



UNIVERSIDADE
ESTADUAL DE LONDRINA

TATIANA MARI SAITA

**DINÂMICA DE COLIFORMES FECAIS NO LAGO
LURUACO - ATLÁNTICO, COLÔMBIA**

Londrina

2016

TATIANA MARI SAITA

**DINÂMICA DE COLIFORMES FECAIS NO LAGO
LURUACO - ATLÂNTICO, COLÔMBIA**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

Orientador: Prof. Dr. Paulo Laerte Natti

Coorientador: Prof. Dr. Eliandro Rodrigues Cirilo

Londrina

2016

TATIANA MARI SAITA

**DINÂMICA DE COLIFORMES FECAIS NO LAGO
LURUACO - ATLÂNTICO, COLÔMBIA**

Dissertação de mestrado apresentada ao Departamento de Matemática da Universidade Estadual de Londrina, como requisito para a obtenção do Título de MESTRE em Matemática Aplicada e Computacional.

BANCA EXAMINADORA

Prof. Dr. Paulo Laerte Natti
Universidade Estadual de Londrina

Prof. Dra. Emília Kiyomi Kuroda
Universidade Estadual de Londrina

Prof. Dra. Neyva Maria Lopes Romeiro
Universidade Estadual de Londrina

Londrina, 16 de dezembro de 2016.

Dedico este trabalho à minha família

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, agradeço à Deus por dar a oportunidade de vivenciar este projeto, por me dar força e perseverança para concluir os objetivos na vida.

Agradeço imensamente o apoio de todos que estiveram ao meu lado durante este período, principalmente aos meus pais, Augusto e Luiza, minha irmã Laíssa, minha *bachans*, e as minhas filhotes. A base emocional e motivacional dada por eles foi inspirador para que eu desenvolvesse esse trabalho.

Ao meu companheiro, parceiro, melhor amigo, meu noivo Eduardo, o qual me acompanha e incentiva a seguir em frente todos os dias.

Ao meu orientador Professor Paulo L. Natti, e co-orientador Professor Eliandro R. Cirilo, que com muita paciência e empenho transmitiram a base para que este projeto se concluísse. Ao Professor Miguel Caro e Professor Rafael Borja da Universidad del Atlántico, Colômbia, que nos apoiaram disponibilizando informações necessárias à respeito do lago Luruaco.

Aos professores da banca pela colaboração e contribuindo para o aperfeiçoamento deste trabalho.

Durante esses anos de estudo na UEL, agradeço à todos que acompanharam essa trajetória, seja de perto ou longe. Aos colegas da faculdade, professores e amizades que surgiram ao longo desse período. Todos os momentos, sejam eles bons ou ruins, foram importantes para a concretização desse projeto.

Agradeço à CAPES pelo apoio financeiro e ao PGMAC pelo apoio em todo o curso.

A todos deixo meu sincero agradecimento. Gratidão, gratidão, gratidão.

Never Give Up!

SAITA, Tatiana Mari. **Dinâmica de coliformes fecais no lago Luruaco - Atlântico, Colômbia**. 2016. 106. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2016.

RESUMO

O presente trabalho é uma contribuição para melhorar o entendimento do efeito de descargas de coliformes fecais no corpo d'água do lago Luruaco, localizado no Departamento do Atlântico, Colômbia. O escoamento hidrodinâmico é modelado pelas equações de Navier-Stokes e de conservação de massa, ambas em coordenadas generalizadas. O campo de velocidades gerado por esse sistema de equações diferenciais parciais é utilizado na equação de transporte convectivo-difusivo-reativo, que fornece a concentração de coliformes fecais em todo lago. A partir da modelagem matemática do problema realiza-se a modelagem numérica. As discretizações do sistema hidrodinâmico e da equação de transporte são feitas via método de diferenças finitas. Em particular, para o termo convectivo é utilizado o esquema *First Order Upwind* (FOU). Utilizando um modelo bidimensional horizontal, a construção da geometria do lago é realizada através do método multibloco. Finalmente, são realizadas simulações numéricas da concentração de coliformes fecais sobre a malha computacional que representa o lago Luruaco em um período de 72 horas. São analisadas as contribuições de cada afluente na dinâmica do lago. Através dos resultados obtidos é possível propor um manejo do esgoto, a fim de melhorar a qualidade da água em uma região do lago, servindo como uma referência de coleta de água para os moradores da região. Os resultados obtidos nas simulações permitem uma melhor compreensão da dinâmica de coliformes fecais no lago no ponto de vista qualitativo, analisando as regiões que apresentam maior contaminação.

Palavras-chave: Lago Luruaco. Método Multibloco. Equações de Navier-Stokes. Método de Diferenças Finitas. Concentrações de Coliformes Fecais.

SAITA, Tatiana Mari. **Fecal coliforms dynamics in the Luruaco lake - Atlántico, Colombia.** 2016. 106. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2016.

ABSTRACT

The present work is a contribution to improve the understanding of the effect of fecal coliforms discharges into the water body of Luruaco lake, located in Department of Atlántico, Colombia. The hydrodynamic flow is modeled by the Navier-Stokes and the conservation mass equations in generalized coordinates. The range of velocities created by this system of partial differential equations is used in convective-difusive-reactive transport equation, that provides the concentration of fecal coliforms throughout the lake. From the mathematical model of the problem, realized the numerical modeling. The discretization of the hydrodynamic system and the transport equation are made by finite difference method. In particular, for the convective term is used a First Order Upwind (FOU) scheme. Using a bidimensional horizontal model, realized the construction of the lake geometry through the multiblock method. Finally, the numerical simulation of concentration of fecal coliforms on the computational grid that represent the Luruaco lake will be presented during the defense of the dissertation. The contributions of each affluent in the dynamics of the lake are analyzed. Through the results obtained it is possible to propose a management of the sewage in order to improve the quality of the water in a region of the lake, serving as a reference of collection of water for the habitants of the region. The results obtained in the simulation allow a better understanding (in qualitative form) of the fecal coliforms dynamics in the lake, analyzing the regions that presents more contamination.

Keywords: Luruaco Lake. Multiblock Method. Navier-Stokes Equations. Finite Difference Method. Concentration of Fecal Coliforms.

SUMÁRIO

| | | |
|----------|--|-----------|
| 1 | INTRODUÇÃO | 13 |
| 1.1 | JUSTIFICATIVA | 14 |
| 1.2 | OBJETIVOS | 16 |
| 1.3 | APRESENTAÇÃO EM EVENTOS E PUBLICAÇÕES | 19 |
| 2 | O LAGO LURUACO | 20 |
| 2.1 | LOCALIZAÇÃO GEOGRÁFICA | 20 |
| 2.2 | AFLUENTES E EFLUENTE | 21 |
| 2.3 | FATORES EXTERNOS | 22 |
| 2.4 | COLIFORMES FECAIS | 24 |
| 3 | MODELO MATEMÁTICO | 29 |
| 3.1 | MODELO HIDRODINÂMICO | 30 |
| 3.2 | MODELO DE CONCENTRAÇÃO DE COLIFORMES FECAIS | 39 |
| 4 | MÉTODO NUMÉRICO | 45 |
| 5 | CONSTRUÇÃO DA MALHA COMPUTACIONAL | 54 |
| 5.1 | DISCRETIZAÇÃO DO CONTORNO: MÉTODO SPLINE CÚBICO PARAME- TRIZADO | 54 |
| 5.2 | DISCRETIZAÇÃO DA MALHA: MÉTODO MULTIBLOCO | 56 |
| 6 | SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL | 63 |
| 6.1 | CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO | 63 |
| 6.2 | CAMPO DE VELOCIDADES | 65 |
| 6.3 | ANÁLISE DA DINÂMICA DE COLIFORMES FECAIS | 67 |
| 6.3.1 | Cenário 1 | 67 |
| 6.3.2 | Cenário 2 | 68 |
| 6.3.3 | Cenário 3 | 69 |
| 6.3.4 | Cenário 4 | 70 |
| 6.4 | PROPOSTA DE MANEJO DO ESGOTO | 71 |
| 7 | RESULTADOS | 74 |
| A | CONCEITOS BÁSICOS SOBRE FLUIDOS E MODELAGEM DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES | 76 |
| A.1 | FLUIDOS | 76 |

| | |
|--|------------|
| A.2 SISTEMA NAVIER-STOKES | 77 |
| B EQUAÇÃO DE GERAÇÃO DE MALHAS EM COORDENADAS GENERALI- ZADAS | 82 |
| C MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS | 90 |
| C.1 DISCRETIZAÇÃO DE DERIVADAS ESPACIAIS | 90 |
| C.2 DISCRETIZAÇÃO DA DERIVADA TEMPORAL | 92 |
| D DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES HIDRODINÂMICAS E EQUAÇÃO DE TRANS- PORTE | 93 |
| REFERÊNCIAS | 102 |

LISTA DE FIGURAS

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Localização da região de estudo: (a) América do Sul, Colômbia. (b) Departamento do Atlântico. (c) Lago Luruaco. Fonte: Autor. | 20 |
| 2.2 | Lago Luruaco. Fonte: Adaptado de Google Earth, 2016. | 21 |
| 2.3 | Alguns fatores externos que alteram a qualidade da água no lago Luruaco. Fonte: Diagnóstico ambiental y estrategias de rehabilitación de la Ciénega de Luruaco, Atlántico, Barranquilla, 2012. | 23 |
| 2.4 | Resíduos do Município de Luruaco são despejados no lago. Fonte: Diagnóstico ambiental y estrategias de rehabilitación de la Ciénega de Luruaco, Atlántico, Barranquilla, 2012. | 24 |
| 3.1 | Transformação de um domínio em coordenadas cartesianas para coordenadas generalizadas. | 29 |
| 5.1 | Coleta de pontos do contorno do lago Luruaco a partir do software WebPlotDigitizer. | 54 |
| 5.2 | Representação de uma malha justaposta com dois blocos | 57 |
| 5.3 | Blocos da malha computacional do lago Luruaco | 58 |
| 5.4 | Malha computacional do lago Luruaco. | 59 |
| 5.5 | Representação de uma parte da malha computacional. | 61 |
| 5.6 | Representação do contorno dos blocos em coordenadas generalizadas. | 62 |
| 6.1 | Campo de velocidades nos tempos $t = 0.5h, 4h, 8h, 12h, 20h, 24h$ | 66 |
| 6.2 | Campo de velocidades no tempo $t = 72h$ | 66 |
| 6.3 | Simulações de injeção contínua de coliformes fecais através do afluente riacho Limón. | 68 |
| 6.4 | Simulações de injeção contínua de coliformes fecais a partir do afluente riacho Negro. | 69 |
| 6.5 | Simulações de injeção de coliformes fecais no afluente riacho Mateo nos tempos $t = 8h, 16h, 24h$ | 70 |
| 6.6 | Simulações de injeção contínua de coliformes fecais a partir dos riachos Limón, Negro e Mateo. | 71 |
| 6.7 | Simulações de injeção contínua de coliformes fecais a partir dos riachos Limón, Negro e Mateo para a proposta de manejo de esgoto. | 72 |
| A.1 | Volume de controle em um sistema de coordenadas cartesianas. Fonte: Autor. | 76 |

LISTA DE TABELAS

| | | |
|-----|--|----|
| 2.1 | Parâmetros de qualidade da água. Fonte: Adaptado de <i>Estudo nacional del agua</i> , Bogotá, 2014. | 27 |
| 4.1 | Notação e denominação dos termos das equações (4.1)-(4.3) e (4.4) para discretização por diferenças finitas. | 47 |
| 5.1 | Coordenadas dos $n + 1$ pontos da borda da malha. | 55 |

1 INTRODUÇÃO

A escassez dos recursos hídricos é um assunto bastante discutido atualmente, não só do ponto de vista ambiental, mas também como um problema social que envolve as formas de administração e utilização da água pela sociedade. A oferta de água para o consumo humano vem diminuindo ao longo do tempo, principalmente por conta da poluição e a utilização incorreta desses recursos. O problema da poluição hídrica afeta diretamente cerca de 2 bilhões de pessoas no mundo, principalmente nas regiões em que não há conscientização da população (governo e moradores) [28]. Lagos e rios que estão mais próximos às zonas urbanas são mais susceptíveis à poluição, pois estão mais expostos às contaminações devido aos despejos ilegais de esgoto e substâncias tóxicas. Os efeitos da poluição em um corpo d'água podem ser observados através de alterações em sua composição, aparência e na qualidade da água. Suas consequências atingem principalmente os que dependem do corpo d'água para se desenvolver, como organismos aquáticos e comunidades que utilizam a água para o consumo.

Nesse contexto, estudar a dinâmica dos poluentes tem sido uma importante forma de analisar a qualidade da água. Por meio desse estudo, é possível determinar os níveis e as regiões afetadas pela contaminação, para que órgãos ambientais responsáveis possam desenvolver estratégias de controle ou redução nos impactos ambientais causados pelos poluentes.

Para que este estudo seja realizado, é importante conhecer as características, causas, efeitos e agentes poluidores que influenciam toda a dinâmica de distribuição dos contaminantes no sistema aquático. A partir dessas informações é possível determinar um modelo matemático que melhor se ajusta ao problema. A modelagem matemática expressa a dinâmica através de equações, porém quanto mais complexas são, maiores são as dificuldades em determinar a sua solução. Nesses casos, os pesquisadores recorrem a métodos físicos ou numéricos para obter as soluções da modelagem matemática. Os modelos físicos são baseados em protótipos que reproduzem o problema seguindo as características da modelagem matemática, mas em escala reduzida. Como a construção dos protótipos envolve mão de obra e custos elevados, o modelo numérico é a alternativa mais vantajosa encontrada pelos pesquisadores, por não exigir tantos custos na execução. Atualmente, os modelos numéricos podem resolver uma variedade de modelos matemáticos obtendo soluções bem próximas às reais.

Historicamente, o primeiro modelo de qualidade da água foi desenvolvido em 1925 por Streeter-Phelps [53]. Esse modelo baseava-se na concentração da Demanda Bioquímica de Oxigênio (DBO) e no Oxigênio Dissolvido (OD). Com a necessidade cada vez maior em realizar pesquisas sobre a poluição hídrica e aliado aos avanços na tecnologia, outros modelos foram desenvolvidos, alguns fundamentados em teorias e outros em dados estatísticos [45]. Só em 1946, o modelo criado por Sawyer [49] uniu essas duas vertentes, podendo assim desenvolver modelos mais elaborados e específicos, que agregavam mais informações à respeito dos processos biológicos que envolviam o problema. Mas só a partir do ano 2000 que o desen-

volvimento de modelos matemáticos e computacionais para problemas ambientais teve grande avanço. Novas técnicas numéricas para a resolução desses modelos foram criadas, como o uso do método *upwind*, aproximações numéricas, computação paralela, entre outros, tornando os modelos cada vez mais complexos [4, 41].

1.1 JUSTIFICATIVA

A América do Sul é uma das regiões que possui maior disponibilidade de água potável do mundo [46], porém ainda sofre com problemas envolvendo a gestão de recursos hídricos tanto em corpos d'água como em fontes subterrâneas. Cada país pode determinar normas próprias para a qualidade e consumo da água, baseando-se nos guias de qualidade de água potável da Organização Mundial da Saúde (OMS) que pode sofrer adaptações dependendo das características da região. Em 2004, a OMS publicou um guia de qualidade de água [57] incluindo avaliações e gestões de riscos, criação de planos de segurança da água e as responsabilidades de cada órgão na prestação desse serviço. Em publicações seguintes, a OMS estabelece estratégias relacionadas a saúde e qualidade da água para os anos de 2013 à 2020. Dentro das considerações do guia, a OMS enfatiza que os agentes microbianos (coliformes totais e fecais) são um problema de saúde pública e uma preocupação para os países pobres ou com problemas de estrutura populacional ou com problemas climáticos [33].

A poluição em corpos d'água é um problema presente em diversos países. O Brasil é um exemplo de país que apesar de possuir abundância em recursos hídricos, ainda passa por problemas de coleta, tratamento e distribuição da água. Amparado por meios legais, o governo estabelece critérios e limites para a qualidade e o uso dos recursos hídricos. A Política Nacional de Recursos Hídricos, regida pela Lei nº 9.433/97 traz definições e normas que permitem um melhor gerenciamento da água. Além disso, a resolução do Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) nº 357/05, enquadra os tipos de corpos d'água e determina padrões de lançamento de agentes poluentes na água [26].

A Colômbia, país onde está localizado o corpo d'água analisado nesse trabalho, também possui grande disponibilidade de recursos hídricos [10]. De acordo com o *Estudo Nacional del Agua (ENA)* [32], a oferta de água no país é relativamente seis vezes superior à oferta de água mundial, e três vezes superior em relação à América Latina. Contudo, segundo o *Departamento Administrativo Nacional de Estadística (DANE)*, cerca de 58,8% da população (26.7 milhões de habitantes) consome água potável, 13.9% (6.3 milhões de habitantes) utiliza água segura, cerca de 19.1% (8.7 milhões de habitantes) utiliza água de baixo tratamento e proteção e 8,1% (3.7 milhões de habitantes) se serve de água tomada diretamente das fontes. Esses dados mostram que a qualidade da água ainda é um problema que deve ser discutido na Colômbia. A Resolução nº 2115/ 2007 do *Ministerio de Salud e Protección Social* e do *Ministerio de Ambiente y Desarrollo Sostenible* da Colômbia aborda as características físico químicas e microbiológicas que os corpos d'água devem cumprir para consumo humano, ajustando os valores

admissíveis de acordo com os requerimentos da OMS. Já a Resolução nº 0811/ 2008 orienta a definição de critérios para a vigilância da qualidade da água, de forma que haja uma regulamentação nas coletas para a verificação do controle de qualidade. Outras normas orientam sobre a utilização de índices de qualidade da água e as instituições responsáveis por avaliar os recursos hídricos no país [5].

O corpo d'água analisado neste estudo é o lago Luruaco, localizado ao norte da Colômbia. A troca de informações entre experiências ocorridas no Brasil e na Colômbia que possuem algumas características físicas diferentes, amplia o conhecimento sobre os problemas e as técnicas utilizadas, servindo como base na busca de soluções para esse e outros problemas envolvendo recursos hídricos.

O lago Luruaco está localizado no departamento de Atlântico-Colômbia, ocupando uma região de cerca de 420 hectares. Esse lago depende de riachos ou canais menores para ser abastecido e é um exemplo de corpo d'água que sofre diretamente com o problema da poluição. A água do lago é utilizada em atividades como agricultura, pecuária, pesca, turismo e consumo. Além disso, quase às margens do lago, está situado o Município de Luruaco, que possui cerca de 28000 habitantes que vivem de atividades ligadas à agricultura e ao comércio [38]. A população depende diretamente do lago, que utiliza a água para atividades domésticas e também a usa como principal fonte para consumo.

As atividades humanas trazem consequências sobre o lago Luruaco, ocasionadas principalmente pela poluição decorrente da cidade e do uso inadequado de suas águas. Os problemas vão desde o despejo de lixo doméstico e resíduos sólidos da população do município de Luruaco, até problemas administrativos, como a falta de um plano de manejo pesqueiro, turístico e principalmente a ausência de educação ambiental comunitária.

As práticas inadequadas das atividades agrícolas e pecuárias, como o desmatamento das matas ciliares e as queimadas tornam o solo pobre em nutrientes e mais exposto aos efeitos da erosão, levando resíduos (lama, esterco e agrotóxicos) diretamente para o lago em dias de chuva. Sem a vegetação costeira, o solo não tem tempo de absorver a umidade fazendo com que o lago sofra transbordamentos. Quando as chuvas cessam o problema se reverte, e no lugar do excesso de águas há o acúmulo de sedimentos nas margens do lago. A quantidade chega a ser tão grande que se pode notar a diminuição da extensão do lago [38].

Mas o principal risco está no despejo e na falta de tratamento do esgoto do município de Luruaco. O lixo doméstico gerado nas cerca de 5000 construções na região urbana contribui para a poluição com matéria orgânica. O esgoto despejado nas águas do lago se mistura com os resíduos produzidos pela agricultura e são injetados através dos riachos e canais que abastecem o lago Luruaco. Além disso, o esterco produzido nas atividades pecuárias, que vertem no lago através da chuva e dos efeitos do desmatamento também trazem um grande risco ao meio ambiente e à população que utiliza essas águas. Os despejos de matéria orgânica alteram a composição física e química da água, e em algumas situações a tornam imprópria para o consumo. As consequências da poluição se refletem também nas atividades que dependem das

águas do lago, como a pesca e a preservação da fauna e flora da região. Os organismos aquáticos e as matas sofrem com a contaminação, que altera o habitat natural e compromete desenvolvimento das espécies típicas da região principalmente devido ao uso abusivo de agrotóxicos e pesticidas nas lavouras próximas.

A população do município de Luruaco conta com serviços públicos de energia elétrica, gás e água encanada, porém os serviços de saneamento básico são ainda pouco desenvolvidos. Por essa razão a população utiliza o lago, riachos e canais mais próximos para o despejo do lixo e esgoto. Esse comportamento é fruto da falta de organização da administração pública e também da falta de conscientização e educação ambiental por parte dos moradores da região que sofrem diretamente as consequências desse hábito. A presença de impurezas, algumas vezes imperceptíveis a olho nu, pode trazer riscos à saúde, contendo por exemplo, vírus, protozoários, bactérias, elementos radioativos, entre outros, que podem contaminar aqueles que fazem o uso da água, podendo afetar diretamente a saúde de uma comunidade. De acordo com levantamentos realizados no ano de 2012 [54], algumas das enfermidades mais comuns que afetam a população do município de Luruaco são infecções e casos de diarreia aguda, atingindo principalmente as crianças. Logo, estudar o problema da poluição no lago se torna também um problema de saúde pública e de interesse da comunidade.

Nesse contexto, a análise da qualidade da água em um corpo d'água é de grande importância. Em tal análise são avaliados os níveis de concentração de alguns parâmetros (físicos, químicos ou microbiológicos) específicos da água. A *Corporación Autónoma Regional del Atlántico* é uma das instituições que realiza pesquisas sobre a qualidade da água e meio ambiente na região do lago Luruaco, fornecendo informações com os dados coletados.

Porém, para que uma análise de qualidade da água forneça resultados mais precisos, é necessário um grande número de amostras coletadas e análises laboratoriais por todo o lago. Na prática, esses processos exigem grandes investimentos financeiros. Uma das saídas viáveis para contornar essa situação é utilizar os modelos matemáticos e simulações computacionais para estudar a dinâmica dos poluentes nos corpos d'água. Além de trazer resultados consistentes devido aos métodos numéricos/ computacionais utilizados, não exigem grandes quantidades de amostras e análises, o que pode reduzir os gastos com as pesquisas.

Além disso, para descrever uma situação real através de um modelo matemático, as características do problema devem estar contidas em sua modelagem, mais especificamente em seu domínio, nas condições iniciais e de contorno e em suas equações dinâmicas. Quanto mais informações são incluídas, os resultados poderão ser mais próximos da realidade.

1.2 OBJETIVOS

O objetivo deste trabalho é propor uma modelagem para a dinâmica dos coliformes fecais no lago Luruaco utilizando um modelo numérico bidimensional horizontal (2DH). Através desse estudo é possível realizar uma análise qualitativa dos resultados obtidos, indi-

cando por exemplo, quais regiões apresentam maior contaminação, de modo que as informações possam ser utilizadas pela população/governo a fim de desenvolver estratégias de melhoramento da qualidade da água na região.

Para isso é necessário entender a natureza do problema, as suas causas (as fontes de poluição), os efeitos (as áreas afetadas pela poluição) e também os possíveis agentes que podem interferir na dinâmica. Além disso, para se obter o domínio computacional, também chamado de malha computacional, é necessário estudar as características do domínio real do problema (a região em que o modelo será calculado).

No contorno da geometria do lago são indicados as entradas e saídas de água, que alteram a trajetória da água no lago. Do ponto de vista computacional, essa construção pode ser realizada através da interpolação de pontos coletados na borda do lago. A técnica utilizada nesse estudo, conhecida como *spline* cúbica, interpola os pontos através de polinômios de grau três. Esse método foi escolhido por melhor se ajustar aos contornos irregulares do lago Luruaco.

A modelagem matemática utilizada para a dinâmica de coliformes fecais é baseada nas propriedades da mecânica dos fluidos. Nessa modelagem considera-se que as propriedades de transporte dos coliformes fecais são similares às dos compostos dissolvidos no meio aquático, apresentando assim a mesma velocidade de escoamento da água do lago. O campo de velocidades é obtido a partir de um modelo hidrodinâmico que considera as equações de Navier-Stokes e a equação da continuidade. Assim, a dinâmica de coliformes fecais é modelada matematicamente pela equação de transporte, levando em consideração as propriedades reativas (propriedade dos coliformes fecais), convectivas (movimento do fluido com um campo de velocidades) e difusivas (propriedade de se homogeneizar a concentração da substância com o fluido). O meio utilizado para determinar a solução do modelo matemático da dinâmica de coliformes fecais é a modelagem numérica, determinando assim soluções aproximadas que são garantidas pela eficácia do método utilizado.

As equações hidrodinâmicas e de transporte de coliformes fecais devem satisfazer as condições iniciais e de contorno definidas na modelagem do seu domínio. A escolha do sistema de coordenadas pode afetar o desenvolvimento do método numérico. Por exemplo, neste estudo o uso das coordenadas cartesianas exige mais cálculos computacionais devido a complexidade da geometria do lago. Uma das saídas para contornar esse problema é utilizar coordenadas que melhor se ajustam à geometria do lago, como as coordenadas generalizadas.

A representação do domínio físico do lago é feita em uma malha bidimensional horizontal (2DH) do tipo uniforme e estruturada, isto é, há uniformidade e regularidade na disposição dos pontos, o que facilita os cálculos computacionais. A geração da malha é feita a partir do método multibloco. Esse método consiste em dividir o domínio completo do lago em blocos de malhas menores, de modo que os blocos vizinhos se relacionem, transmitindo informações um para o outro, descrevendo assim toda a extensão do domínio. Matematicamente, a face do bloco adjacente a outro fornece as condições de contorno para o próximo bloco, de modo que o modelo matemático calculado em um bloco passa informações para o bloco se-

guinte. A justificativa de usar esse método se encontra no fato da geometria possuir curvas irregulares, "bicos" e "prolongamentos". Com o método multibloco é possível detalhar regiões específicas através de refinamentos (inclusão de linhas) sem exigir o refinamento do domínio inteiro e assim evitando esforços computacionais desnecessários.

Com a construção da malha obtém-se um conjunto finito de pontos nos quais são aplicadas as equações hidrodinâmicas e de transporte. O método utilizado para a discretização dessas equações no trabalho é o de diferenças finitas, o qual aproxima as derivadas a partir de valores próximos ao ponto em que se deseja calcular. Esse método tem a vantagem de não exigir grande esforço computacional e obter resultados próximos do real. Para que as simulações computacionais do modelo de concentração de coliformes fecais sejam realizadas, o campo de velocidades resultante do modelo hidrodinâmico é obtido através do método *Mark and Cell (MAC)*, que determina uma equação para a pressão a partir das equações de Navier-Stokes e da equação de conservação de massa.

Por fim, as simulações do modelo de concentração de coliformes fecais levam em consideração o despejo de uma carga de coliformes fecais através das entradas do lago, analisado em um período de 72 horas, período em que as simulações apresentam características de regime estacionário. Quatro cenários serão analisados, incluindo a influência dos afluentes sobre o lago, simulando a injeção de coliformes fecais a partir de cada afluente individualmente, e também analisando a dinâmica dos coliformes fecais quando há a entrada de poluentes através de todas as suas entradas. Essa análise pode servir como indicativo das regiões com maior índice de contaminação de origem fecal.

A dissertação está organizada da seguinte maneira:

- No capítulo 2 descreve-se as características físicas do lago Luruaco, com informações à respeito da localização, temperatura, principais afluentes e efluentes. Além disso, também são apresentadas as características dos coliformes fecais e parâmetro de qualidade da água utilizado nesse estudo.
- No capítulo 3 apresenta-se um modelo hidrodinâmico, baseado nas equações de Navier-Stokes e da continuidade. Já o modelo de concentração de coliformes fecais é obtido através de uma equação de transporte convectivo-difusivo-reativo, levando em consideração o campo de velocidades gerado no modelo hidrodinâmico. Além disso, por conta da utilização de coordenadas generalizadas, as equações modeladas em coordenadas cartesianas serão transformadas em coordenadas generalizadas.
- No capítulo 4 descreve-se o método *Mark and cell (MAC)* utilizado para determinar a solução numérica do modelo hidrodinâmico.
- No capítulo 5 realiza-se a construção da malha computacional do lago Luruaco, utilizando o método *spline* cúbico parametrizado e o método multibloco. Realizando também um

estudo sobre a geometria para que as características do lago sejam consideradas durante a simulação computacional.

