UNIVERSIDADE ESTADUAL DE CAMPINAS
FACULDADE DE ENGENHARIA QUÍMICA
DESENVOLVIMENTO DE PROCESSOS QUÍMICOS

**DESENVOLVIMENTO DE UM MODELO DE FLUIDODINÂMICA
COMPUTACIONAL PARA O ESTUDO DA DISPERSÃO DE
EFLUENTES MISCÍVEIS EM RIOS COM CONTORNOS
IRREGULARES**

AUTOR: BRUNO ABDALLA DE SOUZA

ORIENTADOR: JOSÉ ROBERTO NUNHEZ

CO-ORIENTADOR: EVERTON MORAES MATOS

**Dissertação de Mestrado apresentada à Faculdade de Engenharia Química da
Universidade Estadual de Campinas como parte dos requisitos exigidos para
obtenção do título de Mestre em Engenharia Química.**

Campinas – São Paulo

Dezembro de 2009

FICHA CATALOGRÁFICA ELABORADA PELA
BIBLIOTECA DA ÁREA DE ENGENHARIA E ARQUITETURA - BAE - UNICAMP

So89d Souza, Bruno Abdalla de
Desenvolvimento de um modelo de fluidodinâmica computacional para o estudo da dispersão de efluentes miscíveis em rios com contornos irregulares / Bruno Abdalla de Souza. --Campinas, SP: [s.n.], 2009.

Orientadores: José Roberto Nunhez, Everton Moraes Matos.
Dissertação de Mestrado - Universidade Estadual de Campinas, Faculdade de Engenharia Química.

1. Dinâmica dos fluidos. 2. Rios. 3. Spline, Teoria do. 4. Efluente. I. Nunhez, José Roberto. II. Matos, Everton Moraes. III. Universidade Estadual de Campinas. Faculdade de Engenharia Química. IV. Título.

Título em Inglês: Development of a fluid dynamic model to study the dispersion of miscible effluents in river sections of irregular geometry

Palavras-chave em Inglês: Fluid Dynamics, Rivers, Spline theory, Effluent quality

Área de concentração: Desenvolvimento de Processos Químicos

Titulação: Mestre em Engenharia Química

Banca examinadora: José Roberto Nunhez, Efraim Cekinski, Leonardo Machado da Rosa

Data da defesa: 18/12/2009

Programa de Pós Graduação: Engenharia Química

Dissertação de Mestrado defendida por Bruno Abdalla de Souza e aprovada em 18 de Dezembro de 2009 pela banca examinadora constituída pelos doutores:

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Prof. Dr. Efraim Cekinski

Dr. Leonardo Machado da Rosa

Este exemplar corresponde à versão final da Dissertação de Mestrado em Engenharia Química defendida por Bruno Abdalla de Souza e aprovada pela banca examinadora em 18 de Dezembro de 2009.

Prof. Dr. José Roberto Nunhez

Orientador

Aos meus pais Mário César Oliveira de Souza e Rosana Maria Abdalla pelo apoio, educação, carinho e amor que recebi durante toda a minha vida. À minha esposa Samaira Bacco Izepi de Souza que, além de seu amor, compartilhou comigo a dificuldade de finalizar este trabalho, suportando minhas inúmeras horas de mau-humor. A toda minha família e amigos que direta ou indiretamente contribuíram para a conclusão deste trabalho.

AGRADECIMENTOS

A Deus por seu amor incondicional.

Aos meus pais pelo amor e educação que sempre me deram, responsáveis pela formação do meu caráter e da pessoa que sou hoje.

A minha esposa pelo amor e tempo que sempre dedica a mim. Sem seu apoio e compreensão durante meus diversos domingos de mau-humor, a conclusão deste trabalho seria certamente muito mais difícil do que realmente foi.

Aos meus irmãos Neto e Rodrigo, que hoje são mais que irmãos, são meus melhores amigos.

Ao meu amigo Guilherme Ignácio de Oliveira, simplesmente pela grande amizade que cultivamos até hoje, mesmo tão distantes.

A minha família e amigos, que tanto me ajudaram ao longo da minha vida.

A meu orientador José Roberto Nunhez pela paciência e dedicação durante o trabalho.

Ao meu co-orientador Everton Moraes Matos pela enorme ajuda que me deu durante todo o trabalho, ajudando-me na modelagem e na conclusão do programa em Fortran realizado para o estudo deste trabalho.

Aos meus colegas da época que freqüentei o Laboratório de Fluidodinâmica Computacional pelo companheirismo e momentos de descontração.

Aos meus amigos de trabalho da Refinaria Henrique Lage (REVAP) pela compreensão às minhas ausências a inúmeros eventos de relaxamento pós-trabalho em São José dos Campos, causado pela dedicação a conclusão deste trabalho.

Ao meu violão e ao rock n' roll que tanto me ajudaram nos momentos de relaxamento e inspiração.

A FAPESP pela bolsa de estudo concedida entre 2004 e 2005.

A todos e tudo que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

“Só sei que nada sei”

Sócrates

RESUMO

Este trabalho apresenta um modelo fluido-dinâmico para a simulação da dispersão contínua de efluentes miscíveis em rios de geometria irregular. Devido à geometria irregular do rio, as equações de conservação de massa e de momentum são descritas em um sistema de coordenadas generalizadas. Utilizando pontos conhecidos de cada margem de rio, foi usado o Método Spline Cúbico para encontrar as funções mais suaves possíveis que passem por esses pontos. Estas funções tornaram possível a obtenção das linhas de corrente e, então, usando o princípio da ortogonalidade, as linhas potenciais foram estimadas. Desta forma, a malha é formada pela intersecção entre as linhas potenciais e as linhas de corrente. Apesar da irregularidade da geometria, as variáveis não costumam apresentar altos gradientes e, por isso, não é necessário utilizar um complexo modelo de turbulência. Portanto, um modelo de turbulência de ordem zero foi escolhido para considerar a turbulência. As equações de conservação de massa e de momentum foram discretizadas através do Método dos Volumes Finitos. Os resultados mostram que o modelo é satisfatório na obtenção dos perfis de velocidade e concentração do efluente de seções de rio de geometria irregular. Além disso, foi previsto com sucesso a influência no perfil de concentração do efluente da variação da vazão do rio, do coeficiente de difusão do efluente na água, da concentração do efluente descartada na margem do rio, da área afetada pela emissão do efluente e da região da emissão do efluente.

Palavras-chave: 1. Dinâmica dos fluidos. 2. Rios. 3. Spline, Teoria do. 4. Efluente.

ABSTRACT

This work presents a fluid dynamic model for the simulation of the dispersion of miscible effluents in river sections of irregular geometry. Due to the irregular geometry, the equations of mass and momentum conservation are described in a generalized coordinate system. Using known coordinates (points) of each riverbank, it was used a modified Cubic Spline Method to find the smoother functions to fit these known points. These functions make possible to obtain the streamlines and then using the principle of orthogonality, the potential lines were estimated. So the mesh is formed by points obtained with the intersection of the potential lines and the streamlines. Despite the irregularity of the geometry, the variables do not usually present high gradients and, for this reason, it is not necessary to use a complex turbulence model for this study. Therefore, a zero-order turbulence model was chosen to account for turbulence. The equations for mass and momentum conservation were discretized using the Finite Volume Method. The results show that the model is satisfactory to obtain the effluent velocity and concentration for river sections with irregular geometry. Moreover, it was successfully predicted the influence in the effluent concentration profile of the variations of the river flow, the diffusion coefficient of the effluent in water, the effluent concentration discarded at the riverbank, the area affected by effluent emission and the region of effluent emission.

Keywords: 1. Fluid Dynamics. 2. Rivers. 3. Spline theory. 4. Effluent quality

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO	1
1.1. MOTIVAÇÃO PELO TEMA	1
1.2. OBJETIVOS	7
1.3. APRESENTAÇÃO DO MODELO	8
1.4. ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	9
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	12
2.1. FLUXO EM RIOS E CANAIS	12
2.2. DISPERSÃO DE EFLUENTES EM RIOS	15
2.3. A FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL	21
2.3.1. As malhas	22
2.3.2. O cálculo numérico na resolução de equações diferenciais parciais	27
2.3.2.1. Método das diferenças finitas	30
2.3.2.2. Método dos elementos finitos	31
2.3.2.3. Método dos volumes finitos	31
3. MODELAGEM	33
3.1. AS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO	33
3.1.1. A conservação de massa	34
3.1.1.1. Balanço Global de Massa	36
3.1.1.2. Balanço de massa para um componente	38
3.1.2. A segunda lei de Newton aplicada à fluidodinâmica	40
3.1.2.2. A equação bidimensional de momentum para o escoamento monofásico água-efluente	41

3.1.2.3. Condições de contorno	57
3.1.2.4. Turbulência	59
4. RESOLUÇÃO NUMÉRICA	63
4.1. GERAÇÃO DA MALHA	63
4.1.1. Definição das fronteiras	63
4.1.2. Cálculo das linhas de corrente	67
4.1.3. Cálculo das linhas potenciais	68
4.2. COEFICIENTE DE RELAXAÇÃO	69
4.3. DISCRETIZAÇÃO DA GEOMETRIA	70
4.4. MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS APLICADO AO ESCOAMENTO DE UM EFLUENTE MISCÍVEL EM RIOS	71
4.4.1. Balanço de Massa	72
4.4.2. Balanço de Momentum	80
4.4.2.1. Direção ξ	80
4.4.2.2. Direção η	91
4.4.3. Cálculo dos coeficientes	102
4.4.4. Número de equações e variáveis	102
4.4.5. Teste de convergência	102
4.4.6. Algoritmo do escoamento monofásico	103
5. RESULTADOS E DISCUSSÕES	105
5.1. RESULTADOS DA MALHA	106
5.2. RESULTADOS DA EMISSÃO DE UM EFLUENTE MISCÍVEL EM ÁGUA	115
5.2.1. Perfil de velocidade	115
5.2.2. Perfil de concentração do efluente	118
5.2.2.1. Variação da velocidade de entrada da água	119

5.2.2.2. Variação do coeficiente de difusão do efluente _____	122
5.2.2.3. Variação da concentração do efluente na entrada do rio _____	124
5.2.2.4. Variação do diâmetro da tubulação de emissão _____	127
5.2.2.5. Variação da região de emissão do efluente _____	130
6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES _____	135
REFERÊNCIAS _____	138
ANEXO 1 - DEFINIÇÃO DE UM DESLOCAMENTO _____	146
ANEXO 2 - O COMPRIMENTO DE UM ELEMENTO DE CURVA _____	155
<i>A Lei dos co-senos _____</i>	155
<i>O produto escalar _____</i>	156
<i>O comprimento _____</i>	158
ANEXO 3 - O CÁLCULO DE UM ELEMENTO DE ÁREA _____	160
<i>O produto vetorial _____</i>	160
<i>A área _____</i>	161
ANEXO 4 - O CÁLCULO DE UM ELEMENTO DE VOLUME _____	164
ANEXO 5 – OS TENSORES NA FLUIDODINÂMICA _____	167
APÊNDICE 1 – CÁLCULO DOS COEFICIENTES DAS EQUAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS _____	172

LISTA DE FIGURAS

<i>Figura 2.1: Esquema de dispersão de efluentes.</i>	17
<i>Figura 2.2: Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema de fluidodinâmica.</i>	29
<i>Figura 3.1: Elemento infinitesimal bidimensional em coordenadas generalizadas e os fluxos de massa em cada eixo (η e ξ).</i>	35
<i>Figura 3.2: Elemento de controle bidimensional com coordenadas ξ e η e suas tensões.</i>	41
<i>Figura 3.3: Visualização geométrica dos vetores $\vec{e}_\xi$ e $\vec{e}_\eta$ em um elemento de controle da malha.</i>	44
<i>Figura 3.4: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi}$.</i>	45
<i>Figura 3.5: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi}$.</i>	45
<i>Figura 3.6: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \eta}$.</i>	46
<i>Figura 3.7: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \eta}$.</i>	46
<i>Figura 3.8: Visualização da água escoando em um rio.</i>	51
<i>Figura 4.1: Rio qualquer discretizado, com q volumes de controle na direção ξ e t volumes de controle na direção η.</i>	71

<i>Figura 4.2: Elemento de controle para aplicação do método dos volumes finitos e os elementos de controle vizinhos a ele.</i>	72
<i>Figura 4.3: Fluxograma representando o algoritmo do escoamento monofásico.</i>	104
<i>Figura 5.1: Malha gerada para o exemplo 1.</i>	108
<i>Figura 5.2: Malha gerada para o exemplo 2.</i>	109
<i>Figura 5.3: Malha gerada para o exemplo 3.</i>	109
<i>Figura 5.4: Malha gerada para o exemplo 4.</i>	110
<i>Figura 5.5: Uma malha mais refinada para o exemplo 4.</i>	111
<i>Figura 5.6: Malha gerada para o exemplo 5.</i>	113
<i>Figura 5.7: Malha gerada para o exemplo 6 com cálculo das linhas potencias iniciado pela margem inferior.</i>	113
<i>Figura 5.8: Malha gerada para o exemplo 6 com cálculo das linhas potencias iniciado pela margem superior na região do pico.</i>	114
<i>Figura 5.9: Malha gerada para o exemplo 6 para mostrar que não há sobreposição entre as linhas potenciais.</i>	115
<i>Figura 5.10: Malha de um trecho de um rio.</i>	116
<i>Figura 5.11: Perfil de velocidade na direção do escoamento (ξ) em um trecho de um rio.</i>	117
<i>Figura 5.12: Perfil de velocidade na direção normal (η) ao escoamento.</i>	118
<i>Figura 5.13: Perfil de concentração do efluente para $v_{entrada} = 0,1$ m/s.</i>	120
<i>Figura 5.14: Perfil de concentração do efluente para $v_{entrada} = 1,0$ m/s.</i>	120
<i>Figura 5.15: Perfil de concentração do efluente para $v_{entrada} = 10,0$ m/s.</i>	121

<i>Figura 5.16: Perfil de concentração do efluente para $D = 0,00001 \text{ m}^2/\text{s}$.</i>	122
<i>Figura 5.17 Perfil de concentração do efluente para $D = 0,0001 \text{ m}^2/\text{s}$.</i>	123
<i>Figura 5.18: Perfil de concentração do efluente para $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{s}$.</i>	123
<i>Figura 5.19: Perfil de concentração do efluente para $C_{\text{entrada}} = 1,0 \text{ mg/l}$.</i>	125
<i>Figura 5.20: Perfil de concentração do efluente para $C_{\text{entrada}} = 10,0 \text{ mg/l}$.</i>	126
<i>Figura 5.21: Perfil de concentração do efluente para $C_{\text{entrada}} = 100,0 \text{ mg/l}$.</i>	127
<i>Figura 5.22: Perfil de concentração do efluente para $D_{\text{tubo}} = 5 \text{ in}$.</i>	128
<i>Figura 5.23: Perfil de concentração do efluente para $D_{\text{tubo}} = 10 \text{ in}$.</i>	129
<i>Figura 5.23: Perfil de concentração do efluente para $D_{\text{tubo}} = 20 \text{ in}$.</i>	130
<i>Figura 5.25: Perfil de concentração do efluente para emissão nas duas margens a 1 m do início do trecho do rio.</i>	132
<i>Figura 5.26: Perfil de concentração do efluente para emissão na margem superior a 1 m do início do trecho do rio.</i>	132
<i>Figura 5.27: Perfil de concentração do efluente para emissão na margem inferior a 1 m do início do trecho do rio.</i>	133
<i>Figura 5.28: Perfil de concentração do efluente para emissão nas duas margens no início do trecho do rio.</i>	133
<i>Figura 5.29: Perfil de concentração do efluente para emissão nas duas margens a 3 m do início do trecho do rio.</i>	134
<i>Figura 1: Exemplo de coordenada cartesiana.</i>	147
<i>Figura 2: Exemplo de coordenada polar.</i>	147
<i>Figura 3: Sistema de coordenada cartesiana e sistema ortogonal qualquer de coordenada.</i>	148

<i>Figura 4: Vetor deslocamento ($d\vec{r}$) em coordenadas cartesianas.</i>	150
<i>Figura 5: Vetor deslocamento ($d\vec{r}$) em coordenadas cilíndricas.</i>	152
<i>Figura 6: Triângulo de lados a, b e c e ângulos α, β e γ.</i>	155
<i>Figura 7: Vetores $\vec{U}$, $\vec{V}$ e $\vec{W}$ no espaço tridimensional.</i>	156
<i>Figura 8: Elemento infinitesimal de uma curva.</i>	158
<i>Figura 9: Paralelogramo formado pelos vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$.</i>	161
<i>Figura 10: Sistema de coordenadas ortogonal qualquer com vetores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$.</i>	162
<i>Figura 11: Sólido formado pelos vetores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$.</i>	164
<i>Figura 12: Sólido infinitesimal em um sistema de coordenadas ortogonal qualquer.</i>	165
<i>Figura 13: Sistema de coordenadas cartesianas com vetores unitários $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ e um vetor $\vec{r}$ qualquer.</i>	167
<i>Figura 14: Elemento de controle contendo o ponto P; elementos de controle vizinhos e pontos de intersecção entre as linhas de corrente e as linhas potenciais.</i>	172

NOMENCLATURA

LETRAS LATINAS

A	Área [m ²] e Matriz de coeficientes na equação discretizada da concentração e da velocidade de um efluente em um determinado elemento de controle [adimensional]	
A ^M , B ^M , C ^M .D ^M	Coeficientes de f(x)	[adimensional]
A _T	Área da seção transversal a um escoamento	[m ²]
B	Constante do modelo turbulento [adimensional] e Vetor de coeficientes na equação discretizada da concentração e da velocidade de um efluente em um determinado elemento de controle [adimensional]	
C	Concentração	[kg x m ⁻³]
D	Coeficiente de difusão	[m ² x s ⁻¹]
$\tilde{D}$	Tensor deformação	[kg x m ⁻¹ x s ⁻²]
$\bar{e}$	Vetor unitário	[m]
E ^M , F ^M , G ^M .H ^M	Coeficientes de g(x)	[adimensional]
f(x)	Função que representa a margem superior	[adimensional]

g	Aceleração gravitacional da Terra	$[m \times s^{-2}]$
$g(x)$	Função que representa a margem inferior	[adimensional]
h	Comprimento característico de uma direção qualquer	[m]
i	Índice relativo: ao número de elementos de controle na direção ξ ; ao número de pontos de uma margem	[adimensional]
j	Índice relativo ao número de elementos de controle na direção η	[adimensional]
$\tilde{I}$	Tensor diagonal unitário	$[kg \times m^{-1} \times s^{-2}]$
k	Constante de Von Kármán	[adimensional]
K	Matriz de coeficientes do sistema linear no spline cúbico	[adimensional]
L	Vetor de coeficientes do sistema linear no spline cúbico	[adimensional]
L_c	Comprimento característico de um canal	[m]
m	Massa	[kg]
$m(x)$	Função que representa as linhas potenciais	[adimensional]
$MI(x,y)$	Ponto da margem inferior	[m]
$MS(x,y)$	Ponto da margem superior	[m]
n	Número de pontos de uma margem do rio	[adimensional]

P	Pressão exercida sobre um fluido	$[\text{kg} \times \text{m}^{-1} \times \text{s}^{-2}]$
P_m	Perímetro molhado de um escoamento	$[\text{m}]$
q	Número de elementos de controle na direção ξ	[adimensional]
$\vec{r}$	Vetor com início na origem do sistema cartesiano e final em um ponto qualquer da malha	$[\text{m}]$
Re	Número de Reynolds	[adimensional]
S	Comprimento de uma curva	[adimensional]
Sc	Número de Schmidt	[adimensional]
S_{TOTAL}	Comprimento de uma margem	$[\text{m}]$
t	Tempo [s] e número de elementos de controle na direção η	[adimensional]
t_0	Tempo anterior	$[\text{s}]$
$\vec{T}$	Tensor da tensão aplicada sobre um fluido	$[\text{kg} \times \text{m}^{-1} \times \text{s}^{-2}]$
U_1, U_2, U_3	Coordenadas ortogonais quaisquer	$[\text{m}]$
v	Velocidade de um fluido	$[\text{m} \times \text{s}^{-1}]$
v^*	Velocidade friccional do modelo de turbulência de Spalding	$[\text{m} \times \text{s}^{-1}]$
V	Volume	$[\text{m}^3]$
$w(x)$	Função que representa as linhas de corrente	[adimensional]

x,y,z	Coordenadas cartesianas	[m]
X	Matriz solução do sistema linear no spline cúbico	[adimensional]

LETRAS GREGAS

α	Variável que determina o número de linhas de corrente	[adimensional]
δ	Ângulo de inclinação do rio	[°]
η	Coordenadas curvilíneas na direção normal ao escoamento	[m]
θ	Distância entre um determinado elemento de controle e a margem do modelo de turbulência de Spalding	[m]
μ	Viscosidade dinâmica de um fluido	[kg x s ⁻¹ x m ⁻¹]
ξ	Coordenadas curvilíneas na direção do escoamento	[m]
ρ	Massa específica de um fluido	[kg x m ⁻³]
σ	Tensão normal de um fluido	[kg x m ⁻¹ x s ⁻²]
τ	Tensão cisalhante aplicada sobre um fluido	[kg x m ⁻¹ x s ⁻²]
ν	Coeficiente de relaxação [adimensional] e viscosidade cinemática [m ² /s]	
ψ	Primeira derivada de $f(x)$ ou $g(x)$ no primeiro ponto da margem [adimensional]	

SUBSCRITOS

A Referente ao efluente

B Referente à água

C Referente ao meio de dispersão (água + efluente)

ef Referente à viscosidade e à difusividade efetiva

T Referente à viscosidade e à difusividade turbulenta

P Elemento de controle analisado

W,E,S,N, NW, NE, SW, SE Elementos de controle vizinhos ao elemento de controle analisado P

n,s,e,w Arestas do elemento de controle analisado (norte, sul, leste, oeste)

SUPERESCRITOS

T Transposto

* Relativo à iteração anterior

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

Neste Capítulo será apresentada uma introdução ao tema de dispersão de efluentes em rios, mostrando a importância da preservação dos recursos naturais.

1.1. MOTIVAÇÃO PELO TEMA

A humanidade precisa dos recursos naturais oferecidos pelo planeta Terra para viver, principalmente do ar para respirar; da água para beber e do solo para plantar e extrair dele outros recursos para seu uso. Apesar disso, ao longo da história houve um uso não-sustentável desses recursos pelos seres humanos, principalmente na história contemporânea, o que acarretou em sérios danos ao meio ambiente.

O ar é considerado hoje impróprio para se respirar em muitas regiões do planeta, principalmente em regiões de alta concentração populacional e industrial. Nestes grandes centros urbanos, veículos automotores expõem diariamente enormes quantidades de gases poluentes, assim como as indústrias também os expõem. Uma consequência disso está no elevado número de doenças respiratórias causadas por este tipo de poluição nestas regiões.

O solo, outro grande recurso muito poluído, tem como componentes principais a fase sólida (matéria mineral e matéria orgânica), a água e o ar . O solo pode ser encarado como uma interface entre o ar e a água (entre a atmosfera e a hidrosfera), sendo imprescindível à produção de biomassa. Assim, o solo não é inerte; não é o simples local onde assentamos os pés; não é o mero suporte para habitações e outras infra-estruturas indispensáveis ao ser humano. Então, sempre que lhe é adicionado qualquer substância estranha, considera-se que ele esteja sendo poluído e, direta ou indiretamente, a água e o ar também.

O enfoque deste trabalho está na poluição da água. A água compõe um dos recursos cruciais à vida terrestre. Porém, seu consumo é limitado pelas condições impostas pela natureza. O planeta Terra possui cerca de 70% de sua superfície coberta por água, na qual sua distribuição está demonstrada na Tabela 1.1.

Tabela 1.1: Distribuição da água mundial.

Fonte de Água	Volume de água (milha³)	Porcentagem do total
Oceanos	317.000.000	97,24%
Calotas glaciais, geleiras	7.000.000	2,14%
Lencóis subterrâneos	2.000.000	0,61%
Lagos de água doce	30.000	0,009%
Mares internos	25.000	0,008%
Umidade retida no solo	16.000	0,005%
Atmosfera	3.100	0,001%
Rios	300	0,0001%
Total	326.000.000	100%

Fonte: U.S. Geological Survey, 1967.

Pode-se perceber pela Tabela 1.1 que pouco menos de 1% da água está disponível para consumo humano. Isto se não forem excluídas as águas inadequadas

pela contaminação com elementos químicos em índices que excedem aos níveis aceitáveis pelos organismos mundiais de saúde.

O Brasil pode ser considerado um país privilegiado, pois dispõe de 8% do volume total de água doce disponível no mundo, sendo a região Amazônica a mais rica, possuindo 80% deste total (Programa Ambiental: A Última Arca de Noé, 2005). Além disso, ainda possui em seu território o maior aquífero do mundo - o aquífero Guarani - que ocupa um espaço de um milhão e duzentos mil km², distribuído da seguinte forma: 70,3% localizado no Brasil; 18,9% na Argentina; 6% no Paraguai e 4,8% no Uruguai (Secretaria do Meio Ambiente do Estado de São Paulo, 2005).

Boa parte da população mundial (cerca de 40%) vive uma situação bem diferente da realidade brasileira, onde a escassez de água para consumo é uma dificuldade que faz parte da vida de seus habitantes. Pior ainda encontram-se cerca de 22 países, onde se deparam diariamente com a falta deste recurso (Programa Ambiental: A Última Arca de Noé, 2005).

Nem toda água é própria ou encontra-se disponível para o consumo humano ou até mesmo para o consumo em atividades de produção. Quase a totalidade da água utilizada para o abastecimento público e industrial é proveniente de rios. Com relação a estes recursos hídricos, a possibilidade de escassez de água tem se mostrada crítica e com consequências já percebidas por parte da população do planeta. Algumas regiões convivem diariamente com a suspensão parcial do abastecimento de água potável. Cerca de um quarto da população mundial não tem acesso à água potável. Pesquisas realizadas em 1985 pela Organização Mundial de Saúde (OMS) revelam que 97% dos

habitantes de países industrializados têm acesso à água tratada enquanto que nos países em desenvolvimento este índice cai para 35%.

A escassez de água potável se deve a uma série de fatores, tais como: econômicos, geográficos, demográficos, culturais, entre outros. Além dos fatores citados, observa-se também um número alarmante de rios cujas águas tornaram-se impróprias para o uso devido ao despejo de efluentes industriais.

Além dos despejos feitos pelas indústrias, muitos deles realizados de forma criminosa, existe outro fator de poluição dos rios; os vazamentos acidentais de poluentes. Dentre estes poluentes está o petróleo e seus derivados, na qual seu vazamento pode acarretar sérios danos aos humanos e aos animais que ali vivem e dependem deste corpo aquático.

Inúmeros vazamentos de óleo já aconteceram na história e alguns deles serão apresentados a seguir. O primeiro grande caso conhecido envolveu o encalhe do navio Torrey Canyon, em 1967, resultando no derramamento de cento e vinte três mil toneladas de óleo, atingindo a zona costeira da Inglaterra e da França e provocando a morte de aves e prejuízos à pesca e ao turismo. Em 1978, cerca de duzentos e trinta mil toneladas de petróleo vazaram do navio petroleiro Amoco Cadiz, ocasionando uma mancha de cento e dez quilômetros de extensão nas praias da costa do Reino Unido. Um ano depois, o navio petroleiro Atlantic Empress deixou vazar cento e sessenta mil toneladas de óleo em Tobago. Em 1989, o navio Exxon Valdez deixou vazar trinta e oito mil toneladas de petróleo no Alasca, causando uma verdadeira catástrofe ambiental na região. Com a guerra do Golfo em 1991, milhões de barris de petróleo vazaram no

Golfo Pérsico, causando a morte de milhares de peixes, tartarugas e aves. No Brasil, a CETESB - Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (SP) – registrou o primeiro caso de vazamento de óleo no país em janeiro de 1978, o que afetou drasticamente o litoral norte do estado de São Paulo (Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 2005).

O Brasil possui outros inúmeros exemplos de desastres ecológicos causados por derivados de petróleo, sendo alguns deles citados abaixo.

Os primeiros relatos de vazamentos datam de 1955, em São Sebastião, durante as operações de transbordo entre os navios maiores para os menores. Ainda no porto de São Sebastião, ocorreu o primeiro grande episódio conhecido no país em agosto de 1974, quando o petroleiro Takimyia Maru chocou-se com uma rocha no canal de São Sebastião, provocando o vazamento aproximado de seis mil toneladas de óleo (Poffo et al., 1996).

Em março de 1975, seis mil toneladas de óleo foram derramadas após um acidente com um cargueiro fretado pela Petrobras. Oito anos depois, no mês de março, três milhões de litros de óleo vazaram de um oleoduto em Bertioga. Em maio de 1994, dois milhões e setecentos mil litros de óleo poluíram uma grande extensão do litoral paulista, atingindo dezoito praias do litoral norte paulista. No mês de março de 1997, um vazamento de dois milhões e oitocentos mil litros de óleo combustível atingiu manguezais na Baía de Guanabara (RJ) devido ao rompimento de um duto da Petrobras ligando a Refinaria de Duque de Caxias (RJ) ao terminal DSTE - Ilha D'Água. Em janeiro de 2000, uma falha de funcionamento nos sensores de pressão de um

oleoduto de conexão entre duas unidades de armazenamento da Petrobras acarretou em vazamento de um milhão e trezentos mil litros de óleo combustível na Bacia de Guanabara. Em julho do mesmo ano, quatro milhões de litros de petróleo foram derramados em uma operação de transferência de petróleo do Terminal de São Francisco do Sul para a Refinaria do Paraná, atingindo uma área de trezentos mil metros quadrados, próxima ao rio Barigui. Este rio foi atingido por cerca de um milhão de litros e, em seguida, o rio Iguaçu também foi atingido (Ambiente Brasil, 2005).

