

UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ

SARA COELHO DA SILVA

MÉTODO NUMÉRICO PARA ANÁLISE DA DISPERSÃO DE SUBSTÂNCIAS EM
ESCOAMENTOS BIDIMENSIONAIS

Curitiba

2019

SARA COELHO DA SILVA

MÉTODO NUMÉRICO PARA ANÁLISE DA DISPERSÃO DE SUBSTÂNCIAS EM
ESCOAMENTOS BIDIMENSIONAIS

Tese apresentada ao curso de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, Setor de Engenharias, Universidade Federal do Paraná, como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Métodos Numéricos em Engenharia.

Orientador: Prof. Dr. Eloy Kaviski
Coorientadora: Profa. Dra. Liliana M. Gramani
Coorientador: Prof. Dr. Adilandri Mércio Lobeiro

Curitiba

2019

Catálogo na Fonte: Sistema de Bibliotecas, UFPR
Biblioteca de Ciência e Tecnologia

S586m

Silva, Sara Coelho da
Método numérico para análise da dispersão de substâncias em escoamentos bidimensionais [recurso eletrônico] / Sara Coelho da Silva. – Curitiba, 2019.

Tese - Universidade Federal do Paraná, Setor de Ciências Exatas, Programa de Pós-Graduação em Métodos Numéricos em Engenharia, 2019.

Orientador: Eloy Kaviski – Coorientador: Liliana Madalena Gramani -
Coorientador: Adilandri Mércio Lobeiro

1. Dispersão. 2. Método dos volumes finitos. 3. Escoamento. 4. Poluentes.
I. Universidade Federal do Paraná. II. Kaviski, Eloy. III. Gramani, Liliana
Madalena. IV. Lobeiro, Adilandri Mércio. V. Título.

CDD: 518.25

Bibliotecário: Elias Barbosa da Silva CRB-9/1894



MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
SETOR DE CIÊNCIAS EXATAS
UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ
PRÓ-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO MÉTODOS NUMÉRICOS
EM ENGENHARIA - 40001016030P0

TERMO DE APROVAÇÃO

Os membros da Banca Examinadora designada pelo Colegiado do Programa de Pós-Graduação em MÉTODOS NUMÉRICOS EM ENGENHARIA da Universidade Federal do Paraná foram convocados para realizar a arguição da tese de Doutorado de **SARA COELHO DA SILVA** intitulada: **MÉTODO NUMÉRICO PARA ANÁLISE DA DISPERSÃO DE SUBSTÂNCIAS EM ESCOAMENTOS BIDIMENSIONAIS**, sob orientação do professor doutor ELOY KAVISKI, que após terem inquirido a aluna e realizada a avaliação do trabalho, são de parecer pela sua aprovação no rito de defesa.

A outorga do título de doutor está sujeita à homologação pelo colegiado, ao atendimento de todas as indicações e correções solicitadas pela banca e ao pleno atendimento das demandas regimentais do Programa de Pós-Graduação.

CURITIBA, 20 de Dezembro de 2019.

LILIANA MADALENA GRAMANI
Presidente da Banca Examinadora

CRISTOVÃO VICENTE SCAPULATEMPO FERNANDES
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARANÁ - DEP. DE
HIDRÁULICA)

EUDES JOSÉ ARANTES
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE TECNOLÓGICA FEDERAL DO
PARANÁ)

RICARDO VICENTE DE PAULA REZENDE
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ)

DOHERTY ANDRADE
Avaliador Externo (UNIVERSIDADE ESTADUAL DE MARINGÁ)

À memória da minha amada mãe Cesaltina Coelho da Silva.
À memória da minha querida coorientadora Liliana M. Gramani.
À memória do meu querido irmão em Cristo, João Leão de Souza.
Pessoas maravilhosas que viram em mim o que nem eu mesmo pude enxergar.

AGRADECIMENTOS

A Deus, por estar comigo nesta tão árdua jornada e por ter me presenteado com pessoas maravilhosas em minha vida.

Ao meu esposo e meu filho, por me apoiarem de forma incondicional, me dando força, carinho e compreensão.

Ao meu orientador Eloy Kaviski e minha coorientadora Liliana Madalena Gramani, que foram pacientes, atenciosos e encorajadores neste grande desafio.

Aos membros da banca examinadora, que revisaram meu trabalho com carinho e profissionalismo trazendo grandes contribuições.

À Universidade Tecnológica Federal do Paraná, campus de Campo Mourão, pela concessão do meu afastamento em período integral para cursar este doutorado.

À CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) pelo apoio financeiro.

Aos professores e amigos do Programa de Pós Graduação em Métodos Numéricos da UFPR.

Aos professores do departamento de Matemática da UTFPR, campus Campo Mourão, que me incentivaram e me apoiaram nestes anos árduos.

Aos meus grandes mestres José Roberto Nogueira (UNESP) e Doherty Andrade (UEM), meus primeiros incentivadores na vida acadêmica.

Ao meu amigo Diego Fernando Moro, pelo suporte em programação e todo apoio dispensado.

À minha grande amiga Regiani de Almeida Rezende, prestativa e atenciosa, que me auxiliou na parte gráfica desta tese, além de todo carinho e amizade.

Ao meu grande amigo Luciano Pereira da Silva, meu irmão, grande apoio nas horas difíceis e parceria em qualquer situação e momento.

À minha grande amiga e irmã em Cristo, Matilde Pereira de Souza (irmã Marta) e ao meu pai Norival da Silva, que sempre intercederam por mim em suas orações, para que eu encontrasse em Deus, tudo que não pude alcançar sozinha.

A todos familiares, amigos e irmãos, que aguardavam, confiantes em Deus, mais essa vitória em minha vida.

Minha eterna gratidão a todos.

*“Os que confiam no SENHOR serão como o monte de Sião, que não se abala, mas
permanece para sempre.”
Salmos 125:1*

RESUMO

A análise da dispersão de poluentes em rios, lagos e canais é essencial para o controle, tomada de decisões e determinação do melhor local para o lançamento de resíduos domésticos e industriais com intuito de evitar que determinadas substâncias afetem o meio ambiente. Para esta análise são empregados os sistemas de equações diferenciais, ditos modelos matemáticos, que descrevem as leis de conservação da massa e de quantidade do movimento linear. Dentre estes, destacam-se os modelos hidrodinâmicos e de transporte, descritos pelas equações de águas rasas e pela equação de advecção-difusão, respectivamente. O avanço computacional tornou possível a simulação numérica destes modelos, ajudando na compreensão dos padrões de escoamento e dispersão. O objetivo desta tese é utilizar o método dos volumes finitos na discretização das equações de águas rasas acopladas à equação de advecção-difusão, a fim de obter uma solução numérica incondicionalmente estável com um algoritmo iterativo otimizado, de convergência rápida e baixo custo computacional, para simulação da dispersão de poluentes em escoamentos bidimensionais transientes em reservatórios e regiões alagadas, com declives e sujeitos à resistência ao escoamento. Nos modelos encontrados na literatura, a variação da massa específica da mistura não é objeto de estudo. Analisa-se somente a concentração mássica de cada poluente injetado, não calculando a massa específica da mistura, que sofre variações com a injeção de poluentes. No modelo apresentado nesta tese considera-se uma mistura de concentração mássica variável e desenvolve-se um algoritmo que, calcula esta variável e carrega esta informação, de forma acoplada, para o modelo hidrodinâmico com velocidades transientes. Condições iniciais descontínuas representando leitos úmidos e secos foram adotadas de forma satisfatória. A robustez da solução numérica é verificada e comparações são realizadas para diferentes esquemas de discretização e com os resultados obtidos em Fennema e Chaudhry (1990). O esquema numérico obtido é aplicado na análise de problemas hidráulicos como abertura súbita de comportas, controle de fluxo em reservatórios de contenção com pilares internos. Nas aproximações dos termos advectivos foram utilizadas inicialmente interpolação central de segunda ordem e posteriormente um esquema híbrido (*central/upwind*), que mostrou-se bem mais eficiente. Para a discretização temporal adotou-se inicialmente uma formulação explícita, que levou à obtenção de uma solução instável com curto tempo de simulação. Na busca da estabilidade da solução numérica adotou-se então uma formulação temporal totalmente implícita. Para implementação numérica foi utilizada a Linguagem Fortran e os resultados obtidos mostram a eficácia do modelo numérico implementado espacialmente híbrido com formulação temporal totalmente implícita. O código empregado permite analisar temporalmente e espacialmente a variação da densidade da mistura, a concentração mássica de cada substância dissolvida na mistura, o fluxo e o nível da mistura em cada ponto do domínio. Os resultados obtidos mostram a interpretação física esperada e a robustez do esquema numérico implementado.

Palavras-chave: Dispersão. Concentração Mássica. Esquema Híbrido de Volumes Finitos. Modelo Hidrodinâmico. Modelo de Transporte. Modelo Acoplado.

ABSTRACT

The analysis of pollutant dispersion in rivers, lakes and canals is essential for the control, decision making and determination of the best site for domestic and industrial waste in order to prevent certain substances from affecting the environment. For this analysis, systems of differential equations are used, called mathematical models, which describe the laws of conservation of mass and quantity of linear motion. Among these, the hydrodynamic and transport models, described by the shallow water equations and the advection-diffusion equation, respectively, stand out. The computational advance made possible the numerical simulation of these models, helping in the understanding of flow and dispersion patterns. The objective of this thesis is to use the finite volume method to discretize the shallow water equations coupled with the advection-diffusion equation in order to obtain an unconditionally stable numerical solution, a common iterative optimized algorithm, of fast convergence and low computational cost, for the simulation of pollutant dispersion in two-dimensional transient flows in reservoirs and flooded regions, with slopes and subject to resistance to flow. In the models found in the literature, the variation in the specific mass of the mixture is not the object of study. Only the mass concentration of each pollutant injected is analyzed, not calculating the specific mass of the mixture, which undergoes variations with the injection of pollutants. In the model presented in this thesis a mixture of variable mass concentration is considered and an algorithm is developed that calculates this variable and loads this information, in a coupled way, to the hydrodynamic model with transient speeds. Initial discontinuous conditions representing wet and dry beds were adopted in a satisfactory manner. The robustness of the numerical solution is verified and comparisons are made for different discretization schemes and with the results obtained in Fennema and Chaudhry (1990). The numerical scheme obtained is applied in the analysis of hydraulic problems such as sudden opening of gates, flow control in containment reservoirs with internal pillars. In the approximation of the advective terms, a second order central interpolation was initially used and later a hybrid scheme (center/upwind), which proved to be much more efficient. For temporal discretization, an explicit formulation was initially adopted, which led to an unstable solution with short simulation time. In the search for stability of the numerical solution, a totally implicit temporal formulation was adopted. For the numerical implementation the Fortran Language was used and the results obtained show the efficacy of the spatially implemented numerical model with fully implicit temporal formulation. The code used allows the temporal and spatial analysis of the mixture density variation, the mass concentration of each dissolved substance in the mixture, the flow and the level of the mixture at each point of the domain. The results obtained show the expected physical interpretation and the robustness of the numerical scheme implemented.

Keywords: Dispersion. Mass Concentration. Hybrid Scheme of Finite Volumes.
Hydrodynamic model. Transport Model. Coupled Model.

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIGURA 1 – Definições de x, z_0, h e u para escoamento unidimensional.	25
FIGURA 2 – Canal com descarga à esquerda.	26
FIGURA 3 – Configurações das simulações de onda superficial provocada pelo fechamento de comportas.	26
FIGURA 4 – Escoamento unidimensional em um volume de controle de comprimento δx	28
FIGURA 5 – Fluxo bidimensional	29
FIGURA 6 – Advecção diferencial sem difusão.	38
FIGURA 7 – Difusão sem advecção diferencial.	38
FIGURA 8 – Dispersão: advecção diferencial combinada com difusão.	39
FIGURA 9 – Distribuição parabólica de velocidade em fluxo laminar em tubulação.	40
FIGURA 10 – Perfil de velocidade de um fluxo de cisalhamento típico enviesado na superfície de um lago, descrito por G. T. Csanady (1966).	41
FIGURA 11 – Volume elementar bidimensional para os balanços de conservação.	48
FIGURA 12 – Volume elementar bidimensional.	50
FIGURA 13 – Discretização do domínio em volumes elementares.	51
FIGURA 14 – Tipos de malha.	52
FIGURA 15 – Volumes para interpolação central.	53
FIGURA 16 – Volumes Fictícios.	56
FIGURA 17 – Notação adotada na análise de fluxo e transporte de substâncias em águas rasas.	57
FIGURA 18 – Esquema de dependência das variáveis na formulação numérica	72
FIGURA 19 – Esquema para condição de contorno.	74
FIGURA 20 – Reservatório de base retangular com dispositivos de descarga lateral.	79
FIGURA 21 – Variação temporal do volume no reservatório.	82
FIGURA 22 – Variação temporal do nível da água no reservatório.	82
FIGURA 23 – Campo de Velocidades do escoamento nos instantes $t = 0,1 s$ e $t = 1,0 s$	83
FIGURA 24 – Norma do vetor velocidade $\vec{U}(u,v)$ nos instantes $t = 0,1s$ e $t = 1,0 s$	84
FIGURA 25 – Convergência da solução.	87
FIGURA 26 – Reservatório de contenção com pilares em seu interior e dois dispositivos de despejo.	87
FIGURA 27 – Nível da água no reservatório com pilares em diferentes instantes de tempo.	88
FIGURA 28 – Análise do fluxo para $t = 2,0 s$	89
FIGURA 29 – Convergência da solução	89