- No capítulo 6 as simulações computacionais de alguns cenários para o modelo hidrodinâmico são realizadas. Inicialmente, é considerada a entrada de coliformes fecais através de seus afluentes, os riachos Limón, Mateo e Negro separadamente, para analisar a influência de cada afluente sobre a dinâmica do lago. Em seguida, a simulação com a injeção de coliformes fecais através dos três afluentes simultaneamente, indica quais regiões podem apresentar maior contaminação. Através da análise das simulações é possível apresentar uma sugestão de manejo de esgoto e assim, obter regiões do lago para captação de água com menor risco de contaminação.

1.3 APRESENTAÇÃO EM EVENTOS E PUBLICAÇÕES

- SAITA, T.M., NATTI, P.L., CIRILO, E.R., ROMEIRO N.M.L. Modelo em coordenadas generalizadas para o fluxo de água no lago Luruaco, Colômbia. (36º Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional), Gramado, 05-09 de setembro / 2016.
- SAITA, T.M., NATTI, P.L., CIRILO, E.R., ROMEIRO N.M.L. Simulação numérica da dinâmica de coliformes fecais no lago Luruaco, Colômbia. (artigo submetido na revista TEMA -Tendências em Matemática Aplicada), novembro / 2016.

2 O LAGO LURUACO

Corpos de água como lagos e rios podem assumir um papel importante para a região em que estão localizados, influenciando diretamente o ambiente e a rotina dos moradores. No caso do lago Luruaco, devido à utilização de suas águas para o abastecimento da população, faz-se necessário o estudo e monitoramento da qualidade da água. Nesse contexto, a presente seção é dedicada ao estudo das características do lago Luruaco.

2.1 LOCALIZAÇÃO GEOGRÁFICA

O lago Luruaco está localizado na Colômbia, país situado no extremo norte da América do Sul. A divisão territorial da Colômbia é formada a partir de 32 departamentos que se subdividem em 1008 municípios [44]. O lago Luruaco pertence ao Departamento do Atlântico (Figura 2.1), situado na região do Caribe colombiano, mais precisamente entre as coordenadas $10^{\circ} 16'$ e $11^{\circ} 04'$ de latitude norte e entre $74^{\circ} 43'$ e $75^{\circ} 16'$ de longitude oeste [17].

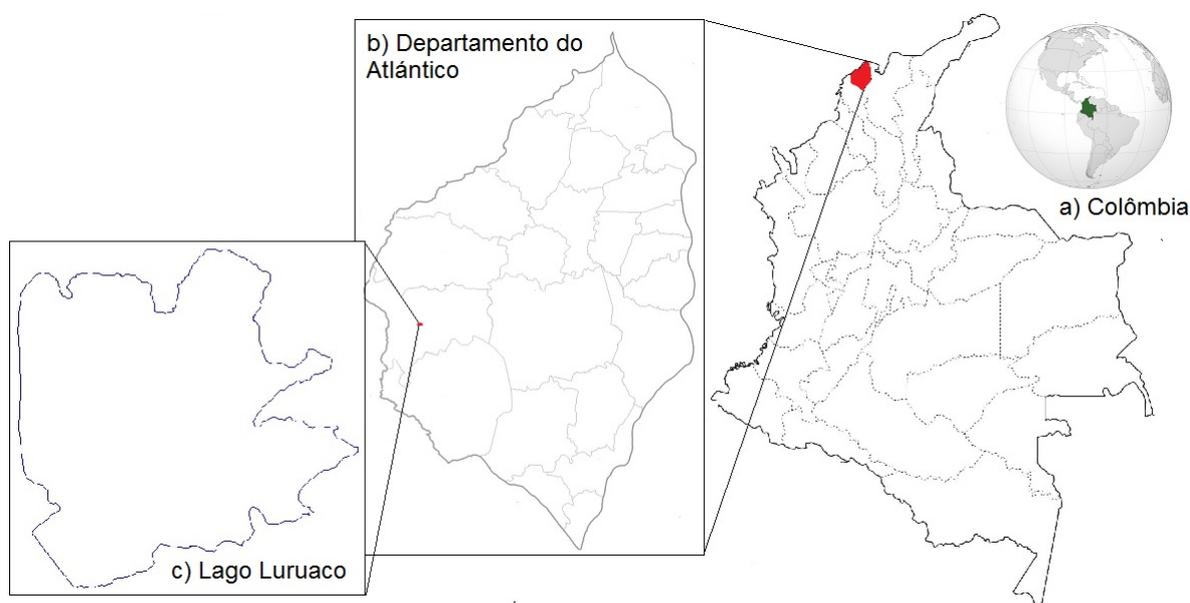


Figura 2.1: Localização da região de estudo: (a) América do Sul, Colômbia. (b) Departamento do Atlântico. (c) Lago Luruaco. Fonte: Autor.

O lago ocupa uma área total de 420 hectares e está a 31 metros de altitude em relação ao nível do mar. Em geral, o lago tem profundidade em torno de 5 metros e estima-se que a capacidade de armazenamento de água seja de $12,5 \times 10^6 \text{ m}^3$ [54].

A bacia do Canal del Dique, ao qual o lago Luruaco pertence, está situada ao sul no Departamento do Atlântico. A região em torno da bacia tem uma topografia suave,

contendo zonas montanhosas e planas [38].

2.2 AFLUENTES E EFLUENTE

O lago Luruaco é um corpo d'água que depende diretamente de riachos menores para garantir a renovação das águas. Os principais riachos que abastecem o lago Luruaco são: riacho Limón, riacho Mateo e riacho Negro [16]. Além disso, existe um córrego que comunica os lagos de Luruaco e de San Juan de Tocagua. Devido a diferença de altura em relação ao nível do mar, o lago de San Juan de Tocagua recebe o efluente do lago Luruaco pois está em altitude mais baixa. A Figura 2.2 mostra a localização das principais entradas e saída do lago Luruaco.



Figura 2.2: Lago Luruaco. Fonte: Adaptado de Google Earth, 2016.

As ligações entre os riachos Limón, Negro e o lago de San Juan de Tocagua com o lago Luruaco são feitas por meio de canalizações. O canal do riacho Negro tem cerca de 20 metros de largura, enquanto o riacho Limón tem cerca de 15 metros. O riacho Mateo ainda

não está canalizado e tem cerca de 8 metros de largura. Já o canal que liga San Juan de Tocagua ao lago Luruaco possui cerca de 6 metros de largura.

2.3 FATORES EXTERNOS

A região do Departamento do Atlântico, onde o lago Luruaco está situado recebe maior influência dos ventos que sopram do nordeste para o sudoeste. Em geral, a velocidade média dos ventos na superfície do lago variam de 15 a 20 km/h.

O regime de precipitação, sem a influência de fenômenos climáticos não é bem distribuído, com períodos de chuva entre maio e junho, e entre agosto a novembro, alternados com períodos secos [54]. A precipitação aumenta de norte a sul assim como a umidade, devido a evaporação da água e a direção e intensidade dos ventos. Como está situado a noroeste da Colômbia, o lago Luruaco tem influências do clima tropical, apresentando características predominantemente quentes durante o ano e temperaturas anuais variando de 24°C a 28°C [17].

O modelo desenvolvido neste estudo, leva em consideração um período sem variações de temperatura e precipitação, com temperatura média de 24° e ventos à 15 km/h.

Existem situações que podem alterar o escoamento e conseqüentemente, modificar a dinâmica dos coliformes fecais na superfície do lago. Tais condições podem ser incluídas em futuras modelagens para o lago Luruaco, apresentando simulações para condições adversas. Por exemplo, o regime de ventos e precipitações podem ser intensificados pela presença de fenômenos climáticos tais como o *El Niño* e a *La Niña*. Seus efeitos podem ser sentidos dependendo das características e localização de cada região. Em particular, a região da Colômbia onde o lago Luruaco está localizado possui características de estiagem durante a ocorrência do fenômeno *El Niño* e o excesso de chuvas sob a ocorrência do fenômeno *La Niña* [2]. As conseqüências podem ser nitidamente observadas, uma vez que o abastecimento do lago depende de riachos menores. Durante as épocas de seca (sob influência do *El Niño*) esses sistemas secam, interrompendo o fornecimento de água e chegando até a diminuir o nível do lago. Já na ocorrência do fenômeno *La Niña* se observam efeitos contrários ao do *El Niño*, com a presença de índices pluviométricos acima do normal, os riachos e canais que servem o lago Luruaco se enchem novamente [54].

A interação do homem com o meio ambiente também pode modificar características naturais. A presença do lago Luruaco contribui para a diversidade biológica e permite manter a fauna e a flora da região. Essas características proporcionam benefícios econômicos, sendo favoráveis para práticas de agricultura, pastoreio e a mineração, assim como alternativas de recreação e turismo. Porém, algumas dessas atividades trazem impactos para a qualidade da água do lago. Por exemplo, o aumento de áreas ribeiras desmatadas e do assoreamento do lago é uma das causas do déficit hídrico. Além disso, tornam o solo desnutrido e exposto aos efeitos da erosão, também aumentando o efeito dos ventos e das chuvas [17].

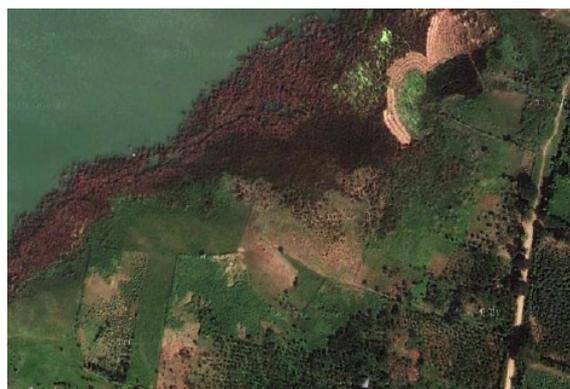
A pecuária também participa nos impactos ambientais, a região em torno do

lago Luruaco tem aproximadamente 9200 hectares utilizados para a pecuária, com cerca de 5000 cabeças de gado [54]. Essa atividade modifica completamente a paisagem da região, que agora possui grandes prados sem árvores, causando fortes processos de erosão e afetando a qualidade da água do lago.

Alguns desses fatores que alteram a qualidade da água podem ser vistos na Figura (2.3)



(a) Pontos de entrada de águas residuais vindas do Município de Luruaco



(b) Regiões com ausência de mata ciliar

Figura 2.3: Alguns fatores externos que alteram a qualidade da água no lago Luruaco. Fonte: Diagnóstico ambiental y estrategias de rehabilitación de la Ciénega de Luruaco, Atlántico, Barranquilla, 2012.

Dentre as fontes de poluição que podem alterar a qualidade da água, o município de Luruaco contribui diretamente para esse problema. Um dos principais riachos que abastece o lago Luruaco, o riacho Limón passa pelo município e por ele são injetados esgotos domésticos e outros tipos de rejeitos da cidade.

O município de Luruaco começou a ser desenvolvido a partir do ano de 1533 e recebeu o *status* de município em 1960. Cerca de 13000 habitantes residem na área urbana do município de Luruaco, que possui a economia baseada em atividades agrícolas, pecuárias e no comércio. O serviço de abastecimento de água abrange cerca de 99% da população, ou seja, aproximadamente 5000 residências, onde a principal fonte de água utilizada é o lago Luruaco. Contudo, a poluição dos riachos e do lago Luruaco estão comprometendo a qualidade da água para consumo da população.

Apenas cerca de 40% da população conta com um sistema de saneamento básico, enquanto as cerca de 3000 habitações que ainda não contam com esse sistema acabam por despejar o esgoto e resíduos diretamente em riachos ou no lago Luruaco. A contaminação por esgoto doméstico, indicada pela presença de substâncias de origem fecal, trás riscos para todos que consomem a água, principalmente pela contaminação por microrganismos patogênicos (causadores de doenças), que podem ser relacionados aos diversos casos de infecções no sistema digestivo principalmente em crianças. A Figura (2.4) evidencia a presença de esgoto e lixo doméstico no lago Luruaco.

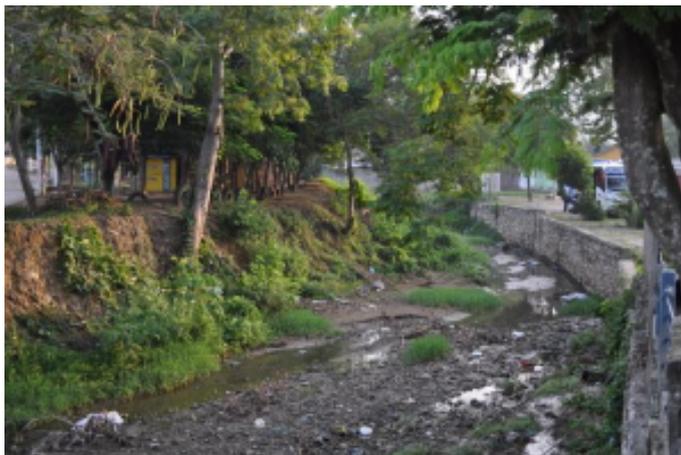


Figura 2.4: Resíduos do Município de Luruaco são despejados no lago. Fonte: Diagnóstico ambiental y estrategias de rehabilitación de la Ciénega de Luruaco, Atlántico, Barranquilla, 2012.

2.4 COLIFORMES FECAIS

A análise da qualidade da água pode detectar a presença de microrganismos patogênicos, isto é, espécies como bactérias, vírus ou protozoários que transmitem doenças em seres vivos. No caso como o do lago Luruaco em que a água é utilizada para consumo humano, a análise se torna mais relevante pois algumas das contaminações por doenças são ocorridas através da ingestão direta ou de alimentos que tiveram contato com a água infectada.

Contudo, há uma grande variedade de agentes patogênicos que podem estar presentes na água, tornando a análise da qualidade da água complexa e consequentemente aumentando os custos das pesquisas. Uma das maneiras de contornar esse problema é identificar tipos de microrganismos específicos (não patogênicos) que indicam o contato com matérias de origem fecal (humana ou animal), havendo risco de conter agentes patogênicos.

De acordo com [9, 20, 57], um organismo indicador de contaminação apresenta as seguintes características:

- ser de origem fecal;
- apresentar maior resistência que os microrganismos patogênicos aos efeitos adversos do meio ambiente e aos processos de tratamento de água;
- apresentar em maior número que os agentes patogênicos;
- ser de fácil identificação;
- não se reproduzir no meio ambiente;
- não ser patogênico.

Até hoje não foi encontrado um organismo que satisfaça a todos os critérios simultaneamente. Assim as pesquisas são realizadas a partir de organismos que se enquadram na maior parte das condições listadas anteriormente.

No ano de 1855, Theodor Esterich isolou um tipo de bactéria encontrado nas fezes de crianças. A bactéria denominada *Bacterium Coli* está presente no trato intestinal de humanos e animais de sangue quente. Na tentativa de classificar essa bactéria, um novo grupo denominado *coli-aerogenes*, ou "coliformes" foi criado [30].

De acordo com a portaria nº 2115 / 2007 do *Ministério de Ambiente, Vivenda y Desarrollo Ambiental da Colômbia* [39], (baseado em definições gerais estabelecidas pela OMS) as bactérias do grupo *coliformes fecais* são definidas:

Coliformes totais (grupo dos coliformes): bacilos gram-negativos, aeróbicos facultativos, não formadores de esporos, oxidantes negativos, capazes de desenvolver-se na presença de sais biliares ou agentes tensoativos que fermentam a lactose com produção de ácido, gás e aldeído a $35,0 \pm 0,5^{\circ}\text{C}$ em 24-48 horas e que podem apresentar atividade da enzima β -galactosidase.

A maioria das bactérias do grupo coliforme pertencem aos gêneros *Escherichia*, *Citrobacter*, *Klebsiella* e *Enterobacter*, embora vários outros gêneros e espécies pertençam ao grupo.

Os coliformes podem ser eliminados nas fezes em quantidades elevadas ($10^6/g$ – $10^8/g$), porém o grupo dos coliformes também englobam bactérias que não possuem origem fecal, sendo encontradas em águas ricas de nutrientes ou matéria orgânica em decomposição (*Enterobacter cloacae*) ou bactérias que se multiplicam em águas tratadas (*Serratia fonticola*) [57]. Por isso, avaliar a qualidade da água através dos coliformes totais pode fornecer resultados pouco específicos, exigindo análises complementares de outros organismos indicadores. Assim, os coliformes totais são geralmente utilizados para avaliar a qualidade da água já tratada, indicando falhas no processo de tratamento.

Dentro do grupo dos coliformes totais, o subgrupo dos *coliformes fecais* são definidos como: Aeróbicos facultativos, bacilos gram-negativos, bactérias não formadoras de esporos. Capazes de desenvolver-se na presença de sais biliares ou agentes tensoativos que fermentam a lactose com produção de ácido, gás e aldeído a $44 \pm 0,5^{\circ}\text{C}$ em 24-48 horas [39]. Esse subgrupo é formado na maior parte por bactérias que estão presentes no trato digestivo de animais com sangue quente, e apesar do nome, o subgrupo também agrega espécies que não são de origem fecal [6]. As bactérias do tipo *Escherichia*, *Klebsiella*, *Citrobacter* e *Enterobacter* são as espécies mais conhecidas.

Os principais agentes microbiológicos encontrados na água podem ser de origem virológica, bacteriológica ou parasitológica. Dentre elas, as bactérias do grupo coliformes são utilizadas como indicadores da qualidade microbiológica da água para consumo humano e apresentam eficiência nos resultados principalmente quando a análise está relacionada a agentes patogênicos, por isso os padrões de potabilidade usualmente se referem a qualidade bacteriológica da água.

As bactérias coliformes fecais, servem como indicadores de contaminação da água sem tratamento e tem a facilidade de utilizar técnicas laboratoriais sem necessitar de altas tecnologias. Além disso, coliformes fecais em geral não se desenvolvem em sistemas

de distribuição de água [6], também fornecendo credibilidade como indicador de qualidade de água tratada e distribuída. Atualmente o indicador mais utilizado para a qualidade da água para consumo humano é a espécie do subgrupo dos coliformes fecais *Escherichia Coli*.

As técnicas adotadas para quantificar os coliformes na água são baseadas no *Standard Methods for the Examination of Water and Wastewater* publicado pela *American Public Health Association (APHA)*, *American Water Works Association (AWWA)* e *Water Environment Federation* [21]. Os dados de coleta são adquiridos através de levantamentos realizados no lago Luruaco.

A técnica dos tubos múltiplos para a análise de coliformes fecais utiliza diferentes porcentagens da amostras diluídas sucessivamente e injetadas em tubos de ensaio contendo o meio de cultura. Após a incubação, a partir do número de tubos positivos em cada série de diluição é possível estimar o Número Mais Provável (NMP) de organismos em $100ml = 100cm^3$ de amostra. O NMP é uma estimativa baseada em probabilidades estatísticas da densidade média de bactérias presentes na amostra. A precisão do método de tubos múltiplos depende do número de tubos e volumes de amostra utilizados [57].

De acordo com o Decreto nº 475/1998 da Colômbia que regula as atividades relacionadas à qualidade de água potável para o consumo humano no país, utilizando o método de tubos múltiplos é a não presença de coliformes fecais em uma amostra de $100cm^3$.

Além de análises microbiológicas, outros tipos de parâmetros (físico-químicos) podem ser avaliados para a qualidade da água. A Tabela 2.1 indica alguns parâmetros utilizados na análise da qualidade da água.

| Parâmetro | Características |
|------------------------|---|
| Temperatura (°C) | Sofre alterações por efeitos naturais (energia solar) ou causado pelo homem (resfriamento/aquecimento em indústrias). A temperatura pode alterar a velocidade de reações químicas e biológicas. |
| Odor | Indica a presença de substâncias ou reações química / biológicas. Para o consumo humano, o padrão exige que a água seja completamente inodora. |
| Cor | A alteração na coloração da água pode indicar o excesso de matéria orgânica (algas, vegetação) ou de substâncias químicas. |
| Turbidez | A turbidez é considerada a medida do grau de interferência da passagem da luz na água. A alteração da turbidez se dá através do aumento ou diminuição de partículas suspensas na água. |
| Condutividade elétrica | Indica a capacidade da água em transmitir uma corrente elétrica. Em geral, águas poluídas por indústrias tem maior condutividade. |
| pH | O potencial de Hidrogênio (pH) mede a concentração de íons H ⁺ das soluções em relação ao meio ácido ou alcalino. |
| OD | O Oxigênio Dissolvido mede a quantidade de oxigênio que está dissolvido na água. A alteração desse parâmetro influencia nas condições de vida dos organismos aquáticos presentes. |
| DBO | A Demanda Bioquímica de Oxigênio mede o consumo de oxigênio na água, indicando assim a presença de matéria orgânica. |
| Série nitrogenada | O nitrogênio pode ser encontrado nas formas de nitrogênio molecular, nitrogênio orgânico, amônio, nitrito e nitrato. A alteração nos valores de nitrogênio podem alterar a qualidade de vida dos organismos que habitam o corpo de água em estudo |
| Fósforo | O fósforo é um dos nutrientes mais importantes no crescimento de plantas aquáticas. Quando o crescimento é exagerado pode prejudicar o uso da água. |
| Ferro e Manganês | Essas substâncias quando encontradas em níveis baixos não causam grandes danos à saúde, porém podem causar danos estéticos (manchas) ou afetar algumas atividades industriais |
| Micropoluentes | Os metais pesados como cádmio, cobre, chumbo ou também substâncias como agrotóxicos e corantes podem causar intoxicação a quem consome a água contaminada. |

Tabela 2.1: Parâmetros de qualidade da água. Fonte: Adaptado de *Estudo nacional del agua*, Bogotá, 2014.

Na Colômbia existem os índices de qualidade da água (ICAs) e os índices de contaminação (ICOs) que utilizam alguns parâmetros físicos, químicos e microbiológicos como

os indicados na Tabela 2.1 para avaliar a qualidade da água nos corpos d'água utilizados para atividades e consumo humano. No Brasil, a resolução nº 22/86 da CONAMA regulamenta os níveis para cada substância utilizada como parâmetro, dependendo da classificação de uso da água.

3 MODELO MATEMÁTICO

No Capítulo 2 foi apresentada informações sobre características do lago Luruaco e os coliformes fecais que são utilizados como parâmetro de análise da qualidade da água neste estudo. Com o objetivo de avaliar a dinâmica dos coliformes fecais na superfície do lago, neste capítulo apresenta-se uma modelagem numérica que descreva a concentração dos coliformes fecais no lago Luruaco.

Considerando que os coliformes fecais são contaminantes passivos, isto é, possuem a propriedade de escoar na mesma velocidade do fluido, determina-se o campo de velocidades da água no lago Luruaco utilizando um sistema de equações diferenciais parciais bidimensional horizontal, inicialmente em coordenadas cartesianas. A partir desse campo de velocidades pode-se modelar uma equação de que descreva a concentração de coliformes fecais no lago.

Para determinar a solução numérica desse problema, utiliza-se modelagens numéricas que se adequam a malha do lago Luruaco, preservando as características originais da geometria. A escolha das coordenadas de referência do modelo podem influenciar o processo dos cálculos, uma vez que a disposição dos pontos pode exigir maior refinamento da malha. No caso do lago Luruaco, as coordenadas generalizadas se ajustam a geometria do lago (preservam as características do contorno com curvas, "extensões" irregulares e à localização de afluentes e efluentes), transformando o domínio computacional em uma malha ortogonal regular, facilitando os cálculos. Assim o modelo hidrodinâmico, o modelo de concentração de coliformes fecais e a malha são transformados de coordenadas cartesianas para coordenadas generalizadas. A Figura (3.1) ilustra a transformação de coordenadas cartesianas para coordenadas generalizadas

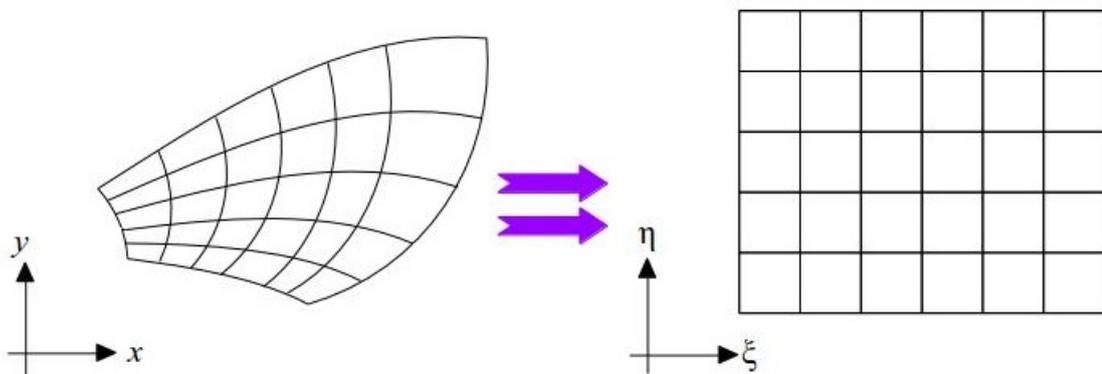


Figura 3.1: Transformação de um domínio em coordenadas cartesianas para coordenadas generalizadas.

3.1 MODELO HIDRODINÂMICO

Para descrever as equações hidrodinâmicas, que modelam o escoamento da água na superfície de um corpo d'água, são consideradas as equações de Navier-Stokes para fluidos newtonianos, incompressíveis e com viscosidade constante. Como o fluido considerado também obedece o princípio da conservação de massa, obtém-se de forma geral no caso tridimensional e em coordenadas cartesianas o sistema

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} = 0, \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{u\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{v\partial(\rho u)}{\partial y} + \frac{w\partial(\rho u)}{\partial z} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho f_1, \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{u\partial(\rho v)}{\partial x} + \frac{v\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{w\partial(\rho v)}{\partial z} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho f_2, \quad (3.3)$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{u\partial(\rho w)}{\partial x} + \frac{v\partial(\rho w)}{\partial y} + \frac{w\partial(\rho w)}{\partial z} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho f_3, \quad (3.4)$$

onde u, v e w são as componentes do vetor velocidade de escoamento do fluido, nas direções x, y e z , respectivamente. Os termos g_x, g_y e g_z são as componentes do vetor aceleração da gravidade, p é a pressão exercida no sistema, ρ e μ denotam a densidade e viscosidade do fluido respectivamente, nesse caso constantes. As componentes f_1, f_2 e f_3 representam outras forças externas aplicadas ao sistema. O desenvolvimento do sistema (3.1)-(3.4) pode ser visto com mais detalhes no Apêndice A.

Nesta modelagem, para estudar o escoamento hidrodinâmico na superfície do lago, utiliza-se um modelo 2DH (bidimensional horizontal), inicialmente em coordenadas cartesianas. Nesse sistema, as componentes u, v da velocidade tem o fluxo nas direções x, y e t . Além disso, considera-se $f_1 = f_2 = 0$. Isso porque durante a maior parte do ano não há grandes variações dos fatores externos que podem alterar a dinâmica do lago. Como o modelo utilizado é horizontal, não são consideradas as forças referentes a gravidade, isto é $g_x = g_y = 0$. Assim, as equações (3.1)-(3.4) podem ser reescritas como

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0, \quad (3.5)$$

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \rho u \frac{\partial u}{\partial x} + \rho v \frac{\partial u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right), \quad (3.6)$$

$$\frac{\partial \rho v}{\partial t} + \rho u \frac{\partial v}{\partial x} + \rho v \frac{\partial v}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} \right). \quad (3.7)$$

O sistema (3.5)-(3.7) em coordenadas cartesianas, modela o escoamento de água na superfície do lago Luruaco.

Para fazer a transformação do modelo hidrodinâmico de coordenadas cartesianas para coordenadas generalizadas (ξ, η, τ) , considera-se a existência de ξ, η e τ tais que

$$\xi = \xi(x, y, t), \quad \eta = \eta(x, y, t), \quad \tau = \tau(x, y, t), \quad (3.8)$$

de modo que admitam a existência de inversas para as funções de ξ e η onde

$$x = x(\xi, \eta) \quad \text{e} \quad y = y(\xi, \eta). \quad (3.9)$$

Além disso, como a malha é do tipo não móvel, não há alteração da geometria em relação ao tempo. Assim, considera-se

$$\tau = \tau(x, y, t) = t. \quad (3.10)$$

As métricas de transformações são dadas por

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = J \frac{\partial y}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial y} = -J \frac{\partial x}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial x} = -J \frac{\partial y}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial y} = J \frac{\partial x}{\partial \xi}, \quad (3.11)$$

onde J é o Jacobiano da transformação, dado por

$$J = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^{-1}. \quad (3.12)$$

A dedução das métricas de transformação estão desenvolvidas no Apêndice B.