As indústrias usam a água dos rios em seus processos, tais como: produção de vapor para aquecimento de correntes de processo ou para geração de energia elétrica, resfriamento de correntes de processo, aumentar rendimento de produtos com maior valor agregado, entre diversas outras utilizações. Também devido aos seus processos, elas também geram efluentes que devem ser descartados, sendo muitos deles lançados aos rios. Para que isso não seja feito de forma indiscriminada e criminosa, o Brasil possui legislação que estabelece níveis máximos de concentração de certos efluentes, de forma o impacto ao meio ambiente seja minimizado e ainda não se prejudique o abastecimento de água das cidades do país.

Assim, o cenário descrito justifica a necessidade de estudos que visem o entendimento da dispersão de efluentes em rios e que possam prever seu possível impacto ambiental. Tais estudos são necessários para minimizar o risco de desastres ambientais e evitar a escassez ainda maior de recursos hídricos.

Além disso, é importante citar a Resolução CONAMA 357 de 17 de março de 2005 do Conselho Nacional do Meio Ambiente que dispõe sobre a classificação dos

corpos de água e diretrizes ambientais para seu enquadramento, bem como estabelece as condições e padrões de lançamento de efluentes. Nesta Resolução, mais especificamente no artigo 33 pode-se ler: “A extensão e as concentrações de substâncias na zona de mistura deverão ser objeto de estudo, nos termos determinados pelo órgão ambiental competente, às expensas do empreendedor responsável pelo lançamento.” Desta forma, qualquer empreendedor que lance efluentes em corpos aquáticos deverá realizar estudos sobre os efeitos do lançamento deste efluente sobre o corpo de água receptor.

1.2. OBJETIVOS

Este trabalho tem como principal objetivo desenvolver um software capaz de prever a dispersão de efluentes miscíveis em água que estão presentes nos efluentes hídricos que são lançados em fluxos naturais de água, podendo contribuir para diminuir o impacto causado.

Além disso, este estudo também apresenta os seguintes objetivos específicos:

- A modelagem e obtenção da malha de um rio com contornos irregulares;
- A modelagem matemática e numérica de escoamento de rios com contornos irregulares, utilizando o conceito de coordenadas generalizadas;
- A obtenção do perfil de velocidade de um determinado rio qualquer;
- A obtenção do perfil de concentração de um determinado efluente após ser lançado em um rio;

- A implementação de uma metodologia de solução das equações do modelo com uso do Método dos Volumes Finitos;
- O desenvolvimento de um programa em Linguagem Fortran capaz de resolver o modelo matemático proposto.

1.3. APRESENTAÇÃO DO MODELO

O sistema em estudo consiste em um fluxo de água através de um caminho de margens irregulares, típico da geometria de um rio. Além disso, será considerado o lançamento contínuo de um efluente hídrico pelas margens do rio contendo uma determinada concentração. Devido à geometria irregular do rio, será obrigatório o uso de coordenadas generalizadas. As seguintes hipóteses serão adotadas pelo modelo proposto neste trabalho:

- Não há ocorrência de reação química entre as fases;
- Sistema contínuo;
- O efluente é miscível em água, o que caracteriza um escoamento monofásico;
- Modelo bidimensional, ou seja, a superfície do rio será considerada plana. Desta forma, está sendo desconsiderada a profundidade do leito do rio;
- Os fluidos são Newtonianos;
- Os fluidos são incompressíveis;
- As massas específicas da água e do efluente não variam;
- A massa específica da mistura água e efluente é considerada igual à massa específica da água, uma vez que se considera que a massa de efluente lançada ao rio é muito menor que a massa de água que escoar pelo rio.

Considerando tais hipóteses, serão aplicados os princípios de conservação de massa do efluente e de conservação de momentum da água em cada direção, resultando em três equações (uma oriunda da conservação de massa e duas da conservação de quantidade de movimento). Em virtude da impossibilidade de resolução analítica dessas equações, o Método dos Volumes Finitos (MVF) será aplicado. Assim, existe a necessidade de uma resolução numérica do problema, o que acarreta na necessidade de discretização do domínio do rio. Então, o MVF é aplicado nas equações para cada elemento de controle da malha a fim de se obter a concentração do efluente ao longo do rio, além das velocidades do rio em cada direção.

Em virtude dos altos custos dos pacotes comerciais de Fluidodinâmica Computacional, o problema é solucionado com o uso da linguagem Fortran com o intuito de se obter um software próprio para resolução deste tipo de escoamento. Este trabalho foi desenvolvido no Laboratório de Fluidodinâmica Computacional (L-CFD) da Faculdade de Engenharia Química da Unicamp.

1.4. ORGANIZAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação está dividida em seis capítulos que foram escritos e organizados de uma forma lógica e sequencial.

No Capítulo 1, Introdução, o problema da poluição e da escassez da água doce foi apresentado, onde foram apresentados os argumentos a fim de justificar o estudo feito neste trabalho. Também há uma apresentação sucinta do modelo e suas hipóteses, além da apresentação de como esta dissertação está dividida.

No capítulo seguinte - Revisão Bibliográfica - são apresentados os estudos bibliográficos referentes ao desenvolvimento de geração de malhas e à dispersão de efluentes em rios. Adicionalmente, apresenta-se uma introdução à Fluidodinâmica Computacional e ao Cálculo Numérico focado nos principais métodos de resolução de equações diferenciais parciais.

O Capítulo 3, Modelagem, apresenta todo o suporte matemático para a utilização de coordenadas generalizadas nos princípios de conservação de massa e momentum. Além disso, é feita a dedução do equacionamento do modelo de acordo com as hipóteses assumidas e também se apresenta a técnica usada para a geração da malha bidimensional de um rio qualquer.

No Capítulo 4, Resolução Numérica, o método de resolução para geração de malhas bidimensionais é apresentado. Porém, o enfoque principal deste capítulo está na resolução numérica do escoamento monofásico utilizando o Método dos Volumes Finitos, além de mostrar também toda a sequência de resolução do problema.

Os resultados obtidos são apresentados e discutidos no Capítulo 5, Resultados e Discussões. Neste capítulo, os resultados apresentados são em relação ao escoamento monofásico de um efluente miscível em um trecho qualquer de rio. Os resultados, de uma forma geral, referem-se à geração da malha bidimensional ortogonal e aos perfis de velocidade e de concentração do efluente. Simultaneamente à apresentação dos resultados, as discussões são realizadas.

Finalmente, o Capítulo 6 (Conclusões e Sugestões) apresenta as conclusões obtidas referentes ao tipo de malha gerada e da análise dos perfis de velocidade e

concentração do efluente na emissão de efluente industriais em rios. Para finalizar, são feitas algumas sugestões a fim de aperfeiçoar o modelo e ajudar em trabalhos futuros relacionados ao tema.

CAPÍTULO 2

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Este Capítulo apresenta uma extensa revisão bibliográfica referente aos estudos de geração de malhas e da dispersão de efluentes em rios.

2.1. FLUXO EM RIOS E CANAIS

Segundo French (1986, p. 2), “um canal aberto é um conduto que possui uma superfície livre, ou seja, uma superfície exposta à atmosfera”. Ainda de acordo com este autor, este tipo de canal abrange desde processos artificiais, como canais para irrigação, valas de drenagem e canais para navegação; como processos naturais, tais como: rios, estuários, lagos e mares.

O escoamento de um fluido, como a água, por exemplo, em canais abertos é semelhante ao escoamento dentro de um tubo. A diferença entre eles está no fato de que a superfície em canais abertos está exposta à atmosfera, enquanto que no tubo este fato não ocorre. A resolução de problemas em canais abertos tende a ser mais difícil em relação aos escoamentos em tubos, já que a posição da superfície livre pode mudar com o tempo e com o espaço (French, 1986).

Os escoamentos em canais abertos podem ser classificados de diversas maneiras e baseadas em diversos critérios. Assim, Chow (1959) classificou os fluxos em canais abertos baseado nas variações ocorridas na profundidade do fluxo em relação ao tempo e ao espaço:

- Profundidade do fluxo em relação ao espaço:

Fluxo variado: Ocorre quando a profundidade do fluxo varia ao longo do comprimento do canal. O fluxo variado pode ainda ser dividido em rapidamente variado ou gradualmente variado.

Fluxo uniforme: Ocorre quando a profundidade do fluxo é constante em qualquer seção transversal do canal em estudo.

- Profundidade do fluxo em relação ao tempo:

Fluxo permanente: Ocorre quando a profundidade do fluxo não varia ao longo do tempo.

Fluxo não-permanente: Quando a profundidade do fluxo varia com o tempo.

Assim como o escoamento em tubos, a relação entre as forças inerciais e viscosas em escoamento em canais abertos pode ser representada pelo número de Reynolds (Re) e classificada como laminar, de transição ou turbulento. A equação (2-1) apresenta a definição deste número adimensional:

$$Re = \frac{v \cdot L_C}{\nu} \quad (2-1)$$

Em que v é a velocidade média característica do escoamento; L_C é o comprimento característico do canal (ou raio hidráulico) e ν é a viscosidade cinemática do fluido.

O raio hidráulico de um canal é determinado pela razão entre a área da seção transversal ao escoamento, A_T , e o perímetro molhado, P_m , como mostrado a seguir:

$$L_C = \frac{A_T}{P_m} \quad (2-2)$$

A viscosidade cinemática é a relação da viscosidade dinâmica, μ , dividida pela massa específica, ρ .

No fluxo laminar, as forças viscosas são predominantes sobre as fontes inerciais, enquanto que no fluxo turbulento as forças inerciais são as predominantes. A faixa de fluxo de transição é aquela em que o escoamento não pode ser classificado nem como completamente laminar nem como completamente turbulento. A classificação em relação ao número de Reynolds para fluxos em canais abertos feita por French (1986) está na Tabela 2.1:

Tabela 2.1: Classificação dos fluxos em canais abertos em relação ao número de Reynolds

Faixa de Re	Tipo de fluxo
$Re \leq 500$	Laminar
$500 \leq Re \leq 12500$	Transição
$Re \geq 12500$	Turbulento

Embora estas faixas de números de Reynolds existam na literatura, esta classificação é considerada generalizada em virtude da variedade e complexidade dos

escoamentos em canais abertos. Para Chow (1959, p. 12), “na maioria dos canais abertos o fluxo laminar raramente acontece” e o fluxo turbulento é predominante. Este autor ainda menciona o fato de que a superfície de um rio parecer plana e suave para um observador não significa que o escoamento em questão seja laminar. Isso provavelmente indica apenas que a velocidade na superfície é menor que a requerida para a formação de ondas.

2.2. DISPERSÃO DE EFLUENTES EM RIOS

A dispersão de efluentes é o fenômeno de transporte que tem como causa a ocorrência simultânea de difusão molecular e/ou turbulenta e da convecção. De um lado o transporte difusivo ocorre em função do gradiente de potencial químico das espécies envolvidas, que equivale ao gradiente de concentração existente entre as diferentes regiões do escoamento, causando a dispersão das moléculas entre as camadas de fluido. Por outro lado o transporte convectivo tem como causa as componentes de velocidade do escoamento.

O coeficiente de difusão representa a facilidade que um determinado soluto se move entre as camadas de fluido de um solvente. No caso específico da dispersão de efluentes, este parâmetro é conhecido como coeficiente de dispersão; quanto maior seu valor, maior a facilidade do efluente dispersar de forma difusiva entre as camadas da água do rio (Cox, 2003).

Fischer (1967) apresentou uma metodologia para obtenção da taxa de dispersão longitudinal em correntes naturais, em que obteve em laboratório diversos coeficientes

de dispersão para distintas condições de escoamento. O trabalho de Nordin e Sabol (1974) mostrou que dispersões ocorridas no meio ambiente não apresentam coeficientes de dispersão constantes. No trabalho de Machado (2006) o coeficiente de dispersão foi considerado um parâmetro de ajuste do modelo, sendo seu valor determinado a partir de dados de concentração e vazão do rio de interesse.

Neste trabalho o coeficiente de dispersão é considerado constante e com valor pré-determinado, uma vez que não há o objetivo de se obter resultados realistas, mas sim testar se o modelo gera resultados coerentes com as teorias da fluidodinâmica.

O fenômeno de dispersão de efluentes industriais em rios é apresentado na Figura 2.1. Conforme apresentado, o efluente é lançado com uma vazão constante Q_e na lateral do rio que escoar com uma vazão também constante Q_r . Conforme o efluente dispersa ao longo do leito do rio, sua pluma formada se expande na zona de mistura, de comprimento LD , até atingir uma zona de mistura completa, onde a dispersão já não é mais significativa. A partir de então, apenas as reações de decomposição da substância em estudo devem ser levadas em consideração, caso seja um componente degenerativo.

Figura 2.1: Esquema de dispersão de efluentes.

Muitos estudos têm sido realizados com o objetivo de compreender as interações entre a descarga de efluentes, a estrutura do fluido, a geometria do canal, e o transporte de material sedimentado. De maneira geral, a investigação em campo destas interações é realizada pontualmente, o que o torna demorado, caro e, de certa maneira, ineficiente, uma vez que o sistema em si pode sofrer mudanças. Por outro lado, um modelo numérico, se comprovada seu potencial e confiabilidade de predição, pode ser ajustado a uma nova situação sem a necessidade de um novo estudo detalhado e demorado.

Uma importante questão que surge na escolha de um modelo de dispersão de efluentes é o número de dimensões a ser considerada. Apesar de apresentar com mais fidelidade o processo em estudo, os modelos tridimensionais devem ser tratados com

cautela, uma vez que estes requerem um considerável aumento de esforço computacional.

Lane et al. (1999) aplicaram a fluidodinâmica computacional para modelar o fluxo em rios, comparando as abordagens bidimensionais (2D) e tridimensionais (3D). Em ambas as abordagens, os resultados foram comparados com dados experimentais. As equações utilizadas foram a de conservação de massa e a de momento de Navier-Stokes para um fluido incompressível. Os termos da influência do vento sobre a superfície, o termo associado ao efeito Coriolis e o gradiente de pressão horizontal não foram considerados. No caso do modelo 3D foram observadas limitações referentes à capacidade de predição do modelo; basicamente isto ocorreu devido à grande quantidade de informações referentes à topografia do rio necessários neste tipo de modelagem. Por outro lado, apenas o modelo 3D foi capaz de prever fluxos secundários, além de apresentar maior capacidade de predição em escala de aplicação.

Lien et al. (22, 1999) desenvolveram um modelo bidimensional de profundidade média para simular as características do fluxo em canais curvos, considerando o sistema de coordenadas ortogonal curvilíneo. O modelo utilizado leva em consideração a existência de fluxo secundário através do cálculo de tensões de dispersão. As tensões de cisalhamento na superfície da água causadas pelo vento foram consideradas nulas e o perfil de velocidade assumido foi de distribuição logarítmica. Nas fronteiras sólidas, a lei da parede foi aplicada fora da subcamada laminar e da camada de transição. Os resultados obtidos considerando o fluxo secundário e em

condição de não-deslizamento apresentaram boa concordância com os dados experimentais no caso de canais com curvatura média.

Para um canal plano que apresentava uma depressão em sua base, Vasiliev et al. (1997) estudaram seu fluxo de forma bidimensional e assimétrica, utilizando um modelo de turbulência de uma única equação e o sistema de coordenadas ortogonal curvilíneo. A condição de contorno de não deslizamento foi utilizada para as paredes. Os resultados mostraram razoável concordância com dados experimentais.

Ye & McCorquodale (48, 1998) realizaram uma simulação dos fenômenos de transferência de momento e massa de um canal curvo utilizando um modelo matemático tridimensional, além de utilizar o modelo de turbulência $k-\epsilon$. O modelo foi utilizado para simular duas situações típicas para canais curvos. Foram simulados um canal de 270° de curvatura e um canal de curvas opostas de 90° , em que os resultados foram comparados com dados experimentais. Foram prescritas distribuições uniformes para todas as variáveis dependentes na entrada do canal; na saída, os gradientes normais de todas as variáveis dependentes foram considerados nulos. Os efeitos de parede foram determinados por meio de uma função de parede refinada que se mostrou mais adequada que a convencional lei logarítmica. Para esta função, a velocidade normal à parede foi considerada nula. O gradiente normal de concentração era nulo nas fronteiras sólidas. Os resultados obtidos pelo modelo mostraram boa concordância com os dados experimentais em ambas as simulações. Na segunda simulação algumas discrepâncias foram observadas nas proximidades do ponto de descarga.

Modenesi (2001) desenvolveu um modelo fluidodinâmico tridimensional de previsão da dispersão de um dado efluente inerte sendo lançado em um rio. O leito do rio é representado por uma calha cilíndrica de seção transversal semi-elíptica, de forma que é possível representar rios de largura e profundidade quaisquer. O modelo também assume que o rio não possui curvas. O perfil de velocidades axiais é calculado usando o Método das Diferenças Finitas de 4ª Ordem e os perfis de concentração são integrados ao longo da direção axial usando o Método de Runge-Kutta de 4ª Ordem. Embora tenha considerado escoamento laminar e limitado ao estudo de trechos retilíneos, o trabalho apresentou bons resultados quando comparados com dados experimentais coletados no Rio Atibaia em um projeto em conjunto com a REPLAN/Petrobras. Além disso, o programa computacional desenvolvido obtém a solução de forma rápida, especialmente quando comparado com outros pacotes de CFD do mercado.

Em continuação ao trabalho de Modenesi (2001), Machado (2006) apresentou um modelo de Fluidodinâmico Computacional tridimensional para simular a dispersão de substâncias solúveis em rios. O método dos volumes finitos foi utilizado para aproximar as equações de conservação de momento, de massa e de espécie química. O sistema de coordenadas cartesianas foi escolhido para representar o sistema e o rio foi considerado retilíneo. Foi utilizado um modelo algébrico de turbulência de ordem zero, além de utilizar o modelo de Streeter-Phelps para prever a concentração de substâncias orgânicas e de oxigênio dissolvido ao longo do rio. O modelo também prevê o impacto causado pela ocorrência de múltiplos pontos de emissão no trecho estudado. Os resultados foram comparados com resultados experimentais do rio Atibaia

e mostraram que a metodologia proposta é uma boa ferramenta para a avaliação do impacto ambiental causado pela emissão de efluentes em rios. Além disso, assim como no trabalho de Modenesi (2001), o software é bastante rápido na obtenção dos resultados.

O trabalho de Machado (2006) também mostrou que um efluente ao ser lançado em um rio apresenta uma variação pequena de concentração na direção da profundidade do rio, sendo as variações mais significativas ao longo dos eixos do comprimento e da largura do rio.

Baseado nos resultados obtidos por Machado (2006), este trabalho propõe a modelagem bidimensional do lançamento contínuo de um dado efluente em rios, considerando ainda coordenadas generalizadas para simular a geometria curvilínea dos rios.

2.3. A FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL

O desenvolvimento dos computadores e de suas capacidades de armazenamento de dados permitiu a rápida evolução da Fluidodinâmica Computacional (CFD). Devida a sua extrema versatilidade para simulação e predição de diversos tipos de escoamento, a CFD vem se desenvolvendo rapidamente desde a década de 80. Muitos processos de escoamento começaram a ser entendidos a partir da aplicação da CFD, já que antes só havia a disponibilidade de se avaliar os fenômenos experimentalmente, o que pode limitar o entendimento de muitos casos reais.

2.3.1. As malhas

Uma vez que as equações diferenciais provenientes da modelagem do problema são resolvidas numericamente pela CFD, é necessário que o domínio de solução do problema (entre as condições de contorno) seja discretizado, o que gera a malha do problema. Existem diversas maneiras de se fazer uma malha bidimensional, podendo-se escolher malhas estruturadas ou não-estruturadas; ortogonais ou não-ortogonais.

Segundo Maliska (2004), uma malha estruturada é definida como aquela “malha em que cada volume de controle possui o mesmo número de volumes de controle vizinhos”, enquanto que em malhas não-estruturadas este fato não acontece. Uma malha ortogonal é aquela em que as linhas coordenadas da malha são ortogonais entre si (Maliska, 2004). Suas vantagens de uso, segundo Maliska (2004), estão na aplicação das condições de contorno envolvendo as derivadas normais às funções da fronteira e na obtenção de equações mais simples de serem discretizadas e implementadas computacionalmente. A desvantagem de uma malha ortogonal, ainda de acordo com Maliska (2004), seria a perda de generalidade do modelo numérico, principalmente em geometrias complexas tridimensionais. Em virtude da simplicidade das geometrias bidimensionais, este trabalho trata também da geração de uma malha estruturada ortogonal.

A boa representação das fronteiras de um determinado sistema é crucial para a determinação do domínio da malha, assim como para um bom uso das condições de contorno do problema. No caso de geometrias bidimensionais, o método *spline* é muito utilizado para este fim.

Matematicamente, *spline* é um conjunto de funções dependentes entre si, em que cada função é definida entre os pontos nodais consecutivos. Esta dependência entre as funções ocorre pela igualdade das derivadas em ambos os lados dos pontos nodais, exceto nos primeiro e último pontos. As funções também devem passar pelos pontos que as definem. O método *spline* cúbico é um dos mais utilizados em aplicações científicas e de engenharia e foi o utilizado neste trabalho (Chapra e Canale, 1988).

Schoenberg (1946) foi quem apresentou o método *spline* pela primeira vez e, após isso, surgiram diversos trabalhos na área. O método de *spline* cúbico foi discutido de uma forma mais profunda nos trabalhos de Landis e Nilson (1962) e Klaus e Van Ness (1967). Mais recentemente, Shariff e Moser (1998) usaram um método *spline* modificado, chamado de β -*Spline*, em que é mencionado o uso de expansões em séries de Fourier na direção paralela às fronteiras e de β -*splines* na direção normal às fronteiras. Nunhez et al. (2004) apresentaram uma maneira de interpolar dados por meio do princípio de minimização usando uma função com pesos pelo método *spline* cúbico, representando um bom guia para o método de interpolação dos dados das fronteiras do rio usado neste trabalho.

A literatura apresenta diversos estudos no desenvolvimento de geração de malhas, pois esta etapa é vital para a aplicação de CFD. Existem inúmeros exemplos e técnicas para a geração de malhas bidimensionais em coordenadas curvilíneas, sejam estas malhas inteiramente ortogonais, parcialmente ortogonais ou não-ortogonais.

A resolução de equações diferenciais parciais necessita de uma representação numérica precisa das condições de contorno. Quando a fronteira é coincidente com

uma linha de coordenada e a fronteira pode ser representada nos pontos gerados sobre esta linha coordenada, então se atinge essa melhor precisão numérica. Um sistema de coordenadas curvilíneas com linhas de coordenadas coincidentes com todos os contornos é chamado de sistema de coordenadas coincidentes com a fronteira (*boundary-fitted coordinates*). O motivo disso é que não é necessária a interpolação entre os pontos da malha na representação das condições de contorno, o que pode gerar erros em geometrias com elevadas curvaturas ou em sistemas de equações diferenciais com altos gradientes nos contornos da geometria (Thompson et al., 1977).

Uma maneira geral de se obter este sistema de coordenadas coincidentes com a fronteira é fazer com que as coordenadas curvilíneas sejam soluções de um sistema de equações diferenciais parciais elípticas no plano físico, com condições de contorno de Dirichlet em todos os contornos do domínio. Enquanto uma coordenada é "forçada" a ser constante em cada uma das fronteiras, a outra coordenada é variada de forma igual ao redor de cada fronteira. Assim, garante-se que haja uma linha coordenada coincidente para cada fronteira (Thompson et al., 1977).

Este método foi aplicado primeiramente para geometrias bidimensionais fechadas e aplicado de formas ligeiramente diferentes por Winslow (1966), Barfield (1970) e Chu (1971). Amsdem e Hirt (1973) também usaram este princípio para geração de malhas curvilíneas bidimensionais não necessariamente ortogonais em um método que consiste na simples distorção de malhas retangulares em malhas curvilíneas usando um método iterativo em que o novo valor de um ponto é calculado em função dos pontos vizinhos até os cálculos convergirem. Potter e Tuttle (1973)

apresentaram um método direto de obtenção de uma única malha ortogonal bidimensional em função de uma malha não-ortogonal.

Ao invés de obter as soluções no plano transformado, Meyder (1975) as obteve no plano físico em uma malha retangular usando interpolação entre os contornos curvos. Um sistema ortogonal de coordenadas curvilíneas foi obtido usando as condições de contorno de Dirichlet em uma parte da fronteira e as condições de contorno de Neumann na outra parte.

Um método muito conhecido e importante no estudo de geração de malhas é o método TTM proposto por Thompson et al. (1977). As relações de transformação entre as coordenadas curvilíneas coincidentes com a fronteira e as coordenadas cartesianas são escritas a fim de satisfazer as seguintes equações parciais elípticas:

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = P(\xi, \eta) \quad (2-3)$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = Q(\xi, \eta) \quad (2-4)$$

As funções $P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$ são escolhidas para controlar o espaçamento e a configuração entre as linhas coordenadas; ξ e η são as coordenadas do plano transformado. Este método só gera malhas ortogonais com tipos específicos das funções de controle (Ryskin e Leal, 1983). Maliska (2004) faz a seguinte referência ao trabalho de Thompson et al. (1977): “após este trabalho, o uso de coordenadas generalizadas difundiu-se de forma espantosa”.

Um outro método de obtenção de malhas, chamado de mapeamento conforme (*conformal mapping*), gera o sistema de coordenadas através da transformação de uma função complexa de um plano para outro em que se preservam a magnitude e a orientação dos ângulos entre quaisquer duas curvas que se interceptam em um determinado ponto (Bieberbach, 1964).

Diversos métodos eficientes surgiram usando o mapeamento conforme para se gerar malhas bidimensionais, como em Ives (1976), Fornberg (1980) e Meiron et al. (1981). No entanto, segundo Ryskin e Leal (1983), o mapeamento conforme apresenta dificuldades quando pequenas mudanças na forma de um domínio podem acarretar em uma grande alteração nos pontos de contorno obtidos. Outra desvantagem, ainda de acordo com Ryskin e Leal (1983), é que a quantidade de pontos de contorno pode variar muito em ordem de magnitude ao longo das fronteiras do domínio original. De acordo com Bieberbach (1964), o método é também limitado a malhas bidimensionais.

Um método chamado mapeamento ortogonal (*orthogonal mapping*) também utilizado atualmente foi proposto por Ryskin e Leal (1983) para geração de malhas ortogonais bidimensionais.

Mais recentemente, Thompson (1996) apresentou uma detalhada revisão no campo de geração de malhas na década de 90. Zhang et al. (2004) desenvolveu dois sistemas modificados baseados nos sistemas RL (Ryskin e Leal, 1983) e um sistema híbrido entre estes dois sistemas modificados para gerar malhas bidimensionais não-ortogonais, em que o primeiro introduz funções de controle suaves e o segundo adiciona fatores de contribuição ao sistema RL.

Este trabalho usa um método muito simples de geração de malhas, em que as fronteiras do domínio físico são representadas por funções analíticas obtidas pelo método *spline* cúbico. Através da definição de uma função bem simples, as linhas coordenadas na direção das fronteiras (chamadas de linhas de corrente) são obtidas. Assim, baseado no princípio da ortogonalidade, obtêm-se as linhas potenciais (linhas coordenadas normais às linhas de corrente) através da resolução de uma equação diferencial resolvida pelo método de diferenças finitas.

Com relação à geração de malhas, este trabalho se diferencia dos demais trabalhos apresentados nesta seção pela sua extrema facilidade de implementação e pela não necessidade do uso de coordenadas de transformação. Apesar de este modelo ser limitado a geometrias bidimensionais, ele é adequado pela abordagem proposta neste trabalho, nos quais estas malhas serão usadas para resolução das equações diferenciais parciais usando o método dos volumes finitos.

Devido ao fato das fronteiras serem irregulares, existe a necessidade do uso de coordenadas generalizadas. Assim, o equacionamento do modelo será obtido em tais coordenadas.

2.3.2. O cálculo numérico na resolução de equações diferenciais parciais

Para se fazer um estudo de um problema físico a ser resolvido, primeiro é necessário que se entenda todos os fenômenos físicos que estão envolvidos. Então, estes fenômenos devem ser modelados de forma matemática e depois devem ser resolvidos. No caso da fluidodinâmica, a modelagem é elaborada a partir da aplicação

de princípios físicos, descritos por leis de conservação adequadas ao fenômeno, como conservação de massa, energia e quantidade de momento. Geralmente, a modelagem matemática gera uma ou mais equações diferenciais parciais, cuja resolução é normalmente difícil de ser obtida analiticamente.

Assim, métodos experimentais são muito utilizados para este propósito. Recentemente, principalmente após a década de 80, o rápido desenvolvimento dos computadores e de suas capacidades de armazenamento de dados aplicados ao estudo de escoamentos deu origem à Fluidodinâmica Computacional, o que abrangeu mais ainda as possibilidades de resolução e simulação de diversos problemas encontrados nesta área.