FIGURA 30 – Domínio do modelo	90
FIGURA 31 – Comparação do comportamento da superfície livre 3D após 7,1 s após a abertura da comporta	91
FIGURA 32 – Comparação do perfil do nível de água em duas linhas de amostra em $x = 115 m$ e $x = 75 m$	92
FIGURA 33 – Comparação das linhas de amostra longitudinais do nível de água em $y = 70 m$ e $y = 150 m$	93
FIGURA 34 – Comparação do tempo de amostragem do nível da água em $P(115,70)$	94
FIGURA 35 – Comparação do campo de velocidade em torno da abertura da comporta em 7,1 s	94
FIGURA 36 – Visão tridimensional da superfície livre em 7,1 s após a abertura da comporta com $h_r/h_l = 0,00002$	95
FIGURA 37 – Domínio físico do reservatório de contenção fluvial	97
FIGURA 38 – Visão da superfície livre e do campo de velocidade após 1,0 s da abertura das comportas	98
FIGURA 39 – Visão da superfície livre e do campo de velocidade após 120,0 s da abertura das comportas	99
FIGURA 40 – Variação no volume de água dentro do reservatório para os primeiros 120,0 s após a abertura das comportas	100
FIGURA 41 – Análise da convergência da solução numérica do modelo hidrodinâmico completo	100
FIGURA 42 – Reservatório de águas pluviais subterrâneas	101
FIGURA 43 – Domínio físico do reservatório subterrâneo e da região externa	102
FIGURA 44 – Superfície de fundo do reservatório	103
FIGURA 45 – Condições iniciais para o nível da água	104
FIGURA 46 – Visão tridimensional do nível da água após 21 s do início do despejo	105
FIGURA 47 – Campo de velocidade nos primeiros 4,0 segundos	106
FIGURA 48 – Campo de velocidade após o início do despejo	106
FIGURA 49 – Perfil do nível de água em uma linha de amostra em $x = 0,75 m$ para $t = 10,0 s$	107
FIGURA 50 – Reservatório de base retangular com entradas e saídas.	108
FIGURA 51 – Fluxo de entradas e saídas nos contornos do reservatório.	110
FIGURA 52 – Convergência da solução	115
FIGURA 53 – Norma da Velocidade nos primeiros 180,0 s.	117
FIGURA 54 – Norma da Velocidade após 180 s.	118
FIGURA 55 – Campo de Velocidade nos primeiros 180,0 s.	119
FIGURA 56 – Campo de Velocidade após 180,0 s.	120
FIGURA 57 – Massa específica da mistura nos primeiros 360,0 s.	121
FIGURA 58 – Massa específica da mistura após 360,0 s.	122

FIGURA 59 – Variação temporal da massa específica da mistura	123
FIGURA 60 – Concentração mássica de metanol nos primeiros 360,0 s.	124
FIGURA 61 – Concentração mássica de metanol após 360,0 s.	125

LISTA DE TABELAS

TABELA 1 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO.	81
TABELA 2 – COMPARAÇÃO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS.	81
TABELA 3 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO.	90
TABELA 4 – VALORES DO NÍVEL USANDO A RELAÇÃO $h_r/h_l = 0,5$	92
TABELA 5 – VALORES DO NÍVEL PARA $h_r/h_l = 0,00002$	96
TABELA 6 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE ABERTURA DAS COM- PORTAS.	97
TABELA 7 – CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA O MO- DELO HIDRODINÂMICO COMPLETO.	101
TABELA 8 – CONDIÇÕES DO CONTORNO SUL ($y = 0$).	112
TABELA 9 – CONDIÇÕES DO CONTORNO OESTE ($x = 0$).	112
TABELA 10 – CONDIÇÕES DO CONTORNO NORTE ($y = 7$).	113
TABELA 11 – CONDIÇÕES DO CONTORNO LESTE ($x = 7$).	113
TABELA 12 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE DISPERSÃO DE METANOL EM ÁGUA.	113
TABELA 13 – COMPARAÇÃO DO TEMPO MÁXIMO DE SIMULAÇÃO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS.	114
TABELA 14 – COMPARAÇÃO DO TEMPO DE CPU DA SIMULAÇÃO.	114
TABELA 15 – CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA O MO- DELO ACOPLADO.	115

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

UFPR	– Universidade Federal do Paraná
MPF	– Ministério Público Federal
CONAMA	– Conselho Nacional do Meio Ambiente
1D	– Unidimensional
2D	– Bidimensional
MATLAB	– Matrix Laboratory
HEC-RAS	– Hydrologic Engineering Center developed the River Analysis System
MDF	– Método das Diferenças Finitas
MC	– Método das Características
MEF	– Método dos Elementos Finitos
MVF	– Método dos Volumes Finitos
MUSCL	– Monotonic Upwind Scheme for Conservation Laws
FVEG	– Finite Volume Evolution Galerkin
TDMA	– Tridiagonal Matrix Algorithm
LBM	– Lattice Boltzmann Method
CDS	– Central Differencing Scheme
UDS	– Upwind Differencing Scheme
FORTTRAN	– Formula Translation System
GCI	– Grid Convergence Index
CPU	– Central Processing Unit

LISTA DE SÍMBOLOS

A	– Área molhada	m^2
A_{c_B}	– Matriz de coeficientes do sistema linear para variável c_B	
A_h	– Matriz de coeficientes do sistema linear para variável h	
A_u	– Matriz de coeficientes do sistema linear para variável u	
A_v	– Matriz de coeficientes do sistema linear para variável v	
a_P, a_E, a_W, a_N, a_S	– Coeficientes do sistema linear para variável c_B	
$a_{Ph}, a_{Eh}, a_{Wh}, a_{Nh}, a_{Sh}$	– Coeficientes do sistema linear para variável h	
$a_{Pu}, a_{Eu}, a_{Wu}, a_{Nu}, a_{Su}$	– Coeficientes do sistema linear para variável u	
$a_{Pv}, a_{Ev}, a_{Wv}, a_{Nv}, a_{Sv}$	– Coeficientes do sistema linear para variável v	
ATR	– Coeficiente auxiliar do sistema linear para as variáveis u, v	
B	– Largura do canal	m
B_h, B_u, B_v, B_{c_B}	– Vetor dos termos fontes do sistema linear para variável h, u, v, c_B , respectivamente	
b_{Ph}, b_{Pu}, b_{Pv}	– Termo fonte do sistema linear para variável h, u, v , respectivamente	
c	– Celeridade da onda	m/s
c_i	– Concentração mássica do fluido i na mistura fluida	kg/m^3
C	– Concentração mássica do traçador	kg/m^3
C_d	– Coeficiente de descarga arbitrário	
D	– Domínio de cálculo bidimensional	
D_e, D_w, D_n, D_s	– Coeficientes auxiliares do sistema linear na variável c_B	
d_ϕ	– Diferença entre os dois lados da equação linearizada para a variável ϕ	
e	– Face leste do volume elementar genérico centrado no ponto P	
E	– Centro do volume elementar vizinho a leste do ponto P	
Err	– Erro da solução numérica estimada	
F_s	– Fator de segurança	

F_e, F_w, F_n, F_s	– Coeficientes auxiliares do sistema linear na variável c_B	
g	– Aceleração da gravidade	m/s^2
H	– Diferença entre o níveis das superfícies livre h e de fundo z_0	m
h	– Nível ou profundidade do fluido	m
h_r	– Nível de água a jusante	m
h_l	– Nível de água a montante	m
i	– Substância (traçador ou soluto) dissolvida em uma solução (solvente)	
$itmax$	– Número máximo de iterações	
\vec{i}	– Vetor unidimensional na direção do eixo x	
\vec{j}	– Vetor unidimensional na direção do eixo y	
J_A	– Fluxo de massa da substância A na mistura	
\vec{k}	– Vetor unidimensional na direção do eixo z	
K_n	– Número de <i>Knudsen</i>	
L	– Comprimento ou escala representativa	m
L_x, L_y	– Comprimento do domínio espacial de cálculo nas direções x, y , respectivamente	m
L_t	– Comprimento do domínio temporal de cálculo	s
M	– Massa da mistura fluida	kg
M_i	– Massa da componente i da mistura de massa M	kg
N	– Centro do volume elementar vizinho ao norte do ponto P	
N_x, N_y, N_t	– Número de divisões dos comprimentos espaciais L_x, L_y e do comprimento temporal L_t , respectivamente	
n	– Face norte do volume elementar genérico centrado no ponto P	
P	– Centro do volume elementar bidimensional genérico	
p_L	– Ordem assintótica da aproximação numérica utilizada	
Q	– Vazão	m^3/s

q	– Razão de refino da malha	
R	– Resíduo global dos sistemas lineares nas variáveis h, u, v, c_B	
R_h	– Raio hidráulico da seção transversal	m
r_h, r_u, r_v, r_{c_B}	– Resíduo do sistema linear nas variáveis h, u, v, c_B , respectivamente	
S	– Centro do volume elementar vizinho ao sul do ponto P	
s	– Face sul do volume elementar genérico centrado no ponto P	
S_{0x}, S_{0y}	– Declividade do fundo do rio ou canal na direção dos eixos x, y , respectivamente	m/m
S_{fx}, S_{fy}	– Declividade de resistência ao escoamento que representa a perda de energia por atrito na direção dos eixos x, y , respectivamente	$m^{1/3}/s$
S_ϕ	– Termo fonte da equação diferencial na variável ϕ	
t	– Tempo	s
t_{CPU}	– Tempo de CPU	
t_{max}	– Tempo máximo de simulação sem divergência da solução	s
tol	– Número máximo residual	
\vec{U}	– Vetor velocidade do escoamento com componentes u, v	
u	– Componente do vetor velocidade na direção x	m/s
U	– Incerteza ou Erro da solução numérica estimada	
U_{R_i}	– Erro da solução numérica estimado por extrapolação de Richardson	
U_{GCI}	– Erro da solução numérica usando o estimador GCI	
v	– Componente do vetor velocidade na direção y	m/s
V	– Volume da mistura fluida	m^3
W	– Centro do volume elementar vizinho a oeste do ponto P	
w	– Face oeste do volume elementar genérico centrado no ponto P	
x_i	– Fração mássica do fluido i na mistura fluida	
x	– Direção coordenada longitudinal x	m

y	– Direção coordenada transversal y	m
z	– Direção coordenada vertical z	m
z_0	– Cota que indica o nível da superfície do fundo do canal.	m

Símbolos gregos

$\alpha_e, \alpha_w, \alpha_n, \alpha_s$	– coeficientes auxiliares na discretização UDS	
Γ	– Coeficiente de difusão	m^2/s
ΔF	– Coeficiente auxiliar do sistema linear para variável c_B	
Δ_i	– espaçamento da malha refinada i vezes	
Δt	– Comprimento do passo de tempo	s
Δx	– Comprimento do volume elementar na direção x	m
Δy	– Comprimento do volume elementar na direção y	m
η	– Coeficiente de Manning	$m/s^{1/3}$
λ	– Caminho livre médio	m
π	– Constante trigonométrica	
ρ	– Massa específica ou densidade mássica da mistura fluida	kg/m^3
ρ_i	– Densidade mássica constante da substância fluida i	kg/m^3
ρ_m	– Massa específica média da mistura	kg/m^3
ϕ	– Solução Numérica	
ϕ_i	– Solução Numérica na malha na malha refinada i vezes	
ϕ_∞	– Solução Numérica na malha mais fina	
ϕ_P	– Solução numérica no ponto P instante de tempo $t + \Delta t$	
ϕ_P^0	– Solução numérica no ponto P instante de tempo t	
ψ	– Concentração média volumétrica de poluente	m^3/m^3

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
1.1	Objetivos	21
1.1.1	Objetivo Geral	21
1.1.2	Objetivos Específicos	21
1.2	Organização da Tese	21
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	22
2.1	Conceitos hidrodinâmicos	22
2.2	Modelos hidrodinâmicos	24
2.3	Conceitos básicos em transferência de massa em fluidos	34
2.4	Modelos de transporte	40
2.5	Modelos acoplados	43
3	MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS	47
3.1	Descrição do Método dos Volumes Finitos (MVF)	47
3.2	Vantagens e desvantagens do Método dos Volumes Finitos	49
3.3	Etapas de aplicação do Método dos Volumes Finitos	51
4	SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA ACOPLADO	57
4.1	Considerações	57
4.2	Sistema de Equações Governantes	58
4.3	Discretização do Modelo Acoplado	59
4.4	Condições Iniciais e de Contorno	72
4.5	O algoritmo	74
5	RESULTADOS	78
5.1	Simulação Numérica de modelos hidrodinâmicos simplificados	78
5.1.1	Equações Governantes	79
5.1.2	Análise de escoamentos em reservatórios de contenção fluvial sem resistência ao escoamento e efeito gravitacional	79
5.1.3	Análise do escoamento de onda abrupta causada por abertura repentina de comportas	89
5.2	Simulação Numérica de modelos hidrodinâmicos completos	96
5.2.1	Equações Governantes	96
5.2.2	Análise de escoamentos em reservatórios de contenção fluvial com resistência ao escoamento e efeito gravitacional	97

5.3	Simulação numérica da dispersão de poluente em mistura de massa específica variável	107
5.3.1	Descrição do modelo	107
5.3.2	Equações governantes	108
5.3.3	Condições Iniciais	109
5.3.4	Condições de Contorno	110
5.3.5	Implementação Numérica e Comparações	113
5.3.6	Resultados	116
6	CONCLUSÃO	126
	REFERÊNCIAS	128
	APÊNDICES	136
	APÊNDICE A – CÓDIGO DO MODELO ACOPLADO . . .	137
	APÊNDICE B – RESÍDUOS E ITERAÇÕES	167

1 INTRODUÇÃO

A ocorrência ou agravamento de inundações nas grandes cidades, bem como a ruptura de barragens e acidentes envolvendo o transporte de poluentes e substâncias químicas tóxicas em rios e lagos, tornaram-se problemas cada vez mais recorrentes, causando mortes e fortes impactos ambientais.

Tiburcius, Zamora e Leal (2004) apontam um acidente ocorrido em julho de 2000, durante a operação de transferência de petróleo do terminal São Francisco do Sul, litoral de Santa Catarina, para a refinaria de Araucária. Neste acidente, cerca de 4 milhões de litros de petróleo atingiram os rios Barigui e Iguaçu.