A transformação de coordenadas será realizada separadamente para cada equação do modelo hidrodinâmico. A equação (3.5), também conhecida como equação da conservação da massa é dada por

$$\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} = 0. \quad (3.13)$$

Tomando-se $A = \rho u$ e $B = \rho v$, temos que

$$\frac{\partial A}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial y} = 0. \quad (3.14)$$

Como

$$A = A(\xi(x, y, t), \eta(x, y, t), \tau(x, y, t)), \quad B = B(\xi(x, y, t), \eta(x, y, t), \tau(x, y, t)), \quad (3.15)$$

pela regra da cadeia obtém-se

$$\frac{\partial A}{\partial x} = \frac{\partial A}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial A}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x}, \quad (3.16)$$

$$\frac{\partial B}{\partial y} = \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial B}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial y}. \quad (3.17)$$

Como a malha utilizada não é do tipo móvel então $\frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0$. Substituindo (3.16) e (3.17) em (3.14) e multiplicando-se por $\frac{1}{J}$ obtém-se

$$\left(\frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \left(\frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = 0. \quad (3.18)$$

Note que aplicando a regra do produto em (3.18) segue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) &= \frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + A \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \right] \\ \Rightarrow \frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - A \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Aplicando o mesmo raciocínio para a coordenada η na equação (3.18) tem-se

$$\frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) - A \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right]. \quad (3.20)$$

E analogamente para os termos em relação a B da equação (3.18), obtém-se

$$\frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - B \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right], \quad (3.21)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - B \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right]. \quad (3.22)$$

Substituindo as equações (3.19)-(3.22) em (3.18)

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial \xi} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - A \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) - A \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial}{\partial \xi} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - B \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - B \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] = 0, \end{aligned} \quad (3.23)$$

que pode ser reescrito como

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \xi} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} + B \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(A \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} + B \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \\ &= A \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] + B \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

Além disso, utilizando as métricas de transformação (3.11) nos termos em colchetes da equação (3.24) tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) = 0, \quad (3.25)$$

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) = 0. \quad (3.26)$$

Substituindo (3.25)-(3.26) em (3.24), o lado direito da equação (3.24) será nulo, isto é

$$\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{A}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{B}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{A}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{B}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = 0. \quad (3.27)$$

Substituindo os valores de $A = \rho u$ e $B = \rho v$ em (3.27) segue que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\rho u}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\rho v}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\rho u}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\rho v}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = 0 \\ \Rightarrow & \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{1}{J} \left(u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{1}{J} \left(u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] = 0, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde ρ é a constante de densidade do fluido. Definindo

$$U = \frac{1}{J} \left(u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} \right), \quad (3.29)$$

$$V = \frac{1}{J} \left(u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} \right), \quad (3.30)$$

e substituindo U e V em (3.28) obtém-se a expressão

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0. \quad (3.31)$$

A equação (3.31) representa a equação de conservação de massa em coordenadas generalizadas.

Utilizando as métricas de transformação dadas em (3.11) pode-se escrever U

e V em coordenadas generalizadas como

$$U = \frac{1}{J} \left(u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) = \frac{1}{J} \left[u \left(J \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) + v \left(-J \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \right] = u \frac{\partial y}{\partial \eta} - v \frac{\partial x}{\partial \eta}, \quad (3.32)$$

$$V = \frac{1}{J} \left(u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = \frac{1}{J} \left[u \left(-J \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + v \left(J \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \right] = -u \frac{\partial y}{\partial \xi} + v \frac{\partial x}{\partial \xi}. \quad (3.33)$$

Além disso, os termos U e V coincidem com os termos u e v respectivamente quando trabalhados em um sistema ortogonal [35].

A seguir, as equações de Navier-Stokes (3.6)-(3.7) serão transformadas em coordenadas generalizadas. A equação (3.6) é dada por

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + u \frac{\partial \rho u}{\partial x} + v \frac{\partial \rho u}{\partial y} = -\frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} \right). \quad (3.34)$$

Rearranjando os termos de (3.34), obtém-se

$$\frac{\partial \rho u}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\rho u u - \mu \frac{\partial u}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\rho u v - \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right) = -\frac{\partial p}{\partial x}. \quad (3.35)$$

Definindo

$$A = \rho u, \quad B = \rho u u - \mu \frac{\partial u}{\partial x}, \quad C = \left(\rho u v - \mu \frac{\partial u}{\partial y} \right), \quad S^u = -\frac{\partial p}{\partial x}, \quad (3.36)$$

a equação (3.35) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial A}{\partial t} + \frac{\partial B}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} = S^u. \quad (3.37)$$

Análogo a equação de conservação de massa, considerando $\tau(x, y, t) = t$, então

$$\frac{\partial \tau}{\partial t} = 1 \quad \text{e} \quad \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0. \quad (3.38)$$

Além disso, utilizando o fato da malha ser não móvel, tem-se que

$$\frac{\partial \xi}{\partial t} = \frac{\partial \eta}{\partial t} = 0. \quad (3.39)$$

Aplicando a regra da cadeia para cada termo da equação (3.37) segue que

$$\frac{\partial A}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial A}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{\partial A}{\partial \tau}, \quad (3.40)$$

$$\frac{\partial B}{\partial x} = \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (3.41)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (3.42)$$

Substituindo (3.40)-(3.42) em (3.37) e multiplicando por $\frac{1}{J}$ obtém-se

$$\frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \tau} + \left(\frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \left(\frac{1}{J} \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{1}{J} \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = \frac{S^u}{J}. \quad (3.43)$$

Como A , B e C dependem de ξ , η e τ , aplicando a regra do produto para cada termo, segue que

$$\frac{1}{J} \frac{\partial A}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{A}{J} \right) - A \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \tau}, \quad (3.44)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - B \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right), \quad (3.45)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial B}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) - B \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right), \quad (3.46)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(C \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - C \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right), \quad (3.47)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(C \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - C \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right). \quad (3.48)$$

Substituindo as equações de (3.44)-(3.48) em (3.43) tem-se que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{A}{J} \right) - A \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - B \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) - B \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(C \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - C \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(C \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - C \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = \frac{S^u}{J}. \end{aligned} \quad (3.49)$$

Reagrupando os termos de (3.49)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \xi} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} + C \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(B \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} + C \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{A}{J} \right) = A \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{J} \right) \right] + \\ & + B \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] + C \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] + \frac{S^u}{J}. \end{aligned} \quad (3.50)$$

E utilizando as métricas de transformação dadas em (3.11) obtém-se para os termos nos colchetes em (3.50)

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{J} \right) = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) = 0, \quad (3.51)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) &= -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.53)$$

Assim, substituindo as equações (3.51)-(3.53) e os valores de A, B, C, S^u dados em (3.36) na equação (3.50) tem-se

$$\begin{aligned} &\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\rho u}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\left(\frac{\rho u u}{J} - \frac{\mu}{J} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \left(\frac{\rho u v}{J} - \frac{\mu}{J} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\left(\frac{\rho u u}{J} - \frac{\mu}{J} \frac{\partial u}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\rho u v}{J} - \frac{\mu}{J} \frac{\partial u}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right] = -\frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial x} \\ \Rightarrow &\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\rho u}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\rho u}{J} \left(u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - \frac{\mu}{J} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] + \\ &+ \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\rho u}{J} \left(u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - \frac{\mu}{J} \left(\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] = -\frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial x}. \end{aligned} \quad (3.54)$$

Utilizando U e V definidos em (3.29)-(3.30) em (3.54) e reorganizando os termos, obtém-se a expressão

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\rho u}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho u U) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho u V) &= -\frac{1}{J} \frac{\partial p}{\partial x} + \frac{\mu}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right] + \\ &+ \frac{\mu}{J} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (3.55)$$

Agora note que, como u e p dependem de ξ, η e τ . Aplicando a regra da cadeia e usando (3.38)

segue que

$$\frac{\partial u}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (3.56)$$

$$\frac{\partial u}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial y} = \frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (3.57)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}. \quad (3.58)$$

Substituindo (3.56) - (3.58) em (3.55)

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} &= \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ &= \frac{\partial u}{\partial \xi} \left[\left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{\partial u}{\partial \eta} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (3.59)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial u}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} &= \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{\partial u}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial u}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \\ &= \frac{\partial u}{\partial \eta} \left[\left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{\partial u}{\partial \xi} \left(\frac{\partial \xi}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (3.60)$$

$$\frac{\partial p}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = J \left[\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right], \quad (3.61)$$

onde as métricas de transformação dadas em (3.11) são utilizadas na expressão (3.61). Ainda utilizando as métricas, tem-se que

$$\left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 = \left(J \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + \left(-J \frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 = J^2 \left[\left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \right], \quad (3.62)$$

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} = -J^2 \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right), \quad (3.63)$$

$$\left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 = J^2 \left[\left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 \right]. \quad (3.64)$$

Definindo

$$\alpha = \left[\left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \right], \quad (3.65)$$

$$\beta = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right), \quad (3.66)$$

$$\gamma = \left[\left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 \right], \quad (3.67)$$

e substituindo as equações (3.62)-(3.64) na equação (3.55) segue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\rho u}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V u) &= - \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + \frac{\mu}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J^2 \alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - J^2 \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \\ &+ \frac{\mu}{J} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J^2 \gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - J^2 \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right). \end{aligned} \quad (3.68)$$

E por fim simplificando

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\rho u}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U u) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V u) &= - \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right) + \mu \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right) \right. \\ &\left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.69)$$

Logo, a equação (3.6) pode ser expressa em coordenadas generalizadas através de (3.69).

Para a equação (3.7), o mesmo procedimento deve ser realizado, obtendo a equação (3.70) em coordenadas generalizadas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\rho v}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (\rho U v) + \frac{\partial}{\partial \eta} (\rho V v) &= - \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) + \mu \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right) \right. \\ &\left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.70)$$

Logo, o sistema (3.5)-(3.7) pode ser expresso em coordenadas generalizadas como

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta}}_{\text{termos da eq. de cons. de massa}} = 0, \quad (3.71)$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (Uu) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vu)}_{\text{termo convectivo}} = \frac{1}{\rho} \underbrace{\left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)}_{\text{termo de pressão}} + \nu \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right) \right]_{\text{termo difusivo}}, \quad (3.72)$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (Uv) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vv)}_{\text{termo convectivo}} = \frac{1}{J} \underbrace{\left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)}_{\text{termo de pressão}} + \nu \underbrace{\left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right) \right]_{\text{termo difusivo}}, \quad (3.73)$$

Note que os termos das equações (3.71)-(3.73) estão agrupados de acordo com as propriedades: temporal, convectiva, pressão e difusiva. Além de representar propriedades físicas do modelo, cada termo pode ser tratado numericamente através de métodos distintos, como por exemplo o termo convectivo que possui a não linearidade e por isso utiliza uma abordagem específica quando tratado numericamente.

3.2 MODELO DE CONCENTRAÇÃO DE COLIFORMES FECALIS

Em corpos d'água como lagos e rios, denomina-se espécie contaminante reativa a substância contida na água que sofre degradação biológica durante o processo de análise. No caso em que a substância tenha a mesma velocidade de escoamento do fluido, denomina-se a substância como uma espécie contaminante passiva, caso contrário de espécie contaminante ativa [43].

Neste trabalho os coliformes fecais são considerados espécies reativas do tipo contaminante passivo. A equação utilizada para modelar a concentração dos coliformes fecais é baseada em uma equação de transporte convectivo-difusivo-reativo com o mesmo campo de velocidades obtido do sistema (3.5)-(3.7), trabalhando de forma desacoplada da modelagem hidrodinâmica.

Como os coliformes estão presentes na água do lago, também são regidos pelo princípio da conservação de massa. Assim como nas equações hidrodinâmicas, essa lei dita que a variação de massa é igual ao fluxo de entrada menos o fluxo de saída, acrescida da massa obtida de reações entre as espécies (chamadas de reações cinéticas). A equação em

coordenadas cartesianas é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left(\frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} \right) + \sum R_C , \quad (3.74)$$

onde $C = C(x, y, t)$ é a concentração de coliformes fecais, u e v são as componentes da velocidade de escoamento do fluido (os mesmos valores obtidos das equações hidrodinâmicas) e R_C são as reações cinéticas que ocorrem no meio.

Além disso, os coliformes fecais obedecem à propriedade de fluxo difusivo (se transportam no fluido através de difusão). Matematicamente, obtém-se a equação

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left(\frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} \right) + \left(D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) + \sum R_C , \quad (3.75)$$

onde os termos D_x, D_y são os coeficientes de difusão molecular nas direções x e y , respectivamente [25].

Como os coliformes fecais são contaminantes passivos, o campo de velocidades (u, v) é independente da concentração C , assim a equação é linear desde que o termo reativo seja linear.

Nessa modelagem, o termo de reação é dado através da expressão

$$\sum R_C = K C , \quad (3.76)$$

onde K é um parâmetro linear de decaimento de coliformes [40]. Assim, de (3.75) e (3.76), obtém-se

$$\frac{\partial C}{\partial t} = - \left(\frac{\partial u C}{\partial x} + \frac{\partial v C}{\partial y} \right) + \left(D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \right) - K C . \quad (3.77)$$

O modelo transporte e reação (3.77) descreve a concentração de coliforme fecais no lago Luru-aco.

Para realizar a transformação da equação (3.77) em coordenadas generalizadas (ξ, η) utiliza-se o mesmo raciocínio desenvolvido nas equações (3.31), (3.69) e (3.70) do modelo hidrodinâmico em coordenadas generalizadas. Assim, reescrevendo a equação (3.77)

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(u C - D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(v C - D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) = -K C . \quad (3.78)$$

Definindo

$$F = C , \quad G = u C - D_x \frac{\partial C}{\partial x} , \quad H = v C - D_y \frac{\partial C}{\partial y} , \quad S = -K C , \quad (3.79)$$

então a equação (3.78) pode ser reescrita como

$$\frac{\partial F}{\partial t} + \frac{\partial G}{\partial x} + \frac{\partial H}{\partial y} = S . \quad (3.80)$$

Fazendo as mesmas considerações dadas em (3.38)-(3.39) e aplicando a regra da cadeia para cada termo da equação (3.80) segue que

$$\frac{\partial F}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial t} + \frac{\partial F}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial t} = \frac{\partial F}{\partial \tau}, \quad (3.81)$$

$$\frac{\partial G}{\partial x} = \frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (3.82)$$

$$\frac{\partial H}{\partial y} = \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial y} = \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (3.83)$$

Substituindo (3.81)-(3.83) em (3.80) e multiplicando por $\frac{1}{J}$ tem-se que

$$\frac{1}{J} \frac{\partial F}{\partial \tau} + \frac{1}{J} \left(\frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \frac{1}{J} \left(\frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = \frac{S}{J}. \quad (3.84)$$

Além disso, como F, G e H dependem de ξ, η e τ , aplicando a regra do produto da derivação para cada termo da equação (3.84)

$$\frac{1}{J} \frac{\partial F}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{F}{J} \right) - F \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{J} \right), \quad (3.85)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial G}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(G \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - G \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right), \quad (3.86)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial G}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(G \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) - G \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right), \quad (3.87)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial H}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(H \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - H \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right), \quad (3.88)$$

$$\frac{1}{J} \frac{\partial H}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial \eta} \left(H \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - H \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right). \quad (3.89)$$

Substituindo as equações de (3.85)-(3.89) em (3.84), obtém-se a equação

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{F}{J} \right) - F \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(G \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) - G \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(G \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) - G \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + \\ & + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(H \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - H \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(H \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - H \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = \frac{S}{J}, \end{aligned} \quad (3.90)$$

e reagrupando os termos de (3.90)

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \xi} \left(G \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} + H \frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(G \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} + H \frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{F}{J} \right) = F \left[\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{J} \right) \right] + \\ & + G \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] + H \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] + \frac{S}{J}. \end{aligned} \quad (3.91)$$

Utilizando as métricas de transformação (3.11), os termos dentro dos colchetes em (3.91) são dados por

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{1}{J} \right) = \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0, \quad (3.92)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0, \end{aligned} \quad (3.93)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{1}{J} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) &= -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) - \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \\ &= -\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0. \end{aligned} \quad (3.94)$$

Assim, substituindo as equações (3.92)-(3.94) e os valores de F, G, H, S dados em (3.79) na equação (3.91) segue que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\left(\frac{uC}{J} - \frac{D_x C}{J} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \left(\frac{vC}{J} - \frac{D_y \partial C}{J} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\left(\frac{uC}{J} - \frac{D_x \partial C}{J} \frac{\partial C}{\partial x} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \left(\frac{vC}{J} - \frac{D_y \partial C}{J} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right] = -\frac{KC}{J} \\ \Rightarrow & \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{C}{J} \left(u \frac{\partial \xi}{\partial x} + v \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) - \frac{1}{J} \left(\frac{D_x \partial C}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{D_y \partial C}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] + \\ & + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{C}{J} \left(u \frac{\partial \eta}{\partial x} + v \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) - \frac{1}{J} \left(\frac{D_x \partial C}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{D_y \partial C}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] = -\frac{KC}{J}. \end{aligned} \quad (3.95)$$

Utilizando (3.29)-(3.30) em (3.95) tem-se que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (UC) + \frac{\partial}{\partial \eta} (VC) &= -\frac{KC}{J} + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} \left[\frac{D_x \partial C}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{D_y \partial C}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right] + \\ & + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \eta} \left[\frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right]. \end{aligned} \quad (3.96)$$

Além disso, como C depende de ξ, η e τ e como $\frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial \tau}{\partial y} = 0$, aplicando a regra da cadeia

$$\frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (3.97)$$

$$\frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \tau} \frac{\partial \tau}{\partial y} = \frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (3.98)$$

Logo, para os termos dentro dos colchetes na equação (3.96) tem-se

$$\begin{aligned} D_x \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} &= D_x \frac{\partial \xi}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + D_y \frac{\partial \xi}{\partial y} \left(\frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \\ &= \frac{\partial C}{\partial \xi} \left[D_x \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{\partial C}{\partial \eta} \left(D_x \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + D_y \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (3.99)$$

$$\begin{aligned} D_x \frac{\partial C}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + D_y \frac{\partial C}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} &= D_x \frac{\partial \eta}{\partial x} \left(\frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right) + D_y \frac{\partial \eta}{\partial y} \left(\frac{\partial C}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial C}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \\ &= \frac{\partial C}{\partial \eta} \left[D_x \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 \right] + \frac{\partial C}{\partial \xi} \left(D_x \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + D_y \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right), \end{aligned} \quad (3.100)$$

A partir das métricas de transformação dadas em (3.11), obtém-se que

$$D_x \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 = D_x \left(J \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + D_y \left(J \frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 = J^2 \left[D_x \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \right], \quad (3.101)$$

$$D_x \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + D_y \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} = -J^2 \left(D_x \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + D_y \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right), \quad (3.102)$$

$$D_x \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 = J^2 \left[D_x \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 \right]. \quad (3.103)$$

Definindo,

$$\delta = \left[D_x \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 \right], \quad (3.104)$$

$$\kappa = \left(D_x \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + D_y \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right), \quad (3.105)$$

$$\sigma = \left[D_x \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2 + D_y \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 \right], \quad (3.106)$$

Substituindo as equações (3.99) - (3.106) na equação (3.96), segue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} (UC) + \frac{\partial}{\partial \eta} (VC) &= -\frac{KC}{J} + \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J^2 \delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - J^2 \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) + \\ &+ \frac{1}{J} \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J^2 \delta \frac{\partial C}{\partial \eta} - J^2 \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right), \end{aligned} \quad (3.107)$$

ou ainda rearranjando a equação,

$$\begin{aligned} \underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (UC) + \frac{\partial}{\partial \eta} (VC)}_{\text{termo convectivo}} &= - \underbrace{\frac{KC}{J}}_{\text{termo reativo}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \right]}_{\text{termo difusivo}} + \\ &+ \underbrace{\frac{\partial}{\partial \eta} J \left(\sigma \frac{\partial C}{\partial \eta} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right)}_{\text{termo difusivo}}. \end{aligned} \quad (3.108)$$

Assim, a equação (3.108) representa a equação de transporte e reação (3.77) em coordenadas generalizadas. Análogo as equações hidrodinâmicas, os termos podem ser agrupados de acordo com as propriedades: temporal, convectivo, reativo e difusivo.

4 MÉTODO NUMÉRICO

Para que os modelos desenvolvidos em coordenadas generalizadas no Capítulo 3 possam ser simulados computacionalmente, as equações devem ser calculadas em um domínio discreto. Assim, as equações do modelo de concentração de coliformes fecais e do modelo hidrodinâmico também devem ser discretizadas.

O processo de discretização das equações pode ser realizado através de métodos como diferenças finitas, elementos finitos ou volumes finitos [35]. Neste estudo utiliza-se o método de diferenças finitas, que aproxima os termos com derivada das equações por expressões algébricas que dependem de valores localizados próximos do ponto em que se deseja calcular. Maiores informações sobre esse método estão disponíveis no Apêndice D.

A equação de concentração de coliformes fecais discretizada, necessita do campo de velocidades obtido através do modelo hidrodinâmico. Assim, neste trabalho utiliza-se o método *Mark and Cell (MAC)* para gerar o campo de velocidades do escoamento do fluido. O modelo hidrodinâmico formado por três equações e três incógnitas desenvolvido na Seção 3.1 foi resolvido numericamente utilizando o método *Mark and Cell (MAC)* em 1965 por Harlow e Welch, a técnica consiste em determinar uma equação para a pressão p através das equações de Navier-Stokes satisfazendo a propriedade da conservação de massa.

O modelo matemático em coordenadas generalizadas que descreve a dinâmica dos coliformes no lago Luruaco é dado por

Modelo hidrodinâmico:

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta}}_{\text{termos da eq. de cons. de massa}} = 0, \quad (4.1)$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (Uu) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vu)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)}_{\text{termo de pressão}} + \underbrace{\nu \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right) \right]_{\text{termo difusivo}}, \quad (4.2)$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (Uv) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vv)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\frac{1}{J} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)}_{\text{termo de pressão}} + \underbrace{\nu \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right. \\ \left. + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right) \right]_{\text{termo difusivo}}, \quad (4.3)$$

Modelo de concentração de coliformes fecais:

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi}(UC) + \frac{\partial}{\partial \eta}(VC)}_{\text{termo convectivo}} = & \underbrace{\frac{KC}{J}}_{\text{termo reativo}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \right]}_{\text{termo difusivo}} \\
 & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\sigma \frac{\partial C}{\partial \eta} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) \right]}_{\text{termo difusivo}}. \quad (4.4)
 \end{aligned}$$

O processo de discretização das equações (4.1)-(4.3) do modelo hidrodinâmico (desenvolvido na Seção 3.1) e do modelo de concentração de coliformes fecais (4.4) (desenvolvido na Seção 3.2) através do método de diferenças finitas é realizado separadamente em relação aos seus termos (vide Apêndice D) e denominados de acordo com a Tabela (4.1)

| Termos | Notação | Denominação |
|--|--|---|
| $\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta}$ | – | Termo da eq. de conservação de massa (eq. (3.71)) |
| $\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right), \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right), \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right)$ | – | Termos temporais (eq. (3.72), (3.73), (3.108)) |
| $\frac{\partial}{\partial \xi} (Uu) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vu), \frac{\partial}{\partial \xi} (Uv) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vv), \frac{\partial}{\partial \xi} (UC) + \frac{\partial}{\partial \eta} (VC)$ | $\mathcal{C}(u), \mathcal{C}(v), \mathcal{C}(C)$ | Termos convectivos (eq. (3.72), (3.73), (3.108)) |
| $\left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right), \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)$ | $\mathcal{P}^u, \mathcal{P}^v$ | Termos de pressão (eq. (3.72), (3.73)) |
| $\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right),$ $\frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right),$ $\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \right) + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\sigma \frac{\partial C}{\partial \eta} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) \right)$ | $\mathcal{V}(u), \mathcal{V}(v), \mathcal{V}(C)$ | Termos difusivos (eq. (3.72), (3.73), (3.108)) |
| $\frac{KC}{J}$ | $\mathcal{R}(C)$ | Termo reativo (eq. (3.108)) |

Tabela 4.1: Notação e denominação dos termos das equações (4.1)-(4.3) e (4.4) para discretização por diferenças finitas.

De acordo com as notações da Tabela 4.1 o modelo hidrodinâmico (4.1)-(4.3) pode ser reescrito como

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} = 0, \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right) = -\mathcal{C}(u) + \nu \mathcal{V}(u) + \frac{1}{\rho} \mathcal{P}^u, \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right) = -\mathcal{C}(v) + \nu \mathcal{V}(v) + \frac{1}{\rho} \mathcal{P}^v. \quad (4.7)$$

Para determinar o campo de velocidades do fluido (utilizado no termo convectivo), aplica-se o método *Mark and cell (MAC)*, gerando assim uma rotina computacional para obter a solução do modelo hidrodinâmico. Como será desenvolvido a seguir.