As soluções numéricas aplicadas ao estudo de escoamentos necessitam antes que o domínio (região física em que as equações são válidas) seja discretizado, isto é, seja dividido em regiões discretas. Ao conjunto das regiões discretas dá-se o nome de malha. Então, as equações são escritas para cada ponto em função de uma variável específica (ex: velocidade, temperatura), o que gera um sistema de equações algébricas. Para se obter a solução analítica utilizando um método numérico, seria preciso utilizar infinitos pontos dentro do domínio de estudo.

As condições de contorno dos problemas são introduzidas normalmente quando estas equações são escritas em pontos da fronteira do sistema. Cada problema tem sua especificidade ligada às condições de contorno, às condições iniciais, aos parâmetros de escoamento e às propriedades físicas do fluido.

Por fim, o sistema de equações é resolvido também de forma numérica (ex: Método da Eliminação de Gauss) fornecendo a solução do problema. Então, a solução deve ser analisada para verificar se tem sentido físico. Para isto, normalmente se compara, os resultados com dados experimentais. A Figura 2.2 resume as etapas necessárias para a obtenção da solução numérica de um problema de fluidodinâmica.

Figura 2.2: Etapas para a obtenção da solução numérica de um problema de fluidodinâmica.

Quando se usa um método numérico para a resolução de uma equação diferencial, deve-se aceitar uma solução para um número finito de pontos, sabendo-se que quanto maior o número de pontos utilizados, maior é a aproximação da solução numérica da analítica. Porém, não é conveniente se trabalhar com malhas muito grandes, já que o esforço computacional não aumenta de forma linear com o aumento do número de pontos.

Os métodos mais utilizados são: método das diferenças finitas, método dos volumes finitos e método dos elementos finitos.

2.3.2.1. Método das diferenças finitas

O método das diferenças finitas (MDF) é um método que se baseia na série de Taylor para a obtenção das equações algébricas que calculam as derivadas em um determinado ponto.

Depois da discretização do domínio de interesse, utiliza-se a série de Taylor para se escrever as derivadas em cada ponto na forma de equações algébricas que envolvem a função/variável que se deseja obter. Depois dessa obtenção, substitui-se estas equações algébricas nas equações diferenciais, obtendo-se um conjunto de equações que devem ser resolvidas para a obtenção da solução, ou seja, do valor da variável de interesse em cada ponto sobre o domínio estudado.

O método das diferenças finitas é um método puramente matemático. Ele não utiliza princípios de conservação de massa, energia e/ou quantidade de movimento para a obtenção das soluções, o que pode gerar erros em alguns casos. Desta forma, para alguns casos é possível a obtenção de resultados matematicamente corretos, mas fisicamente incoerentes.

2.3.2.2. Método dos elementos finitos

Segundo Moaveni (1999, p. 527), o método dos elementos finitos é um procedimento numérico que pode ser usado para a obtenção de soluções para uma extensa série de problemas relacionados com engenharia, incluindo escoamento de fluidos. Este método pode ser aplicável também a objetos de formas irregulares, compostos de diferentes materiais e tendo condições de contorno mistas.

Inicialmente, o domínio é dividido em sub-regiões denominadas elementos, que são conectadas através de pontos. Então, o método usa formulações integrais (método variacional ou de resíduos pesados, por exemplo) para criar um sistema de equações algébricas. Usa-se uma função aproximada para representar a solução para cada elemento e, então, a solução completa é obtida através das soluções individuais.

2.3.2.3. Método dos volumes finitos

O método dos volumes finitos baseia-se na obtenção das equações aproximadas através dos balanços de conservação de uma determinada propriedade envolvida (energia, momentum ou massa) em um volume elementar. A vantagem deste método está no próprio fato da conservação da propriedade no volume elementar ser a base da obtenção das equações, pois o sistema linear formado por elas representa bem a conservação em nível infinitesimal. Além disso, como os balanços devem ser satisfeitos em nível de volumes elementares para qualquer tamanho de malha, os princípios de conservação podem ser checados em uma malha bastante grosseira, permitindo que quase tudo seja feito manuseando-se poucos resultados em execuções rápidas no computador (Maliska, 2004).

É comum a utilização de funções de interpolação do tipo diferenças centrais para os termos difusivos e do tipo “upwind” para os termos convectivos. Isto porque o esquema “upwind” evita o aparecimento de coeficientes negativos na matriz de solução do sistema linear, e por consequência, evita as oscilações numéricas indesejadas (Maliska, 2004).

CAPÍTULO 3

3. MODELAGEM

Este Capítulo apresenta a modelagem de dispersão de efluentes miscíveis em água com o objetivo de representar adequadamente as equações de conservação de massa e momentum desta dispersão.

3.1. AS EQUAÇÕES DE CONSERVAÇÃO

O estudo do movimento de fluidos é baseado nas três leis da física a seguir:

- Lei da Conservação de Massa
- Segunda Lei de Newton
- A Primeira Lei da Termodinâmica

Tais leis são consideradas fundamentais no estudo da física e se tornam essenciais no estudo da mecânica dos fluidos. No presente trabalho, visto que não existe transferência de energia, a abordagem da Primeira Lei da Termodinâmica não será necessária.

3.1.1. A conservação de massa

Na segunda metade do século XVIII, Lavoisier mostrou que a matéria podia ser transformada, porém nunca destruída ou criada. Sua descoberta aconteceu através da demonstração de que após uma determinada reação química, os produtos formados tinham a mesma massa dos reagentes, ou seja, houve uma transformação (reagentes se transformaram em outras substâncias, chamadas produtos) e não houve criação e nem destruição de matéria. Esta descoberta deu origem à chamada lei da conservação de massa, comumente chamada de “balanço material” ou “balanço de massa” (Brasil, 1999).

Apesar de Lavoisier ter usado reações químicas nesta descoberta, tal lei é aplicável tanto para processos físicos (sem reação química) quanto para processos químicos (com reação química).

O conceito geral do balanço de massa está mostrado na equação a seguir:

$$\text{Entrada} + \text{Geração} - \text{Saída} - \text{Consumo} = \text{Acúmulo} \quad (3-1)$$

A entrada e a saída de massa ocorrem através das fronteiras do sistema, enquanto que a geração, consumo e acúmulo de massa ocorrem dentro do sistema. A equação (3-1) pode ser usada em sistemas macro e microscópicos e também para a massa total do material ou para qualquer molécula ou átomo envolvido no processo.

É usual no estudo da mecânica dos fluidos usarem elementos infinitesimais do fluido, ou seja, um balanço de massa microscópico é efetuado. Quando se efetua este balanço para a massa global do sistema, gera-se então a conhecida equação da continuidade. Quando o balanço de massa é aplicado a um elemento infinitesimal de

volume para uma espécie A (na qual há mais de uma espécie química neste volume), então se chega à equação diferencial de transferência de massa para a espécie A.

É comum encontrar na literatura as equações diferenciais escritas para coordenadas cartesianas, cilíndricas e esféricas. Como neste trabalho se usará as coordenadas generalizadas, então as equações de conservação de massa serão aplicadas para este tipo de coordenada, isto é, as equações obtidas serão aplicáveis para qualquer tipo de coordenada.

Considere o elemento infinitesimal bidimensional em coordenadas generalizadas na Figura 3.1:

Figura 3.1: Elemento infinitesimal bidimensional em coordenadas generalizadas e os fluxos de massa em cada eixo (η e ξ).

A partir do desenvolvimento apresentado no Anexo 3, as áreas deste elemento são calculadas por:

$$dA_{\xi} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right\| \cdot d\eta \quad (3-2)$$

$$dA_{\eta} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \right\| \cdot d\xi \quad (3-3)$$

De acordo com a definição de volume dada contida no Anexo 4, então:

$$dV = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right\| \cdot d\xi \cdot d\eta \quad (3-4)$$

É importante ressaltar que o elemento infinitesimal é bidimensional e, portanto, as dimensões em terceira dimensão são unitárias. Estas equações serão mais precisas quanto menor for o elemento de controle, ou seja, quanto mais suas arestas se aproximarem de retas.

Definindo:

$$h_{\xi} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \xi} \right\| \quad (3-5)$$

$$h_{\eta} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \eta} \right\| \quad (3-6)$$

3.1.1.1. Balanço Global de Massa

Se considerarmos um balanço de massa global, então a equação (3-1) se reduz

a:

$$\text{Entrada} - \text{Saída} = \text{Acúmulo} \quad (3-7)$$

Assim:

$$\left(\rho.v_{\xi}.dA_{\xi}|_{\xi} + \rho.v_{\eta}.dA_{\eta}|_{\eta} \right) - \left(\rho.v_{\xi}.dA_{\xi}|_{\xi+d\xi} + \rho.v_{\eta}.dA_{\eta}|_{\eta+d\eta} \right) = \frac{\partial(\rho.V)}{\partial t} \quad (3-8)$$

Substituindo as equações (3-2) a (3-6) na equação (3-8):

$$\begin{aligned} & \left(\rho.v_{\xi}.h_{\eta}.d\eta|_{\xi} + \rho.v_{\eta}.h_{\xi}.d\xi|_{\eta} \right) - \\ & \left(\rho.v_{\xi}.h_{\eta}.d\eta|_{\xi+d\xi} + \rho.v_{\eta}.h_{\xi}.d\xi|_{\eta+d\eta} \right) = \frac{\partial(\rho.h_{\xi}.h_{\eta}.d\xi.d\eta)}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-9)$$

Rearranjando a equação (3-9):

$$\begin{aligned} & \left(\rho.v_{\xi}.h_{\eta}.d\eta|_{\xi} - \rho.v_{\xi}.h_{\eta}.d\eta|_{\xi+d\xi} \right) + \\ & \left(\rho.v_{\eta}.h_{\xi}.d\xi|_{\eta} - \rho.v_{\eta}.h_{\xi}.d\xi|_{\eta+d\eta} \right) = \frac{\partial(\rho.h_{\xi}.h_{\eta}.d\xi.d\eta)}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-10)$$

Dividindo a equação (3-10) pela equação (3-4), chega-se a:

$$-\frac{1}{h_{\xi}.h_{\eta}} \left[\frac{\partial(\rho.h_{\eta}.v_{\xi})}{\partial \xi} + \frac{\partial(\rho.h_{\xi}.v_{\eta})}{\partial \eta} \right] = \frac{\partial \rho}{\partial t} \quad (3-11)$$

A equação (3-11) recebe o nome de equação da continuidade em coordenadas generalizadas ou curvilíneas.

No caso deste trabalho, os fluidos (água e efluente) são incompressíveis e as massas específicas não variam ao longo dos eixos, então:

$$\left[\frac{\partial(h_\eta \cdot v_\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial(h_\xi \cdot v_\eta)}{\partial \eta} \right] = 0 \quad (3-12)$$

3.1.1.2. Balanço de massa para um componente

Define-se a substância A como sendo o efluente; B como sendo a água e C como sendo o meio de dispersão (água e efluente). Considerando a convecção e a difusão e que não há reação química, então aplicando a equação (3-1) no elemento de controle da Figura 3.1 para o efluente:

$$\begin{array}{ccccc} \text{Entra por} & \text{Entra por} & \text{Entra por} & \text{Entra por} & \text{Sai por} \\ \text{convecção + difusão} & \text{+ convecção + difusão} & \text{+ convecção + difusão} & \text{- convecção +} & \\ \text{em } \xi & \text{em } \xi & \text{em } \eta & \text{em } \eta & \text{em } \xi + d\xi \end{array} \quad (3-13)$$

$$\begin{array}{cccc} \text{Sai por} & \text{Sai por} & \text{Sai por} & \\ \text{-difusão} & \text{-convecção} & \text{-difusão} & = \text{Acúmulo} \\ \text{em } \xi + d\xi & \text{em } \eta + d\eta & \text{em } \eta + d\eta & \end{array}$$

Então:

$$\begin{aligned} & C_A \cdot v_\xi \Big|_\xi \cdot d\xi - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\xi \cdot \partial \xi} \Big|_\xi \cdot dA_\xi + C_A \cdot v_\eta \Big|_\eta \cdot d\eta - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\eta \cdot \partial \eta} \Big|_\eta \cdot dA_\eta + \\ & + C_A \cdot v_\xi \Big|_{\xi+d\xi} \cdot d\xi - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\xi \cdot \partial \xi} \Big|_{\xi+d\xi} \cdot dA_\xi + C_A \cdot v_\eta \Big|_{\eta+d\eta} \cdot d\eta + \\ & - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\eta \cdot \partial \eta} \Big|_{\eta+d\eta} \cdot dA_\eta = \frac{\partial(C_A \cdot V)}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-14)$$

Substituindo as equações (3-2) a (3-6) na equação (3-14):

$$\begin{aligned}
& C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta \Big|_\xi \cdot d\eta - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\xi \cdot \partial \xi} \cdot h_\eta \Big|_\xi \cdot d\eta + C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi \Big|_\eta \cdot d\xi - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\eta \cdot \partial \eta} \cdot h_\xi \Big|_\eta \cdot d\xi + \\
& - C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta \Big|_{\xi+d\xi} \cdot d\eta + D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\xi \cdot \partial \xi} \cdot h_\eta \Big|_{\xi+d\xi} \cdot d\eta - C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi \Big|_{\eta+d\eta} \cdot d\xi + \\
& + D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\eta \cdot \partial \eta} \cdot h_\xi \Big|_{\eta+d\eta} \cdot d\xi = \frac{\partial(C_A \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta)}{\partial t}
\end{aligned}
\tag{3-15}$$

Rearranjando a equação (3-15):

$$\begin{aligned}
& \left(C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta \Big|_\xi - C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta \Big|_{\xi+d\xi} \right) d\eta - \left(D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\xi \cdot \partial \xi} \cdot h_\eta \Big|_\xi - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\xi \cdot \partial \xi} \cdot h_\eta \Big|_{\xi+d\xi} \right) \cdot d\eta + \\
& + \left(C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi \Big|_\eta - C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi \Big|_{\eta+d\eta} \right) d\xi - \left(D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\eta \cdot \partial \eta} \cdot h_\xi \Big|_\eta - D_{ef,A,C} \cdot \frac{\partial C_A}{h_\eta \cdot \partial \eta} \cdot h_\xi \Big|_{\eta+d\eta} \right) \cdot d\xi = \\
& = \frac{\partial(C_A \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta)}{\partial t}
\end{aligned}
\tag{3-16}$$

Dividindo a equação (3.5.1.2-4) por $d\xi \cdot d\eta$:

$$\begin{aligned}
& \frac{\partial}{\partial \xi} \left(-C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta + D_{ef,A,C} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \right) + \\
& + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(-C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi + D_{ef,A,C} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial(C_A \cdot h_\xi \cdot h_\eta)}{\partial t}
\end{aligned}
\tag{3-17}$$

Considerando que o coeficiente de difusão é constante, então:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\partial(C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta)}{\partial \xi} + D_{ef,A,C} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \right) - \frac{\partial(C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi)}{\partial \eta} + \\
 & + D_{ef,A,C} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial(C_A \cdot h_\xi \cdot h_\eta)}{\partial t}
 \end{aligned} \tag{3-18}$$

Considerando ainda que a emissão de efluente ao rio seja contínua, então não há variação da concentração ao longo do tempo, como mostrado pela equação (3-19).

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\partial(C_A \cdot v_\xi \cdot h_\eta)}{\partial \xi} + D_{ef,A,C} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \right) - \frac{\partial(C_A \cdot v_\eta \cdot h_\xi)}{\partial \eta} + \\
 & + D_{ef,A,C} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \right) = 0
 \end{aligned} \tag{3-19}$$

3.1.2. A segunda lei de Newton aplicada à fluidodinâmica

A segunda lei de Newton aplicada à Fluidodinâmica pode ser escrita de uma forma geral para um determinado volume de controle da seguinte forma (Welty et al., 1984, p. 48):

$$\begin{aligned}
 \text{Somatório de} & & \text{Taxa de momentum} & & \text{Taxa de momentum} \\
 \text{Forças no volume} & = & \text{que sai do volume} & - & \text{que entra no volume} + \\
 \text{de controle} & & \text{de controle} & & \text{de controle}
 \end{aligned} \tag{3-20}$$

Taxa de acúmulo
 + de momentum dentro
 do volume de controle

No caso de fluidos, é comum trabalhar-se com tensões, como a seguir:

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum (\vec{T} \cdot dA) = \frac{1}{dV} \cdot \frac{\partial(m \cdot \vec{v})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot \vec{v})}{\partial t} \quad (3-21)$$

Em que A é a área em que atua a tensão.

Esta equação é escrita em cada direção do problema dado. Seja uma direção φ arbitrária, então:

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum (\vec{T}_{\varphi} \cdot dA) = \frac{1}{dV} \cdot \frac{\partial(m \cdot \vec{v}_{\varphi})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot \vec{v}_{\varphi})}{\partial t} \quad (3-22)$$

3.1.2.2. A equação bidimensional de momentum para o escoamento monofásico água-efluente

Considere o elemento de controle bidimensional e as tensões a seguir:

Figura 3.2: Elemento de controle bidimensional com coordenadas ξ e η e suas tensões.

A equação (3-22) pode ser escrita para cada uma das direções.

Direção ξ :

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum (\vec{T}_\xi \cdot dA) = \frac{1}{dV} \cdot \frac{\partial(m \cdot v_\xi)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho \cdot v_\xi)}{\partial t} \quad (3-23)$$

Como só há uma fase, uma vez que o efluente é miscível em água, a velocidade da equação (3-23) é relativa tanto à água quanto ao efluente.

Ainda com relação à equação (3-23), como a massa de efluente lançada ao rio será muito menor em relação à massa da água do rio, então a massa específica da equação pode ser considerada como a massa específica da água.

O tensor $\vec{T}_\xi$ pode ser escrito da seguinte forma:

$$\vec{T}_\xi = \begin{bmatrix} \sigma_{\xi\xi} & \tau_{\xi\eta} \\ \tau_{\eta\xi} & \sigma_{\eta\eta} \end{bmatrix} \quad (3-24)$$

Fazendo as devidas substituições usando as equações (3-2) a (3-6), o termo da esquerda da equação (3-23) pode ser escrito como a seguir:

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum (\vec{T}_\xi \cdot dA) = \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{1}{d\xi \cdot d\eta} \cdot \left\{ \begin{array}{l} \left[\sigma_{\xi\xi} \cdot h_\eta \cdot d\eta \Big|_{\xi+d\xi} - \sigma_{\xi\xi} \cdot h_\eta \cdot d\eta \Big|_{\xi} \right] + \\ + \left[\tau_{\eta\xi} \cdot h_\xi \cdot d\xi \Big|_{\eta+d\eta} - \tau_{\eta\xi} \cdot h_\xi \cdot d\xi \Big|_{\eta} \right] + \\ \rho \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta \cdot g_\xi \end{array} \right\} \quad (3-25)$$

Aplicando os limites $d\eta \rightarrow 0$ e $d\xi \rightarrow 0$ na equação (3-25), chega-se em:

$$\frac{1}{dV} \cdot \sum (\vec{T}_\xi \cdot dA) = \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \left[\frac{\partial(h_\eta \cdot \sigma_{\xi\xi})}{\partial\xi} + \frac{\partial(h_\xi \cdot \tau_{\eta\xi})}{\partial\eta} + \rho \cdot g_\xi \right] \quad (3-26)$$

Também fazendo uso das equações (3-2) a (3-6), o primeiro termo da direita da equação (3-23) pode ser escrito como:

$$\frac{1}{dV} \cdot \frac{\partial(m \cdot \vec{v}_\xi)}{\partial t} = \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{1}{d\xi \cdot d\eta} \left\{ \left[\rho \cdot dt \cdot v_\xi \cdot v_\xi \cdot h_\eta \cdot d\eta \Big|_{\xi+d\xi} - \rho \cdot dt \cdot v_\xi \cdot v_\xi \cdot h_\eta \cdot d\eta \Big|_\xi \right] + \left[\rho \cdot dt \cdot v_\xi \cdot v_\eta \cdot h_\xi \cdot d\xi \Big|_{\eta+d\eta} - \rho \cdot dt \cdot v_\xi \cdot v_\eta \cdot h_\xi \cdot d\xi \Big|_\eta \right] \right\} \quad (3-27)$$

Aplicando o conceito de limite de $d\eta \rightarrow 0$ e $d\xi \rightarrow 0$ na equação (3-27):

$$\frac{1}{dV} \cdot \frac{\partial(m \cdot \vec{v}_\xi)}{\partial t} = \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \left[\frac{\partial(h_\eta \cdot \rho \cdot v_\xi^2)}{\partial\xi} + \frac{\partial(h_\xi \cdot \rho \cdot v_\xi \cdot v_\eta)}{\partial\eta} \right] \quad (3-28)$$

Substituindo as equações (3-26) e (3-28) na equação (3-23):

$$\begin{aligned} \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \left[\frac{\partial(h_\eta \cdot \sigma_{\xi\xi})}{\partial\xi} + \frac{\partial(h_\xi \cdot \tau_{\eta\xi})}{\partial\eta} + \rho \cdot g_\xi \right] &= \\ = \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \left[\frac{\partial(h_\eta \cdot \rho \cdot v_\xi^2)}{\partial\xi} + \frac{\partial(h_\xi \cdot \rho \cdot v_\xi \cdot v_\eta)}{\partial\eta} \right] + \frac{\partial(\rho \cdot v_\xi)}{\partial t} \end{aligned} \quad (3-29)$$

Agora só falta escrever as tensões em função das velocidades.

Escrevendo o tensor gradiente de velocidade com base na equação (22) do

Anexo 5:

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v} = \frac{\partial(\mathbf{v}_\xi \cdot \bar{\mathbf{e}}_\xi)}{h_\xi \partial \xi} \cdot \bar{\mathbf{e}}_\xi + \frac{\partial(\mathbf{v}_\eta \cdot \bar{\mathbf{e}}_\eta)}{h_\xi \partial \xi} \cdot \bar{\mathbf{e}}_\xi + \frac{\partial(\mathbf{v}_\xi \cdot \bar{\mathbf{e}}_\xi)}{h_\eta \partial \eta} \cdot \bar{\mathbf{e}}_\eta + \frac{\partial(\mathbf{v}_\eta \cdot \bar{\mathbf{e}}_\eta)}{h_\eta \partial \eta} \cdot \bar{\mathbf{e}}_\eta \quad (3-30)$$

Reescrevendo a equação acima:

$$\begin{aligned} \tilde{\nabla} \mathbf{v} = & \bar{\mathbf{e}}_\xi \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_\xi \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_\xi}{h_\xi \partial \xi} + \mathbf{v}_\xi \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{e}}_\xi}{h_\xi \partial \xi} \right] + \bar{\mathbf{e}}_\xi \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_\eta \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_\eta}{h_\xi \partial \xi} + \mathbf{v}_\eta \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{e}}_\eta}{h_\xi \partial \xi} \right] + \\ & + \bar{\mathbf{e}}_\eta \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_\xi \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_\xi}{h_\eta \partial \eta} + \mathbf{v}_\xi \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{e}}_\xi}{h_\eta \partial \eta} \right] + \bar{\mathbf{e}}_\eta \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_\eta \cdot \frac{\partial \mathbf{v}_\eta}{h_\eta \partial \eta} + \mathbf{v}_\eta \cdot \frac{\partial \bar{\mathbf{e}}_\eta}{h_\eta \partial \eta} \right] \end{aligned} \quad (3-31)$$

Considere agora as figuras a seguir:

Figura 3.3: Visualização geométrica dos vetores $\bar{\mathbf{e}}_\xi$ e $\bar{\mathbf{e}}_\eta$ em um elemento de controle da malha.

Figura 3.4: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi}$.

Figura 3.5: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi}$.

Figura 3.6: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \eta}$.

Figura 3.7: Visualização geométrica do vetor $\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi}$.

Pode-se escrever que:

$$\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi} = \frac{\vec{e}_\xi|_{\xi+d\xi} - \vec{e}_\xi|_{\xi}}{d\xi} \quad (3-32)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi} = \frac{\vec{e}_\eta|_{\xi+d\xi} - \vec{e}_\eta|_{\xi}}{d\xi} \quad (3-33)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \eta} = \frac{\vec{e}_\xi|_{\eta+d\eta} - \vec{e}_\xi|_\eta}{d\eta} \quad (3-34)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \eta} = \frac{\vec{e}_\eta|_{\eta+d\eta} - \vec{e}_\eta|_\eta}{d\eta} \quad (3-35)$$

Pela Figura 3.4, observa-se que o vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi}$ tem a mesma direção do vetor $\vec{e}_\eta$.

A Figura 3.5 mostra que o vetor $\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi}$ tem a mesma direção do vetor $\vec{e}_\xi$. A análise da

Figura 3.6 indica que o vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \eta}$ tem a mesma direção do vetor $\vec{e}_\eta$ e a Figura 3.7

mostra que o vetor $\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \eta}$ tem a mesma direção do vetor $\vec{e}_\xi$. Isto somente ocorre em

coordenadas ortogonais. Assim:

$$\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi} = \pm \vec{e}_\eta \quad (3-36)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi} = \pm \vec{e}_\xi \quad (3-37)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \eta} = \pm \vec{e}_\eta \quad (3-38)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \eta} = \pm \vec{e}_\xi \quad (3-39)$$

O sinal das equações (3-36) a (3-39), que indicam o sentido dos vetores unitários, dependem da curvatura da malha do rio. Para que o sentido destes vetores seja obtido, será usada a definição de produto escalar entre vetores. Por exemplo, para se saber se o vetor $\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi}$ está no mesmo sentido ou no sentido contrário ao vetor $\vec{e}_\eta$,

então é calculado o produto escalar entre o vetor $d\vec{e}_\xi$ na direção ξ e o vetor $\vec{e}_\eta$.

Então:

$$\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \xi} = \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot \vec{e}_\eta \quad (3-40)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \xi} = \left(\frac{\vec{e}_\xi \bullet d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot \vec{e}_\xi \quad (3-41)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\xi}{\partial \eta} = \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \|d\vec{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot \vec{e}_\eta \quad (3-42)$$

$$\frac{\partial \vec{e}_\eta}{\partial \eta} = \left(\frac{\vec{e}_\xi \bullet d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot \vec{e}_\xi \quad (3-43)$$

Substituindo as equações (3-40) a (3-43) na equação (3-31):

$$\begin{aligned}
\tilde{\nabla} \mathbf{v} = & \bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\xi} \partial \xi} + \frac{v_{\xi}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \xi}\|} \right) \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\eta} \right] + \bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\xi} \partial \xi} + \frac{v_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \xi}\|} \right) \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\xi} \right] + \\
& + \bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\eta} \partial \eta} + \frac{v_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \eta}\|} \right) \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\eta} \right] + \bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot \left[\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\eta} \partial \eta} + \frac{v_{\eta}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \eta}\|} \right) \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\xi} \right]
\end{aligned} \tag{3-44}$$

Agrupando os termos:

$$\begin{aligned}
\tilde{\nabla} \mathbf{v} = & \left[\frac{\partial v_{\xi}}{h_{\xi} \partial \xi} + \frac{v_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \xi}\|} \right) \right] \bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\xi} + \left[\frac{v_{\xi}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \xi}\|} \right) + \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\xi} \partial \xi} \right] \bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\eta} + \\
& + \left[\frac{\partial v_{\xi}}{h_{\eta} \partial \eta} + \frac{v_{\eta}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \eta}\|} \right) \right] \bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\xi} + \left[\frac{v_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \eta}\|} \right) + \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\eta} \partial \eta} \right] \bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot \bar{\mathbf{e}}_{\eta}
\end{aligned} \tag{3-45}$$

Escrevendo o tensor gradiente de velocidade na forma da equação (14) do

Anexo 5:

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v} = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\xi} \partial \xi} + \frac{v_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \xi}\|} \right) & \frac{v_{\xi}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \xi}\|} \right) + \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\xi} \partial \xi} \\ \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\eta} \partial \eta} + \frac{v_{\eta}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta, \eta}\|} \right) & \frac{v_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi, \eta}\|} \right) + \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\eta} \partial \eta} \end{bmatrix} \tag{3-46}$$

Escrevendo então o tensor gradiente de velocidade transposto:

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v}^T = \begin{bmatrix} \frac{\partial v_\xi}{h_\xi \partial \xi} + \frac{v_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_\xi \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_\xi\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\xi}\|} \right) & \frac{\partial v_\xi}{h_\eta \partial \eta} + \frac{v_\eta}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_\xi \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_\xi\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \\ \frac{v_\xi}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_\eta \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_\eta\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}\|} \right) + \frac{\partial v_\eta}{h_\xi \partial \xi} & \frac{v_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_\eta \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_\eta\| \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}\|} \right) + \frac{\partial v_\eta}{h_\eta \partial \eta} \end{bmatrix} \quad (3-47)$$

Para simplificar, escrevem-se as equações (3-46) e (3-47) da seguinte maneira:

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v} = \begin{bmatrix} \tilde{\nabla} v_{11} & \tilde{\nabla} v_{12} \\ \tilde{\nabla} v_{21} & \tilde{\nabla} v_{22} \end{bmatrix} \quad (3-48)$$

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v}^T = \begin{bmatrix} \tilde{\nabla} v_{11}^T & \tilde{\nabla} v_{12}^T \\ \tilde{\nabla} v_{21}^T & \tilde{\nabla} v_{22}^T \end{bmatrix} \quad (3-49)$$

Substituindo as equações (3-48) e (3-49) na equação (16) do Anexo 5:

$$\tilde{\mathbf{D}} = \begin{bmatrix} \tilde{\nabla} v_{11} + \tilde{\nabla} v_{11}^T & \tilde{\nabla} v_{12} + \tilde{\nabla} v_{12}^T \\ \tilde{\nabla} v_{21} + \tilde{\nabla} v_{21}^T & \tilde{\nabla} v_{22} + \tilde{\nabla} v_{22}^T \end{bmatrix} \quad (3-50)$$

Agora é necessário avaliar o termo da pressão da equação (15) do Anexo 5, que estará presente nos termos que possuem tensões da equação (3-29).