Martinez e Santos (1999) ressaltam a necessidade de previsão de certos desastres que podem ocorrer na natureza quando são construídas barragens e comportas. Como exemplo de desastres atuais no Brasil, pode-se citar o rompimento das barragens de Fundão e de Brumadinho, em Minas Gerais. O rompimento da barragem do Fundão ocorreu no dia 05 de novembro de 2015, no distrito de Bento Rodrigues, em Mariana, Minas Gerais, afetando as cidades de Águas Claras, Ponte do Gama, Paracatu e Pedras, além das cidades de Barra Longa e Rio Doce. Os rejeitos também atingiram mais de 40 cidades na Região Leste de Minas Gerais e no Espírito Santo. Este desastre ambiental foi considerado o maior e sem precedentes no Brasil. E em 25 de janeiro de 2019, ocorreu o rompimento da barragem de Brumadinho, considerado como um desastre humanitário e ambiental, com mais de 200 mortes e muitos desaparecidos.

Derramamentos acidentais de combustíveis, solventes industriais, matéria prima para a indústria química e outros produtos químicos orgânicos e/ou inorgânicos também tem ocorrido em muitas situações, tais como: vazamentos em tubulações de transporte de fluidos, acidentes envolvendo navios que transportam substâncias químicas, perfurações em tanques de armazenamento de combustíveis, entre outras situações. Como exemplo atual, pode-se apontar o vazamento de petróleo cru no Nordeste do Brasil, com primeiros registros no fim do mês de agosto de 2019, atingindo até o final de outubro mais de 200 localidades de vários municípios da Região Nordeste. Na publicação do jornal “O Estado de São Paulo”, do dia 18 de outubro de 2019, o Ministério Público Federal (MPF) classificou este derramamento como o maior desastre ambiental já registrado no litoral brasileiro.

Portanto, é necessário simular e prever a dispersão de substâncias na água temporalmente e espacialmente. Isso possibilitará prever a extensão do impacto ambiental causado e auxiliar na aplicação de técnicas de remediação (FAVERO, 2007).

Segundo Telles (2009), é crescente a busca por medidas preventivas ou remediativas para o problema de poluição hídrica, cujos principais receptores são os rios, lagos, mares e oceanos. No entanto, Lee e Lin (2000) ressaltam que as técnicas de remediação de sítios

contaminados são consideradas caras e, portanto ainda são pouco praticadas.

Dentre os instrumentos preconizados pela Política Nacional de Recursos Hídricos, destaca-se o monitoramento de corpos hídricos que estejam sujeitos à diluição de efluentes. O Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA), em sua Resolução 357 de 2005, salienta a necessidade de estudos específicos nas zonas onde ocorra a mistura dos efluentes com as águas dos corpos receptores. Tais estudos exigem programas de monitoramento muitas vezes intensivos, cuja aplicação, portanto, tem limitações logísticas, operacionais e financeiras (TELLES, 2009).

Neste panorama, Fragoso Jr (2005) e Tucci (2005) evidenciam a necessidade do conhecimento prévio, por meio de simulação computacional, do comportamento hidrodinâmico de ecossistemas e do uso de metodologias que melhor descrevam as variáveis hidrodinâmicas envolvidas, no intuito de gerenciar esses ecossistemas avaliando riscos, usos, disponibilidade e preservação ambiental. As variáveis hidrodinâmicas como a velocidade do escoamento (intensidade e direção), turbulência e ondas (mudanças temporais na altura da superfície da água) são fatores de influência direta na distribuição espacial de nutrientes e poluentes (IMBONDEN, 2004; PAZ, 2003; REYNOLDS, 1984).

Como método de análise comportamental hidrodinâmica, Pereira *et al.* (2013) sugerem o uso da modelagem hidrodinâmica, ou seja, o uso de modelos matemáticos para entendimento dos padrões de fluxo e transporte de substâncias em corpos d'água.

Em Rodrigues *et al.* (2012), modelos matemáticos são apontados como ferramentas de grande utilidade, na medida em que reduzem tempo de análise, custos e riscos na avaliação de impactos ambientais auxiliando na tomada de decisões, quanto a ações corretivas em face de vazamentos iminentes. Telles (2009) sugere o uso dos modelos matemáticos e computacionais como ferramentas que agilizam e otimizam programas de monitoramento, na medida que possam simular a reação do meio ao aporte de uma dada carga de poluentes. Em concordância, Ribeiro, Poffal e Zabadal (2009) também destacam a elevada relevância da simulação de processos envolvendo propagação de poluentes, por reduzir significativamente os custos do projeto e construção de redes de esgotos.

Neste contexto, esta tese apresenta um estudo sobre o comportamento dispersivo de substâncias em reservatórios e regiões alagadas, desenvolvendo uma solução numérica para um modelo matemático bidimensional preditivo do impacto causado por emissões de poluentes, pois é de extrema importância compreender o fluxo e a dispersão de substâncias lançadas em reservatórios naturais.

1.1 Objetivos

1.1.1 Objetivo Geral

Propor um código computacional para análise da dispersão transiente e bidimensional de poluentes em reservatórios e regiões alagadas, fazendo uso do método dos volumes finitos na discretização numérica do modelo de transporte acoplado ao modelo hidrodinâmico.

1.1.2 Objetivos Específicos

- Propor discretização numérica via método dos volumes finitos para o modelo acoplado bidimensional transiente, considerando regiões alagadas com geometria complexa, contendo uma mistura de massa específica variável, devido a processos de injeção/entrada de substâncias.
- Desenvolver um código computacional em Linguagem Fortran 90 para obtenção da solução numérica do modelo acoplado discretizada através do método dos volumes finitos, com condições de contorno incorporadas por volumes fictícios.
- Realizar a validação da solução obtida computacionalmente, observando os critérios de convergência, consistência e estabilidade.
- Analisar a convergência do método iterativo adotado calculando o resíduo global da solução numérica.
- Avaliar o desempenho do código, das discretizações e interpolações estabelecendo comparações.
- Utilizar o código computacional desenvolvido para solucionar estudos de casos, para análise da dispersão de substâncias em escoamentos bidimensionais.

1.2 Organização da Tese

Esta tese é delineada da seguinte forma:

O capítulo 2 traz conceitos básicos, modelos hidrodinâmicos, modelos de transporte e modelos acoplados (hidrodinâmicos e de transporte) tratados em teses, dissertações e artigos. No capítulo 3, apresenta-se o método dos volumes finitos, descrevendo suas etapas de aplicação e vantagens com relação a outros métodos de discretização. No capítulo 4, é feita a aplicação do método dos volumes finitos na discretização numérica do modelo acoplado. O capítulo 5 traz os resultados obtidos em estudos de casos, fazendo uso do modelo acoplado. As conclusões e recomendações são apresentadas no capítulo 6.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, apresentam-se os conceitos básicos que fundamentam os modelos hidrodinâmicos e de transporte, seguidos de uma revisão bibliográfica preliminar.

2.1 Conceitos hidrodinâmicos

A modelagem hidrodinâmica tem como base alguns princípios da Mecânica dos Fluidos, que serão apresentados a seguir.

Definição 2.1: Um fluido é uma substância que se deforma continuamente sob a aplicação de uma tensão de cisalhamento (tangencial), e são classificados de acordo com a relação entre a tensão de cisalhamento aplicada e a taxa de deformação. Os fluidos nos quais a tensão de cisalhamento é diretamente proporcional à taxa de deformação são chamados de fluidos newtonianos. Fluidos comuns como água e ar são considerados newtonianos em condições normais (FOX; MCDONALD; PRITCHARD, 2006).

A mecânica dos fluidos trata do comportamento dos fluidos em repouso ou em movimento. A deformação de um fluido sob tensão é dito escoamento. Escoamentos podem ocorrer, por exemplo, em canais abertos ou condutos.

Segundo Fox, Mcdonald e Pritchard (2006), a viscosidade é a propriedade física que caracteriza a resistência de um fluido ao escoamento. Em outras palavras, é a propriedade associada à resistência que um fluido oferece à deformação por cisalhamento. Os fluidos se subdividem em viscosos e não viscosos. Os escoamentos onde se desprezam os efeitos de viscosidade são denominados invíscidos. Os fluidos com viscosidade nula não existem; entretanto, utiliza-se esta hipótese de inexistência das forças viscosas para simplificar a análise do escoamento.

As interações entre átomos, íons e moléculas podem ser descritas por modelos matemáticos que podem ser classificados de acordo com o número de *Knudsen* (K_n) dado por:

$$K_n = \frac{\lambda}{L}, \quad (2.1)$$

onde, $\lambda(m)$ é o caminho livre médio molecular e $L(m)$ é escala de comprimento fisicamente representativa (RAPP, 2017).

O número de Knudsen, assim batizado em homenagem ao físico dinamarquês Martin Hans Christian Knudsen (1871-1949), é muito útil para determinar se a formulação da mecânica estatística ou da mecânica do contínuo deve ser usada. Se o número de *Knudsen* é muito pequeno ($K_n \ll 1$) considera-se o meio contínuo e aplica-se as equações hidrodinâmicas. No contexto dos modelos contínuos, aplica-se as equações de Navier-Stokes quando $K_n < 0,2$. Considerando nula a viscosidade, as equações de Navier-Stokes são

simplificadas e obtém-se as equações de Euler, que são válidas em movimentos de fluidos não viscosos ($K_n \ll 0.01$). Em geral, quando considera-se a hipótese de fluido não-viscoso, também assume-se que não existe transferência de calor com o meio externo (KAVISKI, 2006).

Definição 2.2: O quociente entre a massa de um fluido e o volume que contém essa massa é dito massa específica ou densidade mássica $\rho(kg/m^3)$. Segundo Graebel (2007), um escoamento incompressível é definido como aquele em que a densidade mássica de uma partícula de fluido não muda à medida que a partícula é transportada. Ou seja, $\frac{\partial \rho}{\partial t} = 0$ e $\frac{\partial \rho}{\partial x} = \frac{\partial \rho}{\partial y} = \frac{\partial \rho}{\partial z} = 0$.

Isto pode ser expresso, em uma única equação, da seguinte maneira:

$$\frac{D\rho}{Dt} = 0, \quad (2.2)$$

onde $\frac{D}{Dt}$ é chamada de derivada material (ou substancial) e representa a diferenciação ao longo de um caminho movendo-se com velocidade $U(m/s)$, escrita como:

$$\frac{D\rho}{Dt} = \frac{\partial \rho}{\partial t} + (U \cdot \nabla \rho). \quad (2.3)$$

Um escoamento é chamado compressível quando as variações da massa específica não são desprezíveis (GRAEBEL, 2007).

Definição 2.3: O escoamento livre, ou fluxo em canais abertos, é caracterizado pela presença de uma superfície em contato com a atmosfera, submetida, portanto, a pressão atmosférica. Nos escoamentos livres as condições de contorno podem ser variáveis, no tempo e no espaço (DIOGENES, 2011).

A velocidade e a profundidade do escoamento são as principais características que diferenciam o escoamento em rios, do escoamento em reservatórios e lagos (TEIXEIRA; PORTO, 2008).

O escoamento em córregos, rios e correntes de água, são exemplos de canais naturais. Os sistemas de escoamento em sistemas de irrigação, redes de esgoto, canais de drenagem e calhas, são exemplos de canais artificiais (CHAUDHRY, 2008).

Para McCutcheon (1989), as coordenadas espaciais necessárias para especificar o campo de velocidade ($\vec{U} = u\vec{i} + v\vec{j} + w\vec{k}$) ou as propriedades do fluido, levam a seguinte classificação:

Escoamento unidimensional: as variações são consideradas somente na direção longitudinal. Neste caso, tem-se: $\frac{v}{u} \approx 0$, $\frac{w}{u} \approx 0$.

Escoamento bidimensional: as variações ocorrem em duas direções, lateral e longitudinal. Neste caso, tem-se: $\frac{w}{v} \approx 0$, $\frac{u}{v} \approx 0$.

De acordo com Chaudhry (2008), se a velocidade e pressão do escoamento num dado ponto não mudam com relação ao tempo, o escoamento é dito permanente ou estacionário. No entanto, se a velocidade e a pressão num dado local mudam com respeito ao tempo, então o escoamento é chamado não permanente ou transiente.

O escoamento em canais abertos e em outros corpos de água é classificado como escoamento permanente ou transiente. O escoamento de água nos canais de rios, reservatórios, lagos, piscinas, sistema de esgotos, condutos, tubos, galerias, túneis e bueiros, para os quais as velocidades mudam com o tempo, é definido como escoamento transiente (não permanente ou não estacionário). O escoamento em canais naturais é quase sempre transiente. Quando a mudança de descarga com o tempo é muito gradual, o escoamento transiente pode ser considerado como constante (MAHMOOD; YEVJEVICH, 1975).

Segundo Teixeira e Porto (2008), as maiores dificuldades na utilização dos modelos bidimensionais se referem à obtenção de dados, ao grande número de parâmetros e à instabilidade numérica.

2.2 Modelos hidrodinâmicos

Segundo Mahmood e Yevjevich (1975), a modelagem hidrodinâmica teve início há mais de 240 anos, com pesquisas dos matemáticos franceses Laplace e Lagrange, publicadas entre 1775 e 1781.

Todavia, Mahmood e Yevjevich (1975) afirmam que, o tratamento matemático avançado de escoamentos transientes em canais abertos se deu a partir de 1871, com a divulgação de duas equações diferenciais parciais formuladas por Barré de Saint Venant, no trabalho intitulado *Teoria do fluxo de água instável, com aplicação a inundações do rio e à propagação das marés nos canais dos rios*, páginas 148-154 e 237-240 das sessões da Academia de Ciência da França em seu volume 73 de julho-dezembro de 1871.