Utilizando o método de Euler explícito [24] para a equação (4.6) e aplicando diferenças finitas progressiva no termo temporal em relação a k , obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right) \Big|_e^k &\approx \frac{1}{J_e} \left(\frac{u|_e^{k+1} - u|_e^k}{\Delta \tau} \right) = -\mathcal{C}(u) \Big|_e^k + \nu \mathcal{V}(u) \Big|_e^k + \frac{1}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_e^{k+1} \\ \Rightarrow u|_e^{k+1} &= J_e \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(u) \Big|_e^k + \nu \mathcal{V}(u) \Big|_e^k \right] + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_e^{k+1} + u|_e^k \\ &= F \Big|_e^k + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_e^{k+1}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

com $F \Big|_e^k = J_e \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(u) \Big|_e^k + \nu \mathcal{V}(u) \Big|_e^k \right] + u|_e^k$. Realizando o mesmo procedimento para as faces n , w e s , obtém-se as expressões

$$u \Big|_n^{k+1} = F \Big|_n^k + \frac{J_n \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_n^{k+1} \quad \text{com} \quad F \Big|_n^k = J_n \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(u) \Big|_n^k + \nu \mathcal{V}(u) \Big|_n^k \right] + u|_n^k, \quad (4.9)$$

$$u \Big|_w^{k+1} = F \Big|_w^k + \frac{J_w \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_w^{k+1} \quad \text{com} \quad F \Big|_w^k = J_w \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(u) \Big|_w^k + \nu \mathcal{V}(u) \Big|_w^k \right] + u|_w^k, \quad (4.10)$$

$$u \Big|_s^{k+1} = F \Big|_s^k + \frac{J_s \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_s^{k+1} \quad \text{com} \quad F \Big|_s^k = J_s \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(u) \Big|_s^k + \nu \mathcal{V}(u) \Big|_s^k \right] + u|_s^k. \quad (4.11)$$

Aplicando o mesmo raciocínio na equação (4.7), agora utilizando o método de Euler explícito

na face n tem-se que

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right) \Big|_n^k &\approx \frac{1}{J_n} \left(\frac{v|_n^{k+1} - v|_n^k}{\Delta \tau} \right) = -\mathcal{C}(v) \Big|_n^k + \nu \mathcal{V}(v) \Big|_n^k + \frac{1}{\rho} \mathcal{P}^v \Big|_n^{k+1} + v|_n^k \\ \Rightarrow v \Big|_n^{k+1} &= G \Big|_n^k + \frac{J_n \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^v \Big|_n^{k+1}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

com $G \Big|_n^k = J_n \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(v) \Big|_n^k + \nu \mathcal{V}(v) \Big|_n^k \right] + v|_n^k$. Calculando nas faces s , e e w , respectivamente obtém-se

$$v \Big|_s^{k+1} = G \Big|_s^k + \frac{J_s \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^v \Big|_s^{k+1} \quad \text{com} \quad G \Big|_s^k = J_s \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(v) \Big|_s^k + \nu \mathcal{V}(v) \Big|_s^k \right] + v|_s^k, \quad (4.13)$$

$$v \Big|_e^{k+1} = G \Big|_e^k + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^v \Big|_e^{k+1} \quad \text{com} \quad G \Big|_e^k = J_e \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(v) \Big|_e^k + \nu \mathcal{V}(v) \Big|_e^k \right] + v|_e^k, \quad (4.14)$$

$$v \Big|_w^{k+1} = G \Big|_w^k + \frac{J_w \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^v \Big|_w^{k+1} \quad \text{com} \quad G \Big|_w^k = J_w \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(v) \Big|_w^k + \nu \mathcal{V}(v) \Big|_w^k \right] + v|_w^k. \quad (4.15)$$

Da equação (3.32) segue que

$$U = u \frac{\partial y}{\partial \eta} - v \frac{\partial x}{\partial \eta}, \quad (4.16)$$

Calculando $U \Big|_e^{k+1}$, utilizando (4.8) e (4.14) obtém-se

$$\begin{aligned} U \Big|_e^{k+1} &= \left(F \Big|_e^k + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^u \Big|_e^{k+1} \right) \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e - \left(G \Big|_e^k + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \mathcal{P}^v \Big|_e^{k+1} \right) \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e \\ &= F \Big|_e^k \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e - G \Big|_e^k \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \left(\mathcal{P}^u \Big|_e^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e - \mathcal{P}^v \Big|_e^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e \right), \end{aligned} \quad (4.17)$$

mas note que

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^u \Big|_e^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e - \mathcal{P}^v \Big|_e^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e &= \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \Big|_e^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e - \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \Big|_e^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e \\ &= -\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e^2 + \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e^2 \right) + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_e \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e + \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_e \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} \alpha|_e + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \beta|_e, \end{aligned} \quad (4.18)$$

com α e β definidos em (3.65) e (3.66) segue que

$$U \Big|_e^{k+1} = F \Big|_e^k \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e - G \Big|_e^k \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e + \frac{J_e \Delta \tau}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} \alpha|_e + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \beta|_e \right). \quad (4.19)$$

Com raciocínio análogo obtém-se a seguinte expressão para U na direção w no tempo $k + 1$

$$U \Big|_w^{k+1} = F \Big|_w^k \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_w - G \Big|_w^k \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_w + \frac{J_w \Delta \tau}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_w^{k+1} \alpha|_w + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_w^{k+1} \beta|_w \right). \quad (4.20)$$

Da equação (3.33) segue que

$$V = -u \frac{\partial y}{\partial \xi} + v \frac{\partial x}{\partial \xi}, \quad (4.21)$$

que calculada na direção n

$$V \Big|_n^{k+1} = -F \Big|_n^k \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n + G \Big|_n^k \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n + \frac{J_n \Delta \tau}{\rho} \left(\mathcal{P}^u \Big|_n^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n - \mathcal{P}^v \Big|_n^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n \right). \quad (4.22)$$

Agora note que

$$\begin{aligned} \mathcal{P}^u \Big|_n^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n - \mathcal{P}^v \Big|_n^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n &= - \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \Big|_n^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n + \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \Big|_n^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n \\ &= \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_n + \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_n \right) - \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n^2 + \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n^2 \right) \\ &= -\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} \gamma|_n + \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \beta|_n, \end{aligned} \quad (4.23)$$

com β e γ já determinados em (3.66)-(3.67). Logo substituindo (4.23) em (4.22) tem-se que

$$V \Big|_n^{k+1} = -F \Big|_n^k \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n + G \Big|_n^k \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n + \frac{J_n \Delta \tau}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} \gamma|_n + \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \beta|_n \right). \quad (4.24)$$

Analogamente, obtém-se a expressão para V em s no tempo $k + 1$.

$$V \Big|_s^{k+1} = -F \Big|_s^k \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_s + G \Big|_s^k \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_s + \frac{J_s \Delta \tau}{\rho} \left(-\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_s^{k+1} \gamma|_s + \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_s^{k+1} \beta|_s \right). \quad (4.25)$$

Quanto à equação da continuidade dada em (4.5), aproximando os termos por

diferenças finitas centrais em P no tempo $k + 1$

$$\begin{aligned} \frac{\partial U}{\partial \xi} \Big|_P^{k+1} + \frac{\partial V}{\partial \eta} \Big|_P^{k+1} = 0 &\Rightarrow \frac{U|_e^{k+1} - U|_w^{k+1}}{(\Delta \xi)^2} + \frac{V|_n^{k+1} - V|_s^{k+1}}{(\Delta \eta)^2} = 0 \\ &\Rightarrow U|_e^{k+1} - U|_w^{k+1} + V|_n^{k+1} - V|_s^{k+1} = 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Substituindo (4.19)- (4.20), (4.24)-(4.25) em (4.26) e reagrupando os termos segue que

$$\begin{aligned} &J_e \left(-\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} \alpha|_e + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \beta|_e \right) - J_w \left(-\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_w^{k+1} \alpha|_w + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_w^{k+1} \beta|_w \right) + \\ &+ J_n \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \beta|_n - \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} \gamma|_n \right) - J_s \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_s^{k+1} \beta|_s - \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_s^{k+1} \gamma|_s \right) \\ &= \frac{\rho}{\Delta \tau} \left[-F \Big|_e^k \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e + G \Big|_e^k \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_e + F \Big|_w^k \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_w - G \Big|_w^k \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_w + \right. \\ &\left. + F \Big|_n^k \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_n - G \Big|_n^k \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n - F \Big|_s^k \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_s + G \Big|_s^k \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_s \right]. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Denotando os termos entre colchetes da equação (4.27) como $FG \Big|_e^k$ tem-se que

$$\begin{aligned} &J_e \left(-\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} \alpha|_e + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \beta|_e \right) - J_w \left(-\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_w^{k+1} \alpha|_w + \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_w^{k+1} \beta|_w \right) + \\ &+ J_n \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \beta|_n - \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} \gamma|_n \right) - J_s \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_s^{k+1} \beta|_s - \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_s^{k+1} \gamma|_s \right) = \frac{\rho}{\Delta \tau} FG \Big|_e^k. \end{aligned} \quad (4.28)$$

Assim, obtém-se uma equação para o termo de pressão calculado em $k + 1$ através de outros termos (difusivo e convectivo) calculados no tempo k , ou seja, a partir de dados já obtidos no passo anterior. Uma rotina computacional do *MAC* desenvolvida para o modelo hidrodinâmico utilizado neste trabalho será apresentada no final do capítulo.

O modelo de concentração de coliformes fecais (4.4) na forma discretizada é dado por

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) = -\mathcal{R}(C) - \mathcal{C}(C) + \mathcal{V}(C). \quad (4.29)$$

Note que para a equação (4.29), utilizando o método de Euler explícito e aplicando diferenças finitas progressiva no termo temporal em relação a k , obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) \Big|_P^k &\approx \frac{1}{J_P} \left(\frac{C|_P^{k+1} - C|_P^k}{\Delta \tau} \right) = -\mathcal{R}C \Big|_P^k - \mathcal{C}(C) \Big|_P^k + \mathcal{V}(C) \Big|_P^k \\ \Rightarrow C|_P^{k+1} &= J_P \Delta \tau \left[-\mathcal{C}(C) \Big|_P^k + \mathcal{V}(C) \Big|_P^k - \mathcal{R}(C) \Big|_P^k \right] + C|_P^k, \end{aligned} \quad (4.30)$$

onde P é o centro da célula, onde está armazenado as informações sobre a concentração. Obtendo assim, a equação discretizada para a concentração de coliformes fecais.

Algorithm: algoritmo do método MAC simplificado

Admita $\tau_{final}, \Delta\tau$, $u = u_0, v = v_0, p = p_0, U = U_0, V = V_0, C = C_0, \rho, \mu, \nu, K$.

procedure ALOCAÇÃO DE MEMÓRIA PARA AS VARIÁVEIS

procedure LEITURA DOS PONTOS DA MALHA

procedure CÁLCULO DAS MÉTRICAS DE TRANSFORMAÇÃO

Inicialize $\tau = 0 : 0, k = 0$.

procedure APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES INICIAIS

procedure APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

procedure GRAVAÇÃO = $(u^0, v^0, U^0, V^0, p^0, C^0)$

while $\tau < \tau_{final}$ **do**

procedure CÁLCULO DOS TERMOS CONVECTIVOS =

$(\mathcal{C}(u)|^k; \mathcal{C}(v)|^k; \mathcal{C}(C)|^k)$

procedure CÁLCULO DOS TERMOS DIFUSIVOS =

$(\mathcal{V}(u)|^k; \mathcal{V}(v)|^k)$

atualização $\tau = \tau + \Delta\tau, k = k + 1$

procedure CÁLCULO DA PRESSÃO = $(p|^{k+1})$

procedure CÁLCULO DAS VELOCIDADES = $(u|^{k+1}; v|^{k+1})$

procedure CÁLCULO DA CONCENTRAÇÃO = $(C|^{k+1})$

procedure CÁLCULO DAS COMPONENTES CONTRAVARIANTES =

$(U|^{k+1}; V|^{k+1})$

procedure APLICAÇÃO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

procedure GRAVAÇÃO = $(u^{k+1}, v^{k+1}, U^{k+1}, V^{k+1}, p^{k+1}, C^{k+1})$

end while

5 CONSTRUÇÃO DA MALHA COMPUTACIONAL

O modelo numérico desenvolvido descreve o campo de velocidades de escoamento da água e a concentração de coliformes fecais no lago Luruaco, levando em consideração as características reais do problema, como a geometria do lago, que pode modificar a dinâmica dos coliformes fecais.

A fronteira do domínio computacional, contém informações à respeito das entradas e saídas de água do lago Luruaco e além disso, mantém a presença de curvas e a formação de "bicos" no contorno. Para captar essas características, utiliza-se o *software* online *WebPlotDigitizer* [47], onde a partir de uma imagem ou gráfico são coletadas as coordenadas dos pontos da região analisada. Para essa análise, o contorno do lago Luruaco é formado através de 309 pontos, como disposto na Figura 5.1, que serão interpolados através do método spline cúbico.

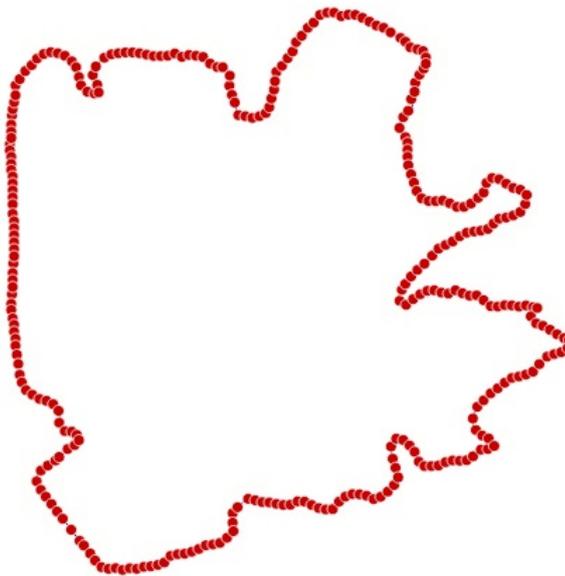


Figura 5.1: Coleta de pontos do contorno do lago Luruaco a partir do software WebPlotDigitizer.

5.1 DISCRETIZAÇÃO DO CONTOURO: MÉTODO SPLINE CÚBICO PARAMETRIZADO

A interpolação de pontos por funções contínuas através de métodos numéricos pode ser feita por exemplo, a partir de funções do tipo polinomial. Um dos métodos, denominado *spline* cúbico utiliza polinômios de terceiro grau. No caso em que os pontos não possuem ordenação em relação às suas coordenadas, o método pode ser aplicado na forma parametrizada [14].

Uma das vantagens do método spline cúbico parametrizado é a geração de

dois polinômios X_i e Y_i (em relação as coordenadas x e y , respectivamente) de grau três para cada subintervalo, garantindo maior detalhamento da região principalmente quando possuem contornos irregulares [8].

Assim, dados $n + 1$ pontos do bordo, a ordenação pode ser realizada através das coordenadas do par (x_i, y_i) , com $i = 1, 2, \dots, n + 1$, obtendo a Tabela 5.1

| | | | | | |
|-----|-------|-------|-----|-------|-----------|
| i | 1 | 2 | ... | n | $n + 1$ |
| x | x_1 | x_2 | ... | x_n | x_{n+1} |
| y | y_1 | y_2 | ... | y_n | y_{n+1} |

Tabela 5.1: Coordenadas dos $n + 1$ pontos da borda da malha.

As funções X_i e Y_i geradas no método spline cúbico parametrizado satisfazem as condições [8]:

i) As funções *spline* cúbicas são denotadas por $X_i(h)$ e $Y_i(h)$ e estão definidas nos intervalos $[x_i, x_{i+1}]$ e $[y_i, y_{i+1}]$ respectivamente, com $i = 1, \dots, n$;

ii)

$$\begin{aligned} X_i(x_i) = x_i & \quad \text{e} \quad X_i(x_{i+1}) = x_{i+1} , \\ Y_i(y_i) = y_i & \quad \text{e} \quad Y_i(y_{i+1}) = y_{i+1} , \end{aligned} \quad (5.1)$$

para todo $i = 1, \dots, n$;

iii)

$$X_{i+1}(x_{i+1}) = X_i(x_{i+1}) \quad \text{e} \quad Y_{i+1}(y_{i+1}) = Y_i(y_{i+1}) , \quad (5.2)$$

para todo $i = 1, \dots, n - 1$;

iv)

$$X'_{i+1}(x_{i+1}) = X'_i(x_{i+1}) \quad \text{e} \quad Y'_{i+1}(y_{i+1}) = Y'_i(y_{i+1}) , \quad (5.3)$$

para todo $i = 1, \dots, n - 1$;

v)

$$X''_{i+1}(x_{i+1}) = X''_i(x_{i+1}) \quad \text{e} \quad Y''_{i+1}(y_{i+1}) = Y''_i(y_{i+1}) , \quad (5.4)$$

para todo $i = 1, \dots, n - 1$.

Além disso, considerando a spline natural como condição de contorno, tem-se que

$$X''(x_1) = X''(x_{n+1}) = 0 \quad \text{e} \quad Y''(y_1) = Y''(y_{n+1}) = 0 . \quad (5.5)$$

Através das condições (i)-(v) e de (5.5) é possível construir polinômios de grau três dados por

$$X_i(x) = m_{0i} + m_{1i}(x - x_i) + m_{2i}(x - x_i)^2 + m_{3i}(x - x_i)^3, \quad (5.6)$$

$$Y_i(y) = n_{0i} + n_{1i}(y - y_i) + n_{2i}(y - y_i)^2 + n_{3i}(y - y_i)^3, \quad (5.7)$$

onde os coeficientes $m_{0i}, m_{1i}, m_{2i}, m_{3i}, n_{0i}, n_{1i}, n_{2i}$ e n_{3i} das equações (5.6)-(5.7) são dados por

$$\begin{aligned} m_{0i} &= x_i, \\ m_{1i} &= x_i - x_{i-1} + \frac{1}{3}g_i^X + \frac{1}{6}g_{i-1}^X, \\ m_{2i} &= \frac{1}{2}g_i^X, \\ m_{3i} &= \frac{1}{6}(g_i^X - g_{i-1}^X), \end{aligned} \quad (5.8)$$

$$\begin{aligned} n_{0i} &= y_i, \\ n_{1i} &= y_i - y_{i-1} + \frac{1}{3}g_i^Y + \frac{1}{6}g_{i-1}^Y, \\ n_{2i} &= \frac{1}{2}g_i^Y, \\ n_{3i} &= \frac{1}{6}(g_i^Y - g_{i-1}^Y), \end{aligned}$$

para $i = 2, \dots, n + 1$.

Os termos $g_i^X, g_i^Y, g_{i-1}^X, g_{i-1}^Y$ são determinados a partir da solução de sistemas $n \times n$ em relação a x e a y , ou seja,

$$g_{k-1}^X + 4g_k^X + g_{k+1}^X = w_k^X, \quad (5.9)$$

$$g_{k-1}^Y + 4g_k^Y + g_{k+1}^Y = w_k^Y, \quad (5.10)$$

com

$$w_k^X = 6(x_{k+1} - 2x_k + x_{k-1}) \quad \text{e} \quad w_k^Y = 6(y_{k+1} - 2y_k + y_{k-1}), \quad (5.11)$$

para $k = 2, \dots, n$. Como a matriz dos coeficientes dos sistemas (5.9)-(5.10) é tridiagonal, utiliza-se o método *TriDiagonal Matrix Algorithm (TDMA)* [15] para determinar a solução dos sistemas (5.9)-(5.10).

5.2 DISCRETIZAÇÃO DA MALHA: MÉTODO MULTIBLOCO

Em alguns casos, quanto maior o refinamento da malha, maior é a precisão dos resultados, porém também será maior o esforço computacional exigido. Através do método multibloco é possível trabalhar com o refinamento de regiões específicas do domínio, evitando o esforço computacional em regiões que não necessitam de detalhamento. Normalmente o refina-

mento é exigido onde a geometria é irregular ou tem a formação de "bicos" e "prolongamentos".

O método multibloco, desenvolvido a partir da década de 80, consiste em cobrir toda a extensão do domínio do problema através de um número finito de blocos menores. Nesse método, os blocos devem ser conectados de forma a permitir a troca de informações, entre os blocos adjacentes, mantendo a precisão em cada uma das aproximações. Através da disposição e estruturação dos blocos é possível classificar o tipo de malha multibloco [34]. Nesse estudo utiliza-se malhas justapostas, onde os blocos estão posicionados de forma que apenas as faces fazem a conexão com outros blocos, como pode ser visto na Figura 5.2

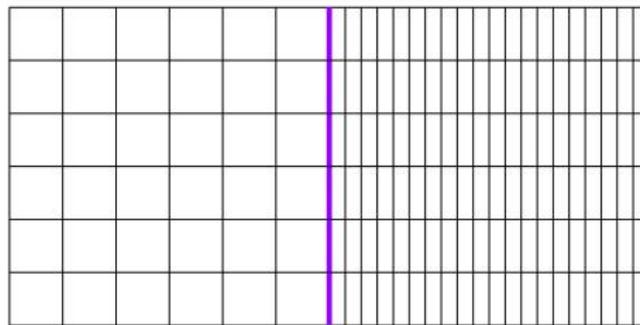


Figura 5.2: Representação de uma malha justaposta com dois blocos

Nesse estudo, a malha deve ser ajustada de acordo com a geometria e o modelo numérico utilizado, de modo que as simulações computacionais não percam as características do domínio do problema. São utilizados 13 blocos, que possuem tamanhos e formatos distintos. Os blocos adjacentes são ligados por uma de suas faces, onde as informações obtidas em um bloco são transmitidas para o outro bloco na forma de condição de contorno. Os blocos adjacentes devem estar conectados de maneira que os pontos de suas faces em comum estejam ligados e assim possam transmitir as informações de um bloco a outro.

Na Figura 5.3 estão indicados as posições dos 13 blocos na malha do lago Luruaco. As entradas estão localizadas nos blocos 2, 3 e 4, enquanto a saída está localizada no bloco 7.

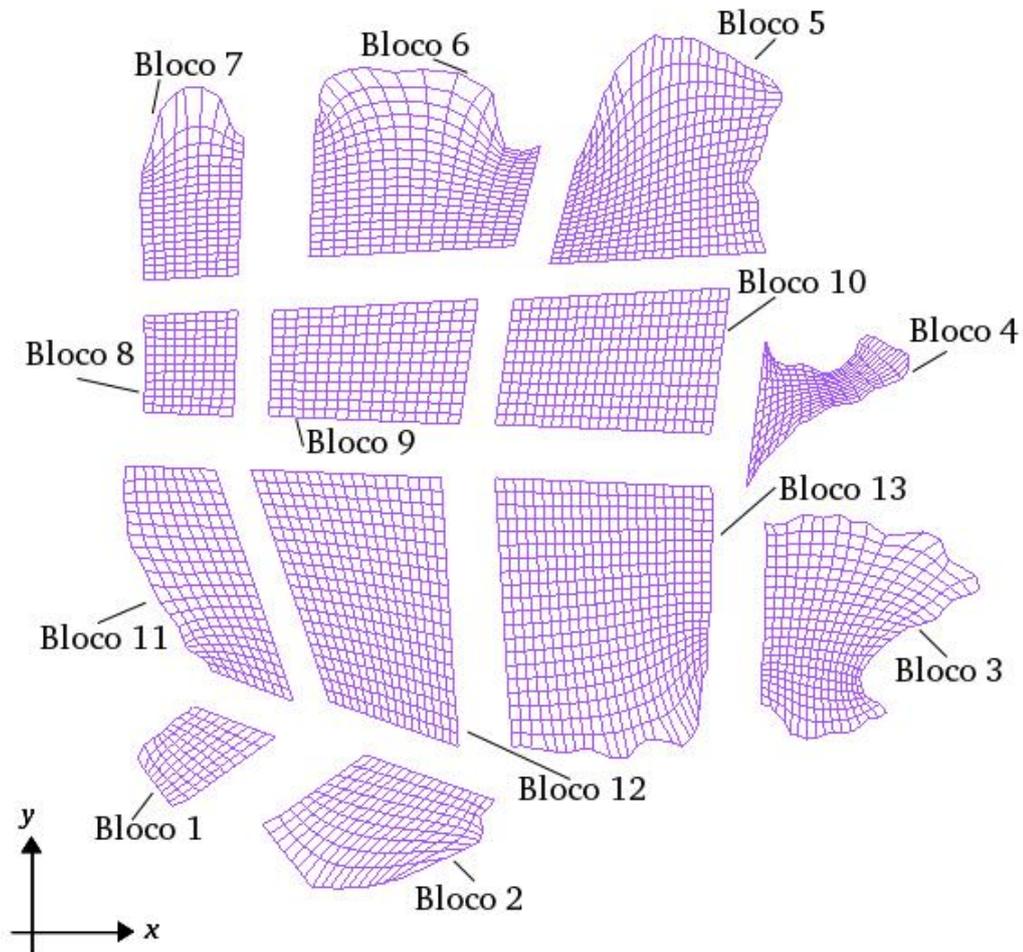


Figura 5.3: Blocos da malha computacional do lago Luruaco

As condições impostas sobre a fronteira de cada bloco dependem da localização e das características do contorno do lago Luruaco. Para a modelagem do escoamento do fluido, as fronteiras de cada bloco se enquadram em uma das três condições:

- Condição de injeção prescrita do fluido: Quando há a entrada de fluido pela fronteira (presente apenas nos blocos 2,3 e 4).
- Condição de escoamento contínuo do fluido: Quando o fluido passa para a fronteira adjacente (a fronteira onde a saída de água do lago se encontra também recebe essa condição).
- Condição de não escorregamento e impermeabilidade do fluido: O fluido não passa pela fronteira.

As condições iniciais e de contorno serão exploradas no Capítulo 6. Juntos, os blocos formam a malha do lago Luruaco, como pode ser visto na Figura 5.4

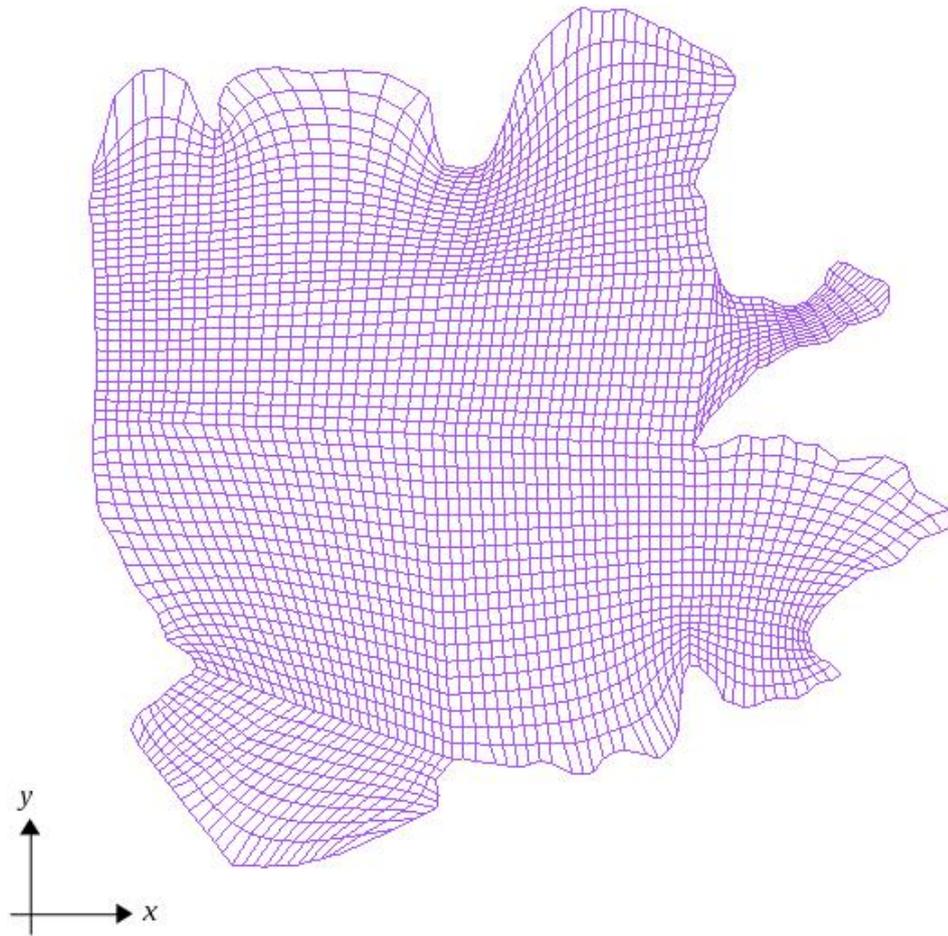


Figura 5.4: Malha computacional do lago Luruaco.

A malha indicada na Figura 5.4 está construída em coordenadas cartesianas. Como já mencionado no Capítulo 3, devido as características físicas do lago Luruaco adota-se as coordenadas generalizadas para o desenvolvimento do modelo, assim as equações que geram a malha também devem ser transformadas em coordenadas generalizadas.

Considerando as métricas em (3.11), as equações no caso bidimensional para a geração de linhas nos eixos ξ e η no interior da malha são dadas por

$$a \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + b \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} - 2c \frac{\partial^2 x}{\partial \eta \partial \xi} + \left(\frac{1}{J^2} \right) \left(P \frac{\partial x}{\partial \xi} + Q \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0, \quad (5.12)$$

$$a \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + b \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} - 2c \frac{\partial^2 y}{\partial \eta \partial \xi} + \left(\frac{1}{J^2} \right) \left(P \frac{\partial y}{\partial \xi} + Q \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0, \quad (5.13)$$

onde

$$a = \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right)^2, \quad (5.14)$$

$$b = \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right)^2, \quad (5.15)$$

$$c = \frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta}. \quad (5.16)$$

Nas equações (5.12)-(5.13) as funções $P(\xi, \eta)$ e $Q(\xi, \eta)$ são responsáveis pelo aumento ou redução de concentração de linhas de acordo com a característica do problema [35]. Nesta modelagem são dadas por

$$P(\xi, \eta) = - \sum_{j=1}^{n_j} a_j \text{sign}(\xi - \xi_j) e^{-c_j |\xi - \xi_j|} - \sum_{i=1}^{n_i} b_i \text{sign}(\xi - \xi_i) e^{-d_i \sqrt{(\xi - \xi_i)^2 + (\eta - \eta_i)^2}}, \quad (5.17)$$

$$Q(\xi, \eta) = - \sum_{j=1}^{n_j} a_j \text{sign}(\eta - \eta_j) e^{-c_j |\eta - \eta_j|} - \sum_{i=1}^{n_i} b_i \text{sign}(\eta - \eta_i) e^{-d_i \sqrt{(\xi - \xi_i)^2 + (\eta - \eta_i)^2}}, \quad (5.18)$$

onde n_i, n_j representam o número total de linhas nas direções ξ e η , respectivamente. Os números a_j, b_i, c_j, d_i são ajustados via experimentação numérica para que haja atração de linhas ξ, η para as linhas ξ_i, η_i [35]. Maiores detalhes sobre o desenvolvimento das métricas de transformação e as equações de geração de linhas podem ser encontrados no Apêndice B.

As malhas podem ser classificadas em relação a distribuição dos pontos [35]. Utilizando as coordenadas generalizadas, a malha possui as características de ser uniforme (quando os pontos são igualmente espaçados), estruturada (quando há regularidade na distribuição dos pontos) e não móvel (quando não há movimentação dos pontos da malha em relação ao tempo) [4]. A Figura 5.5 representa uma região da malha computacional e a localização das informações em uma célula

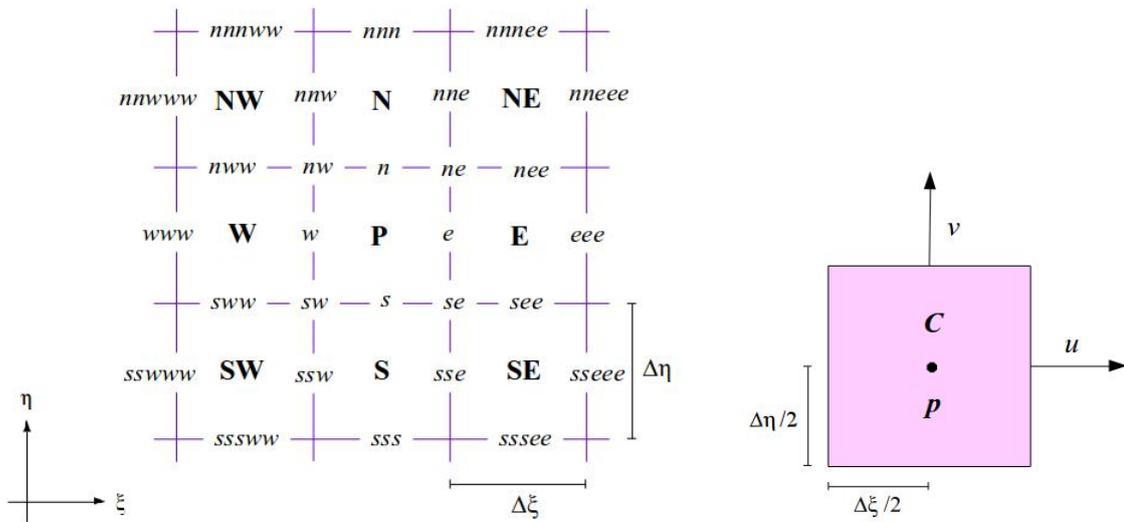


Figura 5.5: Representação de uma parte da malha computacional.

