrada a componente da velocidade tangencial pode ser especificada assumindo que o fluxo é normal ao contorno aberto. Os dados necessários para as condições de contorno podem ser obtidos por medições. Existem vários tipos destas condições de contorno que podem ser aplicados nas diferentes situações:

- nível de água: $\zeta = F_{\zeta}(t)$
- velocidade (na direção normal): $U = F_U(t)$
- descarga (total e por células): $Q = F_Q(t)$
- Neumann: $\frac{\partial \zeta}{\partial \vec{n}} = f(t)$
- constante de Riemann: $U \pm \zeta \sqrt{\frac{g}{d}} = F_R(t)$

Se medições de nível não estivessem disponíveis, a forçante barotrópica na fronteira aberta é aproximada por uma superposição linear de flutuações da maré, forçantes meteorológicas (vento) e ondas.

A escolha do tipo de condição de contorno aberta depende do fenômeno que se deseja estudar. Em geral, as condições de contorno são especificadas em um número limitado de pontos do contorno. A interpolação linear é usada para gerar as condições de contorno nos pontos intermediários.

Tensão de cisalhamento em contornos fechados.

Uma fronteira fechada é localizada na transição entre terra e água. Neste tipo de contorno, duas condições devem ser definidas: o fluxo normal ao contorno e a tensão de cisalhamento ao longo do contorno.

A condição de contorno para fluxo normal é que não há fluxo através deste. Já para a tensão de cisalhamento ao longo do contorno podem ser prescritas as seguintes situações: tensão de cisalhamento tangencial zero (escoamento livre) ou escoamento parcial.

Para simulações em grande escala, a influência da tensão de cisalhamento ao longo dos contornos fechados pode ser desprezada. O escoamento livre é então aplicado para todos os contornos fechados. Já para simulações de fluxo em pequena escala (por exemplo, escala de laboratório), a influência das paredes laterais no fluxo tem que ser considerada.