Os pressupostos básicos para o desenvolvimento das equações de Saint Venant, apontados por Mahmood e Yevjevich (1975) são:

1. A superfície de onda varia gradualmente, o que é equivalente a afirmar que a distribuição da pressão ao longo de uma vertical é hidrostática, ou que a aceleração vertical é pequena.
2. As perdas por atrito em escoamento transiente não são significativamente diferentes das do escoamento constante.
3. o fluido é incompressível e homogêneo.
4. o escoamento é unidimensional (1D).

5. a velocidade é variável na direção longitudinal, em cada seção utiliza-se velocidade média.
6. A distribuição de velocidade através da área molhada não afeta substancialmente a propagação da onda.
7. A inclinação média do fundo do canal é pequena, podendo o fundo do canal ser considerado horizontal.

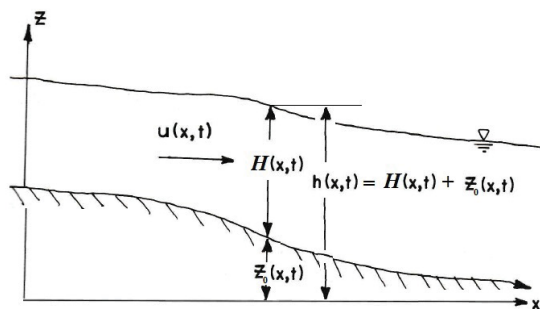
Usando-se da conservação de massa e de quantidade de movimento, Mahmood e Yevjevich (1975) apresentam a dedução das equações de Saint Venant, representadas pelas equações (2.4) e (2.5):

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(uh)}{\partial x} = 0, \quad (2.4)$$

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + g \frac{\partial h}{\partial x} = g(S_{0x} - S_{fx}), \quad (2.5)$$

sendo: $x(m)$ a direção do fluxo, $z(m)$ a direção vertical, $z_0(m)$ nível da superfície do fundo, $u(m/s)$ a velocidade média na direção x , $h(m)$ o nível da água ou profundidade do canal, $t(s)$ o tempo, $S_{0x} = \frac{\partial z_0}{\partial x}$ (m/m) declividade do fundo do rio ou canal, S_{fx} ($m^{1/3}/s$) declividade de resistência ao escoamento que representa a perda de energia por atrito com o fundo e as margens, $g(m/s^2)$ a aceleração da gravidade, conforme FIGURA 1.

FIGURA 1 – Definições de x , z_0 , h e u para escoamento unidimensional.

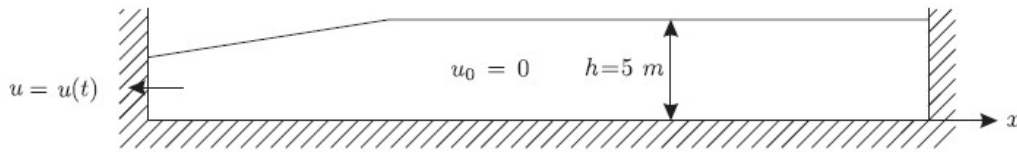


FONTE: Adaptado de Mahmood e Yevjevich (1975).

As variáveis dependentes (incógnitas) deste modelo são as vazões, níveis d'água e velocidades médias no tempo e no espaço.

Lobeiro (2012) utiliza as equações de Saint Venant unidimensionais, para análise do escoamento em um canal retangular, conforme a FIGURA 2. A solução numérica do modelo hidrodinâmico unidimensional foi obtida via Método das Características e implementada no software *Maple*, fornecendo o nível da água e a velocidade unidimensional do escoamento ao longo do tempo.

FIGURA 2 – Canal com descarga à esquerda.



FONTE: Adaptado de Lobeiro (2012).

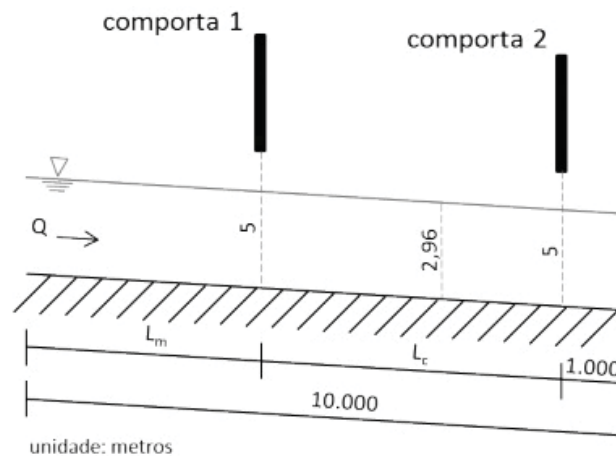
Uma aproximação do modelo hidrodinâmico, descrito pelas equações de Saint Venant, é utilizada por Monteiro *et al.* (2015) para simulação de onda superficial provocada pelo fechamento de comportas. Neste artigo, Monteiro *et al.* (2015) descrevem o modelo hidrodinâmico, usando:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + \frac{1}{B} \frac{\partial}{\partial x} \left(\frac{Q^2}{h} \right) + gA \frac{\partial h}{\partial x} = gAS_{0x} - gAS_{fx}, \quad (2.6)$$

$$B \frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial Q}{\partial x} = 0, \quad (2.7)$$

sendo: $Q(m^3/s)$ a vazão, $t(s)$ o tempo, $A(m^2)$ a área molhada da seção transversal do rio, $h(m)$ a profundidade da lâmina da água, $B(m)$ a largura do canal, $x(m)$ a distância longitudinal ao escoamento do rio, $g(m/s^2)$ a aceleração da gravidade, $S_{0x}(m/m)$ a declividade do fundo do rio e $S_{fx}(m^{1/3}/s)$ a declividade da linha de energia do escoamento, representados na FIGURA 3.

FIGURA 3 – Configurações das simulações de onda superficial provocada pelo fechamento de comportas.

FONTE: Monteiro *et al.* (2015).

A proposta de Monteiro *et al.* (2015) é desprezar o termo advectivo da Equação dinâmica 2.6 e reescrever o termo de perda de energia utilizando a Equação de Manning,

obtendo assim um novo modelo, dito Modelo Inercial, onde a Equação dinâmica é dada por:

$$\frac{\partial Q}{\partial t} + gA \frac{\partial h}{\partial x} = gAS_{0x} - gA \frac{Q|Q|\eta^2}{A^2 R_h^{\frac{4}{3}}}, \quad (2.8)$$

sendo: $R_h(m)$ o raio hidráulico da seção transversal e $\eta(s/m^{1/3})$ o coeficiente de Manning. Para Monteiro *et al.* (2015), o artifício do produto $Q|Q|$ permite dar a direção da força de resistência do fundo, podendo representar ondas de retorno provocadas pelo fechamento de comportas e remansos.

A solução numérica do Modelo Inercial proposto por Monteiro *et al.* (2015) foi implementada na linguagem Fortran 90 usando o compilador GNU Compiler Collection e, foi obtida adotando um método de diferenças finitas semi-implícito baseado no esquema difusivo de Lax. Para validação foram realizados quatro testes e os resultados foram comparados, realizando as mesmas simulações, com o programa HEC-RAS, que utiliza uma solução das equações unidimensionais completas de Saint Venant com a aproximação de Preissmann para as derivadas. Os resultados mostraram que o modelo inercial proposto por Monteiro *et al.* (2015) se adapta ao problema dependendo do tipo de onda, da vazão e da profundidade do escoamento.

O esquema difusivo de Lax também é aplicado por Steinstrasser (2005) na solução das equações completas de Saint Venant para análise de modelos hidrodinâmicos unidimensionais. O método de diferenças finitas explícito com o esquema difusivo de Lax provou ser estável, convergente e suficientemente preciso para aplicações práticas, desde que a condição de Courant seja atendida e as condições iniciais e de contorno definam claramente a situação física real. A solução numérica obtida por implementação em MATLAB e aplicada em problemas da literatura mostrou-se estável, desde que as condições impostas sejam satisfeitas e a rotina de programação seja adequada.

Comparações com o modelo hidrodinâmico HEC-RAS também são estabelecidas por Paiva, Collishonn e Bravo (2011) e Ferreira, Fernandes e Gomes (2017). A eficiência de um esquema numérico explícito preditor corretor de Mac Cormack é verificada em Paiva, Collishonn e Bravo (2011), na obtenção da solução numérica das Equações de Saint Venant unidimensional. O modelo proposto gera resultados iguais aos obtidos com o modelo HEC-RAS, com a vantagem de ser um esquema explícito de fácil implementação, desde que adotado um intervalo de tempo relativamente curto que garanta a estabilidade numérica. Em Ferreira, Fernandes e Gomes (2017) traz-se avanços na solução do modelo hidrodinâmico pelo esquema difusivo de Lax, comparando com software HEC-RAS em um estudo de caso que consiste na drenagem de um rio em uma área densamente povoada (rio Iguaçu, localizado em Curitiba-PR). Concluiu-se em Ferreira, Fernandes e Gomes (2017) que, os esquemas explícitos, apesar de serem mais sensíveis ao intervalo temporal

de simulação, apresentam a vantagem de simplificação para implementação, o que pode trazer benefícios no estudo de sistemas complexos, como rios urbanos.

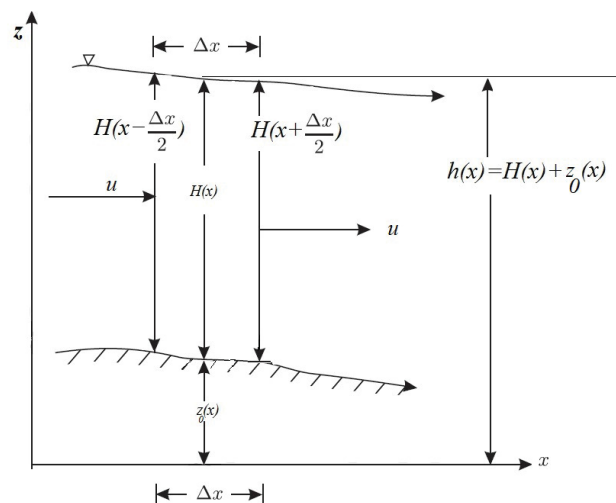
Szydowski (2004), Pato e Navarro (2014) utilizaram o método dos volumes finitos para obter a solução numérica de modelos hidrodinâmicos unidimensionais descritos pelas equações de Saint Venant.

Szydowski (2004) testou esquemas implícitos e outro explícito de volumes finitos. Os resultados obtidos foram comparados uns com os outros e com uma solução analítica (exata) na simulação de uma ruptura de barragem idealizada (*dambreak*). O esquema totalmente implícito e o trapezoidal não são limitados por uma condição de estabilidade como o esquema explícito, porém adicionam erros de difusão e dispersão numérica para a solução. Pato e Navarro (2014) utilizaram o esquema de Roe na simulação de *dambreak* e redes de tubulação. A validação, neste caso, é obtida por comparação com dados laboratoriais.

As equações de Saint Venant frequentemente são empregadas em sua forma unidimensional com o intuito de prever inundações e enchentes, analisando: o comportamento de ondas de cheias em canais, rios e sistemas de drenagem causadas pela ruptura de barragens e diques; manobras de comportas em canais de irrigação; a formação de ressaltos hidráulicos; o comportamento de correntes marítimas e consequentes elevações de maré; entre outros eventos de considerável relevância para navegação e com implicações ambientais devido a dispersão de poluentes (SIMOES *et al.*, 2011).

Como dito anteriormente, as equações de Saint Venant são deduzidas a partir dos princípios de conservação de massa e quantidade de movimento fazendo uso de hipóteses simplificadoras como a entrada/saída de fluxo no volume de controle em uma única direção com velocidade u , conforme ilustrado na FIGURA 4.

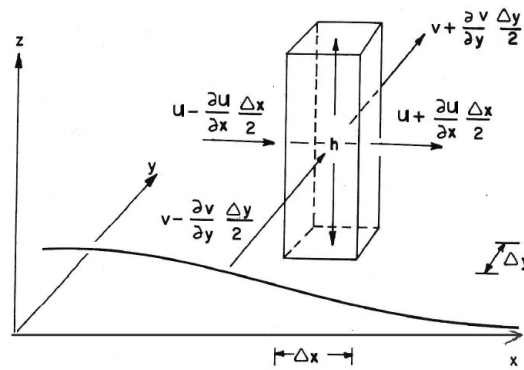
FIGURA 4 – Escoamento unidimensional em um volume de controle de comprimento δx .



FONTE: Adaptado de Lobeiro (2012).

No entanto, Mahmood e Yevjevich (1975) observam que muitas aplicações de escoamentos transientes são mais complexas e exigem hipóteses adicionais, como a adição de uma coordenada horizontal y , perpendicular ao eixo x , para entrada/saída de fluxo através da face normal ao eixo y , conforme FIGURA 5.

FIGURA 5 – Fluxo bidimensional



FONTE: Adaptado de Mahmood e Yevjevich (1975).

Para modelos hidrodinâmicos, nos quais as tensões e acelerações verticais podem ser negligenciadas sem prejuízo do resultado, ou seja, sem que haja perda de informação e da interpretação do fenômeno físico estudado com redução considerável no custo computacional, são utilizadas as equações de águas rasas bidimensionais, que representam uma simplificação das equações de Navier-Stokes e são dadas por:

Equação da Continuidade:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial(hu)}{\partial x} + \frac{\partial(hv)}{\partial y} = 0, \quad (2.9)$$

Equação Dinâmica na direção x :

$$\frac{\partial u}{\partial t} + u \frac{\partial u}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = g(S_{0x} - S_{fx}), \quad (2.10)$$

Equação Dinâmica na direção y :

$$\frac{\partial v}{\partial t} + u \frac{\partial v}{\partial x} + v \frac{\partial v}{\partial y} = g(S_{0y} - S_{fy}), \quad (2.11)$$

sendo: $h(m)$ o nível da água, $u(m/s)$ a velocidade média do fluxo na direção x , $v(m/s)$ a velocidade média do fluxo na direção y , $S_{0x}(m/m)$, $S_{0y}(m/m)$: a declividade do canal nas direções x,y , respectivamente e, $S_{fx}(m^{1/3}/s)$, $S_{fy}(m^{1/3}/s)$ os termos relacionados à resistência da água (perda de energia) com o fundo do canal.