Considere a figura a seguir:

Figura 3.8: Visualização da água escoando em um rio.

A Figura 3.8 mostra um líquido escoando em um rio de comprimento L . Pode-se perceber que a pressão exercida em qualquer ponto da extensão do rio sobre a água é a pressão atmosférica. Então:

$$P = P_{atm} \quad (3-51)$$

Se o rio for inclinado com um ângulo δ qualquer entre o rio e a força peso, então as componentes da gravidade nas direções ξ e η são calculadas por:

$$g_{\xi} = g \cdot \cos \delta \quad (3-52)$$

$$g_{\eta} = 0 \quad (3-53)$$

Substituindo as equações (3-50) e (3-51) na equação (15) do Anexo 5:

$$\tilde{T}_{\xi} = \begin{bmatrix} -P_{atm} & 0 \\ 0 & -P_{atm} \end{bmatrix} + \mu_{ef} \cdot \begin{bmatrix} \tilde{\nabla}v_{11} + \tilde{\nabla}v_{11}^T & \tilde{\nabla}v_{12} + \tilde{\nabla}v_{12}^T \\ \tilde{\nabla}v_{21} + \tilde{\nabla}v_{21}^T & \tilde{\nabla}v_{22} + \tilde{\nabla}v_{22}^T \end{bmatrix} \quad (3-54)$$

Comparando as equações (3-24) e (3-54), pode-se escrever que:

$$\sigma_{\xi\xi} = -P_{atm} + 2 \cdot \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\xi} \partial \xi} + 2 \cdot \mu_{ef} \cdot \frac{v_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_{\xi} \bullet d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_{\xi}\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \quad (3-55)$$

$$\begin{aligned} \tau_{\xi\eta} = & \mu_{ef} \cdot \frac{v_{\xi}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_{\eta} \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_{\eta}\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) + \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\xi} \partial \xi} + \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\eta} \partial \eta} + \\ & + \mu_{ef} \cdot \frac{v_{\eta}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_{\xi} \bullet d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_{\xi}\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \end{aligned} \quad (3-56)$$

$$\begin{aligned} \tau_{\eta\xi} = & \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{h_{\eta} \partial \eta} + \mu_{ef} \cdot \frac{v_{\eta}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_{\xi} \bullet d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_{\xi}\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) + \\ & + \mu_{ef} \cdot \frac{v_{\xi}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_{\eta} \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_{\eta}\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) + \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\xi} \partial \xi} \end{aligned} \quad (3-57)$$

$$\sigma_{\eta\eta} = -P_{atm} + 2 \cdot \mu_{ef} \cdot \frac{v_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_{\eta} \bullet d\vec{e}_{\xi,\eta}}{\|\vec{e}_{\eta}\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\eta}\|} \right) + 2 \cdot \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\eta}}{h_{\eta} \partial \eta} \quad (3-58)$$

Substituindo as equações (3-55) e (3-57) na equação (3-29):

$$\begin{aligned}
& - \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(h_\eta \cdot P_{atm})}{\partial \xi} + \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} + \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\xi \bullet d\bar{e}_{\eta,\xi}}{\|\bar{e}_\xi\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \xi} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\xi \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_\xi\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \eta} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\eta \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi}}{\|\bar{e}_\eta\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \right)}{\partial \eta} + \rho \cdot g \cdot \cos \delta + \\
& - \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(h_\eta \cdot \rho \cdot v_\xi^2)}{\partial \xi} - \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(h_\xi \cdot \rho \cdot v_\xi \cdot v_\eta)}{\partial \eta} = \frac{\partial(\rho \cdot v_\xi)}{\partial t}
\end{aligned}$$

(3-59)

Considera-se a massa específica e a pressão atmosférica constantes. É importante ressaltar que a pressão exerce força em áreas iguais em ξ e $\xi + d\xi$.

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} + \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\xi \bullet d\bar{e}_{\eta,\xi}}{\|\bar{e}_\xi\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \xi} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef,A} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_{\xi,A}}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef,A} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\xi \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_\xi\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_{\eta,A} \right)}{\partial \eta} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\eta \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi}}{\|\bar{e}_\eta\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \right)}{\partial \eta} + \rho \cdot g \cdot \cos \delta + \\
& - \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(h_\eta \cdot v_\xi^2)}{\partial \xi} - \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(h_\xi \cdot v_\xi \cdot v_\eta)}{\partial \eta} = \rho \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial t}
\end{aligned}$$

(3-60)

Considerando um envio contínuo de efluentes para o rio, a dispersão não varia ao longo do tempo. Logo:

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} + \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \xi} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef,A} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_{\xi,A}}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef,A} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_{\eta,A} \right)}{\partial \eta} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \cdot d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \right)}{\partial \eta} + \rho \cdot g \cdot \cos \delta + \\
& - \left(\frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial (h_\eta \cdot v_\xi^2)}{\partial \xi} + \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial (h_\xi \cdot v_\xi \cdot v_\eta)}{\partial \eta} \right) = 0
\end{aligned}$$

(3-61)

Para finalizar a modelagem, será inserida na equação (3-61) a conservação global de massa, garantindo assim que os resultados obtidos neste trabalho não respeitem somente o balanço de momentum, mas também o balanço global de massa.

Sendo assim, considere o último termo do lado esquerdo da igualdade da equação (3-61) como E.

$$E = \left(\frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial (h_\eta \cdot v_\xi \cdot v_\xi)}{\partial \xi} + \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial (h_\xi \cdot v_\eta \cdot v_\xi)}{\partial \eta} \right) \quad (3-62)$$

Seja $a = h_\eta \cdot v_\xi$ e $b = h_\xi \cdot v_\eta$ e substituindo na equação (3-62), então:

$$E = \left(\frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(a \cdot v_\xi)}{\partial \xi} + \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial(b \cdot v_\xi)}{\partial \eta} \right) \quad (3-63)$$

Desenvolvendo a equação (3-63):

$$E = \left(\frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot a \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} + \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot v_\xi \cdot \frac{\partial a}{\partial \xi} + \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot b \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} + \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot v_\xi \cdot \frac{\partial b}{\partial \eta} \right) \quad (3-64)$$

Substituindo os termos a e b na equação (3-64) e rearranjando a equação:

$$E = \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \left[v_\xi \cdot \left(\frac{\partial(h_\eta \cdot v_\xi)}{\partial \xi} + \frac{\partial(h_\xi \cdot v_\eta)}{\partial \eta} \right) + \left(h_\eta \cdot v_\xi \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} + h_\xi \cdot v_\eta \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \right) \right] \quad (3-65)$$

Substituindo a equação (3-12) na equação (3-65), chega-se a:

$$E = \frac{\rho}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \left(h_\eta \cdot v_\xi \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} + h_\xi \cdot v_\eta \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \right) \quad (3-66)$$

Substituindo a equação (3-66) no último termo do lado esquerdo da equação (3-61), chega-se a:

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} + \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \xi} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \eta} + \quad (3-67) \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \cdot d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \eta} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \right)}{\partial \eta} + \rho \cdot g \cdot \cos \delta + \\
& - \frac{\rho}{h_\xi} \cdot v_\xi \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} - \frac{\rho}{h_\eta} \cdot v_\eta \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} = 0
\end{aligned}$$

A equação (3-67) é a equação de conservação de momentum na direção ξ . A equação de momentum na direção η é obtida de forma análoga à obtida na direção ξ . Segue a equação de momentum na direção η .

Direção η :

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} + \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\eta \cdot d\bar{e}_{\xi,\eta}}{\|\bar{e}_\eta\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \eta} + \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\eta \cdot d\bar{e}_{\xi,\xi}}{\|\bar{e}_\eta\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \xi} + \quad (3-68) \\
& + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\xi \cdot d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_\xi\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \xi} + \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \right)}{\partial \xi} + \\
& - \frac{\rho}{h_\eta} \cdot v_\eta \frac{\partial v_\eta}{\partial \eta} - \frac{\rho}{h_\xi} \cdot v_\xi \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} = 0
\end{aligned}$$

3.1.2.3. Condições de contorno

As condições de contorno de um escoamento de um efluente miscível em rios são: velocidades nulas nas margens do rio; impermeabilidade das margens; velocidade conhecida e uniforme na entrada; valor constante e conhecido da concentração do efluente enviado ao rio nas margens do rio; derivadas nulas na saída do rio.

Matematicamente:

- Margens do rio

$$v_\xi = 0 \quad (3-69)$$

$$v_\eta = 0 \quad (3-70)$$

Para os volumes de controle onde não há emissão do efluente:

$$\frac{\partial C_A}{\partial \eta} = 0 \quad (3-71)$$

Para os volumes de controle onde há emissão de efluente:

$$C_A = C_{A,conhecido}$$

- Início do rio

$$V_\xi = V_{\xi,uniforme} \quad (3-72)$$

$$V_\eta = V_{\eta,uniforme} \quad (3-73)$$

$$C_A = C_{A,uniforme} \quad (3-74)$$

- Fim do rio

$$\frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} = 0 \quad (3-75)$$

$$\frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} = 0 \quad (3-76)$$

$$\frac{\partial C_A}{\partial \xi} = 0 \quad (3-77)$$

3.1.2.4. Turbulência

De acordo com Chow (1959), o fluxo turbulento predomina em escoamentos em canais abertos. Assim, é necessário que se utilize algum modelo para que os efeitos da turbulência sejam considerados.

Assim, escolheu-se um modelo no qual serão adicionados termos de viscosidade e difusividade turbulenta nas equações de conservação de momentum e de massa, respectivamente. Assim:

$$\mu_{ef} = \mu + \mu_T \quad (3-78)$$

$$D_{ef} = D + D_T \quad (3-79)$$

Em que μ_{ef} é a viscosidade dinâmica efetiva; μ é a viscosidade dinâmica do fluido; μ_T é a viscosidade dinâmica turbulenta; D_{ef} é o coeficiente de difusão efetivo; D é o coeficiente de difusão molecular e D_T é o coeficiente de difusão turbulento.

A difusividade turbulenta é calculada através do número de Schmidt turbulento (Sc_T):

$$Sc_T = \frac{\mu_T}{D_T \cdot \rho} \quad (3-80)$$

Segundo Welty et al. (1993, p. 591), o número de Schmidt turbulento é próximo de 1. Então a equação acima pode ser escrita desta maneira:

$$D_T = \frac{\mu_T}{\rho} \quad (3-81)$$

Para que o valor da difusividade turbulenta seja obtido, é preciso que o valor da viscosidade turbulenta seja conhecido. Este valor será obtido de acordo com um modelo de ordem zero proposto por Spalding (1961):

$$\mu_T = \mu.k.e^{-k.B} \left(e^Z - 1 - Z - \frac{Z^2}{2} \right) \quad (3-82)$$

Em que:

$$Z = \frac{k.\bar{v}}{v^*} \quad (3-83)$$

A variável $\bar{v}$ é a velocidade em um determinado elemento de controle e é dada por:

$$\bar{v} = \sqrt{v_\xi^2 + v_\eta^2} \quad (3-84)$$

A constante de Von Kármán (k) possui valor de 0,41 e a constante B é igual a 5.

De acordo com Wilcox (1993), quando se realiza um balanço de momentum na região de escoamento da camada limite (muito próxima à margem do rio) com as considerações de que os termos convectivos são desprezíveis (devido às baixas velocidades próximas à margem) e que o atrito do fluido com a margem é muito maior que entre as camadas de fluido, então, chega-se à seguinte equação com a utilização do modelo de comprimento de mistura.

$$\frac{\bar{v}_{\xi}}{v^*} = \frac{1}{k} \cdot \ln\left(\frac{\theta \cdot v^* \cdot \rho}{\mu}\right) + B \quad (3-85)$$

Em que $\bar{v}_{\xi}$ é a velocidade do elemento de controle na direção ξ mais próximo à margem (tangente à margem); v^* é a velocidade friccional e θ é a distância entre o ponto em que $\bar{v}_{\xi}$ foi obtido e a margem do rio.

A equação (3-85) pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\bar{v}_{\xi}}{v^*} - \frac{1}{k} \cdot \ln\left(\frac{\theta \cdot v^* \cdot \rho}{\mu}\right) - B = 0 \quad (3-86)$$

Considere a função $f(v^*)$ definida pela equação abaixo:

$$f(v^*) = \frac{\bar{v}_{\xi}}{v^*} - \frac{1}{k} \cdot \ln\left(\frac{\theta \cdot v^* \cdot \rho}{\mu}\right) - B \quad (3-87)$$

O objetivo é encontrar o valor de v^* que faça com que o valor de $f(v^*)$ seja zero.

Para isso, foi utilizado o Método de Newton-Raphson, como demonstrado a seguir:

$$v_{n+1}^* = v_n^* - \frac{f(v_n^*)}{f'(v_n^*)} \quad (3-88)$$

Em que v_n^* é o valor de v^* na iteração anterior; v_{n+1}^* é o valor de v^* calculado na iteração seguinte; $f(v_n^*)$ é o valor da função $f(v^*)$ na iteração anterior e $f'(v_n^*)$ é o valor da primeira derivada da função $f(v^*)$ na iteração anterior.

Sendo assim, arbitra-se um valor inicial de v^* (representado por v_n^*) e calcula-se $f(v_n^*)$ e $f'(v_n^*)$; em seguida v_{n+1}^* é calculado. Caso a diferença entre v_{n+1}^* e v_n^* seja menor que 10^{-4} , considera-se que o valor de v^* foi encontrado; caso contrário, o novo valor encontrado de v^* , calcula-se novamente $f(v_n^*)$, $f'(v_n^*)$ e v_{n+1}^* , até que o critério de convergência estabelecido seja atingido.

CAPÍTULO 4

4. RESOLUÇÃO NUMÉRICA

Como já mencionado anteriormente, para que as equações diferenciais parciais obtidas no Capítulo 3 a partir dos princípios de conservação de massa e de momentum sejam resolvidas numericamente, é necessário primeiro que o domínio de solução seja discretizado, ou seja, a malha deve ser gerada.

Em seguida, apresenta-se uma breve explicação do uso de coeficiente de relaxação na resolução de um sistema de equações, para depois mostrar com detalhe a aplicação do Método dos Volumes Finitos nas equações de conservação de massa e momentum obtidas no Capítulo 3.

4.1. GERAÇÃO DA MALHA

4.1.1. Definição das fronteiras

Seja um rio representado por um sistema bidimensional definido por duas fronteiras (margens) e que cada fronteira seja representada por um conjunto de pontos:

- Margem Inferior: $MI_1(x_1, y_1), MI_2(x_2, y_2), MI_3(x_3, y_3), \dots, MI_n(x_n, y_n)$
- Margem Superior: $MS_1(x_1, z_1), MS_2(x_2, z_2), MS_3(x_3, z_3), \dots, MS_n(x_n, z_n)$

Em que n é o número total de pontos de cada margem.

Note que cada ponto da margem inferior tem o mesmo valor da abscissa do ponto correspondente na margem superior. Por exemplo, MI_1 e MS_1 possuem a mesma abscissa; MI_2 e MS_2 também possuem o mesmo valor na coordenada x e assim por diante.

O Método Spline foi usado para ajustar funções cúbicas que passem por esses pontos. Sejam $f_i(x)$ e $g_i(x)$ as funções que representam a margem inferior e a margem superior no intervalo i , respectivamente. Assim:

$$f_i(x) = A_i^M \cdot x^3 + B_i^M \cdot x^2 + C_i^M \cdot x + D_i^M \quad (4-1)$$

$$g_i(x) = E_i^M \cdot x^3 + F_i^M \cdot x^2 + G_i^M \cdot x + H_i^M \quad (4-2)$$

Em que $i = 1, 2, \dots, (n - 1)$.

As funções que representam as margens possuem quatro coeficientes cada uma que precisam ser calculados. Para isso, são necessárias quatro equações para que eles sejam calculados. Tais equações surgem das seguintes condições:

- **Primeiro intervalo ($i = 1$)**

1. Passar pelos dois pontos (2 condições)
2. Segunda derivada é nula para o primeiro ponto (1 condição)
3. A primeira derivada é igual a um valor de modo de que o comprimento total de todas as funções seja minimizado (1 condição)

- **Segundo ao penúltimo intervalo ($i = 2, \dots, n - 2$)**
 1. Passar pelos dois pontos (2 condições)
 2. Continuidade da primeira derivada no ponto do início do intervalo i para a função do intervalo i e para a função do intervalo $i - 1$ (1 condição)
 3. Continuidade da segunda derivada no ponto do início do intervalo i para a função do intervalo i e para a função do intervalo $i - 1$ (1 condição)
- **Último intervalo ($i = n - 1$)**
 1. Passar pelos dois pontos (2 condições)
 2. Continuidade da primeira derivada no ponto do início do intervalo i para a função do intervalo i e para a função do intervalo $i - 1$ (1 condição)
 3. Segunda derivada é nula para o último ponto (1 condição)

Aplicando as condições acima, chega-se a um sistema linear de quatro equações cuja resolução foi feita utilizando a eliminação de Gauss. Os sistemas lineares gerados para o cálculo dos quatro coeficientes de cada função estão demonstrados a seguir na forma matricial ($K \cdot X = L$) para a margem inferior (o procedimento é o mesmo para a margem superior):

- **Primeiro intervalo**

$$K = \begin{bmatrix} x_1^3 & x_1^2 & x_1 & 1 \\ x_2^3 & x_2^2 & x_2 & 1 \\ 3x_1^2 & 2x_1 & 1 & 0 \\ 6x_1 & 2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{bmatrix} A_1 \\ B_1 \\ C_1 \\ D_1 \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \psi \\ 0 \end{bmatrix}$$

Em que ψ é o valor da primeira derivada no primeiro ponto.

- Segundo ao penúltimo intervalo

$$K = \begin{bmatrix} x_i^3 & x_i^2 & x_i & 1 \\ x_{i+1}^3 & x_{i+1}^2 & x_{i+1} & 1 \\ 3x_i^2 & 2x_i & 1 & 0 \\ 6x_i & 2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{bmatrix} A_i \\ B_i \\ C_i \\ D_i \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} y_i \\ y_{i+1} \\ \frac{df_{i-1}(x_i)}{dx} \\ \frac{d^2f_{i-1}(x_i)}{dx^2} \end{bmatrix}$$

- Último intervalo

$$K = \begin{bmatrix} x_{n-1}^3 & x_{n-1}^2 & x_{n-1} & 1 \\ x_n^3 & x_n^2 & x_n & 1 \\ 3x_{n-1}^2 & 2x_{n-1} & 1 & 0 \\ 6x_n & 2 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad X = \begin{bmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \\ C_{n-1} \\ D_{n-1} \end{bmatrix} \quad L = \begin{bmatrix} y_{n-1} \\ y_n \\ \frac{df_{n-2}(x_i)}{dx} \\ 0 \end{bmatrix}$$

A cada atribuição de valor à primeira derivada da função no primeiro intervalo, os comprimentos dos arcos de cada função são calculados:

$$dS_i = \sqrt{1 + \left(\frac{df_i(x)}{dx}\right)^2} dx \quad (4-3)$$

Integrando a equação (4-3) entre os pontos do intervalo i, tem-se o valor do comprimento do arco da função do intervalo i:

$$S_i = \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt{1 + \left(\frac{df_i(x)}{dx}\right)^2} dx \quad (4-4)$$

Em que o valor de S_i foi calculado numericamente pelo Método de Simpson.

Então o comprimento total é dado por:

$$S_{TOTAL} = \sum_{i=1}^{n-1} S_i \quad (4-5)$$

Após o cálculo do comprimento total de cada fronteira, faz-se uma otimização desta variável em relação ao valor da primeira derivada do primeiro ponto (ψ). Os splines otimizados serão as margens do rio.

Assim, o valor de ψ é tal que:

$$\frac{d \left(\sum_{i=1}^{n-1} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sqrt{1 + \left(\frac{df_i(x)}{dx} \right)^2} dx \right)}{d\psi} = 0 \quad (4-6)$$

Este procedimento é aplicado para cada margem e, então, obtêm-se as margens que melhor se ajustam aos pontos fornecidos das margens reais do rio.

4.1.2. Cálculo das linhas de corrente

Seja $w_i(x)$ a função que representa a linha de corrente no intervalo i . Então:

$$w_i(x) = \alpha \cdot g_i(x) + (1 - \alpha) \cdot f_i(x) \quad (4-7)$$

Em que α é um número entre 0 e 1. Assim, cada valor de α gera uma linha de corrente. Observa-se ainda que quando $\alpha = 0$ a função $w_i(x)$ é igual à função $g_i(x)$ e para $\alpha = 1$, a linha de corrente torna-se a função $f_i(x)$.

De acordo com a definição das funções das margens inferior e superior, reescreve-se a equação (4-7):

$$w_i(x) = [A_i \cdot (1 - \alpha) + E_i \cdot \alpha]x^3 + [B_i \cdot (1 - \alpha) + F_i \cdot \alpha]x^2 + [C_i \cdot (1 - \alpha) + G_i \cdot \alpha]x + [D_i \cdot (1 - \alpha) + H_i \cdot \alpha] \quad (4-8)$$

4.1.3. Cálculo das linhas potenciais

Como a malha é ortogonal, então as linhas potenciais devem ser perpendiculares às linhas de corrente na intersecção entre elas. Seja $m(x)$ a função que representa a linha potencial, então pelo princípio da ortogonalidade:

$$\frac{dm(x)}{dx} \cdot \frac{dw(x)}{dx} = -1 \quad (4-9)$$

$$\frac{dm(x)}{dx} = \frac{-1}{\frac{dw(x)}{dx}} \quad (4-10)$$

A primeira derivada da função $w_i(x)$ é dada por:

$$\frac{dw(x)}{dx} = (1 - \alpha) \cdot \frac{df(x)}{dx} + \alpha \cdot \frac{dg(x)}{dx} \quad (4-11)$$

A equação (4-7) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\alpha = \frac{w(x) - f(x)}{g(x) - f(x)} \quad (4-12)$$

Substituindo as equações (4-11) e (4-12) na equação (4-10):

$$\frac{dm(x)}{dx} = \frac{-1}{\left(1 - \frac{w(x) - f(x)}{g(x) - f(x)}\right) \cdot \frac{df(x)}{dx} + \left(\frac{w(x) - f(x)}{g(x) - f(x)}\right) \cdot \frac{dg(x)}{dx}} \quad (4-13)$$

A equação (4-13) foi resolvida utilizando diferenças finitas para cada condição de contorno a seguir:

$$x_0 = x_{\text{margem superior}} \quad (4-14)$$

$$m(x_0) = g(x_{\text{margem superior}}) \quad (4-15)$$

Desta forma, a resolução para cada condição de contorno gera uma linha potencial correspondente.

4.2. COEFICIENTE DE RELAXAÇÃO

A aplicação do método dos volumes finitos às equações diferenciais parciais pode acarretar na obtenção de um sistema linear algébrico. Quando isto ocorre, o sistema é do seguinte tipo:

$$A_p \cdot \phi_p = \sum A_\omega \cdot \phi_\omega + B \quad (4-16)$$

A equação (4-16) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\phi_p = \frac{\sum A_\omega \cdot \phi_\omega + B}{A_p} \quad (4-17)$$

Adicionando e subtraindo a variável ϕ_P da iteração anterior (ϕ_P^*):

$$\phi_P = \phi_P^* + \left(\frac{\sum A_\omega \cdot \phi_\omega + B}{A_P} - \phi_P^* \right) \quad (4-18)$$

De acordo com Patankar (1980), a diferença entre a variável em uma iteração e na iteração anterior pode ser diminuída da seguinte forma:

$$\phi_P = \phi_P^* + \nu \cdot \left(\frac{\sum A_\omega \cdot \phi_\omega + B}{A_P} - \phi_P^* \right) \quad (4-19)$$

Em que ν é o coeficiente de relaxação e $0 < \nu < 1$.

Assim:

$$\frac{A_P}{\nu} \cdot \phi_P = \sum A_\omega \cdot \phi_\omega + B + \frac{(1-\nu)}{\nu} \cdot A_P \cdot \phi_P^* \quad (4-20)$$

Este procedimento é feito para diminuir a rigidez do sistema de equações.

4.3. DISCRETIZAÇÃO DA GEOMETRIA

A geração da malha descrita na Seção 4.1 é responsável pela discretização da geometria do rio. Através dela, os pontos de intersecção entre as linhas de corrente e as linhas potenciais serão obtidos e armazenados para que auxiliem na resolução do problema.

A Figura 4.1 mostra um rio qualquer discretizado com q volumes de controle na direção ξ e t volumes de controle na direção η :

Figura 4.1: Rio qualquer discretizado, com q volumes de controle na direção ξ e t volumes de controle na direção η .

Assim, a geometria possui $q + 1$ pontos de intersecção na direção ξ e $t + 1$ pontos de intersecção na direção η .

4.4. MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS APLICADO AO ESCOAMENTO DE UM EFLUENTE MISCÍVEL EM RIOS

Nesta seção, o Método dos Volumes Finitos será aplicado às equações diferenciais parciais de balanço de massa e momentum do escoamento monofásico de um efluente em um rio. Considere a Figura 4.2, supondo que esta malha seja ortogonal:

Figura 4.2: Elemento de controle para aplicação do método dos volumes finitos e os elementos de controle vizinhos a ele.