O ponto P é o ponto onde deseja-se calcular as equações. Assim baseados na localização de P , utiliza-se as letras N , S , W , E e suas combinações para denotar as direções na malha. As variáveis escalares estão armazenadas no centro das células, entre elas a concentração de coliformes fecais C e a pressão p . Por outro lado, as variáveis vetoriais estão armazenadas nas arestas das células, entre elas a velocidade de escoamento do fluido (u, v) nas direções ξ e η .

Com a disposição de pontos da malha em coordenadas generalizadas, as equações que modelam o fluxo de água e a concentração de coliformes fecais, calculadas através do método de diferenças finitas, tem os cálculos simplificados devido a uniformidade no espaçamento. Para esta modelagem é utilizado $\Delta\xi = \Delta\eta = 1$.

Para que a malha do lago Luruaco receba as condições de contorno, todos os pontos que foram utilizados na construção do contorno de cada bloco são considerados. A partir deles é possível indicar as regiões com entrada e saída de água, bem como as faces dos blocos por onde há a passagem do fluido para os blocos adjacentes. São considerados as seguintes condições para a fronteira dos blocos

- Condição de injeção prescrita do fluido: Entrada dos riachos Limón, Negro e Mateo (blocos 2,3 e 4).
- Condição de escorregamento contínuo do fluido: Aplicados nas faces dos blocos que possuem adjacência com outros blocos e na saída do lago (bloco 7)
- Condição de não escorregamento e impermeabilidade do fluido: Aplicado nas faces dos blocos que formam o contorno do lago.

A Figura 5.6 esquematiza o contorno do lago Luruaco em coordenadas generalizadas, onde são indicados as condições de fronteira de cada bloco, facilitando principalmente o desenvolvimento computacional do modelo que considera todos os pontos da fronteira.

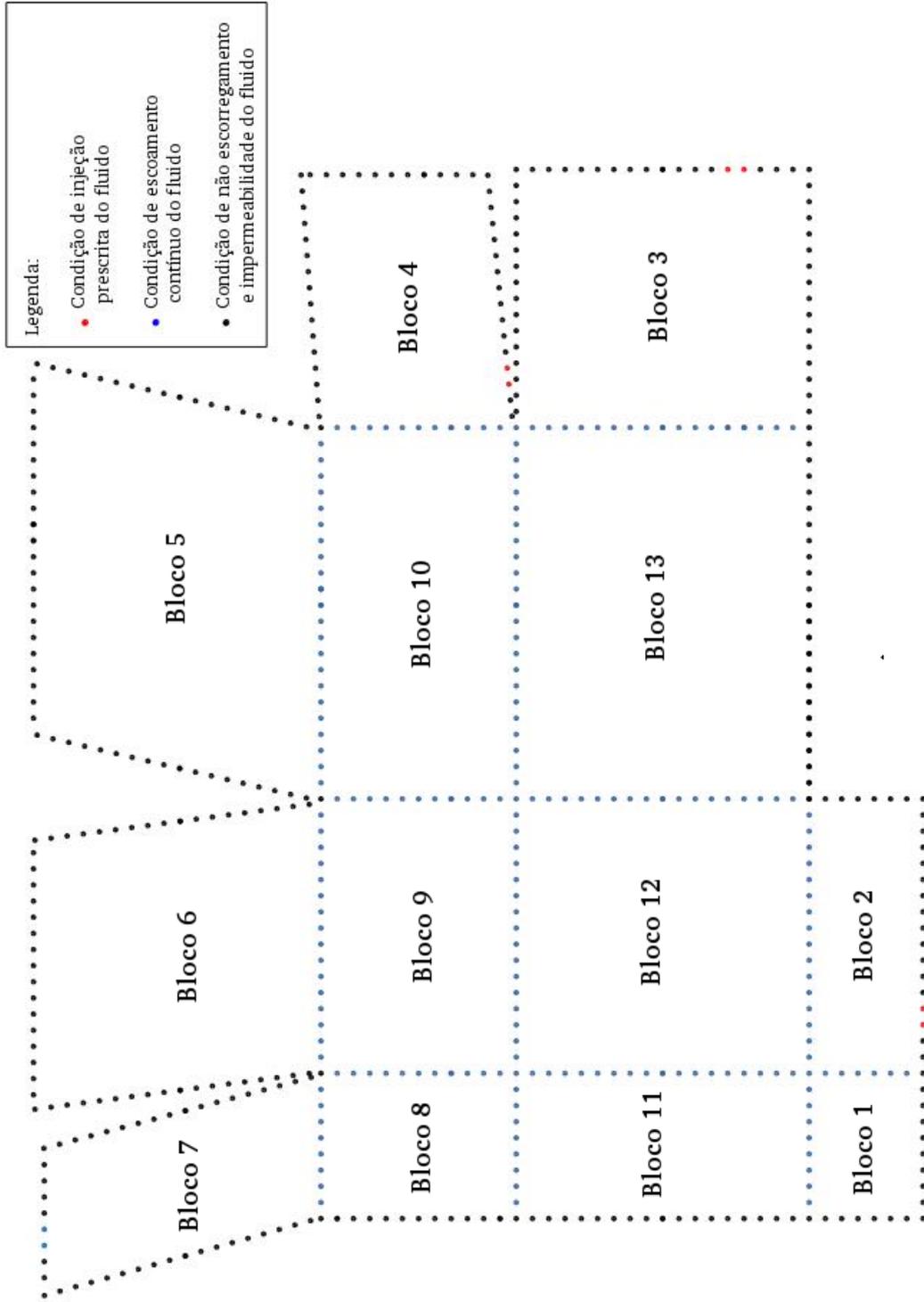


Figura 5.6: Representação do contorno dos blocos em coordenadas generalizadas.

6 SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL

Devido a falta de saneamento básico na região, o esgoto ou lixo doméstico é despejado diretamente em riachos menores, que por sua vez abastecem o lago Luruaco. Assim é importante analisar a influência das descargas de poluentes em cada um de seus afluentes.

Além disso, considerando a influência do município de Luruaco sobre o lago, que por um lado necessita da água para o consumo da população, mas por outro lado é uma das principais fontes de contaminação de coliformes fecais para o lago, avaliar as regiões que apresentam menor ou maior contaminação é útil como uma ferramenta para que órgãos responsáveis e população possam consumir água menos poluída.

Assim, este capítulo tem como objetivo apresentar as simulações do modelo de concentração de coliformes fecais realizadas sobre a malha computacional do lago Luruaco. Os códigos computacionais para os modelos numéricos e simulações são desenvolvidos em linguagem Fortran 90. A visualização e edição das imagens é realizada através do *software Paraview* e do *software Libre Office Draw*.

Inicialmente serão realizadas simulações com a injeção de baixas concentrações de coliformes fecais em cada uma de suas entradas, com a finalidade de compreender a influencia de cada afluente na dinâmica do lago. As baixas concentrações injetadas facilitam a visualização do transporte dos coliformes fecais no lago.

Em seguida, é realizado uma simulação do modelo levando em consideração os valores de concentração obtidos de amostras coletadas no lago. Através desta calibração e das análises obtidas das simulações de baixa concentração obtém-se informações sobre a qualidade da água no lago, indicando as regiões com maiores riscos de contaminação.

Com base nestas informações é possível apresentar uma proposta de manejo do esgoto para que algumas regiões apresentem menor risco de contaminação e sejam pontos de coleta de água para consumo dos moradores da região.

6.1 CONDIÇÕES INICIAIS E DE CONTORNO

A simulação do modelo desenvolvido neste trabalho tem como objetivo inicial, entender a dinâmica dos coliformes fecais no lago Luruaco. Para isso são adotados condições iniciais e de contorno que se adequam as condições reais do problema e além disso, favorecem a visualização da dinâmica do lago.

Durante o desenvolvimento do modelo computacional, um dos parâmetros utilizados é o número de Reynolds (Re). Esta constante adimensional caracteriza o comportamento de um escoamento, podendo ser laminar (para baixos valores de Re) ou turbulento (para

altos valores de Re) [25]. O número de Reynolds é obtido através da expressão

$$Re = \frac{\rho \cdot v \cdot D}{\mu} \quad (6.1)$$

Onde ρ = densidade do fluido, v = velocidade de escoamento, D = comprimento da região analisada e μ = viscosidade dinâmica do fluido. O número de Reynolds pode variar dependendo da região em estudo e do fluido analisado.

O modelo hidrodinâmico utilizado neste estudo, com a hipótese de um fluido incompressível e newtoniano utiliza o número de Reynolds $Re = 555$, calculado nas entradas do lago. Este valor caracteriza o comportamento de um escoamento laminar no lago Luruaco. Contudo, devido à geografia do lago, características de turbulência são vistas em larga escala (vórtices).

A equação de concentração de coliformes fecais (4.4) considera que os coeficientes de decaimento K e difusão δ e γ sejam constantes. O coeficiente de decaimento dos coliformes fecais no lago é de $K = 0.02/h$ [40].

A propriedade de difusão molecular indica que o contaminante é espalhado através de movimentos randômicos. Em larga escala, os vórtices e turbilhões são responsáveis por transportar os contaminantes, a esse movimento se dá o nome de difusão turbulenta. O coeficiente de difusão pode assumir valores diferentes, dependendo da espécie que será difundida e do tipo de difusão. Na literatura, o coeficiente de difusão molecular assume valores entre $D = 10^{-3}m^2/h$ e $D = 10^{-1}m^2/h$, enquanto para a difusão turbulenta os valores se encontram entre $D = 10^1m^2/h$ e $D = 10^{10}m^2/h$ [11]. Com o objetivo de simular e de estudar um modelo com o fenômeno de difusão molecular e turbulenta, envolvidos no transporte das espécies reativas na lâmina d'água do lago Luruaco, considera-se que a constante de difusão é de $D = \delta = \kappa = 3,6m^2/h$.

Considerando a malha em coordenadas generalizadas (ξ, η) , as condições iniciais serão aplicadas em todos os pontos da malha no tempo $t = 0$. As condições de contorno serão aplicadas no contorno do lago e a pressão será calculada durante a simulação. A seguir descreve-se tais condições

- *Condições iniciais para a equação hidrodinâmica:* Considera-se que no momento inicial $t = 0$ o fluido se encontra parado no domínio, isto é, a velocidade e a pressão são nulas para todos os pontos da malha, exceto nas entradas do lago Luruaco. A velocidade de injeção do fluido nos pontos de entrada do contorno leva em consideração o valor de Reynolds utilizado.
- *Condições de fronteira para a equação hidrodinâmica:* A velocidade de escoamento na fronteira da equação hidrodinâmica para $t > 0$ é nula, exceto nas entradas e saída do lago, onde a condição de Newman é aplicada.

- *Condição inicial para a equação de concentração de coliformes fecais:* No tempo $t = 0$, assume-se que não há concentração de coliformes em todos os pontos da malha.
- *Condições de fronteira para a equação de concentração de coliformes fecais:* Para $t > 0$ consideram-se valores para concentrações de coliformes fecais nas entradas e saídas do lago Luruaco (vide Figura 2.2)

$$C(X_{Limon}, t) = \mathbb{C}_1 NMP/100ml,$$

$$C(X_{Negro}, t) = \mathbb{C}_2 NMP/100ml,$$

$$C(X_{Mateo}, t) = \mathbb{C}_3 NMP/100ml,$$

$$C(X_{efluente}, t) = \text{condição tipo Neumann},$$

onde a unidade $NMP/100ml = 10^4 NMP/m^3$ significa o número mais provável de coliformes fecais por $100ml$ em uma amostra de água. Note que as injeções de coliformes fecais são contínuas nas entradas do lago Luruaco. Os valores $\mathbb{C}_1, \mathbb{C}_2, \mathbb{C}_3$ serão indicados nos cenários estudados nas simulações.

É importante ressaltar que o objetivo deste estudo é analisar os resultados qualitativamente, por exemplo, indicando quais regiões apresentam maior contaminação devido às condições impostas no modelo numérico. Além disso, a análise quantitativa dos resultados pode sofrer influências de fatores climáticos, que podem alterar os resultados em um curto período de tempo, descaracterizando as condições iniciais e de contorno do modelo desenvolvido.

6.2 CAMPO DE VELOCIDADES

O campo de velocidades, determinado a partir das equações de Navier-Stokes e desenvolvido através do método *MAC*, considera as condições iniciais e de fronteira para $Re = 555$. A Figura 6.1 indica a simulação do escoamento hidrodinâmico nos tempos $t = 0.5h, 4h, 8h, 12h, 20h, 24h$.

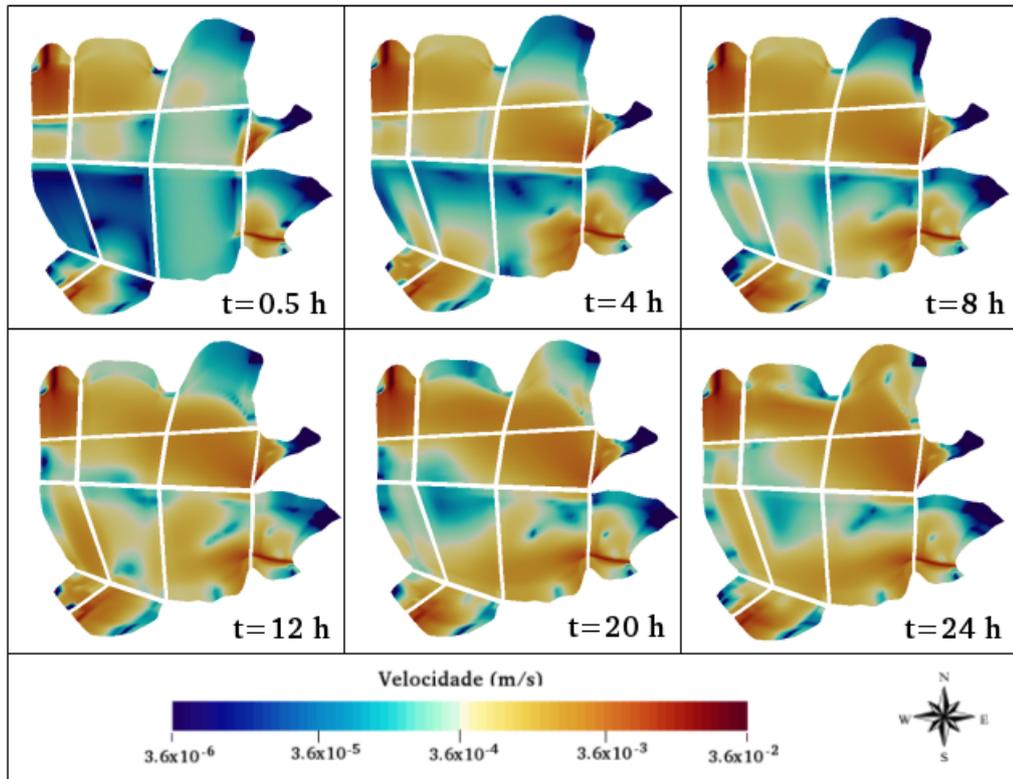


Figura 6.1: Campo de velocidades nos tempos $t = 0.5h, 4h, 8h, 12h, 20h, 24h$.

As regiões em tons de vermelho de Figura 6.1 indicam maior velocidade de escoamento do fluido. A Figura 6.2 mostra o campo vetorial, onde pode-se observar a presença de vórtices em todo lago, influenciando na velocidade de escoamento em algumas regiões.

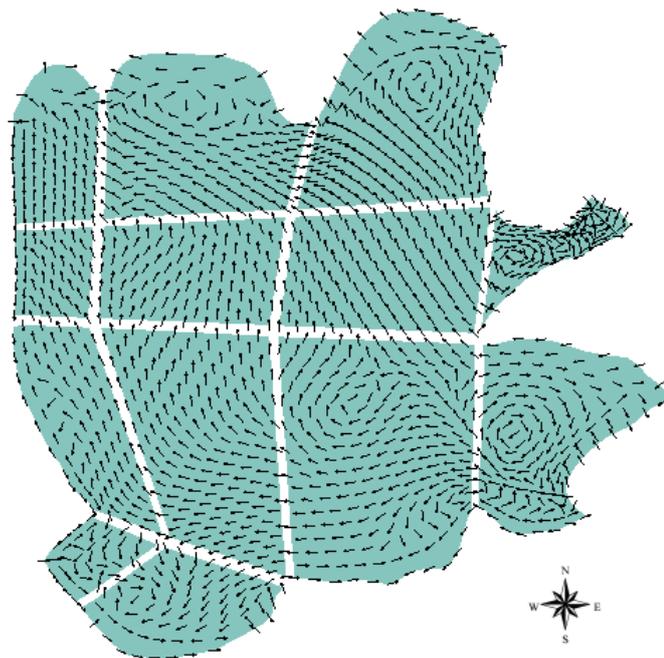


Figura 6.2: Campo de velocidades no tempo $t = 72h$.

Além disso, devido a condição de não escorregamento utilizada na fronteira do lago (velocidade nula na fronteira do lago, exceto nas entradas e saída do lago), consequentemente os vetores da margem do lago se posicionam no sentido contrário ao fluxo.

Nota-se que o método multibloco utilizado na construção da malha também adequou-se ao modelo simulado, uma vez que há comunicação entre os blocos adjacentes, e a dinâmica é completa no lago todo. A malha utilizada nestas simulações (vide Figura 5.4) pode ser ainda mais refinada e apresentar resultados com maior precisão (aumentando por exemplo, a quantidade de vetores na região norte da Figura 6.2), porém o refinamento da malha aumentará o tempo computacional gasto durante as simulações. Deste modo, as simulações com malhas mais refinadas serão realizadas em estudos futuros.

Observa-se também que em um período de 24 horas o campo de velocidades de escoamento do fluido entra em um regime estacionário, como pode ser observado na Figura 6.1 em que não se observa grandes variações no comportamento do campo de velocidades para $t = 20h$ e $t = 24h$.

As próximas simulações consideram os mesmos valores para Re , K , δ , κ e o campo de velocidades apresentado na Figura 6.2. A variação entre os cenários será em relação à concentração de coliformes fecais injetada por cada um dos afluentes do lago Luruaco.

6.3 ANÁLISE DA DINÂMICA DE COLIFORMES FECAIS

Considerando que os poluentes (coliformes fecais) são injetados no lago através de seus afluentes, então torna-se importante entender qual é a contribuição de cada afluente sobre a dinâmica do de coliformes no lago.

Assim, no Cenário 1 (Seção 6.3.1) é apresentada a simulação da injeção de coliformes fecais através do Riacho Limón, o Cenário 2 (Seção 6.3.2) apresenta a simulação de injeção através do riacho Negro e o Cenário 3 (Seção 6.3.3) apresenta a simulação de injeção através do riacho Mateo. O Cenário 4 (Seção 6.3.4) apresenta a simulação do modelo com a injeção de coliformes fecais dos três riachos simultaneamente.

A simulação acontece em um período de 72 horas com as condições iniciais e de contorno impostas no modelo (vide Seção 6.1), período em que a dinâmica de concentração de coliformes fecais entra em um regime estacionário, sofrendo poucas variações em relação à dinâmica dos coliformes fecais.

6.3.1 Cenário 1

O município de Luruaco se encontra vizinho ao lago. Além disso, o riacho Limón que passa pelo município, apresenta um aumento nos níveis de contaminação, principalmente por esgoto e lixo doméstico (com elevada presença de coliformes fecais) gerados nessa região. Baseando-se em dados de coleta realizados no lago Luruaco [17], supõe-se que a injeção de coliformes fecais através do riacho Limón seja de $C_1 = 500NMP/100ml =$

$5e + 6 \text{NMP}/\text{m}^3$. A Figura 6.3 indica a simulação para os tempos $t = 1h, 12h, 24h, 36h, 48h, 60h, 64h, 68h, 72h$.

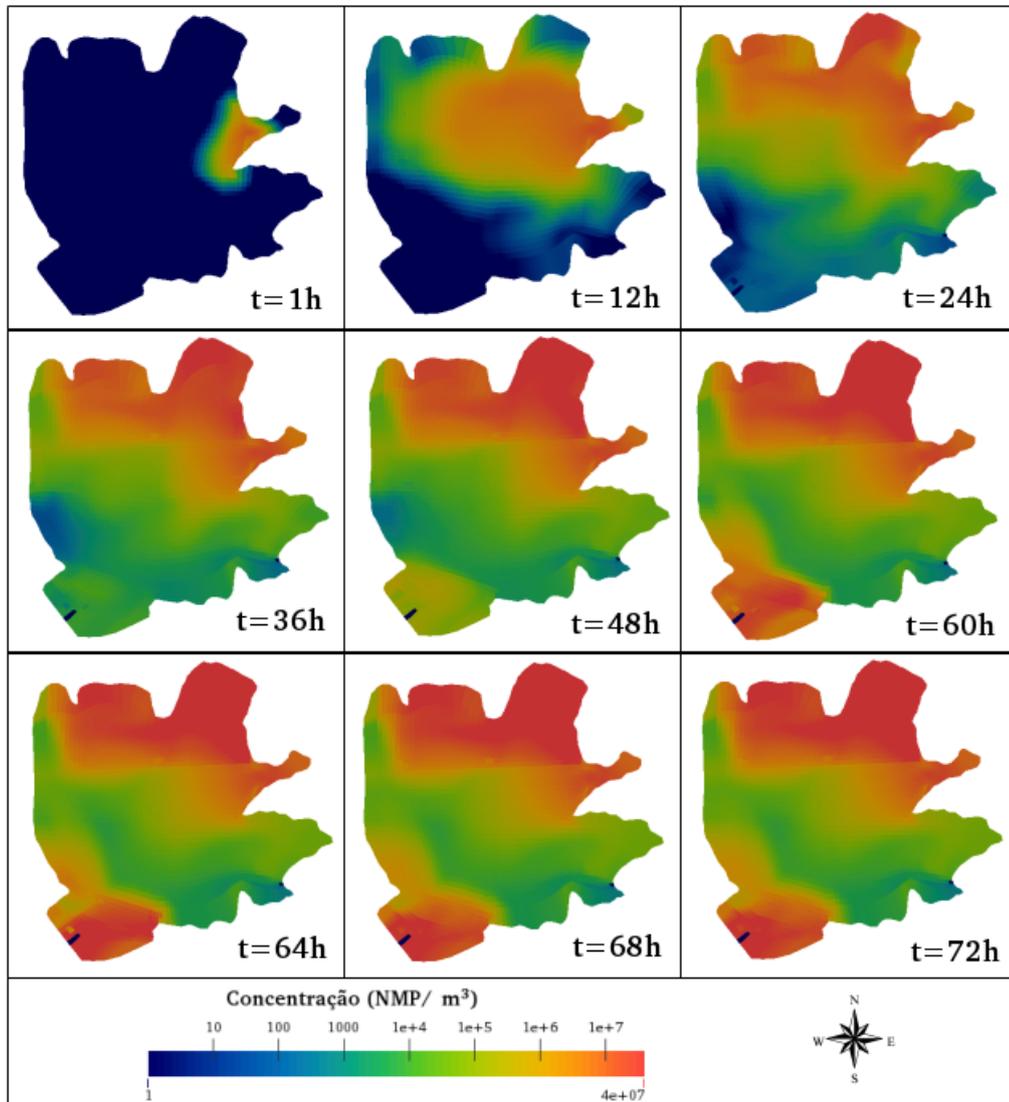


Figura 6.3: Simulações de injeção contínua de coliformes fecais através do afluente riacho Limón.

Note que a influência do campo de velocidades, matematicamente representado pelo termo convectivo do modelo de concentração dos coliformes fecais, faz com que a região norte do lago Luruaco receba maior poluição e sejam transportados em direção à saída do lago.

6.3.2 Cenário 2

Devido à região em que o riacho Negro se encontra, diferente do riacho Limón que recebe a poluição diretamente de um município, o riacho injeta uma quantidade de coliformes fecais menor comparado ao Cenário 1. Assim, considerando que o riacho Negro

injeta $C_2 = 100NMP/100ml = 1e + 6NMP/cm^3$ de coliformes fecais, durante o período de 24 horas, observa-se a dinâmica de coliformes fecais apresentada na Figura 6.4

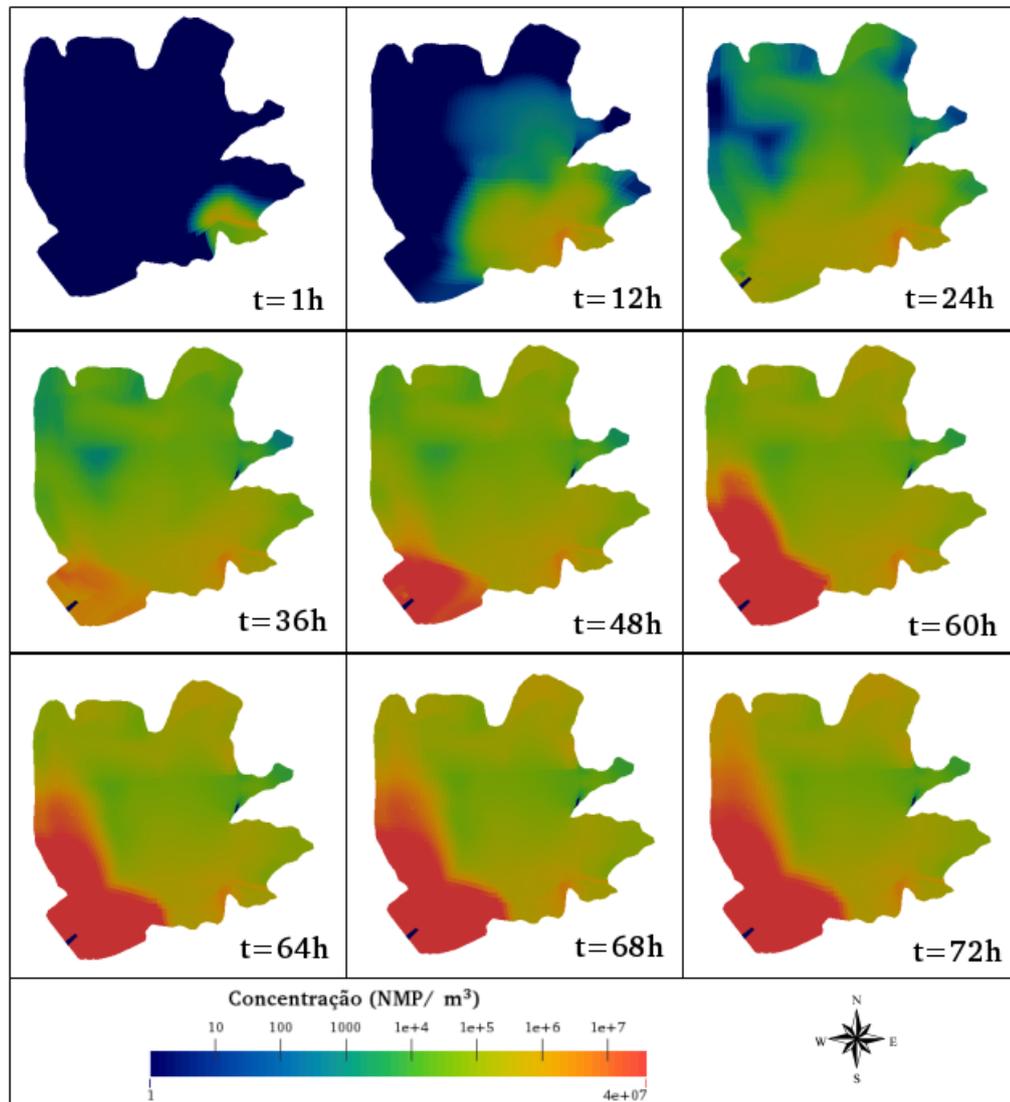


Figura 6.4: Simulações de injeção contínua de coliformes fecais a partir do afluente riacho Negro.