De acordo com Loukili e Soulaïmani (2007), os termos relacionados a declividade e rugosidade do canal são dados por:

$$S_{0x} = \frac{\partial z_0}{\partial x}, \quad S_{0y} = \frac{\partial z_0}{\partial y}, \quad (2.12)$$

$$S_{fx} = \frac{\eta u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{4/3}}, \quad S_{fy} = \frac{\eta v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{4/3}}, \quad (2.13)$$

onde, $z_0(m)$ é o nível da superfície do fundo, $\eta(s/m^{1/3})$ é o coeficiente de Manning.

A derivação das equações de águas rasas podem ser obtidas a partir da integração das equações de quantidade de movimento e conservação da massa na direção vertical ou podem ser deduzidas de forma simples e intuitiva usando o Teorema de Transporte de Reynolds (VREUGDENHIL, 1994; LOBEIRO, 2012).

O sistema de equações (2.9), (2.10) e (2.11) também são denominadas equações de Saint Venant para fluxo bidimensional e podem ser escritas na forma conservativa (com os fluxos dentro do sinal da derivada):

$$h_t + (uh)_x + (vh)_y = 0, \quad (2.14)$$

$$(uh)_t + \left(u^2h + \frac{1}{2}gh^2\right)_x + (uvh)_y = gh(S_{0x} - S_{fx}), \quad (2.15)$$

$$(vh)_t + (uvh)_x + \left(V^2h + \frac{1}{2}gh^2\right)_y = gh(S_{0y} - S_{fy}). \quad (2.16)$$

Esta reformulação na forma conservativa pode ser encontrada em (LOBEIRO, 2012; CHAUDHRY, 2008) e será utilizada nesta tese para tratamento numérico usando o método dos volumes finitos.

Pedlosky (1987) ressalta que, apesar do nomenclatura, as equações de águas rasas modelam escoamentos com frentes de onda consideradas pequenas se comparadas com o seu comprimento.

Segundo Henderson (1966), se o fluido está em contato com a atmosfera e $h \ll L$, sendo h a profundidade do escoamento e L o comprimento das ondas oscilatórias, o escoamento é governado pelas equações de águas rasas. Estas equações modelam escoamentos em canais naturais e artificiais.

Considerando a onda oscilatória, é mostrado nos textos sobre hidrodinâmica que a velocidade c das ondas do comprimento L na água da profundidade h é dada pela equação:

$$c^2 = \frac{gL}{2\pi} \tan\left(\frac{2\pi h}{L}\right). \quad (2.17)$$

Considerando que L é grande comparado com h , então $\frac{2\pi h}{L}$ é pequeno, de modo que

$$\tan\left(\frac{2\pi h}{L}\right) \approx \frac{2\pi h}{L}, \quad (2.18)$$

donde segue que,

$$c^2 = \frac{gL}{2\pi} \frac{2\pi h}{L} = gh, \quad (2.19)$$

ou ainda,

$$c = \sqrt{gh}. \quad (2.20)$$

As equações de águas rasas, embora definidas em um domínio bidimensional, fornecem a altura da coluna de água e as componentes de velocidade em um fluxo instável, independente da topografia de fundo e das irregularidades do domínio.

No entanto, o sistema de equações de águas rasas, na maioria dos casos, não possui solução analítica, pois trata-se de um conjunto de equações diferenciais parciais hiperbólicas não lineares com termos fontes. O que requer um tratamento numérico robusto para obter uma solução numérica garantindo convergência e estabilidade numérica.

Ao longo das últimas décadas, muitos avanços foram realizados na solução numérica das equações de águas rasas para simulação de modelos bidimensionais aplicados à análise de escoamentos causados pela abertura instantânea de comportas e ruptura de barragens (FENNEMA; CHAUDHRY, 1990; SHEU; FANG, 2001; VALIANI; CALEFFI; ZANNI, 2002; NIKOLOS; DELIS, 2009; ABREU JR, 2015; FERNÁNDEZ-PATO; MORALES-HERNÁNDEZ; GARCÍA-NAVARRO, 2018; MELO; GRAMANI; KAVISKI, 2018).

A solução das equações de águas rasas é de considerável importância para uma variedade de problemas de engenharia costeira e ambiental. O estudo nessa área é motivado pela necessidade de prever certos fenômenos ambientais e as alterações que podem ocorrer na natureza quando são construídos portos, barragens, comportas, molhes ou quando são emitidos efluentes térmicos e químicos (MARTINEZ; SANTOS, 1999).

Num levantamento bibliográfico, Chaudhry (2008) destaca alguns métodos numéricos utilizados para obtenção da solução numérica das equações das águas rasas, dentre estes pode-se citar:

- O Método das Diferenças Finitas (MDF)
- O Método das Características (MC)
- O Método dos Elementos Finitos (MEF)
- O Método dos Volumes Finitos (MVF)

Fennema e Chaudhry (1990) utilizaram esquemas explícitos de diferenças finitas, na discretização das equações de águas rasas bidimensionais, adicionando condições de estabilidade e viscosidade artificial para suavizar as oscilações de alta frequência. Para validar, os esquemas discretos foram aplicados em um problema típico de engenharia

hidráulica: abertura parcial de uma barragem e passagem de uma onda de inundação através de uma contração do canal, adotando a razão entre o nível de água a jusante (h_r) e à montante (h_l) como sendo, $h_r/h_l = 0.5$. Os resultados dos diferentes esquemas foram comparados e a ocorrência de oscilações numéricas foi observada, evidenciando a necessidade de se utilizar esquemas implícitos.

Tayfur *et al.* (1993), utilizou um método de diferenças finitas implícito para discretização das equações de águas rasas. Para solução do sistema de equações não lineares, resultantes do procedimento implícito, foi usada a técnica iterativa de Newton-Raphson. As soluções numéricas obtidas, quando comparadas com resultados experimentais, se mostraram satisfatórias.

Lobeiro (2012) utilizou o modelo hidrodinâmico bidimensional governado por equações das águas rasas simplificadas (com declividade e atrito nulos) para análise da variação do nível da superfície da água ($h(x,y,t)$) e das componentes da velocidade (u,v) na simulação de um escoamento bidimensional causado por aberturas nas paredes de um reservatório. A solução numérica do modelo foi obtida via Método das Características e implementada no software Maple. A solução numérica obtida se mostrou instável com duração de tempo de simulação muito curto, não sendo aplicável na análise de escoamentos transientes de longa duração.

Segundo Martinez e Santos (1999), a utilização do Método dos Elementos Finitos (MEF) na obtenção da solução numérica das equações de águas rasas completas (com os termos convectivos e de fricção no fundo), datam do início da década de 70, com a notável contribuição do esquema de Taylor-Galerkin¹. Entre os trabalhos que se destacam na aplicação do esquema de Taylor-Galerkin às equações de águas rasas, Martinez e Santos (1999) destacam o trabalho conjunto de J.Peraire, O.C. Zienkiewicz e K. Morgan(1986), num modelo de elementos finitos para as equações das águas rasas na forma conservativa.

O modelo desenvolvido por Martinez e Santos (1999) simula escoamentos bidimensionais de fluidos incompressíveis, usando uma formulação geral das equações das águas rasas discretizada via MEF. A integração destas equações é realizada pelo método explícito de Taylor-Galerkin e a validação da solução é obtida por comparação de resultados com exemplos da literatura.

O estudo de caso apontado em Fennema e Chaudhry (1990) foi analisado por Sheu e Fang (2001) usando um esquema de elementos finitos de alta ordem e uma melhoria na relação h_r/h_l para 0,05 foi obtida, buscando simular a condição de leito seco em uma determinada região do domínio.

O Método dos Volumes Finitos (MVF), devido as suas propriedades conservativas,

¹ Segundo Martinez e Santos (1999), o método de Taylor-Galerkin é uma extensão da técnica de diferenças finitas de alta ordem desenvolvida originalmente por Lax-Wendroff e introduzido no contexto das equações de águas rasas por M. Kawahara(1978).

é também bastante empregado na obtenção de solução numérica para as equações de Águas rasas. Audusse e Bristeau (2007) utilizaram os *solvers Roe, HLLC e kinetic*; Nikolos e Delis (2009) também fizeram uso do Esquema de Roe, adicionando a técnica de reconstrução MUSCL (*Monotone Upstream Schemes for Conservation Laws*); Begnudelli e Sanders (2007) e Bi *et al.* (2014) aplicaram um esquema de volumes finitos tipo Godunov baseados numa malha de células quadrilaterais e domínio topográfico complexo; Simoes (2011) e Wu, He e Liu (2014) também utilizaram o Método de Godunov, adotando porém uma malha não estruturada de elementos triangulares; Lukacova, Noelle e Kraft (2007) desenvolveram o Esquema FVEG (Finite Volume Evolution Galerkin) com dois passos, o preditor e o de atualização dos volumes finitos padrões; Murillo *et al.* (2008) basearam-se num método de volume finito de células centradas para criarem o GUAD 2D, um software de simulação hidrodinâmica bidimensional adaptado para computadores pessoais básicos que, comparado com outros softwares baseados em métodos de diferenças finitas, se mostrou muito rápido.

Para obtenção de soluções numéricas das equações de águas rasas via MVF são utilizados comumente esquemas explícitos na integração temporal, como os trabalhos de Bellos, Soulis e Sakkas (1991), Loukili e Soulaïmani (2007), Nikolos e Delis (2009), Bi *et al.* (2014), entre outros. Para garantir a estabilidade numérica nestes casos, são utilizadas adaptações da Condição de Courant bidimensional e para validação são feitas comparações com soluções analíticas (em casos particulares simplificados), com outros métodos e esquemas existentes ou, com dados experimentais.

Valiani, Caleffi e Zanni (2002) usaram dados experimentais em um evento de quebra de barragem para verificar a precisão, estabilidade e confiabilidade de uma solução numérica das equações de águas rasas obtidas por um esquema de volumes finitos bidimensional. O modelo numérico permitiu uma precisão de segunda ordem, tanto no espaço como no tempo, acarretando porém um alto custo computacional, apresentando algumas discrepâncias entre os resultados experimentais e os numéricos nos pontos pesquisados. Os autores destacam a necessidade de simular a propagação de uma onda de inundação para um fundo seco e áspero e otimizar o algoritmo para reduzir o tempo de computação.

Um esquema de volumes finitos não estruturado para malhas triangulares para simular escoamentos bidimensionais instáveis em águas rasas com frentes molhadas/secas sobre topografia complexa é apresentado em Nikolos e Delis (2009). Utiliza-se em Nikolos e Delis (2009) para o esquema temporal o método explícito de Runge-Kutta e para o espacial a malha não estruturada. Comparações satisfatórias foram obtidas com dados mensurados e numéricos. Todavia, os autores sugerem a incorporação de um procedimento de escalonamento num esquema implícito temporal, e uma implementação paralela do algoritmo, a fim de reduzir o tempo computacional.

A eficiência de um esquema implícito de volumes finitos é explorada em Fernández-Pato, Morales-Hernández e García-Navarro (2018) para simulação de fluidos em águas

rasas bidimensionais, com frentes secas/molhadas, adotando um tratamento complexo para a discretização espacial e uma malha não estruturada flexível para obter um melhor ajuste à geometrias irregulares. No entanto, é feito ressalvas quanto ao tempo computacional para obtenção da solução por esquemas implícitos, pois embora um método implícito normalmente exija menos etapas da solução, cada uma exige mais tempo computacional do que as soluções obtidas por um esquema explícito. Os autores apontam a necessidade de se utilizar um solucionador de matrizes que com um número reduzido de iterações alcance a convergência.

Neste contexto, esta tese apresenta a formulação de um esquema híbrido (central/*upwind*) e totalmente implícito de volumes finitos para discretização das equações de águas rasas, a fim de obter uma solução numérica incondicionalmente estável com um algoritmo iterativo otimizado, de convergência rápida e baixo custo computacional, para simulação de escoamentos bidimensionais transientes em topografias complexas (com declives e sujeitos a resistência ao fluxo). Condições iniciais descontínuas representando leitos úmidos e secos foram adotadas de forma satisfatória. A robustez da solução numérica é verificada com uma extrapolação na relação h_r/h_l para 0.00002. Comparações são realizadas para diferentes esquemas de discretização e com os resultados obtidos em Fennema e Chaudhry (1990). O esquema numérico obtido é aplicado na análise de problemas hidráulicos como abertura súbita de comportas, controle de fluxo em reservatórios de contenção com pilares internos e análise de fluxo em regiões com topografia de fundo com declives e resistência ao escoamento.

2.3 Conceitos básicos em transferência de massa em fluidos

O modelo de transporte de uma substância ao longo do tempo e do espaço fundamenta-se no princípio de conservação de massa parcial.

Apresenta-se a seguir uma notação apropriada, adotada em Felder e Rousseau (2005), para indicar as propriedades físicas de uma mistura ideal de múltiplas componentes.

Definição 2.4: Seja V um dado volume da mistura fluida. Considera-se M_i a massa da componente i neste volume. Deste modo, defini-se:

$$\sum M_i = M. \quad (2.21)$$

Para análise percentual, define-se a fração mássica do fluido i , o volume parcial da componente i e a massa específica da mistura fluida.

Definição 2.5: A fração mássica do fluido i na mistura fluida de massa $M = \sum M_i$ é dada por:

$$x_i = \frac{M_i}{M}. \quad (2.22)$$

Usando a definição de fração mássica obtêm-se uma relação fundamental dada no teorema abaixo.