4.4.1. Balanço de Massa

Aplicando o método dos volumes finitos à equação (3-19), que representa a conservação de massa do efluente no rio.

$$\begin{aligned}
 & \int_{s}^n \int_{w}^e \frac{\partial}{\partial \xi} (C_A \cdot v_{\xi} \cdot h_{\eta}) \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
 & - D_{ef,A,C} \cdot \int_{s}^n \int_{w}^e \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \right) \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
 & + \int_{s}^n \int_{w}^e \frac{\partial}{\partial \eta} (C_A \cdot v_{\eta} \cdot h_{\xi}) \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
 & - D_{ef,A,C} \cdot \int_{s}^n \int_{w}^e \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \right) \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta = 0
 \end{aligned} \tag{4-21}$$

- Volumes de controle centrais do rio (para $2 \leq i \leq q-1$ e $2 \leq j \leq t-1$)

$$\begin{aligned}
& h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \eta \cdot \left(v_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot C_A \Big|_e - v_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot C_A \Big|_w \right) + \\
& - h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \eta \cdot D_{ef,A,C} \cdot \left(\frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \Big|_e - \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \Big|_w \right) + \\
& + h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \xi \cdot \left(v_{\eta} \cdot h_{\xi} \cdot C_A \Big|_n - v_{\eta} \cdot h_{\xi} \cdot C_A \Big|_s \right) + \\
& - h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \xi \cdot D_{ef,A,C} \cdot \left(\frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \Big|_n - \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \Big|_s \right) = 0
\end{aligned} \tag{4-22}$$

Usando diferenças centrais para os termos difusivos e o esquema upwind para os termos convectivos, então:

$$\begin{aligned}
& h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \eta \cdot \left\{ \begin{aligned} & h_{\eta} \Big|_e \cdot [v_{\xi,e}, 0] C_{A,P} - h_{\eta} \Big|_e \cdot [-v_{\xi,e}, 0] C_{A,E} + \\ & - h_{\eta} \Big|_w \cdot [v_{\xi,w}, 0] C_{A,W} + h_{\eta} \Big|_w \cdot [-v_{\xi,w}, 0] C_{A,P} \end{aligned} \right\} + \\
& - h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \eta \cdot D_{ef,A,C} \cdot \left(\frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \Big|_e \cdot \left(\frac{C_{A,E} - C_{A,P}}{\Delta \xi} \right) - \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \Big|_w \cdot \left(\frac{C_{A,P} - C_{A,W}}{\Delta \xi} \right) \right) + \\
& + h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \xi \cdot \left(\begin{aligned} & h_{\xi} \Big|_n \cdot [v_{\eta,n}, 0] C_{A,P} - h_{\xi} \Big|_n \cdot [-v_{\eta,n}, 0] C_{A,N} + \\ & - h_{\xi} \Big|_s \cdot [v_{\eta,s}, 0] C_{A,S} + h_{\xi} \Big|_s \cdot [-v_{\eta,s}, 0] C_{A,P} \end{aligned} \right) + \\
& - h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot \Delta \xi \cdot D_{ef,A,C} \cdot \left(\frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \Big|_n \cdot \left(\frac{C_{A,N} - C_{A,P}}{\Delta \eta} \right) - \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \Big|_s \cdot \left(\frac{C_{A,P} - C_{A,S}}{\Delta \eta} \right) \right) = 0
\end{aligned} \tag{4-23}$$

Rearranjando os termos:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \begin{aligned} & \Delta\eta \cdot h_{\eta,e} \cdot [v_{\xi,e}, 0] + \Delta\eta \cdot h_{\eta,w} \cdot [-v_{\xi,w}, 0] + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} + \\ & + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} + \Delta\xi \cdot h_{\xi,n} \cdot [v_{\eta,n}, 0] + \Delta\xi \cdot h_{\xi,s} \cdot [-v_{\eta,s}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \end{aligned} \right\} \cdot C_{A,P} = \\
& = \left\{ \begin{aligned} & \Delta\eta \cdot h_{\eta,e} \cdot [-v_{\xi,e}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \end{aligned} \right\} \cdot C_{A,E} + \left\{ \begin{aligned} & \Delta\eta \cdot h_{\eta,w} \cdot [v_{\xi,w}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \end{aligned} \right\} \cdot C_{A,W} + \\
& + \left\{ \begin{aligned} & \Delta\xi \cdot h_{\xi,n} \cdot [-v_{\eta,n}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \end{aligned} \right\} \cdot C_{A,N} + \left\{ \begin{aligned} & \Delta\xi \cdot h_{\xi,s} \cdot [v_{\eta,s}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \end{aligned} \right\} \cdot C_{A,S} \quad (4-24)
\end{aligned}$$

Escrevendo de forma simplificada:

$$A_P \cdot C_{A,P} = A_E \cdot C_{A,E} + A_W \cdot C_{A,W} + A_N \cdot C_{A,N} + A_S \cdot C_{A,S} + B \quad (4-25)$$

Sendo que:

$$A_P = \left\{ \begin{aligned} & \Delta\eta \cdot h_{\eta,e} \cdot [v_{\xi,e}, 0] + \Delta\eta \cdot h_{\eta,w} \cdot [-v_{\xi,w}, 0] + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} + \\ & + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} + \Delta\xi \cdot h_{\xi,n} \cdot [v_{\eta,n}, 0] + \Delta\xi \cdot h_{\xi,s} \cdot [-v_{\eta,s}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \end{aligned} \right\} \quad (4-26)$$

$$A_E = \left\{ \begin{aligned} & \Delta\eta \cdot h_{\eta,e} \cdot [-v_{\xi,e}, 0] + \\ & + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \end{aligned} \right\} \quad (4-27)$$

$$A_W = \left\{ \begin{array}{l} \Delta\eta \cdot h_{\eta,w} \cdot [v_{\xi,w}, 0] + \\ + \frac{\Delta\eta}{\Delta\xi} \cdot D_{ef,A,C,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \end{array} \right\} \quad (4-28)$$

$$A_N = \left\{ \begin{array}{l} \Delta\xi \cdot h_{\xi,n} \cdot [-v_{\eta,n}, 0] + \\ + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \end{array} \right\} \quad (4-29)$$

$$A_S = \left\{ \begin{array}{l} \Delta\xi \cdot h_{\xi,s} \cdot [v_{\eta,s}, 0] + \\ + \frac{\Delta\xi}{\Delta\eta} \cdot D_{ef,A,C,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \end{array} \right\} \quad (4-30)$$

$$B = 0 \quad (4-31)$$

- Volumes de controle do início do rio (para $i = 1$ e $2 \leq j \leq t-1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-74) e utilizando volumes fictícios, pode-se escrever:

$$C_{A,W} = C_{A,uniforme} = \frac{C_{A,P} + C_{A,W}}{2} \quad (4-32)$$

$$C_{A,W} = 2 \cdot C_{A,uniforme} - C_{A,P} \quad (4-33)$$

Substituindo a equação (4-33) na equação (4-25):

$$\begin{aligned} A_P \cdot C_{A,P} &= A_E \cdot C_{A,E} + A_W \cdot (2 \cdot C_{A,uniforme} - C_{A,P}) + \\ &+ A_N \cdot C_{A,N} + A_S \cdot C_{A,S} + B \end{aligned} \quad (4-34)$$

Rearranjando os termos:

$$(A_P + A_W)C_{A,P} = A_E \cdot C_{A,E} + A_N \cdot C_{A,N} + A_S \cdot C_{A,S} + B \quad (4-35)$$

Neste caso, o termo B está definido da seguinte forma:

$$B = 2 \cdot A_W \cdot C_{A,uniforme} \quad (4-36)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados pelas equações (4-26) a (4-30), respectivamente.

- Volumes de controle da margem inferior do rio (para $2 \leq i \leq q-1$ e $j=1$)

Aplicando a condição de contorno dada pela equação (3-71) e usando volumes fictícios, tem-se:

$$\left. \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \right|_s = 0 = \frac{C_{A,P} - C_{A,S}}{\Delta \eta} \quad (4-37)$$

$$C_{A,S} = C_{A,P} \quad (4-38)$$

Substituindo a equação (4-38) na equação (4-25) e rearranjando os termos, então:

$$(A_P - A_S)C_{A,P} = A_E \cdot C_{A,E} + A_W \cdot C_{A,W} + A_N \cdot C_{A,N} + B \quad (4-39)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-31).

- Volumes de controle da margem superior do rio (para $2 \leq i \leq q-1$ e $j = t$)

Aplicando novamente a condição de contorno dada pela equação (3-71) e usando volumes fictícios, tem-se:

$$\left. \frac{\partial C_A}{\partial \eta} \right|_n = 0 = \frac{C_{A,N} - C_{A,P}}{\Delta \eta} \quad (4-40)$$

$$C_{A,N} = C_{A,P} \quad (4-41)$$

Substituindo a equação (4-41) na equação (4-25) e rearranjando os termos, tem-se:

$$(A_P - A_N)C_{A,P} = A_E \cdot C_{A,E} + A_W \cdot C_{A,W} + A_S \cdot C_{A,S} + B \quad (4-42)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-31).

- Volumes de controle do final do rio (para $i = q$ e $2 \leq j \leq t-1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-77) e usando volumes fictícios, então:

$$\left. \frac{\partial C_A}{\partial \xi} \right|_e = 0 = \frac{C_{A,E} - C_{A,P}}{\Delta \xi} \quad (4-43)$$

$$C_{A,E} = C_{A,P} \quad (4-44)$$

Substituindo a equação (4-44) na equação (4-25) e rearranjando os termos, chega-se em:

$$(A_P - A_E)C_{A,P} = A_W \cdot C_{A,W} + A_N \cdot C_{A,N} + A_S \cdot C_{A,S} + B \quad (4-45)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-31).

- Volume de controle situado no início e na margem inferior (para $i = 1$ e $j = 1$)

Substituindo as equações (4-33) e (4-38) na equação (4-25) e rearranjando os termos, chega-se em:

$$(A_P + A_W - A_S)C_{A,P} = A_E \cdot C_{A,E} + A_N \cdot C_{A,N} + B \quad (4-46)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-30) e (4-36).

- Volume de controle situado no início e na margem superior (para $i = 1$ e $j = t$)

Substituindo as equações (4-33) e (4-41) na equação (4-25) e rearranjando os termos:

$$(A_P + A_W - A_N).C_{A,P} = A_E.C_{A,E} + A_S.C_{A,S} + B \quad (4-47)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-30) e (4-36).

- Volume de controle situado no final e na margem inferior (para $i = q$ e $j = 1$)

Substituindo as equações (4-44) e (4-38) na equação (4-25) chega-se a:

$$(A_P - A_E - A_S).C_{A,P} = A_W.C_{A,W} + A_N.C_{A,N} + B \quad (4-48)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-31).

- Volume de controle situado no final e na margem superior (para $i = q$ e $j = t$)

Substituindo as equações (4-44) e (4-41) na equação (4-25) chega-se a:

$$(A_P - A_E - A_N).C_{A,P} = A_W.C_{A,W} + A_S.C_{A,S} + B \quad (4-49)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-26) a (4-31).

4.4.2. Balanço de Momentum

4.4.2.1. Direção ξ

Aplicando o método dos volumes finitos na equação (3-67):

$$\begin{aligned}
& \int \int_{w s}^{e n} \frac{2}{h_{\xi} \cdot h_{\eta}} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int \int_{w s}^{e n} \frac{2}{h_{\xi} \cdot h_{\eta}} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \cdot d\bar{e}_{\eta, \xi}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta, \xi}\|} \right) \cdot v_{\eta} \right)}{\partial \xi} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int \int_{w s}^{e n} \frac{1}{h_{\xi} \cdot h_{\eta}} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int \int_{w s}^{e n} \frac{1}{h_{\xi} \cdot h_{\eta}} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \cdot d\bar{e}_{\eta, \eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta, \eta}\|} \right) \cdot v_{\eta} \right)}{\partial \eta} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int \int_{w s}^{e n} \frac{1}{h_{\xi} \cdot h_{\eta}} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\eta} \cdot d\bar{e}_{\xi, \xi}}{\|\bar{e}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi, \xi}\|} \right) \cdot v_{\xi} \right)}{\partial \eta} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int \int_{w s}^{e n} \frac{1}{h_{\xi} \cdot h_{\eta}} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_{\eta}}{\partial \xi} \right)}{\partial \eta} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \tag{4-50} \\
& + \int \int_{w s}^{e n} \rho \cdot g \cdot \cos \delta \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& - \int \int_{w s}^{e n} \frac{\rho \cdot v_{\xi}}{h_{\xi}} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{\partial \xi} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta - \int \int_{w s}^{e n} \frac{\rho \cdot v_{\eta}}{h_{\eta}} \cdot \frac{\partial v_{\xi}}{\partial \eta} \cdot h_{\xi} \cdot h_{\eta} \cdot d\xi \cdot d\eta = 0
\end{aligned}$$

- Volumes de controle centrais do rio (para $2 \leq i \leq q-1$ e $2 \leq j \leq t-1$):

$$\begin{aligned}
& 2.\Delta\eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} \Big|_e + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \xi} \Big|_w \end{array} \right\} + 2.\Delta\eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_e + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_w \end{array} \right\} + \\
& + \Delta\xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \Big|_n + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \Big|_s \end{array} \right\} + \Delta\xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_n + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_s \end{array} \right\} + \\
& + \Delta\xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \cdot d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_n + \\ - \mu_{ef} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \cdot d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_s \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} (\mu_{ef} \cdot v_\eta \Big|_e - \mu_{ef} \cdot v_\eta \Big|_w) \Big|_n + \\ - (\mu_{ef} \cdot v_\eta \Big|_e - \mu_{ef} \cdot v_\eta \Big|_w) \Big|_s \end{array} \right\} + \\
& + \rho \cdot g \cdot \cos \delta \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot \Delta\xi \cdot \Delta\eta - \rho \cdot \Delta\eta \cdot h_\eta \cdot v_{\xi,P} \cdot \left\{ \begin{array}{l} v_\xi \Big|_e + \\ - v_\xi \Big|_w \end{array} \right\} - \rho \cdot \Delta\xi \cdot h_\xi \cdot v_{\eta,P} \cdot \left\{ \begin{array}{l} v_\xi \Big|_n + \\ - v_\xi \Big|_s \end{array} \right\} = 0
\end{aligned} \tag{4-51}$$

Usando diferenças centrais para os termos difusivos, o esquema upwind para os termos convectivos, então:

$$\begin{aligned}
& 2.\Delta\eta \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \left[\frac{v_{\xi,E} - v_{\xi,P}}{\Delta\xi} \right] + \\ & - \mu_{ef,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \left[\frac{v_{\xi,P} - v_{\xi,W}}{\Delta\xi} \right] \end{aligned} \right\} + 2.\Delta\eta \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef} \cdot \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\xi}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_e + \\ & - \mu_{ef} \cdot \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\xi}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_w \end{aligned} \right\} + \\
& + \Delta\xi \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \left[\frac{v_{\xi,N} - v_{\xi,P}}{\Delta\eta} \right] + \\ & - \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \left[\frac{v_{\xi,P} - v_{\xi,S}}{\Delta\eta} \right] \end{aligned} \right\} + \Delta\xi \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef} \cdot \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_n + \\ & - \mu_{ef} \cdot \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_s \end{aligned} \right\} + \\
& + \Delta\xi \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef,n} \cdot \left[\left(\frac{\bar{e}_{\eta,n} \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi,n}}{\|\bar{e}_{\eta,n}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi,n}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\xi,P} + \\ & - \mu_{ef,n} \cdot \left[- \left(\frac{\bar{e}_{\eta,n} \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi,n}}{\|\bar{e}_{\eta,n}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi,n}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\xi,N} + \\ & - \mu_{ef,s} \cdot \left[\left(\frac{\bar{e}_{\eta,s} \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi,s}}{\|\bar{e}_{\eta,s}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi,s}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\xi,S} + \\ & + \mu_{ef,s} \cdot \left[- \left(\frac{\bar{e}_{\eta,s} \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi,s}}{\|\bar{e}_{\eta,s}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi,s}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\xi,P} \end{aligned} \right\} + \left\{ \begin{aligned} & (\mu_{ef,P} \cdot v_{\eta,P} - \mu_{ef,W} \cdot v_{\eta,W}) + \\ & - (\mu_{ef,S} \cdot v_{\eta,S} - \mu_{ef,SW} \cdot v_{\eta,SW}) \end{aligned} \right\} + \\
& + \rho \cdot g \cdot \cos \delta \cdot h_{\xi,P} \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta\xi \cdot \Delta\eta - \rho \cdot \Delta\eta \cdot h_{\eta,P} \cdot \left\{ \begin{aligned} & [v_{\xi,P}, 0] v_{\xi,P} + \\ & - [-v_{\xi,P}, 0] v_{\xi,E} + \\ & - [v_{\xi,P}, 0] v_{\xi,W} + \\ & + [-v_{\xi,P}, 0] v_{\xi,P} \end{aligned} \right\} + \\
& - \rho \cdot \Delta\xi \cdot h_{\xi,P} \cdot \left\{ \begin{aligned} & [v_{\eta,P}, 0] v_{\xi,P} + \\ & - [-v_{\eta,P}, 0] v_{\xi,N} + \\ & - [v_{\eta,P}, 0] v_{\xi,S} + \\ & + [-v_{\eta,P}, 0] v_{\xi,P} \end{aligned} \right\} = 0 \tag{4-52}
\end{aligned}$$

Rearranjando os termos da equação (4-52):

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{2\Delta\eta\cdot\mu_{ef,e}\cdot h_{\eta,e}}{\Delta\xi\cdot h_{\xi,e}} + \frac{2\Delta\eta\cdot\mu_{ef,w}\cdot h_{\eta,w}}{\Delta\xi\cdot h_{\xi,w}} + \frac{\Delta\xi\cdot\mu_{ef,n}\cdot h_{\xi,n}}{\Delta\eta\cdot h_{\eta,n}} + \frac{\Delta\xi\cdot\mu_{ef,s}\cdot h_{\xi,s}}{\Delta\eta\cdot h_{\eta,s}} + \right. \\
& \left. - \Delta\xi\cdot\mu_{ef,n}\cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}\|} \right), 0 \right] - \Delta\xi\cdot\mu_{ef,s}\cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}\|} \right), 0 \right] + \right. \\
& \left. + \Delta\eta\cdot\rho\cdot h_{\eta,P}\cdot [v_{\xi,P}, 0] + \Delta\eta\cdot\rho\cdot h_{\eta,P}\cdot [-v_{\xi,P}, 0] + \Delta\xi\cdot\rho\cdot h_{\xi,P}\cdot [v_{\eta,P}, 0] + \Delta\xi\cdot\rho\cdot h_{\xi,P}\cdot [-v_{\eta,P}, 0] \right\} \cdot v_{\xi,P} = \\
& = \left\{ \frac{\Delta\xi\cdot\mu_{ef,n}\cdot h_{\xi,n}}{\Delta\eta\cdot h_{\eta,n}} - \Delta\xi\cdot\mu_{ef,n}\cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}\|} \right), 0 \right] + \Delta\xi\cdot\rho\cdot h_{\xi,P}\cdot [-v_{\eta,P}, 0] \right\} \cdot v_{\xi,N} + \\
& + \left\{ \frac{\Delta\xi\cdot\mu_{ef,s}\cdot h_{\xi,s}}{\Delta\eta\cdot h_{\eta,s}} - \Delta\xi\cdot\mu_{ef,s}\cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}\|} \right), 0 \right] + \Delta\xi\cdot\rho\cdot h_{\xi,P}\cdot [v_{\eta,P}, 0] \right\} \cdot v_{\xi,S} + \\
& + \left\{ \frac{2\Delta\eta\cdot\mu_{ef,e}\cdot h_{\eta,e}}{\Delta\xi\cdot h_{\xi,e}} + \Delta\eta\cdot\rho\cdot h_{\eta,P}\cdot [-v_{\xi,P}, 0] \right\} \cdot v_{\xi,E} + \left\{ \frac{2\Delta\eta\cdot\mu_{ef,w}\cdot h_{\eta,w}}{\Delta\xi\cdot h_{\xi,w}} + \right. \\
& \left. + \Delta\eta\cdot\rho\cdot h_{\eta,P}\cdot [v_{\xi,P}, 0] \right\} \cdot v_{\xi,W} + \\
& + 2\Delta\eta\cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef}\cdot \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_e + \\ & - \mu_{ef}\cdot \frac{h_{\eta}}{h_{\xi}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_w \end{aligned} \right\} + \Delta\xi\cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef}\cdot \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_n + \\ & - \mu_{ef}\cdot \frac{h_{\xi}}{h_{\eta}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\|\|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_{\eta}|_s \end{aligned} \right\} + \\
& + \left\{ (\mu_{ef,P}\cdot v_{\eta,P} - \mu_{ef,W}\cdot v_{\eta,W}) + \right. \\
& \left. - (\mu_{ef,S}\cdot v_{\eta,S} - \mu_{ef,SW}\cdot v_{\eta,SW}) \right\} + \rho\cdot g\cdot \cos\delta_P\cdot h_{\xi,P}\cdot h_{\eta,P}\cdot \Delta\xi\cdot\Delta\eta
\end{aligned}
\tag{4-53}$$

Escrevendo de forma simplificada e utilizando o conceito de coeficiente de relaxação:

$$\frac{A_P}{V} \cdot v_{\xi,P} = A_E \cdot v_{\xi,E} + A_W \cdot v_{\xi,W} + A_N \cdot v_{\xi,N} + A_S \cdot v_{\xi,S} + B \tag{4-54}$$

Sendo:

$$A_P = \left\{ \begin{aligned} & \frac{2 \cdot \Delta \eta \cdot \mu_{ef,e} \cdot h_{\eta,e}}{\Delta \xi \cdot h_{\xi,e}} + \frac{2 \cdot \Delta \eta \cdot \mu_{ef,w} \cdot h_{\eta,w}}{\Delta \xi \cdot h_{\xi,w}} + \frac{\Delta \xi \cdot \mu_{ef,n} \cdot h_{\xi,n}}{\Delta \eta \cdot h_{\eta,n}} + \frac{\Delta \xi \cdot \mu_{ef,s} \cdot h_{\xi,s}}{\Delta \eta \cdot h_{\eta,s}} + \\ & - \Delta \xi \cdot \mu_{ef,n} \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}\|} \right), 0 \right] - \Delta \xi \cdot \mu_{ef,s} \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}\|} \right), 0 \right] + \\ & + \Delta \eta \cdot \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot [v_{\xi,P}, 0] + \Delta \eta \cdot \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot [-v_{\xi,P}, 0] + \\ & + \Delta \xi \cdot \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot [v_{\eta,P}, 0] + \Delta \xi \cdot \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot [-v_{\eta,P}, 0] \end{aligned} \right\} \quad (4-55)$$

$$A_E = \left\{ \frac{2 \cdot \Delta \eta \cdot \mu_{ef,e} \cdot h_{\eta,e}}{\Delta \xi \cdot h_{\xi,e}} + \Delta \eta \cdot \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot [-v_{\xi,P}, 0] \right\} \quad (4-56)$$

$$A_W = \left\{ \frac{2 \cdot \Delta \eta \cdot \mu_{ef,w} \cdot h_{\eta,w}}{\Delta \xi \cdot h_{\xi,w}} + \Delta \eta \cdot \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot [v_{\xi,P}, 0] \right\} \quad (4-57)$$

$$A_N = \left\{ \frac{\Delta \xi \cdot \mu_{ef,n} \cdot h_{\xi,n}}{\Delta \eta \cdot h_{\eta,n}} - \Delta \xi \cdot \mu_{ef,n} \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n}\|} \right), 0 \right] + \right. \\ \left. + \Delta \xi \cdot \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot [-v_{\eta,P}, 0] \right\} \quad (4-58)$$

$$A_S = \left\{ \frac{\Delta \xi \cdot \mu_{ef,s} \cdot h_{\xi,s}}{\Delta \eta \cdot h_{\eta,s}} - \Delta \xi \cdot \mu_{ef,s} \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s}\|} \right), 0 \right] + \right. \\ \left. + \Delta \xi \cdot \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot [v_{\eta,P}, 0] \right\} \quad (4-59)$$

$$\begin{aligned}
B = 2 \cdot \Delta \eta \cdot & \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_e + \\ & - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_w \end{aligned} \right\} + \\
+ \Delta \xi \cdot & \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_n + \\ & - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_s \end{aligned} \right\} + \\
+ & \left\{ \begin{aligned} & (\mu_{ef,P} \cdot v_{\eta,P} - \mu_{ef,W} \cdot v_{\eta,W}) + \\ & - (\mu_{ef,S} \cdot v_{\eta,S} - \mu_{ef,SW} \cdot v_{\eta,SW}) \end{aligned} \right\} + \rho \cdot g \cdot \cos \delta_P \cdot h_{\xi,P} \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \xi \cdot \Delta \eta + \frac{(1-v)}{v} \cdot A_P \cdot v_{\xi,P}^*
\end{aligned} \tag{4-60}$$

- Volumes de controle do início do rio (para $i = 1$ e $2 \leq j \leq t - 1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-72) e utilizando volumes fictícios, pode-se escrever:

$$v_{\xi,W} = v_{\xi,uniforme} = \frac{v_{\xi,P} + v_{\xi,W}}{2} \tag{4-61}$$

$$v_{\xi,W} = 2 \cdot v_{\xi,uniforme} - v_{\xi,P} \tag{4-62}$$

Substituindo a equação (4-62) na equação (4-54) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{v} + A_W \right) v_{\xi,P} = A_E \cdot v_{\xi,E} + A_N \cdot v_{\xi,N} + A_S \cdot v_{\xi,S} + B \tag{4-63}$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-59). O termo B é calculado da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 B = & 2 \cdot \Delta \eta \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_e + \\ & - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\xi}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\xi}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_w \end{aligned} \right\} + \\
 & + \Delta \xi \cdot \left\{ \begin{aligned} & \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_n + \\ & - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_s \end{aligned} \right\} + \\
 & + \left\{ \begin{aligned} & (\mu_{ef,P} \cdot v_{\eta,P} - \mu_{ef,W} \cdot v_{\eta,W}) + \\ & - (\mu_{ef,S} \cdot v_{\eta,S} - \mu_{ef,SW} \cdot v_{\eta,SW}) \end{aligned} \right\} + \rho \cdot g \cdot \cos \delta_P \cdot h_{\xi,P} \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \xi \cdot \Delta \eta + \\
 & + \frac{(1-\nu)}{\nu} \cdot A_P \cdot v_{\xi,P}^* + 2 \cdot A_W \cdot v_{\xi,uniforme} \tag{4-64}
 \end{aligned}$$

- Volumes de controle situados na margem inferior (para $2 \leq i \leq q-1$ e $j=1$)

Aplicando a condição de contorno dada pela equação (3-69) e usando volumes fictícios, tem-se:

$$v_{\xi,S} = 0 = \frac{v_{\xi,P} + v_{\xi,S}}{2} \tag{4-65}$$

$$v_{\xi,S} = -v_{\xi,P} \tag{4-66}$$

Substituindo a equação (4-66) na equação (4-54) e rearranjando os termos, então:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_S\right) \cdot v_{\xi,P} = A_E \cdot v_{\xi,E} + A_W \cdot v_{\xi,W} + A_N \cdot v_{\xi,N} + B \quad (4-67)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-60).

- Volumes de controle situados na margem superior (para $2 \leq i \leq q-1$ e $j = t$)

Aplicando novamente a condição de contorno dada pela equação (3-69) e usando volumes fictícios, tem-se:

$$v_{\xi,n} = 0 = \frac{v_{\xi,N} + v_{\xi,P}}{2} \quad (4-68)$$

$$v_{\xi,N} = -v_{\xi,P} \quad (4-69)$$

Substituindo a equação (4-69) na equação (4-44) e rearranjando os termos, tem-se:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_N\right) \cdot v_{\xi,P} = A_E \cdot v_{\xi,E} + A_W \cdot v_{\xi,W} + A_S \cdot v_{\xi,S} + B \quad (4-70)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-60).

- Volumes de controle situados no final do rio (para $i = q$ e $2 \leq j \leq t - 1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-75) e usando volumes fictícios, então:

$$\left. \frac{\partial v_{\xi}}{\partial \xi} \right|_e = 0 = \frac{v_{\xi,E} - v_{\xi,P}}{\Delta \xi} \quad (4-71)$$

$$v_{\xi,E} = v_{\xi,P} \quad (4-72)$$

Substituindo a equação (4-72) na equação (4-54) e rearranjando os termos, chega-se em:

$$\left(\frac{A_P}{V} - A_E \right) v_{\xi,P} = A_W \cdot v_{\xi,W} + A_N \cdot v_{\xi,N} + A_S \cdot v_{\xi,S} + B \quad (4-73)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-60).

- Volume de controle situado no início e na margem inferior (para $i = 1$ e $j = 1$)

Substituindo as equações (4-62) e (4-66) na equação (4-54) e rearranjando os termos, chega-se em:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_W + A_S \right) v_{\xi,P} = A_E \cdot v_{\xi,E} + A_N \cdot v_{\xi,N} + B \quad (4-74)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-59) e o termo B está representado pela equação (4-64).

- Volume de controle situado no início e na margem superior (para $i = 1$ e $j = t$)

Substituindo as equações (4-62) e (4-69) na equação (4-54) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_W + A_N \right) \cdot v_{\xi, P} = A_E \cdot v_{\xi, E} + A_S \cdot v_{\xi, S} + B \quad (4-75)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-59) e o termo B está representado pela equação (4-64).

- Volume de controle situado no final e na margem inferior (para $i = q$ e $j = 1$)

Substituindo as equações (4-66) e (4-72) na equação (4-54) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{V} - A_E + A_S \right) \cdot v_{\xi, P} = A_W \cdot v_{\xi, W} + A_N \cdot v_{\xi, N} + B \quad (4-76)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-60).

- Volume de controle situado no final e na margem superior (para $i = q$ e $j = t$)

Substituindo as equações (4-69) e (4-72) na equação (4-54) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{V} - A_E + A_N \right) \cdot v_{\xi,P} = A_W \cdot v_{\xi,W} + A_S \cdot v_{\xi,S} + B \quad (4-77)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-55) a (4-60).