Neste caso, pode-se observar que o transporte dos coliformes fecais segue o fluxo hidrodinâmico, e a presença dos vórtices fazem com que algumas regiões recebam menos coliformes fecais que em outras (regiões em azul).

6.3.3 Cenário 3

Nesta simulação apresenta-se a influencia do riacho Mateo no lago Luruaco. Considerando a injeção contínua de coliformes fecais de $C_3 = 100NMP/100ml = 1e + 6NMP/cm^3$ em um período de 24 horas, observa-se na Figura 6.5 que a ação do campo de velocidades faz com que os coliformes fecais não sejam carregados para a região leste do lago,

dirigindo-se diretamente para o lago San Juan de Tocagua (saída do lago Luruaco). Além disso, o decaimento dos coliformes fecais também tem grande influencia nesta simulação, de modo que a concentração sofre diminuição antes de chegar até o efluente durante o período de 24 horas. Isso devido às baixas velocidades do fluxo hidrodinâmico nessa região.

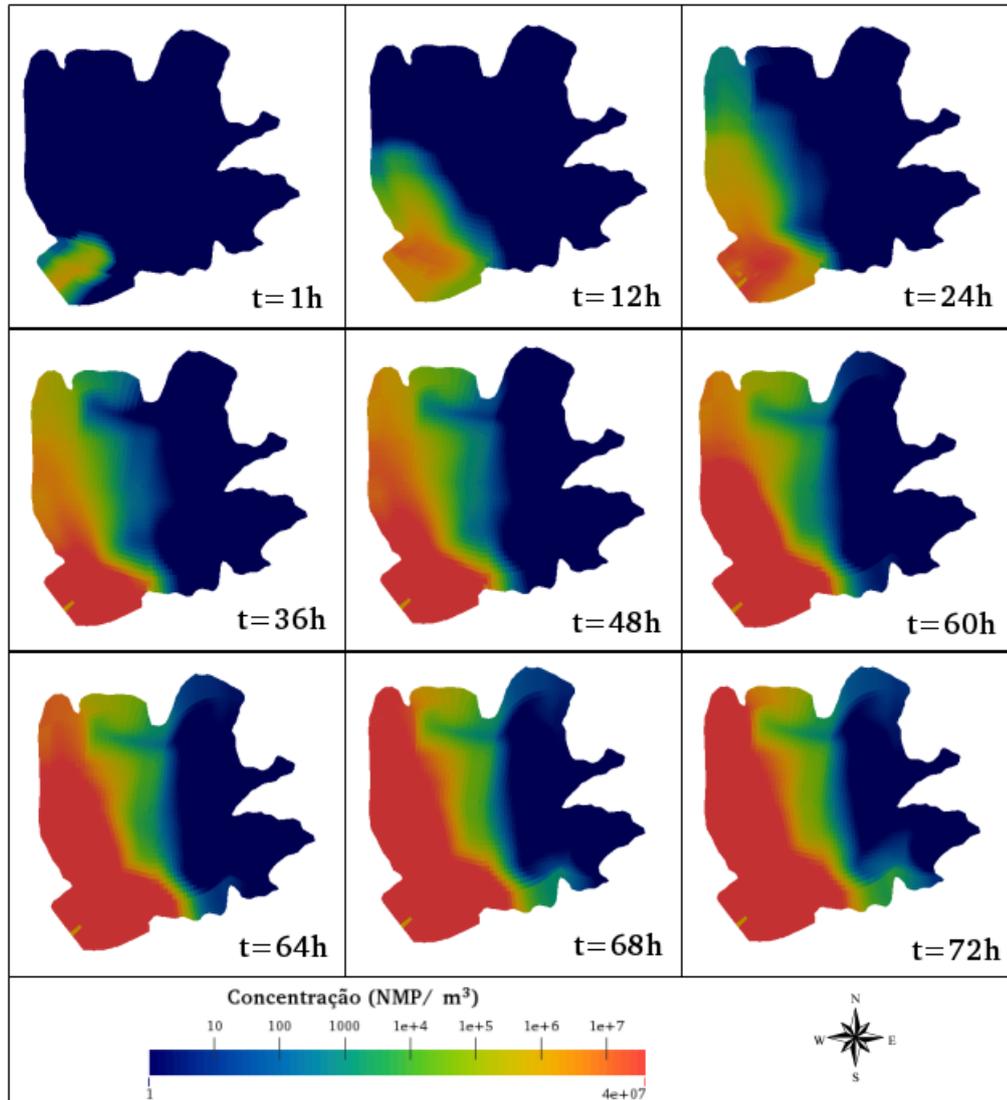


Figura 6.5: Simulações de injeção de coliformes fecais no afluente riacho Mateo nos tempos $t = 8h, 16h, 24h$.

6.3.4 Cenário 4

Neste cenário é considerada a entrada contínua de coliformes fecais dos três afluentes simultaneamente em um período de 24 horas. Os valores injetados em cada entrada são os mesmos utilizados nos Cenários 1-3. A simulação para $t = 0.5h, 4h, 8h, 12h, 20h, 24h$ horas são dadas na Figura 6.6

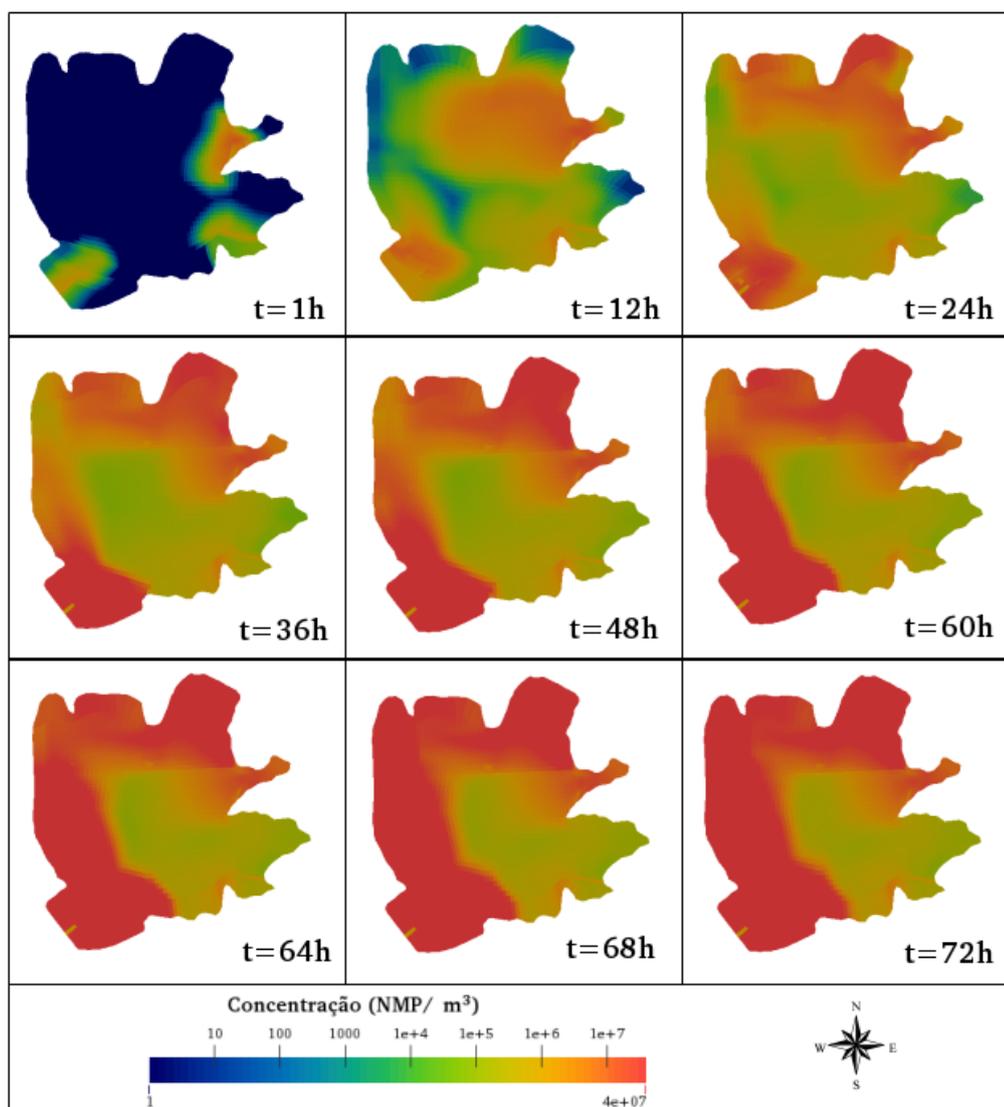


Figura 6.6: Simulações de injeção contínua de coliformes fecais a partir dos riachos Limón, Negro e Mateo.

Pode-se observar a influência de cada afluente no lago Luruaco, preservando as características quando analisados separadamente (Cenários 1-3). A dinâmica de concentração de coliformes fecais no tempo final ($t = 24$ horas) indica que todas as regiões sofrem contaminação, havendo variação na concentração principalmente devido a propriedade convectiva (que considera o campo de velocidades hidrodinâmico). Além disso, o decaimento de coliformes fecais devido a propriedade reativa também influencia na dinâmica, como descrito na Figura 6.6.

6.4 PROPOSTA DE MANEJO DO ESGOTO

Pode-se observar que existem regiões com diferentes concentrações de coliformes fecais. Regiões com maiores riscos se encontram próximas ao município de Luruaco e

também ao sul do lago. Tendo em vista que a água é utilizada para consumo humano, a captação da água em regiões que apresentam baixas concentrações de coliformes fecais é uma opção para a população consumir uma água de melhor qualidade.

Pensando nisso, foi desenvolvida uma proposta de manejo do esgoto, para que uma região maior do lago possa ser ponto de coleta de água oferecendo menores riscos de contaminação. Analisando a dinâmica dos coliformes através das simulações apresentadas na Seção 6.3 pode-se observar que a região próxima ao riacho Negro é favorecida principalmente pelo fluxo de escoamento do fluido que transporta de maneira uniforme os coliformes para outras regiões do lago. A proposta de manejo é desviar o esgoto que vem através do riacho Negro para o riacho Mateo, uma vez que a região próxima da entrada do riacho Mateo já apresenta maior concentração de coliformes fecais (devido ao fluxo do escoamento da água). A simulação é realizada com os mesmo valores de injeção da Seção 6.3 e são dadas na Figura 6.7

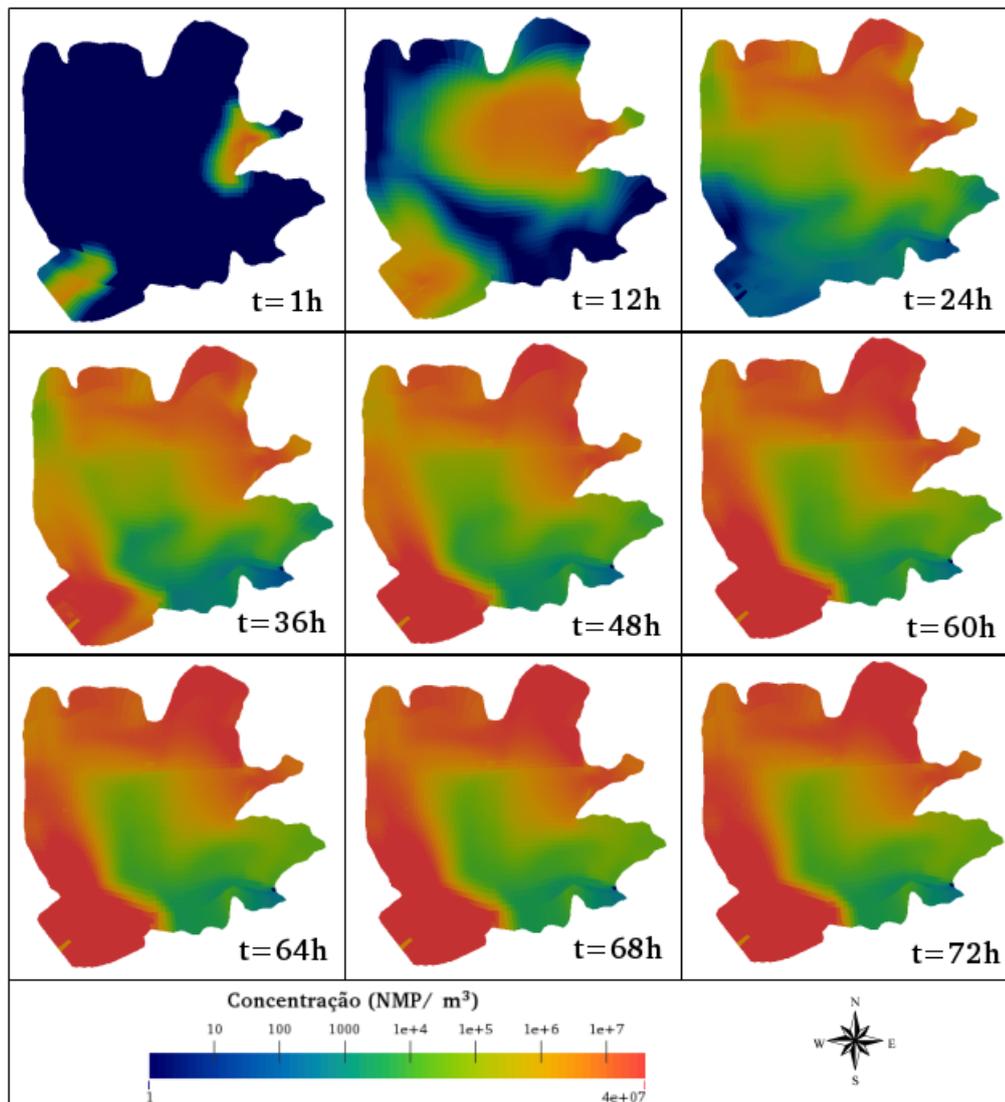


Figura 6.7: Simulações de injeção contínua de coliformes fecais a partir dos riachos Limón, Negro e Mateo para a proposta de manejo de esgoto.

Pode-se observar que nesta simulação as regiões ao sudeste apresentam concentração menor de coliformes fecais, sendo uma região próxima ao município de Luruaco e indicada para a captação de água pelos moradores da região.

7 RESULTADOS

Através das simulações numéricas do sistema de equações (4.1-4.4) é possível analisar qualitativamente a dinâmica da concentração de coliformes fecais no lago Luruaco. É importante salientar que a simulação computacional desenvolvida nesse trabalho não tem a finalidade de fornecer previsões quantitativas sobre o índice de poluição em um dado local do domínio físico do lago, num dado instante.

Sabe-se que as condições de entrada (iniciais e fronteira) de coliformes fecais variam diariamente, por exemplo, quando há o efeito de fenômenos climáticos (chuva, estiagem, entre outros) na região. Nessas condições, o objetivo desse estudo é apresentar informações, por exemplo, dos locais mais poluídos no domínio do lago, independentemente das concentrações iniciais e de fronteira. Assim, analisar a dinâmica de coliformes fecais no corpo d'água do lago Luruaco é uma forma de determinar as regiões que apresentam maior risco de contaminação para a população local.

Através das simulações dos Cenários 1-3, é possível analisar a dinâmica dos coliformes fecais através de cada um de seus afluentes, separadamente. Devido à proximidade com o município de Luruaco, a concentração de coliformes fecais injetada pelo afluente riacho Limón (Cenário 1) é maior. Além disso, a influência do campo de velocidades hidrodinâmico faz com que as regiões mais próximas do município e a região mais ao norte apresentem maior contaminação. A injeção de coliformes fecais a partir do riacho Negro, tende a se espalhar com maior facilidade, devido à direção do fluxo hidrodinâmico. Já na região próxima ao riacho Mateo (Cenário 3) observa-se que há uma concentração maior de coliformes fecais, trazendo riscos de contaminação para quem consome a água coletada naquela região.

Como consequência, quando analisado a injeção de coliformes fecais através dos três afluentes simultaneamente (Cenário 4), devido à geometria do lago Luruaco e ao campo hidrodinâmico de velocidades gerado, nota-se que a poluição injetada no lago Luruaco pelo riacho Negro flui na direção da entrada do riacho Mateo, agregando-se à poluição injetada por esse último, aumentando a concentração de coliformes fecais na região próxima ao riacho Mateo.

Já no sentido nordeste, devido à maior injeção de coliformes pelo riacho Limón, tem-se também uma região muito poluída até o canal efluente para o Lago San Juan de Tocagua. Nota-se também que a região central do lago apresenta a melhor qualidade de água com uma concentração de coliformes fecais muito baixa. Enfim, essas simulações numéricas permitem uma melhor compreensão qualitativa da dinâmica de coliformes fecais no lago Luruaco, evidenciando as regiões mais poluídas. A partir da análise das simulações é possível propor um manejo para o esgoto, com a finalidade de criar uma região no lago apresentando menor risco de contaminação e consequentemente sendo um ponto de captação para os moradores da região em torno do lago Luruaco.

Assim a simulação numérica é um instrumento útil e importante para avaliação da qualidade da água, apresentando resultados que podem ser adotados por órgãos públicos para a recuperação do ambiente poluído, e para proporcionar uma melhor qualidade de vida para os utilizadores do lago, bem como para os habitantes da cidade de Luruaco que depende dessa água.

Em estudos futuros, a realização de simulações com condições iniciais e de fronteira diferentes podem descrever situações específicas, como em caso de variação climática. Além disso a utilização de dados experimentais do lago Luruaco, o aperfeiçoamento da malha, com a otimização e refinamento podem trazer resultados mais precisos.

A CONCEITOS BÁSICOS SOBRE FLUIDOS E MODELAGEM DAS EQUAÇÕES DE NAVIER-STOKES

A.1 FLUIDOS

Fluido é uma substância que possui a propriedade de se deformar continuamente quando aplicada uma tensão de cisalhamento (força aplicada em sentido igual ou oposto com intensidade diferentes no material estudado). Os fluidos podem ser encontrados na forma líquida ou gasosa. As substâncias sólidas também apresentam deformação quando estão sob tensão de cisalhamento, porém esta deformação não é contínua, isto é, volta ao estado de repouso (caso a força aplicada atinja o seu limite elástico) [25].

A dinâmica dos fluidos é estudada através de suas leis físicas básicas, dentre elas podemos citar a lei da conservação de massa, lei de conservação de movimento linear (2ª lei de Newton), lei da conservação de energia (1ª lei da termodinâmica), lei da conservação de momento angular, lei de aumento de entropia do universo e também seguem as leis constitutivas (equações específicas para cada tipo de fluido), que quando expressas matematicamente servem como base para modelar o comportamento de um fluido.

Cada ponto P do fluido carrega propriedades como massa específica, temperatura, velocidade, entre outras. Assim para estudar o escoamento de um fluido, pode-se analisar cada ponto P em volumes arbitrários (infinitesimais) denominados volumes de controle, por onde o fluido escoar. A fronteira do volume de controle é chamada de superfície de controle, como pode ser visto na Figura A.1

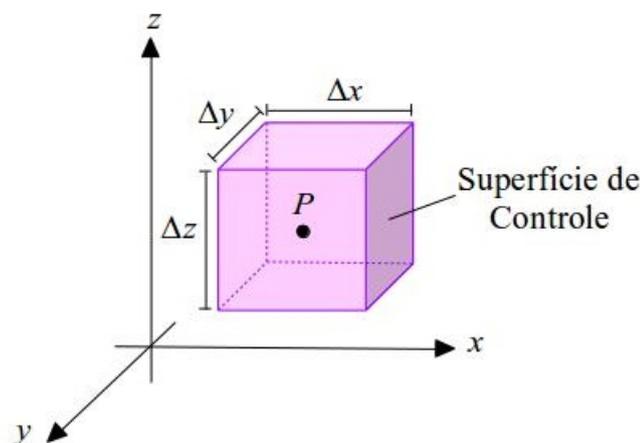


Figura A.1: Volume de controle em um sistema de coordenadas cartesianas. Fonte: Autor.

Além disso, um fluido pode ser classificado de acordo com a taxa de deformação e a variação da massa específica [25] como:

- *Newtoniano*: Quando a tensão de cisalhamento é linearmente proporcional a taxa de deformação.
- *Não Newtoniano*: A tensão de cisalhamento não é linearmente proporcional a taxa de deformação.
- *Compressível*: A massa específica varia em relação as condições do sistema.
- *Incompressível*: A massa específica tem variações desprezíveis em relação a algumas condições do sistema, como a temperatura ou pressão, por exemplo.

Já o escoamento pode ser classificado como:

- *Viscoso*: O fluido escoar com a mesma velocidade da superfície.
- *Não viscoso*: O fluido escoar com velocidade diferente da superfície.
- *Laminar*: Tem movimentos suaves e em camadas.
- *Turbulento*: Tem movimentos aleatórios e rápidos.
- *Externo*: Escoamento sobre corpos imersos em um fluido não contido.
- *Interno*: Escoamento totalmente envolto por uma superfície sólida.

Neste problema, para determinar as equações que geram o campo de velocidades na superfície do lago (equações hidrodinâmicas), consideramos a água como sendo um fluido newtoniano, incompressível, com viscosidade constante, laminar e interno.

A.2 SISTEMA NAVIER-STOKES

Na modelagem matemática do escoamento da água do lago, trata-se a água como um fluido em uma distribuição contínua de matéria. Porém, no ponto de vista computacional o problema é abordado de forma discreta, onde as soluções são determinadas pontualmente. Para que as propriedades sejam mantidas tanto no meio contínuo quanto no meio discreto, considera-se volumes de controle em um sistema de coordenadas ortogonais.

Assim, considerando um volume de controle V no caso tridimensional, com dimensões físicas Δx , Δy , Δz e sendo S a superfície de controle deste volume (Figura A.1). Considerando problemas que envolvem o escoamento de um fluido que obedecem as leis de continuidade da massa e a lei de conservação de momento linear. Essas leis podem ser descritas por equações na forma integral ou na forma diferencial dependendo do objeto de estudo [25]. Ao trabalhar com escoamento internos (como nesse caso), geralmente as equações são utilizadas na forma diferencial.

A equação de continuidade representa fisicamente que a vazão em massa que sai da superfície de controle S é igual à variação de massa no interior do volume de controle V

na unidade de tempo, considerando que não haja fontes ou sorvedouros de matéria no interior de V . A lei de conservação de massa na forma integral pode ser escrita como

$$\int_S \rho \vec{U} \cdot dS + \frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = 0, \quad (\text{A.1})$$

onde $\vec{U} = (u_1, u_2, u_3)$ é campo de velocidades do fluido limitado pela superfície de controle S .

Note que para calcular o fluxo de massa através da superfície de controle deve-se considerar as 6 faces do volume de controle. Levando em conta a orientação do sistema e fazendo simplificações obtém-se a expressão

$$\int_S \rho \vec{U} \cdot dS = \left[\frac{\partial \rho u}{\partial x} + \frac{\partial \rho v}{\partial y} + \frac{\partial \rho w}{\partial z} \right] dxdydz = (\nabla \cdot \rho \vec{V}) dxdydz. \quad (\text{A.2})$$

A taxa de variação da massa no volume de controle por unidade de tempo pode ser expressa da seguinte maneira

$$\frac{\partial}{\partial t} \int_V \rho dV = \frac{\partial \rho}{\partial t} dxdydz. \quad (\text{A.3})$$

Assim, de (A.2)-(A.3) e fazendo simplificações tem-se que

$$\nabla \cdot \rho \vec{V} + \frac{\partial \rho}{\partial t} = 0. \quad (\text{A.4})$$

Como o fluido é considerado incompressível, isto é, $\rho = cte$ segue que

$$\nabla \cdot \vec{V} = \frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0. \quad (\text{A.5})$$

A equação (A.5) descreve a lei de conservação de massa para fluidos incompressíveis.

O fluido também deve obedecer a Segunda Lei de Newton, propriedade que afirma que a soma das forças externas \vec{F} atuando sobre um sistema é igual a taxa de variação, no tempo, da sua quantidade de movimento linear \vec{P} [25]. Isto é,

$$\vec{F} = \frac{d\vec{P}}{dt} \Big|_{\text{sistema}}. \quad (\text{A.6})$$

Como a quantidade de movimento linear do sistema é dado por

$$\vec{P}_{\text{sist.}} = \int_{\text{massa}} \vec{V} dm, \quad (\text{A.7})$$

assim, em um sistema incompressível infinitesimal de massa dm , tem-se

$$d\vec{F} = dm \frac{d\vec{V}}{dt} \Big|_{\text{sistema}}, \quad (\text{A.8})$$

onde o termo $\frac{d\vec{V}}{dt}$ é a aceleração de um elemento de fluido, e pode ser reescrito como:

$$\frac{d\vec{V}}{dt} = u \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} + v \frac{\partial \vec{V}}{\partial y} + w \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} . \quad (\text{A.9})$$

Logo, de (A.7) e (A.9) em (A.8) obtém-se a segunda lei de Newton na forma diferencial para fluidos incompressíveis, ou seja,

$$d\vec{F} = dm \left[u \frac{\partial \vec{V}}{\partial x} + v \frac{\partial \vec{V}}{\partial y} + w \frac{\partial \vec{V}}{\partial z} + \frac{\partial \vec{V}}{\partial t} \right] . \quad (\text{A.10})$$

Note que as forças que atuam sobre uma partícula fluida podem ser de campo ou de superfície (normais e de cisalhamento), isto é, $d\vec{F} = d\vec{F}_B + d\vec{F}_S$. Considere que a força da gravidade é a única força de campo atuante, então

$$dF_{B_i} = \rho g_i \quad \text{para } i = x, y, z . \quad (\text{A.11})$$

Já as forças de superfície são calculadas em cada face do elemento levando em conta as direções x, y e z , sejam as tensões $\sigma_{xx}, \tau_{yx}, \tau_{zx}$ onde σ representa tensões normais e τ representa as tensões tangenciais. O primeiro termo de cada índice representa a direção da tensão e o segundo termo representa a face analisada [43]. Calculando para todas as faces e fazendo simplificações tem-se

$$\begin{aligned} dF_{S_x} &= \left(\frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz , \\ dF_{S_y} &= \left(\frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz , \\ dF_{S_z} &= \left(\frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) dx dy dz . \end{aligned} \quad (\text{A.12})$$

De (A.10)-(A.12) as forças que atuam sobre uma partícula de fluido nas dire-

ções x, y e z são dadas por

$$\begin{aligned} dF_x &= \left(\rho g_x + \frac{\partial \sigma_{xx}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yx}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz , \\ dF_y &= \left(\rho g_y + \frac{\partial \tau_{xy}}{\partial x} + \frac{\partial \sigma_{yy}}{\partial y} + \frac{\partial \tau_{zx}}{\partial z} \right) dx dy dz , \\ dF_z &= \left(\rho g_z + \frac{\partial \tau_{xz}}{\partial x} + \frac{\partial \tau_{yz}}{\partial y} + \frac{\partial \sigma_{zz}}{\partial z} \right) dx dy dz . \end{aligned} \quad (\text{A.13})$$

Os termos de tensão de cisalhamento e tensão normal para fluidos newtonianos são dados por

$$\begin{aligned} \tau_{xy} = \tau_{yx} &= \mu \left(\frac{\partial v}{\partial x} + \frac{\partial u}{\partial y} \right) , \quad \tau_{yz} = \tau_{zy} = \mu \left(\frac{\partial w}{\partial y} + \frac{\partial v}{\partial z} \right) , \quad \tau_{xz} = \tau_{zx} = \mu \left(\frac{\partial u}{\partial z} + \frac{\partial w}{\partial x} \right) , \\ \sigma_{xx} &= -p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial u}{\partial x} , \quad \sigma_{yy} = -p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial v}{\partial y} , \quad \sigma_{zz} = -p - \frac{2}{3} \mu \nabla \cdot \vec{V} + 2\mu \frac{\partial w}{\partial z} , \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

onde p é a pressão termodinâmica relacionada com a massa e a temperatura. A dedução das expressões destes termos podem ser encontrados em [25].

Substituindo (A.13)-(A.14) em (A.10) e como ρ e μ são constantes obtém-se as expressões

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{u \partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{v \partial(\rho u)}{\partial y} + \frac{w \partial(\rho u)}{\partial z} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho f_1 , \quad (\text{A.15})$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{u \partial(\rho v)}{\partial x} + \frac{v \partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{w \partial(\rho v)}{\partial z} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho f_2 , \quad (\text{A.16})$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{u \partial(\rho w)}{\partial x} + \frac{v \partial(\rho w)}{\partial y} + \frac{w \partial(\rho w)}{\partial z} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho f_3 . \quad (\text{A.17})$$

Os termos f_1, f_2, f_3 representam outras forças externas que podem agir sobre o sistema.

As equações (A.15)-(A.17) são chamadas de equações de Navier-Stokes. Incluindo a equação de conservação de massa (A.5) no sistema, obtém-se o sistema que modela o escoamento de um fluido newtoniano, incompressível, com viscosidade constante, laminar e

interno.

