APÊNDICE I

(Discretização das equações utilizadas na modelagem)

Para contextualizar o programa aqui desenvolvido foi baseado de modelos matemáticos e programas computacionais já existentes, objetivando a sua utilidade para nossa proposta. Nesse contexto foi feito uma ampla revisão bibliográfica, onde se encontrou 36 modelos, 16 programas, muito deles programados em plataformas multitarefa e principalmente em Unix e Linux. A análise mostra que as principais características dinâmicas e numéricas de grande parte desses modelos segue o mesmo padrão. A discretização é via diferenças finitas, e utilizam o método ADI e o algoritmo de Thomas para obter a solução – seqüencial - dos sistemas de equações, e usa-se o sistema de coordenadas cartesianas ou curvilíneas para construir a malha horizontal. Nosso caso ficou, mas claro, ao seguir a metodologia descrita por Silveira.

O software Matlab, contem dentro de suas livrarias o método ADI e o algoritmo de Thomas, esta vantagem é muito importante, pois permitem que o pesquisador se focalize nas características de seu problema, de seus dados, e não com a dinâmica utilizada para resolver as equações, já que o programa conta com algoritmos que permitem encontrar a solução mais ótima ou adequada. No entanto algumas equações devem ser programadas para que sejam utilizadas e resolvidas pelo *software*, entre elas a equações de contorno. As grandezas de seus resultados dependeram da quantidade e qualidade dos dados. Outra vantagem é que o *software*, permite simular desde programas simples sem muita objetividade até programas específicos, de grandes dimensiones e objetividade.

O modelo matemático de escoamentos de superfície livre com densidade constante, escrito em variáveis primitivas, e que pode ser obtido a partir das equações de *Navier-Stokes* assumindo a promediação de Reynolds e o escoamento como sendo hidrostático, é chamado de equações *shallow water.*

Sob o ponto de vista matemático, as equações shallow water formam um sistema de Equações Diferenciais Parciais hiperbólicas não-lineares para um fluido incompressível com superfície livre. Esse sistema é composto pelas equações da conservação da quantidade de movimento para as velocidades horizontais da Equação da Conservação da Quantidade do Movimento na direção X e a Equação da conservação da Quantidade do Movimento na direção Y e pela equação da continuidade:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + U\,\frac{\partial U}{\partial x} + V\,\frac{\partial U}{\partial y} - \phi V = -g\,\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{t_x^v}{\rho H} - \frac{t_x^s}{\rho H} + \varepsilon_n\left(\frac{\partial^2 U}{\partial x^2} + U\,\frac{\partial^2 U}{\partial y^2}\right)$$

$$\frac{\partial V}{\partial t} + U\,\frac{\partial V}{\partial x} + V\,\frac{\partial V}{\partial y} - \phi V = -g\,\frac{\partial n}{\partial x} + \frac{t_y^v}{\rho H} - \frac{t_y^s}{\rho H} + \varepsilon_n\left(\frac{\partial^2 V}{\partial y^2} + U\,\frac{\partial^2 V}{\partial y^2}\right)$$

$$\frac{\partial n}{\partial t} + \frac{\partial\left[(h+n)U\right]}{\partial x} + \frac{\partial\left[(h+n)V\right]}{\partial y} = 0$$

Em que:

1.- g é a aceleração da gravidade e σ = σ água é a densidade da água.

2.- H = h +*n* é a distancia do fundo até a superfice livre neste caso a superfície onde n=n(x,y,t) é a elevação da água acima de um nível de referencia na vertical e h=h (x, y) representa a profundidade abaixo desse nivel, Na proposta é =0

3.- U = U (x,y,t) e V=V (x,y,t) são aas componetes de velociades horizontais medias otidas pela integração nas direções X e Y

4.- Φ = 2ωsenøé a força de Coriolis, onde w é a velocidade angular da terra e ǿ é a latitude.

5.- єn é o coeficiente de viscosidade cinemática turbulenta horizontal.

Modelos 2D podem ser integrados na vertical quando o corpo de água é bem misturado ou parcialmente estratificado. Essa classe envolve os mais conhecidos modelos 2D em uso. Essa aproximação pode ser considerada quando o fluido tem densidade constante e uniforme; os movimentos ocorrem sobretudo na horizontal, onde a escala vertical H é muito menor que a horizontal L.