4.4.2.2. Direção η

Aplicando o método dos volumes finitos na equação (3-68):

$$\begin{aligned}
& \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \eta} \right)}{\partial \eta} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{2}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\eta \bullet d\bar{e}_{\xi,\eta}}{\|\bar{e}_\eta\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \eta} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \right)}{\partial \xi} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\eta \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi}}{\|\bar{e}_\eta\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \right)}{\partial \xi} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \left(\frac{\bar{e}_\xi \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_\xi\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \right)}{\partial \xi} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta + \\
& + \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{1}{h_\xi \cdot h_\eta} \cdot \frac{\partial \left(\mu_{ef} \cdot \frac{\partial v_\xi}{\partial \eta} \right)}{\partial \xi} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta + \tag{4-78} \\
& - \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{\rho \cdot v_\eta}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \eta} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta - \int_{s w}^n \int_{s w}^e \frac{\rho \cdot v_\xi}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \cdot h_\xi \cdot h_\eta \cdot d\xi \cdot d\eta = 0
\end{aligned}$$

Procedendo-se de forma análoga à obtenção das equações discretizadas para a direção ξ , estas equações estão apresentadas a seguir:

- Para $2 \leq i \leq q-1$ e $2 \leq j \leq t-1$:

$$\begin{aligned}
& 2.\Delta\xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \eta} \Big|_n + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \eta} \Big|_s \end{array} \right\} + 2.\Delta\xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_n + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\xi}{h_\eta} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_s \end{array} \right\} + \\
& + \Delta\eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \Big|_e + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \frac{\partial v_\eta}{\partial \xi} \Big|_w \end{array} \right\} + \Delta\eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_e + \\ - \mu_{ef} \cdot \frac{h_\eta}{h_\xi} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_w \end{array} \right\} + \\
& + \Delta\eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \bullet d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_e + \\ - \mu_{ef} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\xi \bullet d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \cdot v_\eta \Big|_w \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} (\mu_{ef} \cdot v_\xi \Big|_n - \mu_{ef} \cdot v_\xi \Big|_s) \Big|_e + \\ - (\mu_{ef} \cdot v_\xi \Big|_n - \mu_{ef} \cdot v_\xi \Big|_s) \Big|_w \end{array} \right\} + \\
& - \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot \Delta\xi \cdot v_{\eta,P} \cdot \left\{ \begin{array}{l} v_\eta \Big|_n + \\ - v_\eta \Big|_s \end{array} \right\} - \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta\eta \cdot v_{\xi,P} \cdot \left\{ \begin{array}{l} v_\eta \Big|_e + \\ - v_\eta \Big|_w \end{array} \right\} = 0
\end{aligned} \tag{4-79}$$

Usando diferenças centrais para os termos difusivos, o esquema upwind para os termos convectivos, então:

$$\begin{aligned}
& 2 \cdot \Delta \xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \cdot \left(\frac{v_{\eta,N} - v_{\eta,P}}{\Delta \eta} \right) + \\ - \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \cdot \left(\frac{v_{\eta,P} - v_{\eta,S}}{\Delta \eta} \right) \end{array} \right\} + 2 \cdot \Delta \xi \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\eta} \bullet d\bar{e}_{\xi,\eta}}{\|\bar{e}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_{\xi|n} + \\ - \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\eta} \bullet d\bar{e}_{\xi,\eta}}{\|\bar{e}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_{\xi|s} \end{array} \right\} + \\
& + \Delta \eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \cdot \left(\frac{v_{\eta,E} - v_{\eta,P}}{\Delta \xi} \right) + \\ - \mu_{ef,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \cdot \left(\frac{v_{\eta,P} - v_{\eta,W}}{\Delta \xi} \right) \end{array} \right\} + \Delta \eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\eta} \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi}}{\|\bar{e}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_{\xi|e} + \\ - \mu_{ef,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \cdot \left(\frac{\bar{e}_{\eta} \bullet d\bar{e}_{\xi,\xi}}{\|\bar{e}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_{\xi|w} \end{array} \right\} + \\
& + \Delta \eta \cdot \left\{ \begin{array}{l} \mu_{ef,e} \cdot \left[\left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\eta,P} + \\ - \mu_{ef,e} \cdot \left[- \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\eta,E} + \\ - \mu_{ef,w} \cdot \left[\left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\eta,W} + \\ + \mu_{ef,w} \cdot \left[- \left(\frac{\bar{e}_{\xi} \bullet d\bar{e}_{\eta,\eta}}{\|\bar{e}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{e}_{\eta,\eta}\|} \right), 0 \right] \cdot v_{\eta,P} \end{array} \right\} + \left\{ \begin{array}{l} (\mu_{ef,P} \cdot v_{\xi,P} - \mu_{ef,S} \cdot v_{\xi,S}) + \\ - (\mu_{ef,W} \cdot v_{\xi,W} - \mu_{ef,SW} \cdot v_{\xi,SW}) \end{array} \right\} + \quad (4-80) \\
& - \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot \Delta \xi \cdot v_{\eta,P} \cdot \left\{ \begin{array}{l} v_{\eta,N} + \\ - v_{\eta,P} \end{array} \right\} - \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \eta \cdot v_{\xi,P} \cdot \left\{ \begin{array}{l} v_{\eta,E} + \\ - v_{\eta,P} \end{array} \right\} = 0
\end{aligned}$$

Rearranjando os termos da equação (4-80) chega-se a:

$$\begin{aligned}
& \left\{ 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} + 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} + \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} + \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} + \right. \\
& \left. + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,e} \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \right]_e, 0 \right\} + \left\{ \Delta \eta \cdot \mu_{ef,w} \cdot \left[- \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \right]_w, 0 \right\} + \left. \right\} \cdot \mathbf{v}_{\eta,P} = \\
& + \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot \Delta \xi \cdot \mathbf{v}_{\eta,P} + \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \eta \cdot \mathbf{v}_{\xi,P} \\
& \left\{ \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} + \right. \\
& \left. + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,e} \cdot \left[- \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \right]_e, 0 \right\} \cdot \mathbf{v}_{\eta,E} + \left\{ \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} + \right. \\
& \left. + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,w} \cdot \left[\left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\xi} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\xi}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\eta,\eta}\|} \right) \right]_w, 0 \right\} \cdot \mathbf{v}_{\eta,W} + \\
& + \left\{ 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} + \right. \\
& \left. + \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot \Delta \xi \cdot \mathbf{v}_{\eta,P} \right\} \cdot \mathbf{v}_{\eta,N} + \left\{ 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} + \right. \\
& \left. + \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \eta \cdot \mathbf{v}_{\xi,P} \right\} \cdot \mathbf{v}_{\eta,S} + \\
& \left\{ 2 \cdot \Delta \xi \cdot \left[\mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi}|_n + \right. \right. \\
& \left. \left. - \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi}|_s \right] + \Delta \eta \cdot \left[\mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi}|_e + \right. \right. \\
& \left. \left. - \mu_{ef,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \bullet d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi}|_w \right] + \right. \\
& \left. \left[(\mu_{ef,P} \cdot \mathbf{v}_{\xi,P} - \mu_{ef,S} \cdot \mathbf{v}_{\xi,S}) + \right. \right. \\
& \left. \left. - (\mu_{ef,W} \cdot \mathbf{v}_{\xi,W} - \mu_{ef,SW} \cdot \mathbf{v}_{\xi,SW}) \right] \right\}
\end{aligned}
\tag{4-81}$$

Escrevendo de forma simplificada a equação (4-81) e aplicando o conceito de coeficiente de relaxação, chega-se na equação a seguir:

$$\frac{A_P}{V} \cdot \mathbf{v}_{\eta,P} = A_E \cdot \mathbf{v}_{\eta,E} + A_W \cdot \mathbf{v}_{\eta,W} + A_N \cdot \mathbf{v}_{\eta,N} + A_S \cdot \mathbf{v}_{\eta,S} + B \tag{4-82}$$

Sendo que:

$$A_P = \left\{ \begin{aligned} & 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} + 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} + \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} + \\ & + \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,e} \cdot \left[\left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \Big|_e, 0 \right] + \\ & + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,w} \cdot \left[- \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \Big|_w, 0 \right] + \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot \Delta \xi \cdot v_{\eta,P} + \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \eta \cdot v_{\xi,P} \end{aligned} \right\} \quad (4-83)$$

$$A_E = \left\{ \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,e} \cdot \left[- \left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \Big|_e, 0 \right] \right\} \quad (4-84)$$

$$A_W = \left\{ \frac{\Delta \eta}{\Delta \xi} \cdot \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} + \Delta \eta \cdot \mu_{ef,w} \cdot \left[\left(\frac{\vec{e}_\xi \cdot d\vec{e}_{\eta,\eta}}{\|\vec{e}_\xi\| \cdot \|d\vec{e}_{\eta,\eta}\|} \right) \Big|_w, 0 \right] \right\} \quad (4-85)$$

$$A_N = \left\{ 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} + \rho \cdot h_{\xi,P} \cdot \Delta \xi \cdot v_{\eta,P} \right\} \quad (4-86)$$

$$A_S = \left\{ 2 \cdot \frac{\Delta \xi}{\Delta \eta} \cdot \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} + \rho \cdot h_{\eta,P} \cdot \Delta \eta \cdot v_{\xi,P} \right\} \quad (4-87)$$

$$\begin{aligned}
B = & 2 \cdot \Delta \xi \cdot \left[\begin{aligned} & \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_n + \\ & - \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\eta}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_s \end{aligned} \right] + \\
& + \Delta \eta \cdot \left[\begin{aligned} & \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_e + \\ & - \mu_{ef,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \cdot \left(\frac{\vec{e}_\eta \bullet d\vec{e}_{\xi,\xi}}{\|\vec{e}_\eta\| \cdot \|d\vec{e}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot v_\xi \Big|_w \end{aligned} \right] + \\
& \left[\begin{aligned} & (\mu_{ef,P} \cdot v_{\xi,P} - \mu_{ef,S} \cdot v_{\xi,S}) + \\ & - (\mu_{ef,W} \cdot v_{\xi,W} - \mu_{ef,SW} \cdot v_{\xi,SW}) \end{aligned} \right] + \frac{(1-\nu)}{\nu} \cdot A_P \cdot v_{\eta,A,P}^*
\end{aligned} \tag{4-88}$$

- Volumes de controle do início do rio (para $i = 1$ e $2 \leq j \leq t - 1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-73) e utilizando volumes fictícios, pode-se escrever:

$$v_{\eta,w} = v_{\eta,uniforme} = \frac{v_{\eta,P} + v_{\eta,W}}{2} \tag{4-89}$$

$$v_{\eta,W} = 2 \cdot v_{\eta,uniforme} - v_{\eta,P} \tag{4-90}$$

Substituindo a equação (4-90) na equação (4-82) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{\nu} + A_W \right) \cdot v_{\eta,P} = A_E \cdot v_{\eta,E} + A_N \cdot v_{\eta,N} + A_S \cdot v_{\eta,S} + B \tag{4-91}$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-87). O termo B é calculado da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 B = & 2 \cdot \Delta \xi \cdot \left[\begin{aligned} & \mu_{ef,n} \cdot \frac{h_{\xi,n}}{h_{\eta,n}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi} \Big|_n + \\ & - \mu_{ef,s} \cdot \frac{h_{\xi,s}}{h_{\eta,s}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\eta}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi} \Big|_s \end{aligned} \right] + \\
 & + \Delta \eta \cdot \left[\begin{aligned} & \mu_{ef,e} \cdot \frac{h_{\eta,e}}{h_{\xi,e}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi} \Big|_e + \\ & - \mu_{ef,w} \cdot \frac{h_{\eta,w}}{h_{\xi,w}} \cdot \left(\frac{\bar{\mathbf{e}}_{\eta} \cdot d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}}{\|\bar{\mathbf{e}}_{\eta}\| \cdot \|d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi}\|} \right) \cdot \mathbf{v}_{\xi} \Big|_w \end{aligned} \right] + \quad (4-92) \\
 & \left[\begin{aligned} & (\mu_{ef,P} \cdot \mathbf{v}_{\xi,P} - \mu_{ef,S} \cdot \mathbf{v}_{\xi,S}) + \\ & - (\mu_{ef,W} \cdot \mathbf{v}_{\xi,W} - \mu_{ef,SW} \cdot \mathbf{v}_{\xi,SW}) \end{aligned} \right] + \frac{(1-\nu)}{\nu} \cdot A_P \cdot \mathbf{v}_{\eta,A,P}^* + 2 \cdot A_W \cdot \mathbf{v}_{\eta,uniforme}
 \end{aligned}$$

- Volumes de controle da margem inferior (para $2 \leq i \leq q-1$ e $j=1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-70) e utilizando volumes fictícios, pode-se escrever:

$$v_{\eta,s} = 0 = \frac{v_{\eta,P} + v_{\eta,S}}{2} \quad (4-93)$$

$$v_{\eta,S} = -v_{\eta,P} \quad (4-94)$$

Substituindo a equação (4-94) na equação (4-82) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_S \right) v_{\eta,P} = A_E \cdot v_{\eta,E} + A_W \cdot v_{\eta,W} + A_N \cdot v_{\eta,N} + B \quad (4-95)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-88).

- Volumes de controle da margem superior (para $2 \leq i \leq q-1$ e $j = t$)

Usando novamente a condição de contorno dada pela equação (3-70) e utilizando volumes fictícios, pode-se escrever:

$$v_{\eta,n} = 0 = \frac{v_{\eta,P} + v_{\eta,N}}{2} \quad (4-96)$$

$$v_{\eta,N} = -v_{\eta,P} \quad (4-97)$$

Substituindo a equação (4-97) na equação (4-82) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_N \right) v_{\eta,P} = A_E \cdot v_{\eta,E} + A_W \cdot v_{\eta,W} + A_S \cdot v_{\eta,S} + B \quad (4-98)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-88).

- Volumes de controle no final do rio (para $i = q$ e $2 \leq j \leq t - 1$)

Usando a condição de contorno dada pela equação (3-76) e utilizando volumes fictícios, pode-se escrever:

$$\frac{\partial v_{\eta}}{\partial \xi} = \frac{v_{\eta,E} - v_{\eta,P}}{\Delta \xi} = 0 \quad (4-99)$$

$$v_{\eta,E} = v_{\eta,P} \quad (4-100)$$

Substituindo a equação (4-100) na equação (4-82) e rearranjando os termos:

$$\left(\frac{A_P}{V} - A_E \right) v_{\eta,P} = A_W \cdot v_{\eta,W} + A_N \cdot v_{\eta,N} + A_S \cdot v_{\eta,S} + B \quad (4-101)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-88).

- Volume de controle situado no início e na margem inferior (para $i = 1$ e $j = 1$)

Substituindo as equações (4-90) e (4-94) na equação (4-82), chega-se a:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_W + A_S \right) v_{\eta,P} = A_E \cdot v_{\eta,E} + A_N \cdot v_{\eta,N} + B \quad (4-102)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-87) e o termo B está representado pela equação (4-92).

- Volume de controle situado no início e na margem superior (para $i = 1$ e $j = t$)

Substituindo as equações (4-90) e (4-97) na equação (4-82), chega-se a:

$$\left(\frac{A_P}{V} + A_W + A_N \right) \cdot v_{\eta,P} = A_E \cdot v_{\eta,E} + A_S \cdot v_{\eta,S} + B \quad (4-103)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N e A_S estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-87) e o termo B está representado pela equação (4-92).

- Volume de controle situado no final e na margem inferior (para $i = q$ e $j = 1$)

Substituindo as equações (4-94) e (4-100) na equação (4-82), chega-se a:

$$\left(\frac{A_P}{V} - A_E + A_S \right) \cdot v_{\eta,P} = A_W \cdot v_{\eta,W} + A_N \cdot v_{\eta,N} + B \quad (4-104)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-88).

- Volume de controle situado no final e na margem superior (para $i = q$ e $j = t$)

Substituindo as equações (4-97) e (4-100) na equação (4-82), chega-se a:

$$\left(\frac{A_P}{V} - A_E + A_N \right) \cdot v_{\eta,P} = A_W \cdot v_{\eta,W} + A_S \cdot v_{\eta,S} + B \quad (4-105)$$

Os termos A_P , A_E , A_W , A_N , A_S e B estão representados respectivamente pelas equações (4-83) a (4-88).

4.4.3. Cálculo dos coeficientes

O cálculo das variáveis presentes nos coeficientes das equações de balanço de massa e de momentum discretizadas neste Capítulo está apresentado no Apêndice 1.

4.4.4. Número de equações e variáveis

Cada equacionamento das seções 4.4.1., 4.4.2.1. e 4.4.2.2. gera um sistema linear de equações com $q \times t$ equações e $q \times t$ incógnitas (C_A , v_ξ e v_η). A resolução será obtida através do Método de Eliminação de Gauss.

4.4.5. Teste de convergência

A convergência será obtida somente quando:

$$\sum_{i=1}^q \sum_{j=1}^t (\Delta v_{\xi,i,j}^2 + \Delta v_{\eta,i,j}^2) \leq \text{Erro} \leq 10^{-6} \quad (4-106)$$

4.4.6. Algoritmo do escoamento monofásico

O algoritmo do escoamento monofásico está descrito nas etapas a seguir:

1. Arbitrar valores de v_ξ e v_η .
2. Calcular C_A .
3. Calcular v_ξ .
4. Calcular v_η .
5. Calcular v^* , μ_T e D_T .
6. Fazer teste de convergência.
7. Se o teste de convergência for satisfeito, o cálculo do perfil de velocidades e de concentração do efluente está resolvido.
8. Se o teste de convergência falhar, então repetir etapas 2 a 6 até a convergência do sistema.

Figura 4.3: Fluxograma representando o algoritmo do escoamento monofásico.

CAPÍTULO 5

5. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Este Capítulo apresenta os resultados e discussões referentes à obtenção de determinadas malhas através do modelo apresentado no Capítulo 4. Além disso, discute os resultados obtidos de uma determinada emissão contínua de certo efluente em determinados trechos de rio.

Os resultados obtidos na seção 5.2 foram obtidos com a utilização de um Notebook com processador Intel Pentium de 1,73 GHz e 512 MB de memória DDR2 SDRAM. A malha utilizada de 12 volumes de controle no sentido ortogonal ao escoamento e 100 volumes de controle no sentido do escoamento, ou seja, uma malha composta por 1.200 volumes de controle.

Assim, os resultados dos perfis de velocidade e concentração são armazenados em arquivos com extensão .txt através de um programa feito em linguagem Fortran (Compaq Visual Fortran 6.5); posteriormente estes resultados eram plotados utilizando o programa Matlab (versão 7.0).

Para gerar os resultados em arquivos .txt, o programa em linguagem Fortran levou cerca de 4 minutos. Em seguida cada gráfico obtido com o programa Matlab era obtido em cerca de 20 minutos.

A obtenção de uma malha mais refinada não foi possível, porque uma pequena elevação no número de volumes de controle não possibilitava que a máquina tivesse memória suficiente para realizar os cálculos.

Logo, recomenda-se para as etapas seguintes a este trabalho, como por exemplo, a validação experimental, que seja realizada em computadores com maior velocidade de processamento e com mais memória RAM, possibilitando obter malhas mais refinadas e, portanto, melhores resultados numéricos.

5.1. RESULTADOS DA MALHA

Nas figuras apresentadas nesta seção, as “bolinhas azuis” são pontos coletados de fronteiras reais. As malhas geradas foram obtidas através dos seguintes pontos pertencentes às fronteiras reais:

- Exemplo 1

Pontos da margem superior: $MS_1(1, 3)$, $MS_2(2, 3)$, $MS_3(4, 2.5)$ e $MS_4(6, 3)$

Pontos da margem inferior: $MI_1(1, 2)$, $MI_2(2, 1.5)$, $MI_3(4, 1.5)$ e $MI_4(6, 2)$

- Exemplo 2

Pontos da margem superior: $MS_1(1, 2.5)$, $MS_2(2, 3)$, $MS_3(4, 2.5)$ e $MS_4(6, 2.5)$

Pontos da margem inferior: $MI_1(1, 2.5)$, $MI_2(2, 1.5)$, $MI_3(4, 1.5)$ e $MI_4(6, 2.5)$

- Exemplo 3

Pontos da margem superior: $MS_1(1, 2.5)$, $MS_2(2, 4)$, $MS_3(4, 2.5)$ e $MS_4(6, 3.5)$

Pontos da margem inferior: $MI_1(1, 2.5)$, $MI_2(2, 3.5)$, $MI_3(4, 1.5)$ e $MI_4(6, 3.5)$

- Exemplo 4

Pontos da margem superior: $MS_1(1, 3)$, $MS_2(2, 3.5)$, $MS_3(4, 3)$ e $MS_4(6, 3.5)$

Pontos da margem inferior: $MI_1(1, 2)$, $MI_2(2, 1.5)$, $MI_3(4, 2)$ e $MI_4(6, 1.5)$

- Exemplo 5

Pontos da margem superior: $MS_1(1, 3)$, $MS_2(2, 4)$, $MS_3(4, 3)$ e $MS_4(6, 3.5)$

Pontos da margem inferior: $MI_1(1, 2)$, $MI_2(2, 3)$, $MI_3(4, 2)$ e $MI_4(6, 1.5)$

- Exemplo 6

Pontos da margem superior: $MS_1(1, 3)$, $MS_2(2, 5)$, $MS_3(4, 2)$ e $MS_4(6, 5)$

Pontos da margem inferior: $MI_1(1, 1)$, $MI_2(2, 3)$, $MI_3(4, 0.5)$ e $MI_4(6, 3)$

A Figura 5.1 apresenta a malha gerada para o exemplo 1. Observa-se que as funções cúbicas que representam as margens do rio são suaves e contínuas e,

conseqüentemente, as linhas de corrente também possuem as mesmas características. Estas funções também passam pelos pontos responsáveis por suas gerações, o que está de acordo com o modelo usado. As linhas potenciais foram obtidas com sucesso e elas são ortogonais às linhas de corrente pelo fato de terem sido obtidas pelo princípio da ortogonalidade.

As Figuras 5.2 e 5.3 mostram as malhas geradas para os exemplos 2 e 3, respectivamente. Estes exemplos representam malhas fechadas, tais como a de um lago. Assim como no exemplo 1, em ambos os casos as funções que representam as margens e as linhas de corrente são suaves e passam pelos pontos que as criaram. Além disso, os elementos de controle formados são bem estruturados.

As Figuras 5.4 e 5.5 apresentam as malhas geradas para o exemplo 4. Novamente, foi observada a suavidade e a continuidade das funções que representam as margens e as linhas de corrente. A Figura 5.5 mostra uma malha mais refinada em relação à malha apresentada pela Figura 5.4, ou seja, ela possui mais linhas de corrente e linhas potenciais. Assim, o modelo mostra sua facilidade em alcançar o refinamento da malha.

A Figura 5.6 mostra a malha gerada para o exemplo 5 e as Figuras 5.7 e 5.8 apresentam malhas geradas para o exemplo 6. Mais uma vez, as funções que representam as margens e as linhas de corrente são suaves e contínuas e passam pelos pontos que as formam. No exemplo 5, a malha gerada é bem estruturada e é considerada satisfatória. Para o exemplo 6, o modelo mostra uma aparente dificuldade em captar geometrias com altos gradientes (elevadas curvaturas), mas isto pode ser evitado escolhendo-se o início do caminho das linhas potenciais na margem inferior ou superior, como mostra a Figura 5.8. Assim, a ideia baseia-se em onde as linhas potenciais iniciam seu caminho e isto pode ser manipulado pelo algoritmo. Então, para o exemplo 6, seria necessário começar o caminho das linhas potenciais na margem

superior na região de pico e na margem inferior na região de vale, como na Figura 5.8. Na Figura 5.7, o pico não foi bem captado pela malha, mas a região de vale, um pico invertido, foi bem discretizada.

No vale e no pico da Figura 5.8, as linhas potenciais parecem estar sobrepostas. Para mostrar que isto não ocorre, a Figura 5.9 apresenta a malha gerada e faz uma aproximação na região onde três linhas potenciais parecem estar sobrepostas na margem inferior ao redor de $x = 2$. Observa-se que estas três linhas potenciais estão bem próximas entre si, mas elas não possuem as mesmas coordenadas nem nas interseções com a margem inferior. Embora as linhas potenciais não se sobreponham, seria necessário um alto refinamento da malha em relação às linhas de corrente em tais regiões para manter certa proporção entre as arestas dos elementos de controle da malhas em ambas as direções. Esta proporção é necessária para se poder usar adequadamente o conceito de produto vetorial para o cálculo da área de um elemento de controle.

5.2. RESULTADOS DA EMISSÃO DE UM EFLUENTE MISCÍVEL EM ÁGUA

A seguir serão mostrados e discutidos os resultados dos perfis de velocidade e concentração da emissão de um efluente miscível em água em um determinado trecho de rio qualquer.

5.2.1. Perfil de velocidade

A Figura 5.10 mostra a malha utilizada para somente ilustrar o escoamento de um determinado rio hipotético com os seguintes pontos das margens:

- Margem Superior: $MS_1(1;3)$, $MS_2(2;3,5)$, $MS_3(4;3)$ e $MS_4(6;2)$.
- Margem Inferior: $MI_1(1;2)$, $MI_2(2;1,5)$, $MI_3(4;2)$ e $MI_4(6;1)$.

Os resultados somente serão obtidos para as seções transversais que contenham o mesmo número de volumes de controle ao longo da coordenada de direção normal ao escoamento.

A Figura 5.11 mostra o perfil velocidade na direção do escoamento da água neste trecho de rio e a Figura 5.12 apresenta os resultados para as velocidades na direção normal ao escoamento. Os resultados apresentados mostram uma boa concordância com o previsto pela teoria da dinâmica dos fluidos, pois a Figura 5.11

mostra que a velocidade na direção do escoamento é menor na parte do rio onde a área de escoamento é maior e maior na parte final do rio onde a área de escoamento é menor. Além disso, a Figura 5.12 mostra que as velocidades na direção normal possuem magnitudes muito menores em relação às velocidades na direção do escoamento.

5.2.2. Perfil de concentração do efluente

Os resultados apresentados neste Item representam a dispersão de um efluente em um pequeno trecho de rio de 5 metros e serão analisados considerando a variação dos seguintes parâmetros:

- velocidade de entrada da água (v_{entrada})
- coeficiente de difusão do efluente na água (D)
- concentração do efluente na entrada do rio (C_{entrada})

- diâmetro da tubulação da emissão que chega ao rio (D_{tubo})
- região de emissão do efluente

Considerando que o efluente chega ao rio através de uma tubulação com um determinado diâmetro D_{tubo} e conhecendo-se a região de emissão do efluente, é possível que o modelo encontre quantos e quais são os volumes de controle na margem do rio que recebem a emissão do efluente.

5.2.2.1. Variação da velocidade de entrada da água

Foram considerados os seguintes parâmetros:

- $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{s}$
- $C_{\text{entrada}} = 100 \text{ mg/l} = 0,1 \text{ kg/m}^3$
- $D_{\text{tubo}} = 10 \text{ in} = 0,254 \text{ m}$
- Emissão nas duas margens a 1 metro do início do trecho do rio.

Conhecendo tais parâmetros, foram obtidos os perfis de concentração do efluente para velocidades de entrada da água iguais a 0,1 m/s, 1,0 m/s e 10,0 m/s, respectivamente apresentados na Figuras 5.13 a 5.15.

Figura 5.13: Perfil de concentração do efluente para $v_{\text{entrada}} = 0,1$ m/s.

Figura 5.14: Perfil de concentração do efluente para $v_{\text{entrada}} = 1,0$ m/s.

Nota-se que mesmo para uma pequena velocidade, a concentração do efluente na região de lançamento não é igual ao valor da condição de contorno (100 mg/l), uma vez que as concentrações são calculadas nos centros dos volumes. Porém, as concentrações ao redor da região de lançamento seriam tão mais semelhantes à condição de contorno quanto mais refinada for a malha, mas nunca iguais.

Comparando as Figuras 5.13 a 5.15, observa-se que à medida que a velocidade (ou vazão) do rio aumenta, mais o efluente lançado ao rio concentra-se nas margens, ou seja, menor é a sua dispersão ao longo do rio. Isto ocorre porque os termos convectivos passam a ter maior influência em relação aos termos difusivos, o que diminui a dispersão do efluente neste trecho de rio.

5.2.2.2. Variação do coeficiente de difusão do efluente

Neste caso foram considerados os seguintes parâmetros:

- $V_{\text{entrada}} = 0,1 \text{ m/s}$
- $C_{\text{entrada}} = 100 \text{ mg/l} = 0,1 \text{ kg/m}^3$
- $D_{\text{tubo}} = 10 \text{ in} = 0,254 \text{ m}$
- Emissão nas duas margens a 1 metro do início do trecho do rio.

Desta forma, foram obtidos os perfis de concentração do efluente para coeficientes de difusão do efluente iguais a $0,00001 \text{ m}^2/\text{s}$, $0,0001 \text{ m}^2/\text{s}$ e $0,001 \text{ m}^2/\text{s}$, respectivamente apresentados na Figuras 5.16 a 5.18.

Figura 5.17 Perfil de concentração do efluente para $D = 0,0001 \text{ m}^2/\text{s}$.

Figura 5.18: Perfil de concentração do efluente para $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{s}$.

Ao comparar as Figuras 5.16 a 5.18, observa-se que à medida que o coeficiente de difusão aumenta, aumenta também a dispersão do efluente. Tal fato ocorre devido aos termos difusivos tornarem-se mais significativos em relação aos termos convectivos cada vez que o coeficiente de difusão aumenta.

5.2.2.3. Variação da concentração do efluente na entrada do rio

Foram considerados os seguintes parâmetros:

- $V_{\text{entrada}} = 0,1 \text{ m/s}$

- $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{s}$

- $D_{\text{tubo}} = 10 \text{ in} = 0,254 \text{ m}$

- Emissão nas duas margens a 1 metro do início do trecho do rio.

De posse destas informações, foram obtidos os perfis de concentração do efluente para concentrações de entrada do efluente iguais a 1,0 mg/l, 10,0 mg/l e 100,0 mg/l, respectivamente apresentados na Figuras 5.19 a 5.21.

Figura 5.20: Perfil de concentração do efluente para C_{entrada} = 10,0 mg/l.

Comparando-se as Figuras 5.19 a 5.21, observa-se que quanto maior a concentração do efluente na seção de despejo, maior é a dispersão dele ao longo do rio. Este fato é esperado, já que a maior concentração do efluente indica que há uma maior quantidade deste componente sendo lançado ao rio, permitindo que ele se disperse mais e atinja concentrações maiores no centro do rio.

5.2.2.4. Variação do diâmetro da tubulação de emissão

Neste caso foram considerados os seguintes parâmetros:

- $V_{\text{entrada}} = 0,1 \text{ m/s}$

- $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{s}$

- $C_{\text{entrada}} = 100,0 \text{ mg/l}$

- Emissão nas duas margens a 1 metro do início do trecho do rio.

As Figuras 5.22 a 5.24 representam os perfis de concentração do efluente para diâmetros de tubulação de emissão do efluente iguais a 5 in, 10 in e 20 in, respectivamente. Neste caso, será considerado que o aumento da área de despejo implica em maior quantidade de efluente sendo despejado no rio.

Figura 5.23: Perfil de concentração do efluente para $D_{tubo} = 10$ in.

Comparando as Figuras 5.22 a 5.24, observa-se que quanto maior o diâmetro da tubulação que despeja o efluente, maior é a sua dispersão ao longo do rio. Isso ocorre porque o aumento da área atingida implica no aumento de efluente que chega ao rio, aumentando naturalmente a dispersão ao longo do rio.