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0, \quad (\text{A.18})$$

$$\frac{\partial(\rho u)}{\partial t} + \frac{u\partial(\rho u)}{\partial x} + \frac{v\partial(\rho u)}{\partial y} + \frac{w\partial(\rho u)}{\partial z} = \rho g_x - \frac{\partial p}{\partial x} + \mu \left(\frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 u}{\partial z^2} \right) + \rho f_1, \quad (\text{A.19})$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t} + \frac{u\partial(\rho v)}{\partial x} + \frac{v\partial(\rho v)}{\partial y} + \frac{w\partial(\rho v)}{\partial z} = \rho g_y - \frac{\partial p}{\partial y} + \mu \left(\frac{\partial^2 v}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v}{\partial z^2} \right) + \rho f_2, \quad (\text{A.20})$$

$$\frac{\partial(\rho w)}{\partial t} + \frac{u\partial(\rho w)}{\partial x} + \frac{v\partial(\rho w)}{\partial y} + \frac{w\partial(\rho w)}{\partial z} = \rho g_z - \frac{\partial p}{\partial z} + \mu \left(\frac{\partial^2 w}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 w}{\partial z^2} \right) + \rho f_3. \quad (\text{A.21})$$

O modelo (A.18)-(A.21) é utilizado não apenas em estudos de escoamentos em corpos d'água [43, 25], mas também em diversos problemas de mecânica dos fluidos, como por exemplo, a taxa de evaporação em corpos d'água [51], deslocamento de massas de ar [48], entre outros.

B EQUAÇÃO DE GERAÇÃO DE MALHAS EM COORDENADAS GENERALIZADAS

Devido a complexidade da geometria do lago Luruaco, a utilização de coordenadas cartesianas exigiria um refinamento maior nas regiões com curvas irregulares e "bicos". Com o uso das coordenadas generalizadas, o domínio se transforma em uma região regular, mantendo propriedades como a localização de entradas e saídas de água e a regularidade de pontos no domínio, facilitando a simulação computacional.

A transformação de coordenadas utiliza as métricas de transformação de coordenadas cartesianas para coordenadas generalizadas. A ideia é obter expressões onde as derivadas de $\frac{\partial \xi}{\partial x}, \frac{\partial \xi}{\partial y}, \frac{\partial \eta}{\partial x}, \frac{\partial \eta}{\partial y}$ sejam escritas em função de ξ e η . Esses resultados são válidos pelo fato das funções $\xi = \xi(x, y)$ e $\eta = \eta(x, y)$ admitirem inversas (Teorema da função inversa) [35]. Como o modelo utilizado neste estudo, trabalha com apenas duas variáveis, utiliza-se uma abordagem matricial para simplificar os cálculos.

Considere as diferenciais de ξ e η expressas por

$$\partial \xi = \frac{\partial \xi}{\partial x} dx + \frac{\partial \xi}{\partial y} dy, \quad (\text{B.1})$$

$$\partial \eta = \frac{\partial \eta}{\partial x} dx + \frac{\partial \eta}{\partial y} dy. \quad (\text{B.2})$$

Na forma matricial tem-se

$$\begin{bmatrix} \partial \xi \\ \partial \eta \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix}, \quad (\text{B.3})$$

onde chama-se A , a matriz dos coeficientes em (B.3). As equações (B.1)-(B.2) formam um sistema possível e determinado. Admitindo também que existam as funções inversas $x = x(\xi, \eta)$ e $y = y(\xi, \eta)$, então pode-se determinar uma solução tal que

$$\begin{bmatrix} dx \\ dy \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\partial x}{\partial \xi} & \frac{\partial x}{\partial \eta} \\ \frac{\partial y}{\partial \xi} & \frac{\partial y}{\partial \eta} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \partial \xi \\ \partial \eta \end{bmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

Denomina-se B a matriz dos coeficientes em (B.4). Além disso, a matriz dos coeficientes em

(B.3) satisfaz a propriedade

$$\begin{bmatrix} \frac{\partial \xi}{\partial x} & \frac{\partial \xi}{\partial y} \\ \frac{\partial \eta}{\partial x} & \frac{\partial \eta}{\partial y} \end{bmatrix} = \frac{1}{\det B} \begin{bmatrix} \frac{\partial y}{\partial \eta} & -\frac{\partial y}{\partial \xi} \\ -\frac{\partial x}{\partial \eta} & \frac{\partial x}{\partial \xi} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.5})$$

com

$$\det B = \left[\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right]. \quad (\text{B.6})$$

Chamando de J a seguinte expressão

$$J = \frac{1}{\det B} = \left[\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} - \frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} \right]^{-1}, \quad (\text{B.7})$$

a partir de (B.5) pode-se obter as seguintes expressões

$$\frac{\partial \xi}{\partial x} = J \frac{\partial y}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial \xi}{\partial y} = -J \frac{\partial x}{\partial \eta}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial x} = -J \frac{\partial y}{\partial \xi}, \quad \frac{\partial \eta}{\partial y} = J \frac{\partial x}{\partial \xi}, \quad (\text{B.8})$$

chamadas de métricas de transformação.

Para a geração de malhas em coordenadas generalizadas utiliza-se o sistema acoplado de equações diferenciais parciais

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = P(\xi, \eta), \quad (\text{B.9})$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = Q(\xi, \eta), \quad (\text{B.10})$$

onde P e Q são termos que ajustam a distribuição das linhas e pontos da malha. O sistema (B.9)-(B.10) possui a propriedade de garantir que o jacobiano da transformação seja não nulo no domínio [35]. A seguir, as equações (B.9)-(B.10) serão reescritas em termos das métricas de transformação.

Seja $F = F(\xi, \eta)$ a propriedade analisada na equação, uma vez que

$$\xi = \xi(x, y) \quad \text{e} \quad \eta = \eta(x, y), \quad (\text{B.11})$$

aplicando a regra da cadeia da derivação em ξ e η obtém-se

$$\frac{\partial F}{\partial x} = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (\text{B.12})$$

$$\frac{\partial F}{\partial y} = \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (\text{B.13})$$

Derivando as equações (B.12)-(B.13) em relação à x e y novamente, obtém-se

$$\frac{\partial^2 F}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right), \quad (\text{B.14})$$

$$\frac{\partial^2 F}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right). \quad (\text{B.15})$$

Da regra da cadeia da derivação segue que

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (\text{B.16})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (\text{B.17})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x}, \quad (\text{B.18})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (\text{B.19})$$

Assim, substituindo (B.16)-(B.19) em (B.14)-(B.15) segue que

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial x^2} &= \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \right] \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \\ &+ \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \right] \frac{\partial \eta}{\partial x} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial F}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial F}{\partial \eta} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] + 2 \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \right] \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}, \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial^2 F}{\partial y^2} &= \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right] \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial \xi} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \\ &+ \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial y} \right] \frac{\partial \eta}{\partial y} + \frac{\partial F}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \\ &= \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial F}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] \\ &+ \frac{\partial F}{\partial \eta} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] + 2 \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial F}{\partial \xi} \right) \right] \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y}. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Agora, tomando $F = x$ e também $F = y$ em (B.20) obtém-se as equações

$$0 = \frac{\partial^2 x}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial x}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial x}{\partial \eta} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] + 2 \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \right] \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad (\text{B.22})$$

$$0 = \frac{\partial^2 y}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial y}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \right] + \frac{\partial y}{\partial \eta} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \right] + 2 \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \right] \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}. \quad (\text{B.23})$$

Multiplicando a equação (B.22) por $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ e a equação (B.23) por $\frac{\partial \xi}{\partial y}$ e somando-as, segue que

$$0 = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \left[\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \left[\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right] + \frac{\partial \xi}{\partial x} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right] + \frac{\partial \xi}{\partial y} \left[\frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right]. \quad (\text{B.24})$$

Definindo

$$E_1 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad (\text{B.25})$$

$$F_1 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad (\text{B.26})$$

e substituindo as métricas de transformação dadas em (B.8), tem-se que

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) \underbrace{\left[\frac{\partial x}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \xi} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right]}_{=1} + \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) \underbrace{\left[\frac{\partial x}{\partial \eta} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right]}_{=0} = \\ & = - \left(E_1 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.27})$$

Logo,

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) = - \left[E_1 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right]. \quad (\text{B.28})$$

Do mesmo modo, substituindo $F = y$ e $F = x$ em (B.21), obtém-se

$$0 = \frac{\partial^2 y}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial y}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial y}{\partial \eta} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] + 2 \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \right] \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y}. \quad (\text{B.29})$$

$$0 = \frac{\partial^2 x}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial x}{\partial \xi} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \right] + \frac{\partial x}{\partial \eta} \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \right] + 2 \left[\frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \right] \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y}. \quad (\text{B.30})$$

Multiplicando as equações (B.29) e (B.30) por $\frac{\partial \xi}{\partial y}$ e $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ respectivamente e somando-as, segue que

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) = - \left[E_2 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_2 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right], \quad (\text{B.31})$$

com

$$E_2 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (\text{B.32})$$

$$F_2 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial y}{\partial \eta} \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + 2 \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (\text{B.33})$$

De maneira análoga, considerando as equações (B.22)-(B.23), multiplicando-as por $\frac{\partial \eta}{\partial x}$ e $\frac{\partial \eta}{\partial y}$ respectivamente, e somando-as, tem-se

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) = - \left[E_1 \frac{\partial \eta}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \eta}{\partial y} \right]. \quad (\text{B.34})$$

O mesmo ocorre quando multiplica-se por $\frac{\partial \eta}{\partial x}$ e $\frac{\partial \eta}{\partial y}$, respectivamente as equações (B.29)-(B.30) e somando-as segue que

$$\frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = - \left[E_2 \frac{\partial \eta}{\partial x} + F_2 \frac{\partial \eta}{\partial y} \right]. \quad (\text{B.35})$$

Logo, de (B.28), (B.31), (B.34) e (B.35), obtém-se as expressões

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right) = - \left[E_1 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right], \quad (\text{B.36})$$

$$\frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right) = - \left[E_2 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_2 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right], \quad (\text{B.37})$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right) = - \left[E_1 \frac{\partial \eta}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \eta}{\partial y} \right], \quad (\text{B.38})$$

$$\frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} = \frac{\partial}{\partial y} \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right) = - \left[E_2 \frac{\partial \eta}{\partial x} + F_2 \frac{\partial \eta}{\partial y} \right], \quad (\text{B.39})$$

onde

$$E_1 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad (\text{B.40})$$

$$F_1 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x}, \quad (\text{B.41})$$

$$E_2 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}, \quad (\text{B.42})$$

$$F_2 = \frac{\partial}{\partial \xi} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2 + \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2 + 2 \frac{\partial}{\partial \eta} \left(\frac{\partial y}{\partial \xi} \right) \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}. \quad (\text{B.43})$$

Os termos P e Q nas equações (B.9)-(B.10) possuem a propriedade de ajustar a concentração de linhas em determinadas regiões. Esses ajustes podem ser expressos por diversas maneiras [35]. Neste estudo, utiliza-se P e Q definidos em (5.17)-(5.18), dadas por

$$P(\xi, \eta) = - \sum_{j=1}^{n_j} a_j \text{sign}(\xi - \xi_j) e^{-c_j |\xi - \xi_j|} - \sum_{i=1}^{n_i} b_i \text{sign}(\xi - \xi_i) e^{-d_i \sqrt{(\xi - \xi_i)^2 + (\eta - \eta_i)^2}},$$

$$Q(\xi, \eta) = - \sum_{j=1}^{n_j} a_j \text{sign}(\eta - \eta_j) e^{-c_j |\eta - \eta_j|} - \sum_{i=1}^{n_i} b_i \text{sign}(\eta - \eta_i) e^{-d_i \sqrt{(\xi - \xi_i)^2 + (\eta - \eta_i)^2}}.$$

Note que ξ_j e η_j são as linhas para as quais serão atraídas as outras linhas ξ e η , respectivamente. Deste modo, o primeiro termo das equações (5.17)-(5.18) é responsável pela atração entre as linhas coordenadas. Note que o coeficiente c_j pode ser ajustado para aumentar ou diminuir a atração entre as linhas, uma vez que o termo exponencial (com expoente negativo) faz com que as linhas mais próximas ξ_j ou η_j sofram mais atração em relação as que estão mais distantes. Já o segundo termo das equações (5.17)-(5.18) é responsável pela atração das linhas aos pontos escolhidos e possuem comportamento semelhante ao do primeiro termo, ou seja, ajustando o termo d_j pode-se ajustar a distância entre os pontos que estão na linha a ser atraída e os pontos

que a atraem.

Assim, substituindo as equações (B.36)-(B.39), (B.44)-(B.44) em (B.9) - (B.10), obtém-se

$$\begin{aligned} -P = \frac{\partial^2 \xi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \xi}{\partial y^2} &= + \left(E_1 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) + \left(E_2 \frac{\partial \xi}{\partial x} + F_2 \frac{\partial \xi}{\partial y} \right) \\ &= \left[\underbrace{(E_1 + E_2)}_{=E} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \underbrace{(F_1 + F_2)}_{=F} \frac{\partial \xi}{\partial y} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.44})$$

$$\begin{aligned} -Q = \frac{\partial^2 \eta}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \eta}{\partial y^2} &= + \left(E_1 \frac{\partial \eta}{\partial x} + F_1 \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) + \left(E_2 \frac{\partial \eta}{\partial x} + F_2 \frac{\partial \eta}{\partial y} \right) \\ &= \left[\underbrace{(E_1 + E_2)}_{=E} \frac{\partial \eta}{\partial x} + \underbrace{(F_1 + F_2)}_{=F} \frac{\partial \eta}{\partial y} \right], \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

onde

$$E = E_1 + E_2 \quad \text{e} \quad F = F_1 + F_2. \quad (\text{B.46})$$

Multiplicando a equação (B.44) por $\frac{\partial \eta}{\partial y}$, a equação (B.45) por $\frac{\partial \xi}{\partial y}$ e subtraindo-as, obtém-se a expressão

$$\begin{aligned} Q \frac{\partial \xi}{\partial y} - P \frac{\partial \eta}{\partial y} &= -E \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial y} - F \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial y} + E \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial y} + F \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y} \\ &= E \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial y} - \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial x} \right), \end{aligned} \quad (\text{B.47})$$

Um procedimento análogo pode ser feito, agora multiplicando as equações (B.44)-(B.45) por $\frac{\partial \eta}{\partial x}$ e $\frac{\partial \xi}{\partial x}$ respectivamente, obtém-se

$$\begin{aligned} Q \frac{\partial \xi}{\partial x} - P \frac{\partial \eta}{\partial x} &= -E \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} - F \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial x} + E \frac{\partial \xi}{\partial x} \frac{\partial \eta}{\partial x} + F \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial x} \\ &= F \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial x} - \frac{\partial \eta}{\partial y} \frac{\partial \xi}{\partial x} \right). \end{aligned} \quad (\text{B.48})$$

Assim, simplificando as equações (B.47)-(B.48) e multiplicando por $\frac{1}{J}$, tem-se que

$$E = \frac{1}{J} \left(-P \frac{\partial \eta}{\partial y} + Q \frac{\partial \xi}{\partial y} \right), \quad (\text{B.49})$$

$$F = -\frac{1}{J} \left(-P \frac{\partial \eta}{\partial x} + Q \frac{\partial \xi}{\partial x} \right). \quad (\text{B.50})$$

Utilizando as métricas de transformação em (B.8) pode-se rescrever (B.49)-(B.50) como

$$E = - \left(\frac{1}{J} \right)^2 \left(P \frac{\partial x}{\partial \xi} + Q \frac{\partial x}{\partial \eta} \right), \quad (\text{B.51})$$

$$F = - \left(\frac{1}{J} \right)^2 \left(P \frac{\partial y}{\partial \xi} + Q \frac{\partial y}{\partial \eta} \right). \quad (\text{B.52})$$

Substituindo os valores de E e F , obtidos em (B.46), (B.41)-(B.43) nas equações (B.51)-(B.52) obtém-se as seguintes equações para geração de malhas

$$a \frac{\partial^2 x}{\partial \xi^2} + b \frac{\partial^2 x}{\partial \eta^2} + 2c \frac{\partial^2 x}{\partial \eta \partial \xi} + \left(\frac{1}{J^2} \right) \left(P \frac{\partial x}{\partial \xi} + Q \frac{\partial x}{\partial \eta} \right) = 0, \quad (\text{B.53})$$

$$a \frac{\partial^2 y}{\partial \xi^2} + b \frac{\partial^2 y}{\partial \eta^2} + 2c \frac{\partial^2 y}{\partial \eta \partial \xi} + \left(\frac{1}{J^2} \right) \left(P \frac{\partial y}{\partial \xi} + Q \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) = 0, \quad (\text{B.54})$$

com

$$a = \left(\frac{\partial \xi}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \xi}{\partial y} \right)^2,$$

$$b = \left(\frac{\partial \eta}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial \eta}{\partial y} \right)^2,$$

$$c = \frac{\partial \eta}{\partial x} \frac{\partial \xi}{\partial x} + \frac{\partial \xi}{\partial y} \frac{\partial \eta}{\partial y}.$$

(B.55)

C MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS

O método de diferenças finitas aproxima as derivadas através de expressões algébricas que estão relacionados com a expansão em série de Taylor.

Seja um domínio temporal-bidimensional espacial discretizado em coordenadas generalizadas (ξ, η) .

No caso das equações de Navier-Stokes, como a malha utilizada é estruturada, considera-se que a pressão está localizada no centro da célula e as velocidades nas faces. Há casos em que a variável não está definida em pontos vizinhos daquele em que deseja-se calcular. Nesses casos é possível fazer uma aproximação através de médias entre os valores já conhecidos em torno deste ponto.

C.1 DISCRETIZAÇÃO DE DERIVADAS ESPACIAIS

Considere uma função $f(\xi, \eta)$ contínua em $[a, b] \times [c, d]$ com derivadas parciais até a ordem N nas direções i, j . O Teorema de Taylor nos garante que para todo ponto $\xi \in [a, b]$ e na direção i tem-se

$$f(\xi_i + \Delta\xi, \eta_j) = f(\xi_i, \eta_j) + (\Delta\xi) \frac{\partial f}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i, \eta_j} + \frac{(\Delta\xi)^2}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} \Big|_{\xi_i, \eta_j} + \frac{(\Delta\xi)^3}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial \xi^3} \Big|_{\xi_i, \eta_j} + \dots + R_N, \quad (\text{C.1})$$

onde $\Delta\xi = \xi - \xi_i$ e $R_N = \frac{(\Delta\xi)^N}{N!} \frac{\partial^N f}{\partial \xi^N} \Big|_{\xi_\zeta, \eta_j}$ para algum $\xi_\zeta \in [\xi_i, \xi_i + \Delta\xi]$.

Isolando o termo $\frac{\partial f}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i, \eta_j}$ de (C.1) obtém-se

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i, \eta_j} = \frac{f(\xi_i + \Delta\xi, \eta_j) - f(\xi_i, \eta_j)}{\Delta\xi} + \left[-\frac{(\Delta\xi)}{2!} \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} \Big|_{\xi_i, \eta_j} - \frac{(\Delta\xi)^2}{3!} \frac{\partial^3 f}{\partial \xi^3} \Big|_{\xi_i, \eta_j} - \dots - \frac{(\Delta\xi)^{N-1}}{N!} \frac{\partial^N f}{\partial \xi^N} \Big|_{\xi_i, \eta_j} \right], \quad (\text{C.2})$$

onde o termo entre colchetes é chamado de erro local de truncamento (ELT). Além disso, conforme o refinamento da malha aumenta o ELT tende a ser menor.

Reescrevendo a equação (C.2) segue que

$$\frac{\partial f}{\partial \xi} \Big|_{\xi_i, \eta_j} = \frac{f(\xi_i + \Delta\xi, \eta_j) - f(\xi_i, \eta_j)}{\Delta\xi} + O(\Delta\xi), \quad (\text{C.3})$$

onde $O(\Delta\xi)$ significa a ordem de $\Delta\xi$, indicando a ordem do erro local de truncamento. A ordem está relacionada com a potência que acompanha $\Delta\xi$ no primeiro termo do ELT.

Assim, é possível obter uma expressão que estima a primeira derivada da

função f , dada por

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \xi} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i + \Delta\xi, \eta_j) - f(\xi_i, \eta_j)}{\Delta\xi}. \quad (\text{C.4})$$

A equação (C.4) é chamada de *diferença progressiva*, pois utiliza informações de termos posteriores ao que se está calculando. Outras expressões podem ser desenvolvidas se utilizarmos diferentes combinações de pontos como

Diferença atrasada:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \xi} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i, \eta_j) - f(\xi_i - \Delta\xi, \eta_j)}{\Delta\xi}. \quad (\text{C.5})$$

Diferença central:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \xi} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i + \Delta\xi, \eta_j) - f(\xi_i - \Delta\xi, \eta_j)}{2\Delta\xi}. \quad (\text{C.6})$$

Diferença finita para a segunda derivada:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i + \Delta\xi, \eta_j) - 2f(\xi_i, \eta_j) + f(\xi_i - \Delta\xi, \eta_j)}{(\Delta\xi)^2}. \quad (\text{C.7})$$

O análogo pode ser deduzido para a coordenada η , agora calculado na direção j , obtendo as seguintes expressões

Diferença progressiva:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \eta} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i, \eta_j + \Delta\eta) - f(\xi_i, \eta_j)}{\Delta\eta}, \quad (\text{C.8})$$

Diferença atrasada:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \eta} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i, \eta_j) - f(\xi_i, \eta_j - \Delta\eta)}{\Delta\eta}, \quad (\text{C.9})$$

Diferença central:

$$\left. \frac{\partial f}{\partial \eta} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i, \eta_j + \Delta\eta) - f(\xi_i, \eta_j - \Delta\eta)}{2\Delta\eta}, \quad (\text{C.10})$$

Diferença finita para a segunda derivada:

$$\left. \frac{\partial^2 f}{\partial \eta^2} \right|_{\xi_i, \eta_j} \approx \frac{f(\xi_i, \eta_j + \Delta\eta) - 2f(\xi_i, \eta_j) + f(\xi_i, \eta_j - \Delta\eta)}{(\Delta\eta)^2}. \quad (\text{C.11})$$

C.2 DISCRETIZAÇÃO DA DERIVADA TEMPORAL

Neste estudo, a discretização das derivadas temporais é realizada através do método de diferença finita progressiva, dada por

$$\left. \frac{\partial f}{\partial t} \right|_{\tau_k} \approx \frac{f(\tau_k + \Delta\tau) - f(\tau_k)}{\Delta\tau}. \quad (\text{C.12})$$

D DISCRETIZAÇÃO DAS EQUAÇÕES HIDRODINÂMICAS E EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

A geometria do lago Luruaco desenvolvida através do método multibloco na Seção (5.2), transforma a região em uma geometria discreta. Para que o modelo hidrodinâmico e o modelo de concentração de coliformes fecais possam ser simulados computacionalmente na geometria do lago é necessário discretizar as equações dos modelos.

Sendo assim, cada ponto do domínio tem coordenadas (ξ_i, η_j) , mas terá sua representação na malha através do par (i, j) . Quando o tempo t também varia, indica-se na malha com o índice k .

O modelo descrito no Capítulo 4 será discretizado utilizando o método de diferenças finitas descrito no Apêndice C, separadamente em relação aos termos da equação de conservação de massa, termo temporal, termo convectivo, termo de pressão, termo difusivo e termo reativo. Para facilitar o entendimento dos cálculos, por abuso de notação apresenta-se novamente as equações (4.1)-(4.4)

Modelo hidrodinâmico:

$$\underbrace{\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta}}_{\text{termos da eq. de cons. de massa}} = 0, \quad (\text{D.1})$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (Uu) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vu)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right)}_{\text{termo de pressão}} + \nu \left[\underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right. \\ \left. + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right], \quad (\text{D.2})$$

$$\underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} (Uv) + \frac{\partial}{\partial \eta} (Vv)}_{\text{termo convectivo}} = \underbrace{\frac{1}{J} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right)}_{\text{termo de pressão}} + \nu \left[\underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} \left(J \left(\alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right. \\ \left. + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \eta} \left(J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right)}_{\text{termo difusivo}} \right], \quad (\text{D.3})$$

Modelo de concentração de coliformes fecais:

$$\begin{aligned}
 \underbrace{\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right)}_{\text{termo temporal}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi}(UC) + \frac{\partial}{\partial \eta}(VC)}_{\text{termo convectivo}} = & \underbrace{\frac{KC}{J}}_{\text{termo reativo}} + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \right]}_{\text{termo difusivo}} \\
 & + \underbrace{\frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\sigma \frac{\partial C}{\partial \eta} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) \right]}_{\text{termo difusivo}}. \tag{D.4}
 \end{aligned}$$

• **Termos da equação de conservação de massa:**

Para discretizar os termos da equação (D.1), utiliza-se o método de diferenças finitas centrais para as derivadas espaciais, tomadas no tempo k . Assim obtém-se as aproximações

$$\left. \frac{\partial U}{\partial \xi} \right|_e^k \approx \frac{U|_E^k - U|_P^k}{2 \left(\frac{\Delta \xi}{2} \right)} = \frac{U|_E^k - U|_P^k}{\Delta \xi} = U|_E^k - U|_P^k, \tag{D.5}$$

$$\left. \frac{\partial V}{\partial \eta} \right|_n^k \approx \frac{V|_N^k - V|_P^k}{2 \left(\frac{\Delta \eta}{2} \right)} = \frac{V|_N^k - V|_P^k}{\Delta \eta} = V|_N^k - V|_P^k. \tag{D.6}$$

Como U e V estão definidos apenas nas faces das células, obtém-se os valores de $U|_E^k$, $U|_P^k$, $V|_N^k$ e $V|_P^k$ através da média aritmética dos valores próximos e localizados na mesma direção em que se deseja calcular, isto é

$$U|_E^k = \frac{U|_e^k + U|_{eee}^k}{2}, \quad U|_P^k = \frac{U|_w^k + U|_e^k}{2}, \quad V|_N^k = \frac{V|_n^k + V|_{nnn}^k}{2}, \quad V|_P^k = \frac{V|_s^k + V|_n^k}{2}. \tag{D.7}$$

Assim a equação de conservação de massa na forma discretizada pode ser aproximada como

$$\frac{\partial U}{\partial \xi} + \frac{\partial V}{\partial \eta} \approx U|_E^k - U|_P^k + V|_N^k - V|_P^k = 0, \tag{D.8}$$

com as aproximações dos termos dados em (D.7).

• **Termo temporal:**

O termo temporal é expresso por apenas uma derivada de primeira ordem nas equações (D.2)-(D.4). Note que para $t = 0$ são assumidas condições iniciais para a velocidade e pressão. Avançando Δt , as variáveis são calculadas sobre o tempo obtido anteriormente, e assim sucessivamente até chegar ao tempo final.

Utilizando o método de diferenças finitas progressivas no tempo k , então aplicando as

discretizações nas faces e e n tem-se que

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{u}{J} \right) \Big|_e^k \approx \frac{\left(\frac{u}{J} \right) \Big|_e^{k+1} - \left(\frac{u}{J} \right) \Big|_e^k}{\Delta \tau} = \frac{1}{J_e} \left(\frac{u|_e^{k+1} - u|_e^k}{\Delta \tau} \right), \quad (\text{D.9})$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{v}{J} \right) \Big|_n^k \approx \frac{\left(\frac{v}{J} \right) \Big|_n^{k+1} - \left(\frac{v}{J} \right) \Big|_n^k}{\Delta \tau} = \frac{1}{J_n} \left(\frac{v|_n^{k+1} - v|_n^k}{\Delta \tau} \right), \quad (\text{D.10})$$

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\frac{C}{J} \right) \Big|_P^k \approx \frac{\left(\frac{C}{J} \right) \Big|_P^{k+1} - \left(\frac{C}{J} \right) \Big|_P^k}{\Delta \tau} = \frac{1}{J_P} \left(\frac{C|_P^{k+1} - C|_P^k}{\Delta \tau} \right). \quad (\text{D.11})$$

- **Termo convectivo:**

Uma das dificuldades encontradas na discretização das equações de Navier-Stokes está na não linearidade dos termos convectivos. O método de diferenças finitas abordado no Apêndice D aproxima as derivadas dessa equação, porém os termos não lineares podem gerar efeitos de difusão numérica [23], causando a suavização do gradiente ou gerando oscilações que podem alterar a precisão dos resultados.