Condições de Contorno

As condições de contorno na superfície livre, isto é, na interface água-vento, em z = η. São obtidas considerando que não há escoamento atravessando essa interface. As condições de contorno são especificadas assumindo, que não há fluxo e a difusão vertical é o único termo onde se agregam os atritos nessa interface. Desse modo considera-se o coeficiente de Chezy =7,83ln(0,3). As condições de contorno são, para as direções *X* e *Y*,são representadas matematicamente como:

$$\frac{t_x^s}{\rho\, agua\, H} = g\,\frac{U\sqrt{U^2+V^2}}{C_y^v H}$$

$$\frac{t_y^s}{\rho\, agua\, H} = g\,\frac{U\sqrt{U^2+V^2}}{C_z^s H}$$

Para as CC superiores, consideram-se os coeficientes de atrito na interface água superfície livre nas direções *X* e *Y* , resultando em:

$$\frac{t_x^v}{\rho\, agua\, H} = t_y^v \sigma_{ar} t_x^2$$

$$\frac{t_y^v}{\rho\, agua\, H} = t_d^v \sigma_{ar} t_y^2$$

Onde: W_x= *U*,*V sen*φ e ( ) *y W* = *U*,*V* cosφ são as componentes da velocidade do vento nessas direções, medidas a diferentes medidas acima do nível da água; *ar* ρ é a densidade do ar e *vd C* é o coeficiente de atrito na superfície da água.

Como as velocidades horizontais e o coeficiente de arrasto *vd C* são obtidos a 10 metros acima do nível da água, eles são, muitas vezes, denotados na literatura técnica por 10 *U* , 10 *V* e 10 *C* . Em nosso problema nos optamos pelo valor $0,29*10^{-3}$

A equação que modela o transporte de constituintes dispersos em corpos de água integrada na vertical é escrita na forma conservativa (ou fluxo), como em:

$$\frac{\partial(SH)}{\partial}+\frac{\partial(SHU)}{\partial x}+\frac{\partial(SHV)}{\partial y}=\frac{\partial}{\partial x}+\left(HD_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial x}+\left(HD_x\frac{\partial S}{\partial x}\right)+\frac{\partial}{\partial y}\left(\varepsilon_y\frac{\partial S}{\partial y}\right)+KHS+FH$$

Sendo que:

1. *S* é a concentração integrada na vertical;
2. D_x= α $\cos^2\theta$ +α$sen^2\theta$ e *D y* =α *L sen*θ +α*T* cos2 θ são os componentes do tensor de dispersão nas direções *X* e *Y* ; α *L e* α_t são os coeficientes de difusão longitudinal e transversal, ; e θ é o ângulo formado entre o eixo *X* e o vetor velocidade;

3. *F* é o termo de fonte Concentração de SST

4 Eq de contorno $S = S_{t=o}(x, y, t) = 0$

5.- A condição de contorno tipo Neumann ocorre quando o gradiente de concentração é normal à fronteira, significando que um fluxo advectivo e dispersivo deve ser aí especificado. Porém, nas fronteiras laterais abertas inflow e outflow, onde esta última é a fronteira na qual o fluxo está saindo do domínio, pode-se assumir que o fluxo advectivo domina o fluxo dispersivo. A Equação de condição de contorno gradiente é expressa como:

$$\left(\frac{\partial S(x,y,t)}{\partial \vec{n}(x,y,t)} = \nabla S;(xyt) \in \partial\Omega\ [0,t]\right)$$

Onde n(x,y,z,t) é o vetor unitário normal no ponto (x,y,z,t) ∈ ∂Ω .

Especificamente para os modelos de transporte, consideram-se condições de contorno do tipo Dirichlet e de Neumann.

Para determinar o termo (ou matriz) de decaimento K=K(x,y,,t) , considerasse uma concentração inicial S= $S(x_0\ y_0\ t_0)$ em um corpo de água estático e com termo de fonte =F(x,y,z,t)=0. Nesse caso, reduz-se a:

$$S = K(x, y, t)$$

Como o decaimento, resultante de processos físicos, químicos e/ou biológicos, é proporcional à concentração da substância a cada tempo, tem-se que K(x,y,z,t)= −kS(x,y,z,t) , onde k é a constante de proporcionalidade e o sinal negativo indica o decaimento. Portanto, solução pode ser reescrita como

∂S(x,y,t) ∂t = − kS(x,y,t), cuja solução é S(x,y,z,t)=S(x,y,z,0)e−kt , indicando que a concentração decai com o tempo.