5.2.2.5. Variação da região de emissão do efluente

Foram considerados os seguintes parâmetros:

- $V_{\text{entrada}} = 0,1$ m/s

- $D = 0,001 \text{ m}^2/\text{s}$
- $C_{\text{entrada}} = 100,0 \text{ mg/l}$
- $D_{\text{tubo}} = 10,0 \text{ in}$

As Figuras 5.25 a 5.29 apresentam os perfis de concentração do efluente para diferentes regiões de emissão do efluente, como apresentado a seguir.

- Emissão nas duas margens a 1 m do início do trecho do rio.
- Emissão na margem superior a 1 m do início do trecho do rio.
- Emissão na margem inferior a 1 m do início do trecho do rio.
- Emissão nas duas margens no início do trecho do rio.
- Emissão nas duas margens a 3 m do início do trecho do rio.

Figura 5.27: Perfil de concentração do efluente para emissão na margem inferior a 1 m do início do trecho do rio.

Figura 5.28: Perfil de concentração do efluente para emissão nas duas margens no início do trecho do rio.

Comparando-se os resultados de emissão nas duas margens e de somente uma em cada margem (a 1 m do início do trecho do rio), percebe-se que a dispersão é maior no caso de emissão nas duas margens, uma vez que uma maior quantidade de produto está sendo lançada neste caso.

Na comparação dos resultados da emissão de efluente em diferentes distâncias em relação ao início do trecho do rio, percebe-se que quanto mais perto do início for lançado o efluente, mais ele se dispersa, já que há mais área para que ocorra a dispersão.

CAPÍTULO 6

6. CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Este trabalho propôs um novo método de construção de malhas bidimensionais com fronteiras irregulares. Este método é muito simples e capaz de gerar malhas bidimensionais em que as fronteiras das malhas são suaves, contínuas e coincidem com as fronteiras físicas. Os pontos usados para gerar as fronteiras pertencem às funções que representam estas fronteiras, o que é uma imposição do método spline cúbico. Estas funções não apresentam pontos de inflexão porque são criadas com base na minimização de seu comprimento total.

O modelo tem uma aparente dificuldade de capturar a geometria em regiões de altos gradientes (elevadas curvaturas), mas esta dificuldade pode ser superada pela escolha do início do caminho da construção das linhas potenciais pela margem superior ou inferior.

Além disso, foi construído um software em linguagem Fortran que permite obter os perfis de velocidade e de concentração de um determinado efluente que chega à margem de um rio.

O resultado do perfil de velocidade apresentou boa concordância com o previsto pela dinâmica dos fluidos, onde as velocidades aumentam conforme reduz a área da seção transversal de escoamento e diminuem conforme a área da seção transversal de escoamento aumenta.

Os perfis de concentração do efluente ao longo do trecho do rio estudado apresentaram resultados coerentes quando submetidos a variações na velocidade de entrada da água, no coeficiente de difusão do efluente na água, na concentração do efluente na entrada do rio, na área de emissão atingida pelo efluente e na região de emissão do efluente.

Sendo assim, para uma mesma condição, o modelo confirmou que à medida que a velocidade de entrada da água aumenta, a dispersão do efluente ao longo do rio diminui, uma vez que os termos convectivos tornam-se cada vez mais significativos em relação aos termos difusivos.

Como esperado, também foi mostrado que a dispersão do efluente ao longo do rio aumenta conforme aumentam o coeficiente de difusão do efluente na água, a concentração do efluente e a área de emissão do efluente. No primeiro caso, o aumento se deve a maior facilidade de dispersão do efluente na água à medida que o coeficiente de difusão aumenta. No segundo e terceiro casos, o aumento da dispersão foi causado pelo aumento da massa de efluente que chega ao rio conforme aumentam a concentração do efluente ou sua área de emissão.

Finalmente, o modelo permite simular a emissão de um efluente em mais de uma região de cada margem ao longo do curso de um rio, fato que ocorre na prática. Neste

trabalho, para uma mesma condição, foi mostrado que à medida que as regiões de emissão aumentam, a dispersão ao longo do rio também aumenta, já que novamente a massa de efluente que chega ao rio é maior, causando a maior dispersão em relação aos casos que possuam menores regiões de emissão.

Este trabalho também mostrou que, para um mesmo número de regiões de emissão de certo efluente, a dispersão aumenta à medida que o efluente é lançado mais próximo ao início do trecho de rio simulado. Isto é devido ao fato de que o efluente possui maior área longitudinal de escoamento quando é lançado mais próximo ao início do trecho do rio, o que aumenta a dispersão.

Contudo, para que o modelo possa ser validado é necessário que seja comparado com resultados experimentais coletados ao longo de um rio que possua ao longo de seu curso diversas regiões de emissão, o que é comum em áreas industrializadas. Como exemplo, poder-se-ia citar os rios Atibaia e Paraíba do Sul no Estado de São Paulo. Outra sugestão seria a implementação de uma modelagem tridimensional, tornando o modelo mais completo.

Após a validação com resultados experimentais, sugere-se também a criação de uma interface amigável com o usuário de forma a possibilitar o uso mais difundido desta ferramenta, principalmente para a simulação de emissões de efluentes industriais, permitindo verificar, por exemplo, se a emissão pode afetar a qualidade da água captada por um determinado município.

REFERÊNCIAS

AMBIENTE BRASIL. **Principais acidentes com petróleo e derivados no Brasil**. Curitiba, 2005. Disponível em <http://www.ambientebrasil.com.br/composer.php3?base=./energia/petroleo/index.html&conteudo=./energia/petroleo/vazamentos.html>. Acesso em 18 de maio de 2005.

AMSDER, A.A.; HIRT, C.W. A simple scheme for generating general curvilinear grids. **Journal of Computational Physics**, v. 11, p. 348-359, 1973.

ASCE TASK COMMITTEE ON MODELING OF OIL SPILLS OF THE WATER RESOURCES ENGINEERING DIVISION. State-of-the-art review of modeling transport and fate of oil spills. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 122, n. 11, p. 594-609, 1996.

BARFIELD, W.D. An optimal mesh generator for Lagrangian hydrodynamic calculations in two space dimensions. **Journal of Computational Physics**, v. 6, p. 417-429, 1970.

BENQUÉ, J.P.; HAUGHEL, A.; VIOLLET, P.L. **Engineering applications of computational hydraulics**. London: Pitman, 1982. v. 2. p. 57-63.

BIEBERBACH, L. **Conformal mapping**. 4. ed. New York: Chelsea, 1964. cap 1. p. 1-9.

BRASIL, N.I. **Introdução à engenharia química**. Rio de Janeiro: Interciência: Petrobrás, 1999. cap. 4, p. 135-139.

BUCKMASTER, J. Viscous-gravity spreading of an oil slick. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 59, part 3, p. 481-491, 1973.

CHAPRA, S.C.; CANALE, R.P. **Numerical methods for engineers**. 3. ed. New York: McGraw-Hill, 1988. cap. 12. p. 387-397.

CHOW, V.T. **Open-channel hydraulics**. New York: McGraw-Hill, 1959. cap. 1. p. 3-12.

CHU, W.H. Development of a general finite difference approximation for a general domain. **Journal of Computational Physics**, v. 8, part I, p. 392-408, 1971.

COMPANHIA DE TECNOLOGIA DE SANEAMENTO AMBIENTAL. Emergências químicas – tipos de acidentes: vazamentos de óleo. São Paulo, 2005. Disponível em <<http://www.cetesb.sp.gov.br/Emergencia/acidentes/vazamento/vazamento.asp>>. Acesso em 18 de maio de 2005.

CONSELHO NACIONAL DE MEIO AMBIENTE. Resolução No 357 de 17 de março de 2005. Disponível em <www.mma.gov.br/conama/res/res05/res35705.pdf>. Acesso em 10 de outubro de 2009.

COX, B.A.; A review of currently available in-stream water-quality models and their applicability for simulating dissolved oxygen in lowland rivers. *The Science of the Total Environment*, 314-316:335-377, 2003.

DIPIETRO, N.D.; COX, R.G. The containment of an oil slick by a boom placed across a uniform stream. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 96, part 3, p. 613-640, 1980.

DIPIETRO, N.D.; HUH, C.; COX, R.G. The hydrodynamics of the spreading of one liquid on the surface of another. **Journal of Fluid Mechanics**, v. 84, part 3, p. 529-549, 1978.

DOERFFER, J.W. **Oil spill response in the marine environment**. New York: Pergamon Press, 1992. cap 1. p. 20-49.

FANNELOP, T.K.; WALDMAN, G.D. Dynamics of oil slicks. **AIAA Journal**, v. 10, n. 4, p. 506-510, 1972.

FAY, J.A. The spread of oil slicks on a calm sea. In: Hoult, D. **Oil on the sea**, New York: Plenum, 1969. p. 53-64.

FAY, J.A. Physical processes in the spread of oil on a water surface. In: PROCEEDINGS OF THE JOINT CONFERENCE ON PREVENTION AND CONTROL OF OIL SPILLS, 1971, Washington, D.C.. **Anais...** Washington, D.C.: American Petroleum Institute, 1971. p. 463-467.

FISCHER, H.B. The mechanics of dispersion in natural streams. **Journal of Hydraulic Division**, 93(6):187-216, 1967.

FODA, M.; COX, R.G. The spreading of thin liquid films on a water-air interface. **Journal of Fluid Mechanics**. v. 101, part 1, p. 33-51, 1980.

FRENCH, H.R. **Open-channel hydraulics**. New York: McGraw-Hill, 1986. cap 1. p. 2-5.

FORNBERG, B. A numerical method for conformal mapping. **Journal on Scientific and Statistical Computing**, v. 1, p. 386-400, 1980.

HOULT, D.P. Oil spreading on the sea. **Annual Review of Fluid Mechanics**, v. 4, p. 341-368, 1972.

IVES, D.C. A modern look at conformal mapping including multiply connected regions. **AIAA Journal**, v. 14, n. 8, p. 1006-1011, 1976.

KLAUS, R.L.; VAN NESS, H.C. An extension of the spline fit technique and applications to thermodynamic data. **AIChE Journal**, v. 13, n. 6, p. 1132-1136, 1967.

LANDIS, F.; NILSON, E. N. The determination of thermodynamic properties by direct differentiation techniques. In: Symposium on Thermophysical Properties, 2., Princeton, 1962. **Progress in international research on thermodynamic and transport properties**. New York : ASME, Academic Press, 1962. p. 218-227.

LANE, S.N.; BRADBROOK, K.F.; RICHARDS, K.S.; BIRON, P.A. and ROY, A.G.; The application of computational fluid dynamics to natural river channels: three-dimensional versus two-dimensional approaches. **Geomorphology**, 29:1-20, 1999.

LAUNDER, B. E.; SPALDING, D. B. The numerical computation of turbulent flows. **Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering**, v. 3, p. 269–289, 1974.

LIEN, H.C.; HSIEH, T.Y.; YANG, J.C. and YEH, K.C.; Bend-flow simulation using 2D depth-averaged model. **Journal of Hydraulic Engineering**, 125, 1999.

MACHADO, M.B. **Modelagem tridimensional da dispersão de efluentes industriais em rios**. 2006. Tese (Doutorado) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2006.

MALISKA, C.R. **Transferência de calor e mecânica de fluidos computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2004.

MEIRON, D.I.; ORSZAG, S.A.; ISRAELI, M. Applications of numerical conformal mapping. **Journal of Computational Physics**, v. 40, p. 345-360, 1981.

MEYDER, R. Solving the conservation equations in fuel rod bundles exposed to parallel flow by means of curvilinear-orthogonal coordinates. **Journal of Computational Physics**, v. 17, p. 53-67, 1975.

MOAVENI, S. **Finite element analysis: Theory and Application with ANSYS**. Upper Saddle River: Prentice-Hall, 1999. p. 527.

MODENESI, K. **Modelagem tridimensional da dispersão de efluentes em um trecho do rio utilizando a fluidodinâmica computacional**. 2001. Dissertação (Mestrado) - Universidade Estadual de Campinas, Campinas, 2001.

MEIER, H. F.; ALVES, J. J. N.; MORI, M. Comparison between staggered and collocated grids in the finite-volume method performance for single and multi-phase flows. **Computers and Chemical Engineering**, v. 23, p. 247-262, 1999.

NORDIN, C.F.; SABOL, B.V. Empirical data on longitudinal dispersion in rivers. **Geological Survey Water Res. Invest.**, p. 20-74, 1974.

NUNHEZ, J.R.; COSTA, C. B. B.; GUIRARDELLO, R. A new spline approach for data fitting, **Fluid Phase Equilibria**, v. 220, n. 2, p. 171-180, 2004.

PALADINO, E.E. **Modelagem matemática e simulação numérica de trajetórias de derrames de petróleo no mar**. 2000. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2000.

PAPANASTASIOU, T.C.; GEORGIU, G.C.; ALEXANDROU, A.N. **Viscous fluid flow**. New York: CRC Press, 2000. cap. 1. p. 24-33; cap. 1. p. 42-47.

PATANKAR, S. V. **Numerical heat transfer and fluid flow**. New York: Hemisphere, 1980. p. 67-68.

POFFO, I.R.F. et al. **Dinâmica dos vazamentos de óleo no canal de São Sebastião**. São Paulo: CETESB, v. 2, 1996.

POTTER, D.E.; TUTTLE, G.H. The construction of discrete orthogonal coordinate. **Journal of Computational Physics**, v. 13, p. 483-501, 1973.

PROGRAMA AMBIENTAL: A ÚLTIMA ARCA DE NOÉ. **Água: Água em crise**. São Paulo, 2005. Disponível em <<http://www.ultimaarcadenoe.com.br/index1.htm>>. Acesso em 17 de maio de 2005.

RYSKIN, G.; LEAL, L.G. Orthogonal mapping. **Journal of Computational Physics**, v. 50, n. 1, p. 71-100, 1983.

SCHOENBERG, I.J. Contributions to the problem of approximation of equidistant data by analytic functions, part A: on the problem of smoothing or graduation, a first class of analytic approximation formulas. **Quarterly Applied Mathematics**, v. 4, p. 112-141, 1946.

SECRETARIA DO MEIO AMBIENTE DO ESTADO DE SÃO PAULO. **Gestão ambiental do aquífero Guarani**. São Paulo, 2005. Disponível em <http://www.ambiente.sp.gov.br/aquifero/principal_aquifero.htm>. Acesso em 17 de maio de 2005.

SHARIFF, K.; MOSER, R.D. Two-dimensional mesh embedding for B_spline methods. **Journal of Computational Physics**, v. 145, n. 2, p. 471-488, 1998.

SHEN, H.T.; ACKERMANN, N.L. Wintertime flow distribution in river channels. **Journal of Hydraulics Division**, v. 106, n. HY5, 1980.

SHEN, H.T.; YAPA, P.D. Oil slick transport in rivers. **Journal of Hydraulic Engineering**, v. 114, n. 5, p. 529-543, 1988.

SHEN, H.T.; YAPA, P.D.; PETROSKI, M.E. A simulation model for oil slick transport in lakes. **Water Resources Research**, v. 23, n. 10, p. 1949-1957, 1987.

SOUZA, G.E. **Análise da dispersão convectiva de poluentes na superfície de corpos aquáticos: um estudo de CFD**. 2003. Dissertação (Mestrado) - Universidade Regional de Blumenau, Blumenau, 2003.

SPALDING, D.B. A single formula for the "law of the wall". **Journal of Applied Mechanics**, v. 28, p. 455-458, 1961.

SPIEGEL, M. **Vector Analysis**. 1. ed. New York: McGraw-Hill, 1968.

THOMPSON, J.F. A reflection on grid generation in the 90s: trends, needs, and influences. In: 5th INTERNATIONAL CONFERENCE ON GRID GENERATION IN CFD, 1996, Mississippi. **Anais...** Mississippi: Mississippi State University, 1996.

THOMPSON, J.F.; THAMES, F.C.; MASTIN, C.W. TOMCAT – a code for numerical generation of boundary-fitted curvilinear coordinate system on fields containing any number of arbitrary two-dimensional bodies. **Journal of Computational Physics**, v. 24, n. 3, p. 274-302, 1977.

VASILIEV, V.I.; VOLKOV, D.V; ZAITSEV, S.A. and LYUBIMOV, D.A.; Numerical simulation of channel flows by a one-equation turbulence model. **ASME Journal of Fluid Engineering**, 119:885-892, 1997.

WELTY, J.R.; WICKS, C.E.; WILSON, R.E. **Fundamentals of momentum, heat and mass transfer**. 3. ed. New York: John Wiley & Sons, 1984. cap. 5. p. 48; cap. 9. p. 120-134; cap. 19. p. 591.

WILCOX, D.C. **Turbulence modeling for CFD**. La Cañada: DCW Industries, 1993. cap. 4. p. 47.

WINSLOW, A.J. Numerical solution of the quasi-linear Poisson equation in a non-uniform triangular mesh. **Journal of Computational Physics**, v. 2, p. 149-172, 1966.

YE, J.; McCORQUODALE, J.A.; Simulation of curved open channel flows by 3D hydrodynamic model. **Journal of Hydraulic Engineering**, 124(7), 1998.

ZHANG, Y., JIA, Y.; WANG, S.S.Y. 2D nearly orthogonal mesh generation. **International Journal for Numerical Methods in Fluids**, v. 46, n. 7, p. 685-707, 2004.

ANEXO 1 - DEFINIÇÃO DE UM DESLOCAMENTO

O conteúdo apresentado é um desenvolvimento do conteúdo de Spiegel (1968).

A modelagem do sistema leva à obtenção de equações diferenciais que normalmente são difíceis de serem calculadas analiticamente. Para que estas equações sejam obtidas, é necessário o conhecimento do comprimento, da área e do volume de um elemento de controle. Para isso, o cálculo de um deslocamento é extremamente importante para se conhecer as grandezas citadas anteriormente.

Um sistema de coordenadas ortogonais é definido como aquele em que dado uma direção qualquer na qual apenas uma coordenada aumenta, então a direção na qual a outra coordenada aumenta é perpendicular à primeira.

Exemplos:

- Coordenadas Cartesianas

A Figura 1 mostra as coordenadas cartesianas para exemplificar a definição de um sistema de coordenadas ortogonais. É fácil observar figura que à medida que uma coordenada aumenta em uma direção (coordenada x), a direção em que a outra coordenada cresce (coordenada y) é perpendicular à primeira.

Figura 1: Exemplo de coordenada cartesiana.

- Coordenadas Polares

A Figura 2 mostra as coordenadas polares para exemplificar a definição de coordenadas ortogonais. Percebe-se que a direção em que somente o ângulo se modifica é perpendicular ao eixo do raio.

Figura 2: Exemplo de coordenada polar.

A Figura 3 apresenta dois sistemas de coordenadas ortogonais:

Figura 3: Sistema de coordenada cartesiana e sistema ortogonal qualquer de coordenada.

Assim:

$$\vec{r}_1 + d\vec{r} = \vec{r}_2 \quad (1)$$

Definindo o vetor deslocamento da seguinte maneira:

$$d\vec{r} = \left. \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right|_{U_2} \cdot dU_1 + \left. \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right|_{U_1} \cdot dU_2 \quad (2)$$

Sejam os pontos $A(U_{1A}, U_{2A})$, $B(U_{1B}, U_{2B})$ e $C(U_{1C}, U_{2C})$ na Figura 3. Então:

$$\left. \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right|_{U_2} \cdot dU_1 = \frac{(U_{1B} - U_{1A}, U_{2B} - U_{2A})}{U_{1B} - U_{1A}} \cdot (U_{1B} - U_{1A}) = (U_{1B} - U_{1A}, 0) \quad (3)$$

$$\left. \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right|_{U_1} \cdot dU_2 = \frac{(U_{1C} - U_{1B}, U_{2C} - U_{2B})}{U_{2C} - U_{2B}} \cdot (U_{2C} - U_{2B}) = (0, U_{2C} - U_{2B}) \quad (4)$$

Substituindo as equações (3) e (4) na equação (2) tem-se:

$$d\vec{r} = (U_{1B} - U_{1A}, 0) + (0, U_{2C} - U_{2B}) = (U_{1B} - U_{1A}, U_{2C} - U_{2B}) \quad (5)$$

$$d\vec{r} = (U_{1C}, U_{2C}) - (U_{1A}, U_{2A}) = C - A \quad (6)$$

Assim, prova-se que a equação (2) está correta.

A seguir, definem-se alguns vetores importantes. Os vetores unitários nas direções de U_1 e U_2 ($\vec{e}_{U_1}$ e $\vec{e}_{U_2}$) são definidos como:

$$\vec{e}_{U_1} = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\|} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \quad (7)$$

$$\vec{e}_{U_2} = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\|} \cdot \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \quad (8)$$

Isolando as derivadas em relação às suas respectivas coordenadas, tem-se:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| \cdot \vec{e}_{U_1} \quad (9)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| \cdot \vec{e}_{U_2} \quad (10)$$

Substituindo as equações (9) e (10) na equação (2):

$$d\vec{r} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| \cdot dU_1 \cdot \vec{e}_{U_1} + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| \cdot dU_2 \cdot \vec{e}_{U_2} \quad (11)$$

A equação (11) representa o vetor deslocamento para um sistema de coordenada ortogonal qualquer com as direções U_1 e U_2 .

Para provar que a equação (11) está correta, ela será aplicada a dois exemplos de coordenadas conhecidas: cartesianas e cilíndricas.

- Coordenadas cartesianas

A Figura 4 mostra um vetor deslocamento qualquer em coordenadas cartesianas.

Figura 4: Vetor deslocamento ($d\vec{r}$) em coordenadas cartesianas.

Por definição, os vetores unitários em coordenadas cartesianas são:

$$\vec{e}_x = (1, 0, 0) \quad (12)$$

$$\vec{e}_y = (0, 1, 0) \quad (13)$$

$$\vec{e}_z = (0, 0, 1) \quad (14)$$

Neste caso, tem-se que:

$$\vec{r} = x.\vec{e}_x + y.\vec{e}_y + z.\vec{e}_z \quad (15)$$

Substituindo as equações (12) a (14) na equação (15), chega-se a:

$$\vec{r} = x.(1, 0, 0) + y.(0, 1, 0) + z.(0, 0, 1) = (x, y, z) \quad (16)$$

O vetor deslocamento pode ser escrito através da diferenciação da equação (16):

$$d\vec{r} = dx.(1, 0, 0) + dy.(0, 1, 0) + dz.(0, 0, 1) \quad (17)$$

A definição do vetor deslocamento pode ser escrita como na forma da equação (2):

$$d\vec{r} = \frac{\partial \vec{r}}{\partial x}.dx + \frac{\partial \vec{r}}{\partial y}.dy + \frac{\partial \vec{r}}{\partial z}.dz \quad (18)$$

Através da comparação entre as equações (17) e (18), conclui-se que:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial x} = (1, 0, 0) \quad (19)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial y} = (0, 1, 0) \quad (20)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial z} = (0, 0, 1) \quad (21)$$

Calculando-se as normas dos vetores das equações (19) a (21):

$$\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial x} \right\| = \sqrt{1^2 + 0^2 + 0^2} = 1 \quad (22)$$

$$\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial y} \right\| = \sqrt{0^2 + 1^2 + 0^2} = 1 \quad (23)$$

$$\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial z} \right\| = \sqrt{0^2 + 0^2 + 1^2} = 1 \quad (24)$$

Pela definição dada pela equação (11) do vetor deslocamento, tem-se que:

$$d\vec{r} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial x} \right\| dx \cdot \vec{e}_x + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial y} \right\| dy \cdot \vec{e}_y + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial z} \right\| dz \cdot \vec{e}_z \quad (25)$$

Substituindo as equações (19) a (24) na equação (25):

$$d\vec{r} = 1 \cdot dx \cdot (1, 0, 0) + 1 \cdot dy \cdot (0, 1, 0) + 1 \cdot dz \cdot (0, 0, 1) = (dx, dy, dz) \quad (26)$$

- Coordenadas cilíndricas

A Figura 5 mostra um vetor deslocamento qualquer em coordenadas cilíndricas.

Figura 5: Vetor deslocamento ($d\vec{r}$) em coordenadas cilíndricas.

No caso de coordenadas cilíndricas o vetor posição é dado por:

$$\vec{r} = (\lambda \cdot \cos(\alpha), \lambda \cdot \sin(\alpha), z) \quad (27)$$

A equação do vetor deslocamento é:

$$d\vec{r} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \lambda} \right\| d\lambda \cdot \vec{e}_\lambda + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \alpha} \right\| d\alpha \cdot \vec{e}_\alpha + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial z} \right\| dz \cdot \vec{e}_z \quad (28)$$

Calculando-se as derivadas de $\vec{r}$ em relação às três direções:

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \lambda} = (\cos(\alpha), \sin(\alpha), 0) \quad (29)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial \alpha} = (-\lambda \cdot \sin(\alpha), \lambda \cdot \cos(\alpha), 0) \quad (30)$$

$$\frac{\partial \vec{r}}{\partial z} = (0, 0, 1) \quad (31)$$

Calculando as normas dos vetores das equações (29) a (31):

$$\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \lambda} \right\| = \sqrt{\cos^2(\alpha) + \sin^2(\alpha) + 0^2} = 1 \quad (32)$$

$$\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial \alpha} \right\| = \sqrt{(-\lambda \cdot \sin(\alpha))^2 + (\lambda \cdot \cos(\alpha))^2 + 0^2} = \rho \quad (33)$$

$$\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial z} \right\| = \sqrt{0^2 + 0^2 + 1^2} = 1 \quad (34)$$

Calculando os vetores unitários:

$$\bar{e}_\lambda = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \bar{r}}{\partial \lambda} \right\|} \cdot \frac{\partial \bar{r}}{\partial \lambda} = \frac{1}{1} \cdot (\cos(\alpha), \sin(\alpha), 0) = (\cos(\alpha), \sin(\alpha), 0) \quad (35)$$

$$\bar{e}_\alpha = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \bar{r}}{\partial \alpha} \right\|} \cdot \frac{\partial \bar{r}}{\partial \alpha} = \frac{1}{\lambda} \cdot (-\lambda \cdot \sin(\alpha), \lambda \cdot \cos(\alpha), 0) = (-\sin(\alpha), \cos(\alpha), 0) \quad (36)$$

$$\bar{e}_z = \frac{1}{\left\| \frac{\partial \bar{r}}{\partial z} \right\|} \cdot \frac{\partial \bar{r}}{\partial z} = \frac{1}{1} \cdot (0, 0, 1) = (0, 0, 1) \quad (37)$$

Substituindo as equações (32) a (37) na equação (28), chega-se a:

$$d\bar{r} = 1 \cdot d\lambda \cdot (\cos(\alpha), \sin(\alpha), 0) + \lambda \cdot d\alpha \cdot (-\sin(\alpha), \cos(\alpha), 0) + 1 \cdot dz \cdot (0, 0, 1) \quad (38)$$

Então:

$$d\bar{r} = (\cos(\alpha) \cdot d\lambda - \lambda \cdot \sin(\alpha) \cdot d\alpha, \sin(\alpha) \cdot d\lambda + \lambda \cdot \cos(\alpha) \cdot d\alpha, dz) \quad (39)$$

ANEXO 2 - O COMPRIMENTO DE UM ELEMENTO DE CURVA

O conteúdo apresentado é um desenvolvimento do conteúdo de Spiegel (1968).

A Lei dos co-senos

Seja um triângulo de lados a , b e c e ângulos opostos a estes lados α , β e γ , respectivamente. A Figura 6 mostra tal triângulo.

Figura 6: Triângulo de lados a , b e c e ângulos α , β e γ .

Pode-se escrever então:

$$a^2 = (b - c \cdot \cos(\alpha))^2 + (c \cdot \sin(\alpha))^2 \quad (1)$$

$$a^2 = b^2 - 2 \cdot b \cdot c \cdot \cos(\alpha) + c^2 \cdot \cos^2(\alpha) + c^2 \cdot \sin^2(\alpha) \quad (2)$$

$$a^2 = b^2 + c^2 - 2 \cdot b \cdot c \cdot \cos(\alpha) \quad (3)$$

Analogamente:

$$b^2 = a^2 + c^2 - 2 \cdot a \cdot c \cdot \cos(\beta) \quad (4)$$

$$c^2 = a^2 + b^2 - 2 \cdot a \cdot b \cdot \cos(\gamma) \quad (5)$$

O produto escalar

Sejam três pontos A, P e Q no espaço tridimensional. Suponha-se ainda um vetor $\vec{U}$ com início no ponto A e fim no ponto P, um vetor $\vec{V}$ com início no ponto A e fim no ponto Q e outro vetor $\vec{W}$ dado pela subtração dos vetores $\vec{U}$ e $\vec{V}$. A Figura 7 ilustra esses vetores com ângulo α entre os vetores $\vec{U}$ e $\vec{V}$:

Figura 7: Vetores $\vec{U}$, $\vec{V}$ e $\vec{W}$ no espaço tridimensional.