Para contornar esse problema são desenvolvidos métodos denominados *Upwind* [4]. Os métodos *Upwind* podem ser classificados como de baixa ordem, como por exemplo o *FOU* (*First Order Upwind*) e os de ordem superior, como método *QUICK* (*Quadratic Upstream Interpolation for Convective Kinematics*) ou o método *SOU* (*Second-Order Upwind*) [24].

Para este estudo, utiliza-se o método *FOU* que trabalha com o esquema progressivo e regressivo no espaço, dependendo da direção da velocidade. Quando o sinal da componente de convecção é positivo, utiliza-se o método regressivo. Analogamente, se a componente de convecção é negativa utiliza-se o método progressivo. Assim, se a velocidade é positiva ($u \geq 0$), a solução se move para a direita, e portanto utiliza-se os pontos anteriores para poder calcular o ponto posterior. Caso contrário, quando a velocidade é negativa ($u < 0$), a solução se move para a esquerda e portanto utiliza-se os pontos posteriores ao que se deseja calcular. O esquema é aplicado, em geral, em fluidos onde o transporte das propriedades é realizado predominantemente convectivo.

Assim considere

$$\mathcal{C}(u) = \frac{\partial}{\partial \xi}(Uu) + \frac{\partial}{\partial \eta}(Vu), \quad (\text{D.12})$$

$$\mathcal{C}(v) = \frac{\partial}{\partial \xi}(Uv) + \frac{\partial}{\partial \eta}(Vv), \quad (\text{D.13})$$

$$\mathcal{C}(C) = \frac{\partial}{\partial \xi}(UC) + \frac{\partial}{\partial \eta}(VC), \quad (\text{D.14})$$

que representam os termos convectivos das equações (D.2)-(D.4). Inicialmente utiliza-se a discretização por diferenças centrais tomadas no tempo k . Para o termo (D.12) tem-se

$$\begin{aligned} \mathcal{C}(u)|_e^k &= \left. \frac{\partial}{\partial \xi}(Uu) \right|_e^k + \left. \frac{\partial}{\partial \eta}(Vu) \right|_e^k \\ &\approx \frac{(Uu)|_E^k - (Uu)|_P^k}{\Delta \xi} + \frac{(Vu)|_{ne}^k - (Vu)|_{se}^k}{\Delta \eta} \\ &\approx \bar{U}|_E^k u|_E^k - \bar{U}|_P^k u|_P^k + \bar{V}|_{ne}^k u|_{ne}^k - \bar{V}|_{se}^k u|_{se}^k, \end{aligned} \quad (\text{D.15})$$

onde \bar{U} e \bar{V} são chamados de componentes de convecção e u e v são as componentes da velocidade do fluido. Além disso, note que \bar{U} e \bar{V} são obtidos através de médias aritméticas em pontos vizinhos ao que se deseja calcular, de modo que

$$\bar{U}|_E^k = \frac{U|_e^k + U|_{eee}^k}{2}, \quad \bar{U}|_P^k = \frac{U|_w^k + U|_e^k}{2}, \quad \bar{V}|_{ne}^k = \frac{V|_n^k + V|_{nee}^k}{2}, \quad \bar{V}|_{se}^k = \frac{V|_s^k + V|_{see}^k}{2}. \quad (\text{D.16})$$

Aplicando o esquema *FOU* nas componentes da velocidade u e obtém-se

$$u|_E^k = \left(\frac{1 + S_E^k}{2} \right) u|_e^k + \left(\frac{1 - S_E^k}{2} \right) u|_{eee}^k \quad \text{com} \quad S_E^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_E^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_E^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.17})$$

$$u|_P^k = \left(\frac{1 + S_P^k}{2} \right) u|_w^k + \left(\frac{1 - S_P^k}{2} \right) u|_e^k \quad \text{com} \quad S_P^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_P^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_P^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.18})$$

$$u|_{ne}^k = \left(\frac{1 + S_{ne}^k}{2} \right) u|_e^k + \left(\frac{1 - S_{ne}^k}{2} \right) u|_{nee}^k \quad \text{com} \quad S_{ne}^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_{ne}^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_{ne}^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.19})$$

$$u|_{se}^k = \left(\frac{1 + S_{se}^k}{2} \right) u|_{sse}^k + \left(\frac{1 - S_{se}^k}{2} \right) u|_e^k \quad \text{com} \quad S_{se}^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_{se}^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_{se}^k < 0 \end{cases}. \quad (\text{D.20})$$

De modo análogo, obtém-se as discretizações para as equações (D.13)-(D.14)

$$\mathcal{C}(v)|_n^k \approx \bar{U}|_{ne}^k v|_{ne}^k - \bar{U}|_{nw}^k v|_{nw}^k + \bar{V}|_N^k v|_N^k - \bar{V}|_P^k v|_P^k, \quad (\text{D.21})$$

$$\mathcal{C}(C)|_P^k \approx \bar{U}|_E^k C|_E^k - \bar{U}|_W^k C|_W^k + \bar{V}|_N^k C|_N^k - \bar{V}|_S^k C|_S^k, \quad (\text{D.22})$$

com as velocidades de convecção dadas por

$$\begin{aligned} \bar{U}|_{ne}^k &= \frac{U|_e^k + U|_{nne}^k}{2}, & \bar{U}|_{nw}^k &= \frac{U|_w^k + U|_{nnw}^k}{2}, & \bar{V}|_N^k &= \frac{V|_n^k + V|_{nnn}^k}{2}, & \bar{V}|_P^k &= \frac{V|_s^k + V|_n^k}{2}, \\ \bar{U}|_E^k &= \frac{U|_P^k + U|_{EE}^k}{2}, & \bar{U}|_W^k &= \frac{U|_{WW}^k + U|_P^k}{2}, & \bar{V}|_N^k &= \frac{V|_P^k + V|_{NN}^k}{2}, & \bar{V}|_S^k &= \frac{V|_{SS}^k + V|_P^k}{2}. \end{aligned} \quad (\text{D.23})$$

e aplicando o método *FOU* nas componentes da velocidade v e C obtém-se as aproximações

$$v|_{ne}^k = \left(\frac{1 + S_{ne}^k}{2} \right) v|_n^k + \left(\frac{1 - S_{ne}^k}{2} \right) v|_{nee}^k \quad \text{com} \quad S_{ne}^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_{ne}^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_{ne}^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.24})$$

$$v|_{nw}^k = \left(\frac{1 + S_{nw}^k}{2} \right) v|_{nww}^k + \left(\frac{1 - S_{nw}^k}{2} \right) v|_n^k \quad \text{com} \quad S_{nw}^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_{nw}^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_{nw}^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.25})$$

$$v|_N^k = \left(\frac{1 + S_N^k}{2} \right) v|_n^k + \left(\frac{1 - S_N^k}{2} \right) v|_{nnn}^k \quad \text{com} \quad S_N^k = \begin{cases} 1, \bar{V}|_N^k \geq 0 \\ -1, \bar{V}|_N^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.26})$$

$$v|_P^k = \left(\frac{1 + S_P^k}{2} \right) v|_s^k + \left(\frac{1 - S_P^k}{2} \right) v|_n^k \quad \text{com} \quad S_P^k = \begin{cases} 1, \bar{V}|_P^k \geq 0 \\ -1, \bar{V}|_P^k < 0 \end{cases}. \quad (\text{D.27})$$

$$C|_E^k = \left(\frac{1 + S_E^k}{2} \right) C|_P^k + \left(\frac{1 - S_E^k}{2} \right) C|_{EE}^k \quad \text{com} \quad S_E^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_E^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_E^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.28})$$

$$C|_W^k = \left(\frac{1 + S_W^k}{2} \right) C|_{WW}^k + \left(\frac{1 - S_W^k}{2} \right) C|_P^k \quad \text{com} \quad S_W^k = \begin{cases} 1, \bar{U}|_W^k \geq 0 \\ -1, \bar{U}|_W^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.29})$$

$$C|_N^k = \left(\frac{1 + S_N^k}{2} \right) C|_P^k + \left(\frac{1 - S_N^k}{2} \right) C|_{NN}^k \quad \text{com} \quad S_N^k = \begin{cases} 1, \bar{V}|_N^k \geq 0 \\ -1, \bar{V}|_N^k < 0 \end{cases}. \quad (\text{D.30})$$

$$C|_S^k = \left(\frac{1 + S_S^k}{2} \right) C|_{SS}^k + \left(\frac{1 - S_S^k}{2} \right) C|_P^k \quad \text{com} \quad S_S^k = \begin{cases} 1, \bar{V}|_S^k \geq 0 \\ -1, \bar{V}|_S^k < 0 \end{cases}, \quad (\text{D.31})$$

onde (D.24)-(D.27) são aproximações para os termos de (D.21) e (D.28)-(D.31) são aproximações para os termos de (D.22).

• **Termo de pressão:**

Considere

$$\mathcal{P}^u = \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \quad \text{e} \quad \mathcal{P}^v = \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi}, \quad (\text{D.32})$$

os termos de pressão das equações (D.2)-(D.3), respectivamente. A discretização dos termos de pressão são tomadas no tempo $k + 1$, por conta do método computacional *Marker and Cell (MAC)*, utilizado para determinar a solução numérica do modelo hidrodinâmico [24].

Utilizando diferenças finitas centrais para cada termo com derivadas, obtém-se as expressões

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \eta} \right|_e^{k+1} \approx \frac{p|_{ne}^{k+1} - p|_{se}^{k+1}}{2(\Delta\eta/2)} = p|_{ne}^{k+1} - p|_{se}^{k+1}, \quad (\text{D.33})$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \xi} \right|_e^{k+1} \approx \frac{p|_E^{k+1} - p|_P^{k+1}}{2(\Delta\xi/2)} = p|_E^{k+1} - p|_P^{k+1}, \quad (\text{D.34})$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \xi} \right|_n^{k+1} \approx \frac{p|_{ne}^{k+1} - p|_{nw}^{k+1}}{2(\Delta\xi/2)} = p|_{ne}^{k+1} - p|_{nw}^{k+1}, \quad (\text{D.35})$$

$$\left. \frac{\partial p}{\partial \eta} \right|_n^{k+1} \approx \frac{p|_N^{k+1} - p|_P^{k+1}}{2(\Delta\eta/2)} = p|_N^{k+1} - p|_P^{k+1}. \quad (\text{D.36})$$

Note que, como a pressão está armazenada no centro da célula, utiliza-se as médias arit-

métricas para os termos $p|_{ne}^{k+1}$, $p|_{nw}^{k+1}$ e $p|_{se}^{k+1}$. Assim

$$\begin{aligned} p|_{ne}^{k+1} &= \frac{p|_P^{k+1} + p|_E^{k+1} + p|_{NE}^{k+1} + p|_N^{k+1}}{4}, & p|_{nw}^{k+1} &= \frac{p|_W^{k+1} + p|_P^{k+1} + p|_N^{k+1} + p|_{NW}^{k+1}}{4}, \\ p|_{se}^{k+1} &= \frac{p|_S^{k+1} + p|_{SE}^{k+1} + p|_E^{k+1} + p|_P^{k+1}}{4}. \end{aligned} \quad (\text{D.37})$$

Vale ressaltar que a malha utilizada é não móvel, isto é, a malha não varia de k para $k+1$. Então pode-se reescrever os termos de derivada como

$$\frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} = \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_e, \quad \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} = \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e, \quad \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} = \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_n, \quad \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} = \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n, \quad (\text{D.38})$$

obtendo as seguintes discretizações

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\rho} \mathcal{P}^u \right) \Big|_e^{k+1} &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial y}{\partial \xi} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial y}{\partial \eta} \right) \Big|_e^{k+1} \\ &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} - \frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_e^{k+1} \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e^{k+1} \right) \\ &\approx \frac{1}{\rho} \left[(p|_{ne}^{k+1} - p|_{se}^{k+1}) \frac{\partial y}{\partial \xi} \Big|_e - (p|_E^{k+1} - p|_P^{k+1}) \frac{\partial y}{\partial \eta} \Big|_e \right], \end{aligned} \quad (\text{D.39})$$

$$\begin{aligned} \left(\frac{1}{\rho} \mathcal{P}^v \right) \Big|_n^{k+1} &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \frac{\partial x}{\partial \eta} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \frac{\partial x}{\partial \xi} \right) \Big|_n^{k+1} \\ &= \frac{1}{\rho} \left(\frac{\partial p}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} - \frac{\partial p}{\partial \eta} \Big|_n^{k+1} \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n^{k+1} \right) \\ &\approx \frac{1}{\rho} \left[(p|_{ne}^{k+1} - p|_{nw}^{k+1}) \frac{\partial x}{\partial \eta} \Big|_n - (p|_N^{k+1} - p|_P^{k+1}) \frac{\partial x}{\partial \xi} \Big|_n \right]. \end{aligned} \quad (\text{D.40})$$

- **Termo difusivo:**

Considere

$$\mathcal{V}(u) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right], \quad (\text{D.41})$$

$$\mathcal{V}(v) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right], \quad (\text{D.42})$$

$$\mathcal{V}(C) = \frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \right] + \frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\sigma \frac{\partial C}{\partial \eta} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) \right], \quad (\text{D.43})$$

que representam os termos difusivos das equações (D.2)-(D.4), respectivamente. Cada termo com derivada é discretizado por diferenças finitas centrais tomadas no tempo k , assim obtém-se que

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\alpha \frac{\partial u}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial u}{\partial \eta} \right) \right] \Big|_e^k &\approx (J\alpha)|_E^k (u|_{eee}^k - u|_e^k) - (J\beta)|_E^k (u|_{nee}^k - u|_{see}^k) - \\
&- (J\alpha)|_P^k (u|_e^k - u|_w^k) + (J\beta)|_P^k (u|_n^k - u|_s^k) , \\
\frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\gamma \frac{\partial u}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial u}{\partial \xi} \right) \right] \Big|_e^k &\approx (J\gamma)|_{ne}^k (u|_{nne}^k - u|_e^k) - (J\beta)|_{ne}^k (u|_{nee}^k - u|_n^k) - \\
&- (J\gamma)|_{se}^k (u|_e^k - u|_{sse}^k) + (J\beta)|_{se}^k (u|_{see}^k - u|_s^k) , \\
\frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\alpha \frac{\partial v}{\partial \xi} - \beta \frac{\partial v}{\partial \eta} \right) \right] \Big|_n^k &\approx (J\alpha)|_{ne}^k (v|_{nee}^k - v|_n^k) - (J\beta)|_{ne}^k (v|_{nne}^k - v|_e^k) - \\
&- (J\alpha)|_{nw}^k (v|_n^k - v|_{nww}^k) + (J\beta)|_{nw}^k (v|_{nnw}^k - v|_w^k) , \\
\frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\gamma \frac{\partial v}{\partial \eta} - \beta \frac{\partial v}{\partial \xi} \right) \right] \Big|_n^k &\approx (J\gamma)|_N^k (v|_{nnn}^k - v|_n^k) - (J\beta)|_N^k (v|_{nne}^k - v|_{nnw}^k) - \\
&- (J\gamma)|_P^k (v|_n^k - v|_s^k) + (J\beta)|_P^k (v|_e^k - v|_w^k) , \\
\frac{\partial}{\partial \xi} \left[J \left(\delta \frac{\partial C}{\partial \xi} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \eta} \right) \right] \Big|_P^k &\approx (J\delta)|_e (C|_E^k - C|_P^k) - (J\kappa)|_e (C|_{ne}^k - C|_{se}^k) - \\
&- (J\delta)|_w (C|_P^k - C|_W^k) + (J\kappa)|_w (C|_{nw}^k - C|_{sw}^k) . \\
\frac{\partial}{\partial \eta} \left[J \left(\sigma \frac{\partial C}{\partial \eta} - \kappa \frac{\partial C}{\partial \xi} \right) \right] \Big|_P^k &\approx (J\sigma)|_n (C|_N^k - C|_P^k) - (J\kappa)|_n (C|_{ne}^k - C|_{nw}^k) - \\
&- (J\sigma)|_s (C|_P^k - C|_S^k) + (J\kappa)|_s (C|_{se}^k - C|_{sw}^k) ,
\end{aligned} \tag{D.44}$$

Onde considera-se o fato de $\Delta \xi = \Delta \eta = 1$. Além disso, as estimativas dos termos de u, v e C são dados por

$$\begin{aligned}
u_{|nee}^k &= \frac{u_e^k + u_{eee}^k + u_{nnnee}^k + u_{nne}^k}{4}, & u_{|see}^k &= \frac{u_{sse}^k + u_{ssee}^k + u_{eee}^k + u_e^k}{4}, \\
u_{|n}^k &= \frac{u_w^k + u_e^k + u_{nne}^k + u_{nnw}^k}{4}, & u_{|s}^k &= \frac{u_{ssw}^k + u_{sse}^k + u_e^k + u_w^k}{4}. \\
v_{|nne}^k &= \frac{v_n^k + v_{nee}^k + v_{nnnee}^k + v_{nnn}^k}{4}, & v_e^k &= \frac{v_s^k + v_{see}^k + v_{nee}^k + v_n^k}{4}, \\
v_{|nnw}^k &= \frac{v_{nww}^k + v_n^k + v_{nnn}^k + v_{nnnw}^k}{4}, & v_w^k &= \frac{v_{sww}^k + v_s^k + v_n^k + v_{nnw}^k}{4}. \\
C_{|ne}^k &= \frac{C_P^k + C_E^k + C_{NE}^k + C_N^k}{4}, & C_{|se}^k &= \frac{C_S^k + C_{SE}^k + C_E^k + C_P^k}{4}, \\
C_{|nw}^k &= \frac{C_W^k + C_P^k + C_N^k + C_{NW}^k}{4}, & C_{|sw}^k &= \frac{C_{SW}^k + C_S^k + C_P^k + C_W^k}{4}.
\end{aligned} \tag{D.45}$$

- **Termo reativo:**

A discretização do termo reativo da equação (D.4) dado por

$$\mathcal{R}(C) = \frac{KC}{J} \Big|_P^k \tag{D.46}$$

Como esse termo não possui derivadas, a discretização é realizada somente nos valores das concentrações de coliformes. Note que os valores das concentrações C são determinados no centro das células, calculados no tempo k . O termo K é chamado de coeficiente de decaimento dos coliformes fecais.

REFERÊNCIAS

- [1] ALEMDAROGLU, F. E. et al. Generation of multiblock copolymers by PCR: synthesis, visualization and nanomechanical properties. *Nano Letters*, Califórnia, 9, 3658-3662, 2009.
- [2] ANDREOLI, R. V. et al. A influência do evento El Niño-Oscilação Sul e Atlântico Equatorial na precipitação sobre as regiões norte e nordeste da América do Sul. *Acta Amazonica*, Amazonia, 43, 469-480, 2013.
- [3] ASHBOLT, N.J. et al. Indicators of microbial water quality. IWA Publishing, 289-316, 2001.
- [4] BARBA, A. N. D. Estudo e implementação de esquema upwind na resolução de um modelo de dinâmica dos fluidos computacional em coordenadas generalizadas. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional). Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2015.
- [5] BARRAGAN, B. L. G. et. al. Avaliação da implementação do sistema nacional de vigilância da qualidade de água para consumo humano da Colômbia. 2013. Tese (Doutorado em Medicina Veterinária) Universidade Federal de Viçosa, Minas Gerais, 2013.
- [6] BRASIL, Vigilância e controle da qualidade da água para consumo humano, Ministério da Saúde, Brasília, 2006.
- [7] BOCANEGRA, M.; EDGAR, J.; CAICEDO, J. D. P. La variabilidad climática interanual asociada al ciclo El Niño-La Niña-Oscilación del Sur y su efecto en el patrón pluviométrico de Colombia. *Meteorología Colombiana*, 2, 7-21, 2000.
- [8] BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. Numerical analysis. Cengage Learning, Boston, 1993.
- [9] CABELLI, V. J. Microbial indicator systems for assessing water quality. *Antonie van Leeuwenhoek*, 48, 613-618, 1983.
- [10] CALLE, E. D. et al. Relaciones demanda-oferta de agua y el índice de escasez de agua como herramientas de evaluación del recurso hídrico colombiano. *Rev. Acad. Colomb. Ciencia*, Bogotá, 32.123, 195-212, 2008.
- [11] CHAPRA, S. C. Surface water-quality monitoring. The McGraw Hill Companies, Inc, New York, 1997.

- [12] CHEN, X., MCCARTHY, S. P., GROSS, R. A. Synthesis and characterization of [L]-lactide-ethylene oxide multiblock copolymers. *Macromolecules*, Washington, 30.15, 4295-4301, 1997.
- [13] CIRELLI, A. Y. P.; DU MORTIER, C. C. Evaluación de la condición del agua para consumo humano en Latinoamérica. *Tecnologías solares para la desinfección y descontaminación del agua*. Solar Safe Water, 11-26, 2005.
- [14] CIRILO, E. R.; BORTOLI, A. L. Geração da Malha da Traquéia e dos Tubos Bronquiais por Splines Cúbico. *Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas*, Londrina, 27.2, 147-155, 2006.
- [15] CONTE, S. D. C. B. *Elementary Numerical Analysis*, Mc Gran Hill, Nova York, 1972.
- [16] CORPORACIÓN AUTÓNOMA Y REGIONAL DEL ATLÁNTICO. Documentación del estado de las cuencas hidrográficas en el Departamento del Atlántico, Departamento del Atlántico. 2007.
- [17] CORPORACIÓN AUTÓNOMA Y REGIONAL DEL ATLÁNTICO. Diagnóstico inicial para el ordenamiento del Embalse del Guájaro y la Ciénaga del Luruaco, Departamento del Atlántico. 2012.
- [18] DEPARTMENT OF HEALTH AND SOCIAL SECURITY. *The bacteriological examination of drinking water supplies. Methods for examination of waters and associated materials*. London: DHSS/HMSO, 122, 1982.
- [19] FALCONER, R. A.; LIN, B. Three-dimensional modelling of water quality in the Humber Estuary. *Water Research*, 31.5, 1092-1102, 1997.
- [20] FEACHEM, R. G., et al. Detection, survival, and removal of pathogens in the environment. *Sanitation and disease: health aspects of wastewater management*. Chichester: J. Wiley, 53-66, 1983.
- [21] FEDERATION, Water Environmental, et al. *Standard methods for the examination of water and wastewater*. American Public Health Association (APHA): Washington, 2005.
- [22] Fernández N., Solano F. Índices de calidad y de contaminación del agua. *Universidad de Pamplona*. 2005:43-53.
- [23] FERREIRA, V. G.; DE LIMA, G. A. B.; CORRÊA, L. Simulação Computacional de Alguns Problemas em Dinâmica dos Fluidos. In: *Proceedings of the 9th Brazilian Conference on Dynamics Control and their Applications*, x2, São Paulo, 2010.
- [24] FORTUNA, A. O. *Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos: conceitos básicos e aplicações*. Edusp, São Paulo, 2000.

- [25] FOX, R. W.; PRITCHARD, P. J.; MCDONALD, A. T. Introdução à mecânica dos fluidos. Grupo Gen-LTC, 2000.
- [26] GIORI, J. Z. Análise dos efeitos de despejos acidentais de poluentes em corpos hídricos usando traçadores fluorescentes - estudo de caso: Bacia do rio Guandu/RJ. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil). Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.
- [27] GUTIÉRREZ, R. D. G. Organización del espacio a partir de la jerarquía y funcionalidad urbanas: El caso del departamento del Atlántico, Colombia. *Geotrópico*, 2.2, 61-78, Departamento del Atlántico, 2004.
- [28] HELMER, R. et al. Water pollution control: a guide to the use of water quality management principles. E & FN Spon, London, 1997.
- [29] HINKELMANN, R.; ZIELKE, W. P. Three-dimensional Lagrangian-Eulerian model for the shallow water and transport equations. Proceedings for the 11th International conference on computational methods in water resources, CMWR, 2, 71-78, 1996.
- [30] HOFSTRA, HUISIN'T VELD, J.H.J. Methods for the detection and isolation of *Escherichia coli* including pathogenic strains. *Journal of Applied Bacteriology Symposium Supplement*, 1S-19S, Edinburg, 1988.
- [31] INSTITUTO DE HIDROLOGIA, METEOROLOGIA Y ESTUDIOS AMBIENTALES. Zonificación de unidades hidrográficas e hidrogeológicas de Colombia, Bogotá. 2012.
- [32] INSTITUTO DE HIDROLOGIA, METEOROLOGIA Y ESTUDIOS AMBIENTALES. Estudio nacional del agua, Bogotá, 2014.
- [33] INSTITUTO NACIONAL DEL SALUD. Estado de la vigilancia del calidad de la agua para consumo humano en Colombia, Bogotá, 2014.
- [34] DE LEMOS, E. M. Implementação de um método de volumes finitos de ordem superior com tratamento multibloco aplicado à simulação de escoamento de fluidos viscoelásticos. Tese (Doutorado em engenharia química) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011.
- [35] MALISKA, C. R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas. Livros Técnicos e Científicos, Rio de Janeiro, 1994.
- [36] MINISTERIO DE SALUD Y PROTECCIÓN SOCIAL. Informe nacional de la calidad del agua para consumo humano año 2013 con base en el IRCA, Bogotá, 2013.
- [37] MCKEE, S.; TOMÉ, M. F.; FERREIRA, V. G. et al. Review: The mac method. *Computers and Fluids*, 37, 907-930, 2008.

- [38] MUNICIPIO DE LURUACO. Plan de Desarrollo Municipal de Luruaco 2012-2015, Departamento del Atlántico, 2012.
- [39] NÚMERO, Resolución. "2115 de 2007."Diario Oficial 46.679, Bogotá, 2007.
- [40] ROMEIRO, N. M. L., et al. Local calibration of coliforms parameters of water quality problem at Igapó I Lake, Londrina, Paraná, Brazil. *Ecological modelling*, 222.11, 1888-1896, 2011.
- [41] ROMEIRO, N. M. L. Simulação numérica de modelos de qualidade da água usando o método de elementos finitos estabilizados. Tese (Doutorado em ciências em engenharia civil) Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2003.
- [42] OPPA, L. F. Utilização de modelo matemático de qualidade da água para análise de alternativas de enquadramento do rio Vacacaí Mirim. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil). Universidade Federal de Santa Maria, Santa Maria, 2007.
- [43] PARDO, S. R. Uma modelagem do transporte e reações dos ciclos do carbono e do nitrogênio no lago Igapó. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional). Universidade Estadual de Londrina, Londrina. 2009.
- [44] PARDO PARDO, A. Geografía económica y humana de Colombia. Ediciones Tercer Mundo, Colômbia. 1972.
- [45] RECKHOW, K. H., CHAPRA, S. C. Modeling excessive nutrient loading in the environment. *Environmental Pollution*, 100.1, 197-207, 1999.
- [46] RIBEIRO, C. R., BERMÚDEZ, O. B. LEAL, A. C. A gestão compartilhada de águas transfronteiriças, Brasil e Colômbia. *Mercator*, 14.2, 99-118, Ceará, 2015.
- [47] ROHATGI, A. WebPlotDigitizer *URL* <http://arohatgi.info/WebPlotDigitizer/app>, 2011.
- [48] SALTZMAN B., Finite Amplitude Free Convection as an Initial Value Problem-I, *I.J. Atmospheric Sci.*, 19,329-341, 1962.
- [49] SAWYER, C. N. Fertilization of lakes by agricultural and urban drainage. *J. New England Water Works Assoc.*, 61.2, 109-127, Holliston, 1947.
- [50] SOMMEIJER, B. P.; KOK, J. Splitting methods for three-dimensional bio-chemical transport. *Applied numerical mathematics*, 21.3, 303-320, 1996.
- [51] SOUZA, C. L. Simulação da evaporação em reservatórios de hidrelétricas: Aplicação à represa de Itaipu. Dissertação (Mestrado em Matemática Aplicada e Computacional). Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2016.

- [52] SPITALERI, R. M.; CORINALDESI, L. A multigrid semi-implicit finite difference method for the two-dimensional shallow water equations. *International journal for numerical methods in fluids*, 25.11, 1229-1240, 1997.
- [53] STREETER, H. W.; PHELPS, E. B. A study of the pollution and natural purification of the Ohio River. US Department of Health, Education, & Welfare, 1958.
- [54] UNIVERSIDAD DEL ATLÁNTICO. Diagnóstico ambiental y estrategias de rehabilitación de la Ciénega de Luruaco, Atlántico, Barranquilla, 2012.
- [55] VERSTEEG, H. K. W., MALASKERA. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics: The Finite Volume Method Approach*, Pearson Education, 1995.
- [56] VIDAL, A. P.; MARROQUÍN, C. P.A; LOZADA, P. T. Identificación y priorización de peligros como herramientas de la gestión del riesgo en sistemas de distribución del agua potable. *Ingeniería y universidad, Colômbia*, 16.2, 449-470, 2012.
- [57] PAN AMERICAN HEALTH ORGANIZATION. *Guías para la calidad del agua potable*. Pan American Health Org, 1988.