Teorema 2.1 *Numa mistura fluida de massa M constituída de n elementos i de massa M_i , com $i = 1, \dots, n$, têm-se:*

$$\sum x_i = 1. \quad (2.23)$$

Prova:

$$\sum x_i = \sum \frac{M_i}{M} = \frac{1}{M} \sum M_i = \frac{1}{M} M = 1. \quad (2.24)$$

Definição 2.6: O volume ocupado pela massa do componente i na mistura fluida de massa $M = \sum M_i$, com a mesma temperatura e pressão, dito volume parcial da componente i é tal que:

$$\sum V_i = V. \quad (2.25)$$

A massa específica da mistura fluida de massa M e volume V é dada por:

$$\rho = \frac{M}{V}. \quad (2.26)$$

Defini-se ainda, a concentração mássica do fluido i na mistura fluida, da seguinte maneira:

Definição 2.7: A concentração mássica $c_i [kg/m^3]$ de uma substância i (traçador ou soluto) dissolvida em uma solução (fluido solvente de massa $M = \sum M_i$ e volume $V = \sum V_i$) é a razão entre quantidade de massa da substância i (soluto) por unidade de volume da solução (solvente) em que esse traçador é dissolvido. Ou seja,

$$c_i = \frac{M_i}{V}. \quad (2.27)$$

Usando a definição da massa específica ρ e da fração mássica x_i , podemos escrever:

$$c_i = \rho x_i. \quad (2.28)$$

De fato,

$$c_i = \frac{M_i}{V} = \frac{M}{V} \frac{M_i}{M} = \rho x_i. \quad (2.29)$$

A definição da concentração mássica em função da massa específica e da fração mássica, dada pela equação (2.28) será utilizada nesta tese na formulação da equação da conservação de massa parcial.

Definição 2.8: A massa específica ou densidade termodinâmica do elemento i , denominada ρ_i é uma propriedade do fluido i expressa por:

$$\rho_i = \frac{M_i}{V_i}. \quad (2.30)$$

Observa-se assim que há distinção entre a concentração mássica do fluido i e a massa específica, pois c_i é uma quantidade relacionada com a composição da mistura, enquanto que ρ_i é uma propriedade do fluido i , que independe da mistura.

Os teoremas apresentados a seguir auxiliam na formulação do modelo de transporte.

Teorema 2.2 *A massa específica ρ da mistura de massa $M = \sum M_i$ e volume $V = \sum V_i$ pode ser calculada usando a fração mássica x_i e a densidade termodinâmica de cada componente i , como sendo:*

$$\rho = \frac{1}{\sum \frac{x_i}{\rho_i}}. \quad (2.31)$$

Demonstração:

Observa-se que,

$$1 = \frac{V}{V} = \frac{\sum V_i}{V} = \sum \frac{V_i}{V}. \quad (2.32)$$

Como, $\rho_i = \frac{M_i}{V_i}$ tem-se:

$$V_i = \frac{M_i}{\rho_i}. \quad (2.33)$$

Do mesmo modo, sendo $c_i = \frac{M_i}{V}$, resulta:

$$V = \frac{M_i}{c_i}. \quad (2.34)$$

Substituindo as equações (2.33) e (2.34) na equação (2.32), resulta:

$$1 = \sum \frac{M_i}{\rho_i} \frac{c_i}{M_i} = \sum \frac{c_i}{\rho_i} \quad (2.35)$$

Da mesma maneira, substituindo a equação (2.28) na equação (2.35), tem-se:

$$1 = \sum \frac{c_i}{\rho_i} = \sum \frac{\rho x_i}{\rho_i} = \rho \sum \frac{x_i}{\rho_i} \quad (2.36)$$

ou ainda,

$$\frac{1}{\rho} = \sum \frac{x_i}{\rho_i}, \quad (2.37)$$

o que leva a afirmação feita no teorema:

$$\rho = \frac{1}{\sum \frac{x_i}{\rho_i}}. \quad (2.38)$$

Teorema 2.3 *No transporte de um traçador (soluto B) dissolvido num solvente A, a concentração mássica da mistura (soluto-solvente) é dada por:*

$$\rho = \rho_A \left(1 + \frac{c_B}{\rho_A} - \frac{c_B}{\rho_B} \right). \quad (2.39)$$

Demonstração:

Do Teorema (2.2) tem-se:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{x_A}{\rho_A} + \frac{x_B}{\rho_B}. \quad (2.40)$$

Por outro lado, do Teorema (2.1), tem-se:

$$x_A = 1 - x_B. \quad (2.41)$$

Deste modo, substituindo a equação (2.41) em (2.40), resulta:

$$\frac{1}{\rho} = \frac{(1 - x_B)}{\rho_A} + \frac{x_B}{\rho_B}. \quad (2.42)$$

Multiplicando a equação (2.42) por ρ resulta:

$$1 = \frac{\rho - \rho x_B}{\rho_A} + \frac{\rho x_B}{\rho_B} = \frac{\rho}{\rho_A} - \frac{\rho x_B}{\rho_A} + \frac{\rho x_B}{\rho_B}. \quad (2.43)$$

Rearranjando a equação (2.43) de forma conveniente, tem-se:

$$\frac{\rho}{\rho_A} = 1 + \frac{\rho x_B}{\rho_A} - \frac{\rho x_B}{\rho_B}. \quad (2.44)$$

Finalmente, multiplicando a equação (2.44) por ρ_A e usando a equação (2.28), conclui-se a afirmação feita no teorema:

$$\rho = \rho_A \left(1 + \frac{c_B}{\rho_A} - \frac{c_B}{\rho_B} \right). \quad (2.45)$$

A generalização do teorema (2.3), para o cálculo da massa específica da mistura de n elementos fluidos, é dada por:

$$\rho = \rho_1 \left[1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{c_i}{\rho_1} \right) - \sum_{i=2}^n \left(\frac{c_i}{\rho_i} \right) \right]. \quad (2.46)$$

Esta generalização é utilizada na implementação numérica proposta nesta tese para o cálculo da massa específica ρ da mistura de n elementos, usando a densidade termodinâmica e a concentração mássica dos solutos $2, \dots, n$ dissolvidos no solvente 1.

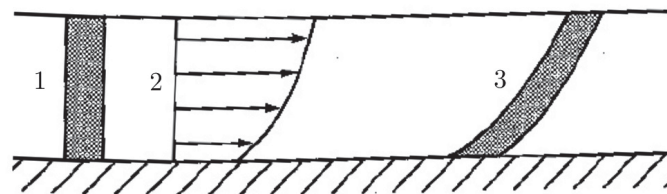
Teixeira e Porto (2008) afirmam que os modelos de qualidade de água relacionam o transporte de uma substância (traçador) ao longo do tempo e do espaço, e que este transporte ocorre devido à advecção, difusão e dispersão das substâncias no corpo d'água.

Estes três processos físicos são definidos da seguinte maneira:

Definição 2.9: A advecção de uma substância é o transporte resultante do gradiente do escoamento e imposto por um sistema de corrente, como em um rio ou águas costeiras. Mais precisamente, a advecção é o mecanismo de transporte macroscópico ocasionado pelo escoamento, uma vez que com o deslocamento do fluido, os contaminantes presentes no mesmo se movem na direção das linhas de corrente. (TUCCI, 2005; FISCHER *et al.*, 1979; PEREIRA, 2015).

Este processo físico é descrito por Cunge, Holly e Verwey (1980) usando as componentes da dispersão: a distribuição inicial do traçador; o perfil de velocidade; e a distribuição do traçador em um momento posterior, conforme a FIGURA 6.

FIGURA 6 – Advecção diferencial sem difusão.

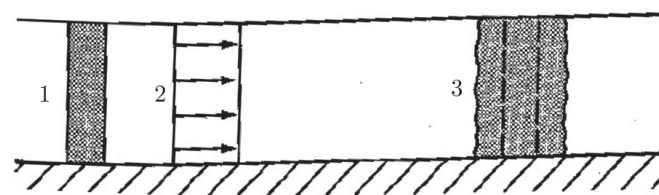


FONTE: Cunge, Holly e Verwey (1980).

Definição 2.10: A difusão é a variação da concentração com base no gradiente da própria substância, ou seja, é o resultado do movimento molecular de um ponto de alta concentração para um de baixa concentração. A difusão (molecular) é a dispersão das partículas por movimentos moleculares aleatórios. Já a difusão (turbulenta) é a dispersão aleatória de partículas por movimento turbulento, considerada aproximadamente análoga à difusão molecular, mas com coeficientes de difusão bem maiores do que os coeficientes de difusão molecular. Fisicamente, o contaminante dissolvido na água desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, visando equalizar a concentração em toda a massa de fluido (TUCCI, 2005; FISCHER *et al.*, 1979; PEREIRA, 2015).

Novamente, usando as componentes da dispersão apontados anteriormente, este processo físico é representado em Cunge, Holly e Verwey (1980), conforme a FIGURA 7.

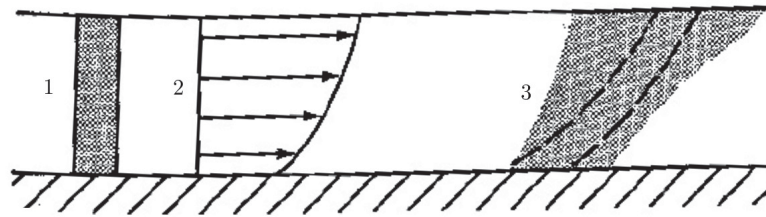
FIGURA 7 – Difusão sem advecção diferencial.



FONTE: Cunge, Holly e Verwey (1980).

Definição 2.11: A **dispersão** é o espalhamento de partículas ou de uma nuvem de contaminantes pelos efeitos combinados de difusão e do cisalhamento transversal. Mais especificamente, a **dispersão** é o efeito da flutuação turbulenta sobre a concentração, quando o fluido é descrito pela velocidade média, num volume finito, considerando que existem partículas que escoam com velocidade diferente da média, existe uma ação dispersiva no escoamento e na concentração de uma substância, conforme a FIGURA 8 (TUCCI, 2005; FISCHER *et al.*, 1979).

FIGURA 8 – Dispersão: advecção diferencial combinada com difusão.



FONTE: Cunge, Holly e Verwey (1980).

A relação entre o fluxo de massa de uma substância e sua concentração é dada pela 1ª Lei de Fick, descrita abaixo.

1ª Lei de Fick: O fluxo de massa de uma substância que se difunde numa mistura de substâncias é diretamente proporcional ao gradiente da fração mássica dessa substância, conforme a equação 2.47:

$$J_A = -\rho\Gamma\nabla\left(\frac{c_A}{\rho}\right), \quad (2.47)$$

sendo: J_A o fluxo de massa da substância A na mistura, c_A concentração mássica parcial da espécie A e ρ a massa específica da mistura.

Segundo Cunge, Holly e Verwey (1980) como o transporte ocorre devido aos processos físicos de advecção, difusão e dispersão, pela 1ª Lei de Fick pode-se afirmar que a variação da concentração é dependente destes processos físicos. Esta dependência é expressa matematicamente pelas equações:

Equação da advecção:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}(C\vec{U}) = 0, \quad (2.48)$$

Equação da difusão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{div}(\Gamma \text{grad} C), \quad (2.49)$$

Equação do transporte ou Equação da advecção - difusão:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \text{div}(C\vec{U}) = \text{div}(\Gamma \text{grad} C), \quad (2.50)$$

sendo: $C[kg/m^3]$ a concentração do traçador; \vec{U} a velocidade do escoamento com componentes $u[m/s]$, $v[m/s]$, $w[m/s]$ na direção dos eixos x, y, z , respectivamente; $\Gamma[m^2/s]$ o coeficiente de difusão.

Para escoamentos bidimensionais, a equação do transporte (2.50) é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma \frac{\partial C}{\partial y} \right). \quad (2.51)$$

A equação do transporte juntamente com condições iniciais e de contorno constituem os Modelos de Transporte. Dependendo das condições incorporadas ao modelo, a equação do transporte admite solução analítica.

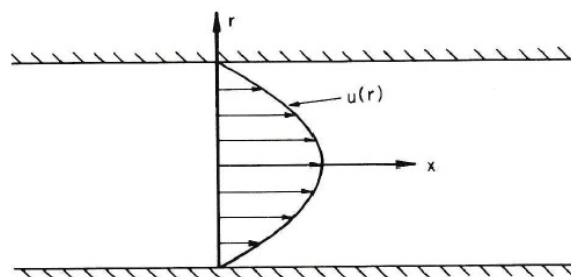
2.4 Modelos de transporte

Em 1953, Geoffrey Taylor publicou um artigo descrevendo a propagação de contaminantes dissolvidos em fluxo laminar em um tubo. Desde então, a análise de G. Taylor tem sido estendida a uma variedade de fluxos ambientais (FISCHER *et al.*, 1979).

De acordo com Islam e Chaudhry (1997), o transporte de contaminantes através de um meio fluido tem sido objeto de extensa pesquisa desde o início dos trabalhos de G. Taylor (1953,1954) e J.W. Elder (1959). Taylor investigou o processo de difusão e advecção em condutos fechados e Elder estendeu os resultados de Taylor para fluxo em canais abertos.

Segundo Fischer *et al.* (1979), para análise da dispersão de poluente, G. Taylor utilizou inicialmente um perfil de velocidade unidimensional de fluxo laminar em conduto fechado, como esboçado na FIGURA 9.

FIGURA 9 – Distribuição parabólica de velocidade em fluxo laminar em tubulação.



FONTE: Fischer *et al.* (1979)

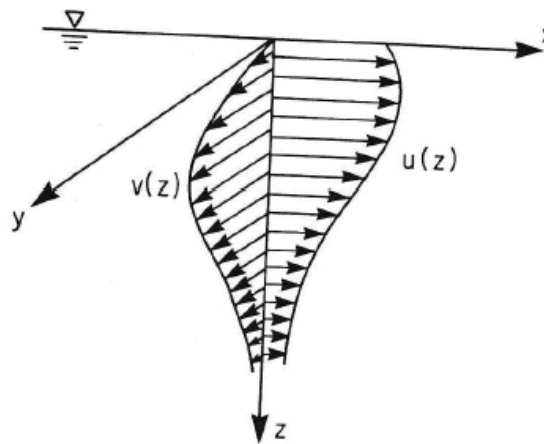
Fischer *et al.* (1979) utilizou a análise de Taylor para dar uma estimativa razoavelmente precisa da taxa de dispersão longitudinal em rios, e uma estimativa da dispersão longitudinal parcial em estuários.