Aplicando a Lei dos co-senos:

$$\|\vec{W}\|^2 = \|\vec{U}\|^2 + \|\vec{V}\|^2 - 2\|\vec{U}\|\|\vec{V}\|\cos(\alpha) \quad (6)$$

Observando a Figura 7, nota-se que:

$$\vec{V} + \vec{W} = \vec{U} \quad (7)$$

$$\vec{W} = \vec{U} - \vec{V} \quad (8)$$

Definindo os vetores $\vec{U}$ e $\vec{V}$ em termos de suas coordenadas:

$$\vec{U} = \vec{U}(x_1, y_1, z_1) \quad (9)$$

$$\vec{V} = \vec{V}(x_2, y_2, z_2) \quad (10)$$

Então:

$$\vec{W} = \vec{U} - \vec{V} = (x_1 - x_2, y_1 - y_2, z_1 - z_2) \quad (11)$$

$$\|\vec{W}\| = \sqrt{(x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2} \quad (12)$$

$$\|\vec{U}\| = \sqrt{x_1^2 + y_1^2 + z_1^2} \quad (13)$$

$$\|\vec{V}\| = \sqrt{x_2^2 + y_2^2 + z_2^2} \quad (14)$$

Reescrevendo a equação (6):

$$\|\vec{W}\|^2 - \|\vec{U}\|^2 - \|\vec{V}\|^2 = -2 \cdot \|\vec{U}\| \cdot \|\vec{V}\| \cdot \cos(\alpha) \quad (15)$$

O termo da esquerda pode ser calculado através da substituição das equações (12) a (14) no lado esquerdo da equação (15):

$$\begin{aligned} \|\vec{W}\|^2 - \|\vec{U}\|^2 - \|\vec{V}\|^2 &= (x_1 - x_2)^2 + (y_1 - y_2)^2 + (z_1 - z_2)^2 - \\ &\quad - x_1^2 - y_1^2 - z_1^2 - x_2^2 - y_2^2 - z_2^2 \end{aligned} \quad (16)$$

Simplificando:

$$\|\vec{W}\|^2 - \|\vec{U}\|^2 - \|\vec{V}\|^2 = -2 \cdot (x_1 \cdot x_2 + y_1 \cdot y_2 + z_1 \cdot z_2) \quad (17)$$

Substituindo a equação (17) na equação (15):

$$-2 \cdot (x_1 \cdot x_2 + y_1 \cdot y_2 + z_1 \cdot z_2) = -2 \cdot \|\vec{U}\| \cdot \|\vec{V}\| \cdot \cos(\alpha) \quad (18)$$

$$\|\vec{U}\| \cdot \|\vec{V}\| \cdot \cos(\alpha) = x_1 \cdot x_2 + y_1 \cdot y_2 + z_1 \cdot z_2 \quad (19)$$

Pela nomenclatura freqüentemente usada:

$$\vec{U} \cdot \vec{V} = x_1 \cdot x_2 + y_1 \cdot y_2 + z_1 \cdot z_2 = \|\vec{U}\| \cdot \|\vec{V}\| \cdot \cos(\alpha) \quad (20)$$

A equação (20) representa a definição do produto escalar entre dois vetores. O nome “escalar” vem do fato de que o valor obtido por este produto é um número, ou seja, não tem direção e sentido.

O comprimento

A Figura 8 mostra um elemento infinitesimal de uma curva qualquer.

Figura 8: Elemento infinitesimal de uma curva.

Se o ponto A estiver muito próximo de B, então:

$$dS \approx \|d\vec{r}\| \quad (21)$$

$$\alpha \approx 0^\circ \quad (22)$$

Usando o conceito de produto escalar:

$$\cos(\alpha) = \frac{d\vec{r} \bullet d\vec{r}}{\|d\vec{r}\| \|d\vec{r}\|} \quad (23)$$

Substituindo as equações (21) e (22) na equação (23), tem-se que:

$$\cos(0) = 1 = \frac{d\vec{r} \bullet d\vec{r}}{dS^2} \quad (24)$$

$$dS = \sqrt{d\vec{r} \bullet d\vec{r}} \quad (25)$$

Ou seja, o diferencial do comprimento de uma curva é obtido pela raiz quadrada do produto escalar do vetor deslocamento.

ANEXO 3 - O CÁLCULO DE UM ELEMENTO DE ÁREA

O conteúdo apresentado é um desenvolvimento do conteúdo de Spiegel (1968).

O produto vetorial

Dados dois vetores no espaço tridimensional

$$\vec{a} = \vec{a}(a_1, a_2, a_3) \quad (1)$$

$$\vec{b} = \vec{b}(b_1, b_2, b_3) \quad (2)$$

O produto vetorial, $\vec{a} \times \vec{b}$, entre os vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$ é definido por:

$$\vec{a} \times \vec{b} = \begin{vmatrix} \vec{i} & \vec{j} & \vec{k} \\ a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \end{vmatrix} \quad (3)$$

Nota-se que o resultado desse produto é um vetor.

Algumas propriedades da equação (3) são:

- o vetor $\vec{a} \times \vec{b}$ é ortogonal ao vetor $\vec{a}$ e ao vetor $\vec{b}$;

$$- \|\vec{a} \times \vec{b}\|^2 = \|\vec{a}\|^2 \cdot \|\vec{b}\|^2 - (\vec{a} \cdot \vec{b})^2 \quad (4)$$

A equação (4) é conhecida como identidade de Lagrange.

Substituindo a equação (20) do Anexo 2 na equação (4):

$$\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2 = \|\vec{a}\|^2 \cdot \|\vec{b}\|^2 - \|\vec{a}\|^2 \cdot \|\vec{b}\|^2 \cdot \cos^2(\alpha) \quad (5)$$

$$\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2 = \|\vec{a}\|^2 \cdot \|\vec{b}\|^2 (1 - \cos^2(\alpha)) \quad (6)$$

$$\|\vec{a} \times \vec{b}\|^2 = \|\vec{a}\|^2 \cdot \|\vec{b}\|^2 \cdot \text{sen}^2(\alpha) \quad (7)$$

$$\|\vec{a} \times \vec{b}\| = \|\vec{a}\| \cdot \|\vec{b}\| \cdot \text{sen}(\alpha) \quad (8)$$

A equação (8) é a definição do produto vetorial entre os vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$, em que α é o ângulo entre esses dois vetores. Assim, a norma (comprimento) do vetor $\vec{a} \times \vec{b}$ é igual à área do paralelogramo cujos lados são os vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$ (vide Figura 9).

Figura 9: Paralelogramo formado pelos vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$.

A área

Dado um sistema de coordenadas ortogonal qualquer, como na Figura 10 a seguir:

Figura 10: Sistema de coordenadas ortogonal qualquer com vetores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$.

O vetor deslocamento ($d\vec{r}$) pode ser escrito como:

$$d\vec{r} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| dU_1 \cdot \vec{e}_{U_1} + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| dU_2 \cdot \vec{e}_{U_2} + \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_3} \right\| dU_3 \cdot \vec{e}_{U_3} \quad (9)$$

A área entre os vetores $\vec{a}$ e $\vec{b}$ (dA_1) é:

$$dA_1 = \left\| \vec{a} \times \vec{b} \right\| \quad (10)$$

Em que:

$$\vec{a} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| dU_1 \cdot \vec{e}_{U_1} \quad (11)$$

$$\vec{b} = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| dU_2 \cdot \vec{e}_{U_2} \quad (12)$$

Assim:

$$dA_1 = \|\bar{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{b}}\| = \begin{vmatrix} \bar{\mathbf{e}}_{U_1} & \bar{\mathbf{e}}_{U_2} & \bar{\mathbf{e}}_{U_3} \\ \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_1} \right\| \cdot dU_1 \cdot \bar{\mathbf{e}}_{U_1} & \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_2} \right\| \cdot dU_2 \cdot \bar{\mathbf{e}}_{U_2} & 0 \\ 0 & b_3 & 0 \end{vmatrix} \quad (13)$$

$$\bar{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{b}} = \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_1} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_2} \right\| \cdot dU_1 \cdot dU_2 \cdot \bar{\mathbf{e}}_{U_3} \quad (14)$$

$$dA_1 = \|\bar{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{b}}\| = \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_1} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_2} \right\| \cdot dU_1 \cdot dU_2 \quad (15)$$

Analogamente:

$$dA_2 = \|\bar{\mathbf{a}} \times \bar{\mathbf{c}}\| = \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_1} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_3} \right\| \cdot dU_1 \cdot dU_3 \quad (16)$$

$$dA_3 = \|\bar{\mathbf{b}} \times \bar{\mathbf{c}}\| = \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_2} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \bar{\mathbf{r}}}{\partial U_3} \right\| \cdot dU_2 \cdot dU_3 \quad (17)$$

ANEXO 4 - O CÁLCULO DE UM ELEMENTO DE VOLUME

O conteúdo apresentado é um desenvolvimento do conteúdo de Spiegel (1968).

Suponha um sólido formado pelos vetores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$, como na Figura 11.

Figura 11: Sólido formado pelos vetores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$.

O volume desse sólido pode ser calculado por:

$$V = \text{Área da Base} \times \text{Altura} \quad (1)$$

$$V = \|\vec{a} \times \vec{b}\| \cdot (\|\vec{c}\| \cdot \cos(\alpha)) \quad (2)$$

Em que α é o ângulo entre $\vec{a} \times \vec{b}$ e $\vec{c}$.

A equação (2) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$V = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} \quad (3)$$

Esse volume pode ser calculado por:

$$V = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \begin{vmatrix} a_1 & a_2 & a_3 \\ b_1 & b_2 & b_3 \\ c_1 & c_2 & c_3 \end{vmatrix} \quad (4)$$

Em que:

$$\vec{a} = \vec{a}(a_1, a_2, a_3) \quad (5)$$

$$\vec{b} = \vec{b}(b_1, b_2, b_3) \quad (6)$$

$$\vec{c} = \vec{c}(c_1, c_2, c_3) \quad (7)$$

Em caso de volume negativo, considera-se o módulo desse valor.

Considere agora o sólido infinitesimal a seguir:

Figura 12: Sólido infinitesimal em um sistema de coordenadas ortogonal qualquer.

Agora os vetores $\vec{a}$, $\vec{b}$ e $\vec{c}$ são:

$$\vec{a} = \vec{a} \left(\left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| \cdot dU_1, 0, 0 \right) \quad (8)$$

$$\vec{b} = \vec{b} \left(0, \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| \cdot dU_2, 0 \right) \quad (9)$$

$$\vec{c} = \vec{c} \left(0, 0, \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_3} \right\| \cdot dU_3 \right) \quad (10)$$

Então, de acordo com a equação (4):

$$dV = (\vec{a} \times \vec{b}) \cdot \vec{c} = \begin{vmatrix} \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| \cdot dU_1 & 0 & 0 \\ 0 & \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| \cdot dU_2 & 0 \\ 0 & 0 & \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_3} \right\| \cdot dU_3 \end{vmatrix} \quad (11)$$

Logo, tem-se que:

$$dV = \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_1} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_2} \right\| \cdot \left\| \frac{\partial \vec{r}}{\partial U_3} \right\| \cdot dU_1 \cdot dU_2 \cdot dU_3 \quad (12)$$

ANEXO 5 – OS TENSORES NA FLUIDODINÂMICA

O conteúdo escrito nesta seção está baseado em Papanastasiou et al. (2000). Considere o sistema de coordenadas cartesianas a seguir com vetores unitários $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ e um vetor $\vec{r}$ qualquer:

Figura 13: Sistema de coordenadas cartesianas com vetores unitários $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ e um vetor $\vec{r}$ qualquer.

Os vetores unitários $\vec{e}_x$, $\vec{e}_y$, $\vec{e}_z$ são os mesmos das equações (12) a (14) do Anexo 1. Assim, o vetor $\vec{r}$ pode ser escrito da seguinte forma:

$$\vec{r} = r_x \cdot \vec{e}_x + r_y \cdot \vec{e}_y + r_z \cdot \vec{e}_z \quad (1)$$

De forma geral, o vetor $\vec{r}$ pode ser escrito como:

$$\vec{r} = \sum_{i=1}^3 r_i \cdot \vec{e}_i \quad (2)$$

Em que os índices 1, 2 e 3 representam as coordenadas x, y e z, respectivamente.

Um tensor qualquer, $\tilde{T}$, pode ser escrito da seguinte forma no mesmo sistema de coordenadas:

$$\tilde{T} = \sum_{i=1}^3 \sum_{j=1}^3 \tau_{ij} \cdot \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j \quad (3)$$

Desenvolvendo a equação (3):

$$\begin{aligned} \tilde{T} = & T_{11} \cdot \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1 + T_{12} \cdot \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 + T_{13} \cdot \vec{e}_1 \cdot \vec{e}_3 + T_{21} \cdot \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_1 + T_{22} \cdot \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_2 + T_{23} \cdot \vec{e}_2 \cdot \vec{e}_3 + \\ & + T_{31} \cdot \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_1 + T_{32} \cdot \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_2 + T_{33} \cdot \vec{e}_3 \cdot \vec{e}_3 \end{aligned} \quad (4)$$

Os produtos entre os vetores unitários são dados por:

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (5)$$

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (6)$$

$$\vec{e}_1 \cdot \vec{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (7)$$

$$\vec{e}_2 \cdot \vec{e}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (8)$$

$$\vec{e}_2 \cdot \vec{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (9)$$

$$\vec{e}_2 \cdot \vec{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (10)$$

$$\vec{e}_3 \cdot \vec{e}_1 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$\vec{e}_3 \cdot \vec{e}_2 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{bmatrix} \quad (12)$$

$$\vec{e}_3 \cdot \vec{e}_3 = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (13)$$

Substituindo as equações (5) a (13) na equação (4), tem-se:

$$\tilde{T} = \begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} & T_{13} \\ T_{21} & T_{22} & T_{23} \\ T_{31} & T_{32} & T_{33} \end{bmatrix} \quad (14)$$

A aplicação de tensores na fluidodinâmica é feita da seguinte forma. Quando o fluido está parado, as tensões normais aplicadas pelo fluido são contrárias às pressões em cada direção e as tensões tangenciais são nulas. Quando um elemento de controle de fluido é deformado, isto acontece devido à existência de tensões tangenciais. Assim especificamente para o caso de fluidos Newtonianos, pode-se escrever:

$$\tilde{T}_T = -P.\tilde{I} + \mu_{ef}.\tilde{D} \quad (15)$$

Em que $\tilde{T}_T$ é o tensor tensão total, P é a pressão exercida sobre o fluido; $\tilde{I}$ é o tensor diagonal unitário; μ_{ef} é a viscosidade dinâmica efetiva do fluido; $\tilde{D}$ é o tensor deformação.

O tensor deformação é dado por:

$$\tilde{D} = \tilde{\nabla}V + \tilde{\nabla}V^T \quad (16)$$

Em que: $\tilde{\nabla}V$: Tensor gradiente de velocidade.

$\tilde{\nabla}V^T$: Tensor gradiente de velocidade transposto.

Como se deseja escrever todos os tensores em coordenadas generalizadas, então é necessário que se defina o gradiente de uma variável nestas coordenadas.

Assim:

$$\nabla = \frac{\partial}{\partial S_{U_1}}.\vec{e}_{U_1} + \frac{\partial}{\partial S_{U_2}}.\vec{e}_{U_2} + \frac{\partial}{\partial S_{U_3}}.\vec{e}_{U_3} \quad (17)$$

Em que S_{U_1} , S_{U_2} e S_{U_3} são comprimentos físicos em suas respectivas direções.

Pela equação (11) do Anexo 1, pode-se escrever:

$$dS = \sum_{i=1}^3 h_{U_i} \cdot dU_i \cdot \vec{e}_{U_i} \quad (18)$$

$$h_i = \left\| \frac{\partial S}{\partial U_i} \right\| \quad (19)$$

Então, o gradiente em coordenadas generalizadas pode ser escrito como a seguir:

$$\nabla = \frac{1}{h_1} \frac{\partial}{\partial U_1} \cdot \vec{e}_{U_1} + \frac{1}{h_2} \frac{\partial}{\partial U_2} \cdot \vec{e}_{U_2} + \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial U_3} \cdot \vec{e}_{U_3} \quad (20)$$

O tensor gradiente de velocidade em coordenadas curvilíneas é dado por:

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v} = \left[\sum_{i=1}^3 \frac{1}{h_i} \frac{\partial}{\partial U_i} \cdot \vec{e}_i \right] \cdot \left[\sum_{j=1}^3 v_j \cdot \vec{e}_j \right] \quad (21)$$

Efetuada a operação acima, obtém-se:

$$\tilde{\nabla} \mathbf{v} = \sum_{j=1}^3 \frac{1}{h_i} \frac{\partial v_j}{\partial U_i} \cdot \vec{e}_i \cdot \vec{e}_j \quad (22)$$

APÊNDICE 1 – CÁLCULO DOS COEFICIENTES DAS EQUAÇÕES DISCRETIZADAS PELO MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Esta seção visa mostrar como se efetuam os cálculos das variáveis presentes nos coeficientes das equações discretizadas através da aplicação do Método dos Volumes Finitos, particularmente no que se refere ao Capítulo 4 desta dissertação.

Será usado o arranjo desencontrado, ou seja, a variável escalar (concentração) será armazenada nos centros dos elementos de controle e as variáveis vetoriais (velocidades) serão armazenadas nas arestas dos elementos de controle (MALISKA, 2004).

Considere a figura a seguir:

Figura 14: Elemento de controle contendo o ponto P; elementos de controle vizinhos e pontos de intersecção entre as linhas de corrente e as linhas potenciais.

Neste caso, os índices i e j indicam, respectivamente, os pontos na direção ξ e na direção η .

Assim, de acordo com a definição das equações (3-5) e (3-6):

$$h_{\eta,e} = \frac{\sqrt{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1})^2 + (y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1})^2}}{2.\Delta\eta} + \frac{\sqrt{(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j})^2}}{2.\Delta\eta} \quad (1)$$

$$h_{\eta,w} = \frac{\sqrt{(x_{i,j+2} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i,j+2} - y_{i,j+1})^2}}{2.\Delta\eta} + \frac{\sqrt{(x_{i,j+1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j})^2}}{2.\Delta\eta} \quad (2)$$

$$h_{\eta,n} = \frac{\sqrt{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1})^2 + (y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1})^2}}{2.\Delta\eta} + \frac{\sqrt{(x_{i,j+2} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i,j+2} - y_{i,j+1})^2}}{2.\Delta\eta} \quad (3)$$

$$h_{\eta,s} = \frac{\sqrt{(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j})^2}}{2.\Delta\eta} + \frac{\sqrt{(x_{i,j+1} - x_{i,j})^2 + (y_{i,j+1} - y_{i,j})^2}}{2.\Delta\eta} \quad (4)$$

$$h_{\xi,e} = \frac{\sqrt{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1})^2 + (y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1})^2}}{2.\Delta\xi} + \frac{\sqrt{(x_{i+2,j} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i+2,j} - y_{i+1,j})^2}}{2.\Delta\xi} \quad (5)$$

$$h_{\xi,w} = \frac{\sqrt{(x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1})^2}}{2.\Delta\xi} + \frac{\sqrt{(x_{i+1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i+1,j} - y_{i,j})^2}}{2.\Delta\xi} \quad (6)$$

$$h_{\xi,n} = \frac{\sqrt{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1})^2 + (y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1})^2}}{2.\Delta\xi} + \frac{\sqrt{(x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1})^2 + (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1})^2}}{2.\Delta\xi} \quad (7)$$

$$h_{\xi,s} = \frac{\sqrt{(x_{i+2,j} - x_{i+1,j})^2 + (y_{i+2,j} - y_{i+1,j})^2}}{2.\Delta\xi} + \frac{\sqrt{(x_{i+1,j} - x_{i,j})^2 + (y_{i+1,j} - y_{i,j})^2}}{2.\Delta\xi} \quad (8)$$

Em que x e y são respectivamente as coordenadas de intersecção dos eixos x e y entre as linhas de corrente e as linhas potenciais de um determinado rio.

A seguir, de acordo com as equações (7) e (8) do Anexo 1, mostra-se como calcular os vetores $\vec{e}$ em uma determinada direção nas arestas do elemento de controle:

$$\bar{\mathbf{e}}_{\eta,n} = \frac{1}{h_{\eta,n}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \eta} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i,j+2} - x_{i,j+1})}{2 \cdot h_{\eta,n} \cdot \Delta \eta} \\ \frac{(y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i,j+2} - y_{i,j+1})}{2 \cdot h_{\eta,n} \cdot \Delta \eta} \end{array} \right], \quad (9)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\eta,s} = \frac{1}{h_{\eta,s}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \eta} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2 \cdot h_{\eta,s} \cdot \Delta \eta} \\ \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2 \cdot h_{\eta,s} \cdot \Delta \eta} \end{array} \right], \quad (10)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\eta,e} = \frac{1}{h_{\eta,e}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \eta} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j})}{2 \cdot h_{\eta,e} \cdot \Delta \eta} \\ \frac{(y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j})}{2 \cdot h_{\eta,e} \cdot \Delta \eta} \end{array} \right], \quad (11)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\eta,w} = \frac{1}{h_{\eta,w}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \eta} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i,j+2} - x_{i,j+1}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2 \cdot h_{\eta,w} \cdot \Delta \eta} \\ \frac{(y_{i,j+2} - y_{i,j+1}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2 \cdot h_{\eta,w} \cdot \Delta \eta} \end{array} \right], \quad (12)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\xi,e} = \frac{1}{h_{\xi,e}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \xi} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+2,j} - x_{i+1,j})}{2 \cdot h_{\xi,e} \cdot \Delta \xi} \\ \frac{(y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+2,j} - y_{i+1,j})}{2 \cdot h_{\xi,e} \cdot \Delta \xi} \end{array} \right], \quad (13)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\xi,w} = \frac{1}{h_{\xi,w}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \xi} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1}) + (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{2 \cdot h_{\xi,w} \cdot \Delta \xi} \\ \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{2 \cdot h_{\xi,w} \cdot \Delta \xi} \end{array} \right], \quad (14)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\xi,n} = \frac{1}{h_{\xi,n}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \xi} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1})}{2 \cdot h_{\xi,n} \cdot \Delta \xi} \\ \frac{(y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1})}{2 \cdot h_{\xi,n} \cdot \Delta \xi} \end{array} \right], \quad (15)$$

$$\bar{\mathbf{e}}_{\xi,s} = \frac{1}{h_{\xi,s}} \cdot \frac{\Delta \vec{r}}{\Delta \xi} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+2,j} - x_{i+1,j}) + (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{2 \cdot h_{\xi,s} \cdot \Delta \xi} \\ \frac{(y_{i+2,j} - y_{i+1,j}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{2 \cdot h_{\xi,s} \cdot \Delta \xi} \end{array} \right], \quad (16)$$

O vetor diferencial de $\bar{\mathbf{e}}$ em uma determinada direção é obtido da seguinte maneira:

$$d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,n} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1}) - (x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1})}{h_{\xi,n} \cdot \Delta \xi} \\ \frac{(y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1}) - (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1})}{h_{\xi,n} \cdot \Delta \xi} \end{array} \right], \quad (17)$$

$$d\bar{\mathbf{e}}_{\xi,\xi,s} = \left[\begin{array}{c} \frac{(x_{i+2,j} - x_{i+1,j}) - (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{h_{\xi,s} \cdot \Delta \xi} \\ \frac{(y_{i+2,j} - y_{i+1,j}) - (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{h_{\xi,s} \cdot \Delta \xi} \end{array} \right], \quad (18)$$

$$d\bar{e}_{\xi,\xi,e} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+2,j} - x_{i+1,j})}{2.h_{\xi,e} \cdot \Delta\xi} + \\ - \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1}) + (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{2.h_{\xi,w} \cdot \Delta\xi}, \\ \frac{(y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+2,j} - y_{i+1,j})}{2.h_{\xi,e} \cdot \Delta\xi} + \\ - \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{2.h_{\xi,w} \cdot \Delta\xi} \end{array} \right] \quad (19)$$

$$d\bar{e}_{\xi,\xi,w} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1}) + (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{2.h_{\xi,w} \cdot \Delta\xi} + \\ - \frac{(x_{i,j+1} - x_{i-1,j+1}) + (x_{i,j} - x_{i-1,j})}{2.h_{\xi,w} \cdot \Delta\xi}, \\ \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{2.h_{\xi,w} \cdot \Delta\xi} + \\ - \frac{(y_{i,j+1} - y_{i-1,j+1}) + (y_{i,j} - y_{i-1,j})}{2.h_{\xi,w} \cdot \Delta\xi} \end{array} \right] \quad (20)$$

$$d\bar{e}_{\eta,\xi,e} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j})}{2.h_{\eta,e} \cdot \Delta\eta} + \\ - \frac{(x_{i,j+2} - x_{i,j+1}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2.h_{\eta,w} \cdot \Delta\eta}, \\ \frac{(y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j})}{2.h_{\eta,e} \cdot \Delta\eta} + \\ - \frac{(y_{i,j+2} - y_{i,j+1}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2.h_{\eta,w} \cdot \Delta\eta} \end{array} \right] \quad (21)$$

$$d\bar{e}_{\eta,\xi,w} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i,j+2} - x_{i,j+1}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2.h_{\eta,w}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(x_{i-1,j+2} - x_{i-1,j+1}) + (x_{i-1,j+1} - x_{i-1,j})}{2.h_{\eta,w}.\Delta\eta}, \\ \frac{(y_{i,j+2} - y_{i,j+1}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2.h_{\eta,w}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(y_{i-1,j+2} - y_{i-1,j+1}) + (y_{i-1,j+1} - y_{i-1,j})}{2.h_{\eta,w}.\Delta\eta} \end{array} \right], \quad (22)$$

$$d\bar{e}_{\xi,\eta,n} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+2,j+1} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+1,j+1} - x_{i,j+1})}{2.h_{\xi,n}.\Delta\xi} + \\ - \frac{(x_{i+2,j} - x_{i+1,j}) + (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{2.h_{\xi,s}.\Delta\xi}, \\ \frac{(y_{i+2,j+1} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+1,j+1} - y_{i,j+1})}{2.h_{\xi,n}.\Delta\xi} + \\ - \frac{(y_{i+2,j} - y_{i+1,j}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{2.h_{\xi,s}.\Delta\xi} \end{array} \right], \quad (23)$$

$$d\bar{e}_{\xi,\eta,s} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+2,j} - x_{i+1,j}) + (x_{i+1,j} - x_{i,j})}{2.h_{\xi,s}.\Delta\xi} + \\ - \frac{(x_{i+2,j-1} - x_{i+1,j-1}) + (x_{i+1,j-1} - x_{i,j-1})}{2.h_{\xi,s}.\Delta\xi}, \\ \frac{(y_{i+2,j} - y_{i+1,j}) + (y_{i+1,j} - y_{i,j})}{2.h_{\xi,s}.\Delta\xi} + \\ - \frac{(y_{i+2,j-1} - y_{i+1,j-1}) + (y_{i+1,j-1} - y_{i,j-1})}{2.h_{\xi,s}.\Delta\xi} \end{array} \right], \quad (24)$$

$$d\bar{e}_{\eta,\eta,n} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i,j+2} - x_{i,j+1})}{2.h_{\eta,n}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2.h_{\eta,s}.\Delta\eta}, \\ \frac{(y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i,j+2} - y_{i,j+1})}{2.h_{\eta,n}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2.h_{\eta,s}.\Delta\eta} \end{array} \right] \quad (25)$$

$$d\bar{e}_{\eta,\eta,s} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2.h_{\eta,s}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(x_{i+1,j} - x_{i+1,j-1}) + (x_{i,j} - x_{i,j-1})}{2.h_{\eta,s}.\Delta\eta}, \\ \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2.h_{\eta,s}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(y_{i+1,j} - y_{i+1,j-1}) + (y_{i,j} - y_{i,j-1})}{2.h_{\eta,s}.\Delta\eta} \end{array} \right] \quad (26)$$

$$d\bar{e}_{\eta,\eta,e} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i+1,j+2} - x_{i+1,j+1}) + (x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j})}{2.h_{\eta,e}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(x_{i+1,j+1} - x_{i+1,j}) + (x_{i+1,j} - x_{i+1,j-1})}{2.h_{\eta,w}.\Delta\eta}, \\ \frac{(y_{i+1,j+2} - y_{i+1,j+1}) + (y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j})}{2.h_{\eta,e}.\Delta\eta} + \\ - \frac{(y_{i+1,j+1} - y_{i+1,j}) + (y_{i+1,j} - y_{i+1,j-1})}{2.h_{\eta,w}.\Delta\eta} \end{array} \right] \quad (27)$$

$$d\bar{e}_{\eta,\eta,w} = \left[\begin{array}{l} \frac{(x_{i,j+2} - x_{i,j+1}) + (x_{i,j+1} - x_{i,j})}{2 \cdot h_{\eta,w} \cdot \Delta\eta} + \\ - \frac{(x_{i,j+1} - x_{i,j}) + (x_{i,j} - x_{i,j-1})}{2 \cdot h_{\eta,w} \cdot \Delta\eta}, \\ \frac{(y_{i,j+2} - y_{i,j+1}) + (y_{i,j+1} - y_{i,j})}{2 \cdot h_{\eta,w} \cdot \Delta\eta} + \\ - \frac{(y_{i,j+1} - y_{i,j}) + (y_{i,j} - y_{i,j-1})}{2 \cdot h_{\eta,w} \cdot \Delta\eta} \end{array} \right] \quad (28)$$

As variáveis de velocidade e de concentração que estão dentro dos coeficientes são consideradas como da iteração anterior.