Os modelos de qualidade de água utilizados na representação dos fenômenos de transporte de massa em rios são, em geral, unidimensionais e representam o escoamento

através da velocidade média na seção transversal, desprezando as variações nas outras direções. No caso dos lagos e reservatórios, com frequência torna-se necessária a utilização de modelos bidimensionais. (TEIXEIRA; PORTO, 2008)

Fischer *et al.* (1979) traz um esboço do fluxo de cisalhamento enviesado na camada superficial do Lago Huron, analisado por G. T. Csanady (1966), conforme FIGURA 10.

FIGURA 10 – Perfil de velocidade de um fluxo de cisalhamento típico enviesado na superfície de um lago, descrito por G. T. Csanady (1966).



FONTE: Fischer *et al.* (1979).

No caso do transporte de poluentes em cursos de água naturais, a equação da advecção-dispersão é amplamente utilizada na sua forma unidimensional para prever a distribuição espacial e temporal da substância dissolvida, quer o lançamento tenha ocorrido intencional ou acidentalmente. (DEVENS; JUNIOR; SILVA, 2006)

Modelos de Transporte unidimensionais foram resolvidos numericamente por Fischer *et al.* (1979) e Cunge, Holly e Verwey (1980), fazendo uso do Método das Diferenças Finitas e velocidades advectivas constantes em todo o processo do transporte. Para validação das soluções numéricas, foram adotadas condições iniciais e de contorno que garantem a existência de solução analítica do modelo. Deste modo, é possível estabelecer comparação entre as soluções analítica e numérica. Fischer *et al.* (1979) e Cunge, Holly e Verwey (1980) observaram porém, o aparecimento de difusão artificial na discretização do termo de advecção na equação do transporte. Segundo Cunge, Holly e Verwey (1980), esta difusão numérica (artificial), em muitos casos pode ser várias vezes maior que a difusão real e leva a resultados equivocados.

Islam e Chaudhry (1997) investigaram técnicas de discretização que minimizassem a difusão artificial, aplicando sete esquemas de diferenças finitas e um esquema de interpolação polinomial para resolver um modelo de transporte unidimensional. Comparações entre os esquemas são estabelecidas a partir de uma solução analítica, que é obtida a partir de simplificações, como condição inicial prescrita além de, velocidades advectivas e

coeficientes de difusão constantes.

Costa e Castro (2007) utilizaram o Método dos Elementos Finitos para obter uma solução numérica da equação unidimensional do transporte que modela a contaminação de águas subterrâneas em meios porosos homogêneos, com velocidade da água na direção do fluxo constante. Para validação do método utilizado, realizou-se comparação com solução analítica submetida à condição de contorno do tipo Dirichlet (concentração prescrita).

Rocha *et al.* (2007) estabeleceram comparações entre as soluções numéricas do modelo de transporte unidimensional obtidas pelos métodos das Diferenças Finitas e dos Elementos Finitos. A partir de condição de contorno prescrita e condição inicial nula, o modelo admite solução analítica, que é utilizada para validação dos métodos numéricos analisados. As soluções obtidas se mostraram equivalentes, desde que seja tomado tratamento numérico apropriado para evitar instabilidade numérica.

Telles, Rodrigues e Neto (2012) utilizaram o Método dos Volumes Finitos para simulação bidimensional-horizontal da dispersão de um traçador em meio fluvial. Foi adotada uma formulação totalmente implícita e para a resolução do sistema de equações fez-se uso do Algoritmo de Thomas (TDMA). Para ajuste dos coeficientes de dispersão longitudinal e transversal foi realizado um trabalho de campo, que auxiliou na calibração dos coeficientes.

Em Versteeg e Malalasekera (2007), a equação do transporte é obtida por balanço de massa e escrita em função da massa específica $\rho[kg/m^3]$ da mistura.

$$\frac{(\partial\rho\phi)}{\partial t} + div(\rho\phi\vec{U}) = div(\Gamma grad \phi) + S_\phi, \quad (2.52)$$

sendo: ϕ a concentração da propriedade transportada, \vec{U} a velocidade do transporte, Γ o coeficiente de difusão e S_ϕ o termo fonte.

Versteeg e Malalasekera (2007) utilizaram o Método dos Volumes Finitos para obter a discretização da equação do transporte (2.52), adotando velocidade advectiva e coeficiente de dispersão constantes.

Nos exemplos apontados em Versteeg e Malalasekera (2007), adota-se massa específica ρ constante. No entanto, no transporte de um traçador (soluto) dissolvido num solvente, a variação da concentração do soluto causa variação na massa específica da solução, $\rho[kg/m^3]$. Deste modo, utilizando a notação adotada na equação (2.28), pode-se reescrever a equação do transporte (2.52) em função da concentração mássica c_B da substância B na mistura AB (soluto-solvente) da seguinte maneira:

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + div(c_B\vec{U}) = div(\Gamma grad c_B) + S_{c_B}, \quad (2.53)$$

com:

- $\frac{\partial c_B}{\partial t}$: taxa de variação da concentração mássica c_B de um determinado elemento de fluido B na mistura,
- $div(c_B \vec{U})$: taxa líquida de fluxo do elemento de fluido B ;
- $div(\Gamma grad c_B)$: taxa de variação da concentração mássica de um elemento de fluido B devido à difusão,
- S_{c_B} : taxa de variação da concentração mássica c_B devido a fontes poluidoras.

Nesta tese, faz-se uso de um modelo de transporte bidimensional, representado pelas Equações (2.53) e (2.45), na análise da dispersão de uma substância em água. A solução numérica é obtida via Método dos Volumes Finitos e detalhada no Capítulo 4, embasada nas discretizações apresentadas em Versteeg e Malalasekera (2007).

2.5 Modelos acoplados

O transporte de poluentes em rios e zonas costeiras é um tema de interesse crescente devido à poluição cada vez mais grave causada por projetos de construção, defesas costeiras, descargas de indústrias, inundações e eliminação de resíduos radioativos. Esta poluição pode prejudicar os ecossistemas e o ambiente, com potencial para afetar a economia e a saúde humana. Compreender a dinâmica dos poluentes e seus impactos na qualidade da água é essencial na previsão precisa dos impactos sobre o sistema ecológico e estabelecer uma estratégia de gestão cientificamente justificada e praticamente eficiente para o controle da poluição e proteção ambiental. Modelos numéricos são uma ferramenta poderosa para estudar o transporte de poluentes em águas rasas (LI; DUFFY, 2012).

A qualidade da água e dos rios é reflexo direto das atividades desenvolvidas na bacia hidrográfica e o controle de poluição apresenta-se como um desafio. O crescente grau de impermeabilização das bacias hidrográficas urbanas e o uso extensivo de insumos industriais, defensivos agrícolas e fertilizantes são fatores associados as fontes de poluição nas bacias urbanas e rurais. Neste contexto, a modelagem de poluição difusa se apresenta como ferramenta de apoio ao processo de identificação das áreas geradoras desta poluição e ao processo de tomada de decisão e estudo de alternativas para mitigação dos efeitos dos processos de ocupação na bacia e implementação dos instrumentos de gestão de recursos hídricos (FERREIRA; MÜHLENHOFF; FERNANDES, 2018).

Como apontado em Ferreira *et al.* (2019), o volume e a velocidade da água, possuem impacto no transporte de poluentes e simulações para o transporte de substâncias em rios em estado instável corroboram com melhores estimativas para as estratégias de planejamento quando a dinâmica temporal for relevante.

Porém, Ferreira (2015) evidencia que, em geral, na simulação do transporte de substâncias, são adotados modelos de transporte com velocidade uniforme e seção transversal prismática. Estas hipóteses simplificadoras auxiliam na obtenção de soluções analíticas. No entanto, em situações reais tais hipóteses não são aplicáveis, uma vez que a geometria, velocidade e rugosidade variam ao longo do canal.

Observa-se que, na modelagem dos escoamentos cuja velocidade possuem gradientes elevados, a adoção de velocidade média para o escoamento implicará em resultados equivocados. Para estes casos, faz-se clara a necessidade de acoplamento de um modelo hidrodinâmico ao modelo de transporte, ou seja, deve-se calcular as variáveis hidrodinâmicas do escoamento e utilizá-las na resolução numérica do modelo de transporte.

Costa e Castro (2007) utilizaram um modelo unidimensional de hidrodinâmica e de qualidade da água para simular o escoamento e a dispersão de poluente em um trecho específico de rio, que recebe influência direta de marés. Na resolução numérica foi utilizado um esquema explícito de diferenças finitas e para validação utilizou-se de dados da literatura.

Chertock, Karshdan e Kurganov (2008) apresentaram um método numérico híbrido para calcular a propagação de um poluente passivo em águas rasas. O fluxo unidimensional é modelado pelo sistema de equações de águas rasas e a propagação do poluente é descrita por uma equação advecção-difusão. Neste trabalho, adota-se um método euleriano - lagrangeano híbrido, em que o termo convectivo é tratado pelo método de características, enquanto a difusão é resolvida utilizando o método rápido de operador divisão explícito. Para testar o desempenho do Método híbrido Euleriano-Lagrangeano foram utilizados dois exemplos numéricos e realizadas comparações de resultados obtidos pelo método proposto e por um método de volumes finitos puramente euleriano (como o esquema *upwind*).

Pereira (2010) desenvolveu um modelo hidrodinâmico e de transporte de poluentes bidimensional, baseado em uma discretização em grade não estruturada. A solução numérica da equação hidrodinâmica foi obtida usando o Método dos Volumes Finitos e para equação do transporte, um esquema com limitador de fluxo. O modelo foi aplicado inicialmente em um estudo de caso simplificado formado por uma lagoa circular hipotética. Pereira (2010) simulou o despejo permanente no Rio Guaíba de um efluente conservativo com concentração e coeficiente de difusão constantes e, o lançamento de um pulso de 10 horas de efluente, com concentração constante de 5 mg/L , na água do Rio Guaíba com concentração constante 1 mg/L . Para validação foram analisados a conservação de princípios físicos, obtendo baixo percentual de erro. Pereira (2010) sugere o desenvolvimento e implementação de um algoritmo de secagem e inundação para áreas sujeitas à inundações e, aponta a utilização de técnicas de processamento em paralelo como alternativa de melhoria na eficiência computacional das implementações numéricas.

Um modelo bidimensional acoplado de escoamento em águas rasas e transporte de poluentes foi desenvolvido em Li e Duffy (2011) utilizando uma malha triangular não estruturada. O modelo apresentado em Li e Duffy (2011) é baseado em um método de volume finito *upwind*, usando o *solver* de *Riemann*. A fim de tornar o modelo eficiente e estável, um método explícito-implícito foi utilizado na discretização temporal. Um caso de teste do transporte de poluentes em uma cavidade quadrada é utilizado para validar o modelo, sendo aplicado também a dois cenários de transporte de poluentes: transporte de poluentes após ruptura de barragens e transporte de poluentes causado por tempestades na Baía de Galveston. Os resultados numéricos mostram que o modelo pode prever com precisão a dinâmica do escoamento e o transporte de poluentes em eventos extremos, como ruptura de barragem. No sistema de equações do modelo, as variáveis são o nível da água $h(m)$, as componentes da velocidade do escoamento $(u,v)(m/s)$ e a concentração média volumétrica de poluente $\psi(m^3/m^3)$. Neste modelo, a equação da advecção-difusão é escrita em função de ψh , transportando assim as informações sobre o nível h proveniente das equações de águas rasas. Acoplagem semelhante para a equação do transporte é utilizada em Benkhaldoun, Elmahi e Seaid (2007) e Chaabelasri *et al.* (2014).

Thongtha e Kasemsuwan (2018) apresentam um modelo de qualidade da água que consiste no modelo hidrodinâmico simplificado e no modelo de dispersão. O modelo hidrodinâmico é usado para descrever a corrente de água e, a equação de advecção-difusão transiente fornece a concentração de poluente em reservatório aberto-fechado com o mecanismo de remoção de contaminantes. São utilizadas técnicas de diferença finita na obtenção da solução numérica do modelo. O modelo adotado é simplificado pois foram desprezados os efeitos gravitacionais e a resistência ao escoamento. A velocidade da água do modelo hidrodinâmico é conectada ao modelo de dispersão, porém o nível do fluxo não é carregado na equação de advecção-difusão, como em Chaabelasri *et al.* (2014), o que enfraquece a solução obtida.

Em Budinski (2019), o transporte de solutos em escoamentos de águas rasas é simulado usando o Método de *Lattice Boltzmann* (LBM). Para impor geometria complexa, as equações de águas rasas são transformadas no sistema de coordenadas curvilíneas. Neste modelo, a equação da advecção-difusão transporta as informações sobre o nível h proveniente das equações de águas rasas sendo escrita em função de hC , onde C é a concentração mássica adimensional média e h a profundidade do escoamento. O transporte acoplado do escoamento e poluição é testado em diferentes casos, estabelecendo comparações. O alto nível de concordância entre os resultados obtidos pelo modelo proposto e os correspondentes valores analíticos e medições indicam que a solução numérica obtida via LBM é capaz de resolver problemas ambientais muito complexos.

Em todos estes modelos citados, a variação da massa específica da mistura não é objeto de estudo. Analisa-se somente a concentração mássica da substância injetada, não

calculando a massa específica da mistura, que sofre variações com a injeção de poluentes. Neste caso, faz-se necessário calcular esta variável e transportar esta informação para o modelo hidrodinâmico.

Para preencher essa lacuna, o ineditismo desta tese é a análise da dispersão de poluentes de forma inovadora, considerando uma mistura de concentração mássica total variável, num modelo de transporte bidimensional com velocidades transientes acoplado a um modelo hidrodinâmico. Este modelo acoplado de dispersão é governado pelas equações:

$$(\rho h)_t + (\rho u h)_x + (\rho v h)_y = 0, \quad (2.54)$$

$$(\rho u h)_t + \left(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2 \right)_x + (\rho u v h)_y = g \rho h (S_{0x} - S_{fx}), \quad (2.55)$$

$$(\rho v h)_t + (u v h)_x + \left(\rho v^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2 \right)_y = g \rho h (S_{0y} - S_{fy}), \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial c_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(c_i u) + \frac{\partial}{\partial y}(c_i v) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_i \frac{\partial c_i}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_i \frac{\partial c_i}{\partial y} \right), \quad i = 2, \dots, n, \quad (2.57)$$

$$\rho = \rho_1 \left[1 + \sum_{i=2}^n \left(\frac{c_i}{\rho_1} \right) - \sum_{i=2}^n \left(\frac{c_i}{\rho_i} \right) \right], \quad (2.58)$$

$$x_i = \frac{c_i}{\rho}, \quad i = 2, \dots, n, \quad (2.59)$$

$$x_1 = 1 - \sum_{i=2}^n x_i, \quad (2.60)$$

$$c_1 = \rho \cdot x_1, \quad (2.61)$$

sendo: $h(m)$ o nível da água; $u(m/s)$ a velocidade do fluxo na direção x ; $v(m/s)$ a velocidade do fluxo na direção y ; S_{0x} e S_{0y} as declividades da superfície de fundo nas direções x, y , respectivamente; S_{fx} e S_{fy} os termos relacionados à resistência ao escoamento (perda de energia); x_i fração mássica da substância i na mistura; $c_i(kg/m^3)$ a concentração mássica da substância i na mistura; $\Gamma_i(m^2/s)$ o coeficiente de dispersão da substância i ; $\rho_i(kg/m^3)$ é a densidade termodinâmica constante da substância i , $\rho(kg/m^3)$ a massa específica variável da mistura de substâncias; $g(m/s^2)$ a aceleração da gravidade; e $t(s)$ o tempo.

A discretização do modelo de dispersão acoplado, obtida usando o Método dos Volumes Finitos, é apresentada no Capítulo 4.

3 MÉTODO DOS VOLUMES FINITOS

Segundo Maliska (2013), o engenheiro ou projetista tem à sua disposição, fundamentalmente, três ferramentas para desenvolver seu projeto ou analisar seu problema:

- métodos analíticos;
- métodos numéricos; e
- experimentação em laboratório.

Os métodos analíticos nem sempre podem ser empregados, pois os modelos que admitem solução analítica requerem hipóteses simplificativas que os desviam do fenômeno físico real. Já a experimentação em laboratório é de altíssimo custo e muitas vezes não pode ser realizada por questões de segurança ou pela dificuldade de reprodução das condições reais. Por outro lado, os métodos numéricos praticamente não apresentam restrições e, graças ao desenvolvimento da computação podem ser empregados para a solução de problemas complexos da engenharia e da física. (MALISKA, 2013)

Ainda de acordo com Maliska (2013), a tarefa de um método numérico é transformar uma equação diferencial, definida no domínio D , em um sistema de equações algébricas. Para tanto, as derivadas existentes na equação diferencial são substituídas por expressões algébricas que envolvem a função incógnita. Essa substituição é dita discretização numérica da equação diferencial e transforma o sistema original de equações diferenciais em um sistema de equações algébricas, cuja solução é obtida rapidamente graças ao avanço computacional atual.

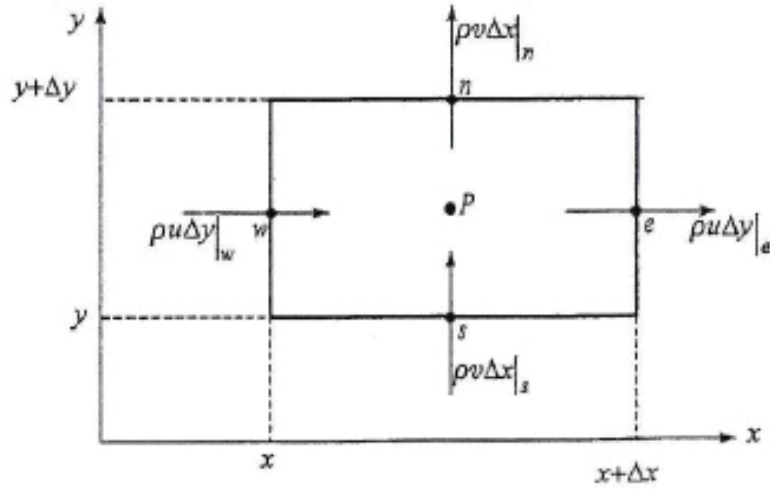
3.1 Descrição do Método dos Volumes Finitos (MVF)

Historicamente o MVF foi introduzido no campo da dinâmica dos fluidos computacional (CFD) em 1971 por P.W. McDonald, para o cálculo do fluxo bidimensional de gás em turbinas (HIRSCH, 2007; BLAZEK, 2001).

Conforme Tannehill, Anderson e Pletcher (1997), o MVF é muito útil e prático na resolução numérica das equações diferenciais que regem a dinâmica de fluidos.

Patankar (1980) descreve o MVF como a técnica de integração, sobre cada volume elementar (região arbitrária no espaço, através do qual o fluido escoar), das equações diferenciais governantes na forma conservativa (com os fluxos dentro do sinal da derivada). Ao realizar esta integração aparecem os fluxos nas fronteiras do volume de controle, de forma equivalente ao balanço da propriedade em estudo. Ou seja, ao se realizar a integração das leis de conservação descritas por equações diferenciais na forma conservativa, realiza-se o balanço da propriedade. Para exemplificar este fato, utiliza-se um balanço de massa bidimensional descrito em Maliska (2013) e mostrado na FIGURA 11.

FIGURA 11 – Volume elementar bidimensional para os balanços de conservação.



FONTE: Maliska (2013).

O balanço de massa indicado na FIGURA 11 é dada por:

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s = 0, \quad (3.1)$$

que em Maliska (2013) é reescrita em termos da velocidade, da seguinte maneira

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0, \quad (3.2)$$

onde as letras minúsculas e, w, n, s são utilizadas para identificar as faces (leste, oeste, norte e sul, respectivamente) do volume de controle na discretização numérica; \dot{m}_w, \dot{m}_s é a massa que entra no volume de controle, nas direções dos eixos x, y , com velocidades u, v , respectivamente; \dot{m}_e, \dot{m}_n representam a transferência de massa no volume de controle, nas direções dos eixos x, y , com velocidades u, v respectivamente.

Dividindo a equação (3.2) pelo produto $\Delta x \Delta y$, obtém-se:

$$\frac{\rho u|_e - \rho u|_w}{\Delta x} + \frac{\rho v|_n - \rho v|_s}{\Delta y} = 0, \quad (3.3)$$

que, após a aplicação do limite, quando Δx e Δy tendem a zero, resulta na forma diferencial conservativa da equação de conservação da massa:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0. \quad (3.4)$$

Pela descrição dada anteriormente, pode-se aplicar o MVF sobre a equação (3.4) para obter o balanço de massa. De fato, realizando a integração sobre o volume elementar

mostrado na FIGURA 11, obtém-se:

$$\int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) \right] dx dy = 0, \quad (3.5)$$

Usando o Teorema Fundamental do Cálculo, a equação (3.5) é reescrita da seguinte maneira:

$$\int_s^n [\rho u_e - \rho u_w] dy + \int_w^e [\rho v_n - \rho v_s] dx = 0. \quad (3.6)$$

Considerando que o fluxo de massa avaliado no meio da face do volume elementar representa a média da variação na face, a equação (3.6) é reescrita em Maliska (2013) por

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0, \quad (3.7)$$

que é exatamente a equação (3.2), obtida da realização do balanço de massa no volume elementar, que também pode ser escrita como

$$\dot{m}_e - \dot{m}_w + \dot{m}_n - \dot{m}_s = 0. \quad (3.8)$$

Esta equação, ou a equação (3.1), é a equação aproximada que dá o fluxo de massa para o volume P , conforme Maliska (2013).

Deste modo, pode-se observar que a integração da forma conservativa da equação diferencial é equivalente a fazer o balanço da propriedade. Em Maliska (2013), a preferência literária em se obter as equações aproximadas por integração é justificada pelo fato que os balanços de propriedades nem sempre são de fácil dedução.

3.2 Vantagens e desvantagens do Método dos Volumes Finitos

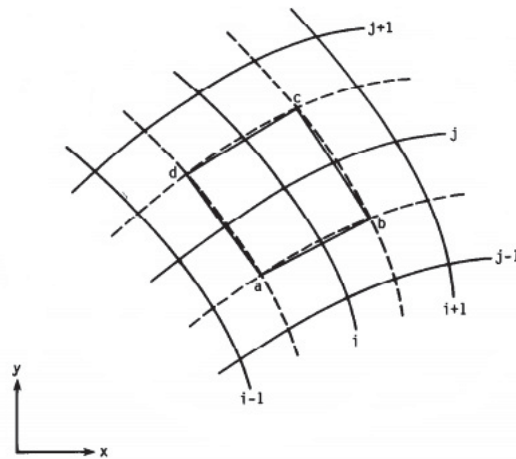
Um dos grandes atrativos, que possibilitaram o crescimento das aplicações do MVF, está diretamente relacionado à forma como a equação aproximada é obtida. A equação discretizada é obtida aplicando a lei de conservação da propriedade em cada volume elementar no qual o domínio do problema encontra-se dividido, garantindo que os balanços sejam satisfeitos ao nível dos volumes elementares, independentemente do tamanho da malha. O MDF e o MEF não garantem a conservação da propriedade em nível discreto.

Uma característica importante do MVF é que massa, quantidade de movimento e energia são automaticamente conservados, com a resolução da forma integral das equações governantes das leis de conservação. E ainda, essa conservação é satisfeita sobre qualquer

volume elementar e, portanto, sobre todo o domínio de cálculo (PATANKAR, 1980; TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997).

A possibilidade de associar a interpretação física à matemática e de se trabalhar com diferenciados volumes elementares nas geometrias complexas, influiu de modo considerável para que os analistas envolvidos com o MDF passassem a usar o MVF no estudo de escoamento de fluidos. Uma vantagem do MVF sobre o MDF é a possibilidade de utilizar uma geometria qualquer, como indicada na FIGURA 12, sem necessidade de transformação de coordenadas. Como o domínio é subdividido em volumes elementares arbitrários, o MVF pode ser empregado em domínios físicos irregulares (TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997).

FIGURA 12 – Volume elementar bidimensional.



FONTE: Tannehill, Anderson e Pletcher (1997).

O MVF apresenta desvantagens quando é empregado em uma equação não escrita na forma conservativa (com os fluxos dentro do sinal da derivada). Neste caso, faz-se necessária a utilização de integração numérica de uma função incógnita e, essa aproximação pode acarretar erros. E mesmo quando a equação está na forma conservativa, como no exemplo dada pela equação (3.4), faz-se necessária a utilização de interpolação para obtenção do valor da função nas faces do volumes elementares.

Mesmo necessitando da utilização de aproximações e interpolações para os casos apontados anteriormente, o MVF é atualmente o método mais aplicado na resolução de escoamentos de fluidos. Segundo Cebeci, Shao e Laurendeau (2005) e Maliska (2013), o MVF é a técnica mais empregada pelos pacotes comerciais de CFD, devido à sua robustez e características conservativas, uma vez que na simulação de escoamentos é extremamente importante satisfazer as leis de conservação em nível discreto.

Abordagens didáticas do MVF podem ser consultadas em livros textos específicos: Leveque (2002), Versteeg e Malalasekera (2007) e Maliska (2013). Mas, pela eficiência do método no tratamento de problemas da dinâmica dos fluidos, há também vários livros

de CFD que abordam o método. Dentre estes, pode-se citar: Patankar (1980), Tannehill, Anderson e Pletcher (1997), Fortuna (2000), Blazek (2001), Cebeci, Shao e Laurendeau (2005) e Hirsch (2007).

3.3 Etapas de aplicação do Método dos Volumes Finitos

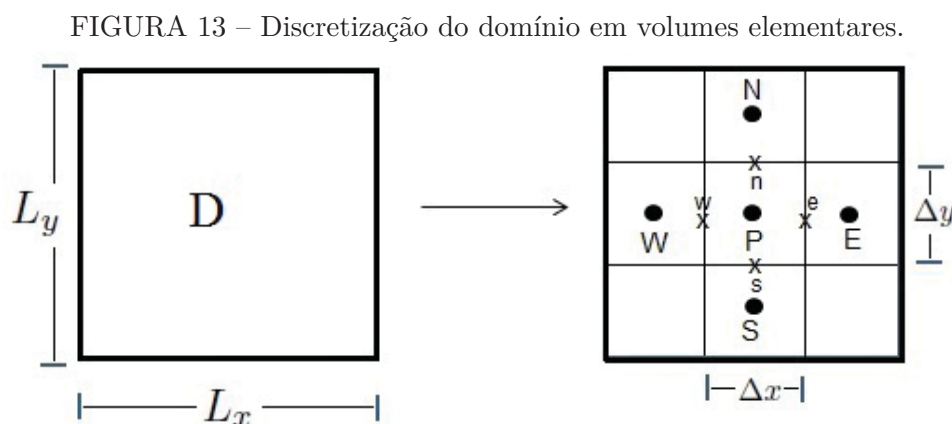
As etapas necessárias para a aplicação do MVF são:

- (i) Discretização do domínio;
- (ii) Balanço de conservação da propriedade (discretização espacial e temporal);
- (iii) Incorporação das condições de contorno e iniciais e;
- (iv) Resolução do sistema algébrico resultante.

(i) Discretização do domínio

Inicialmente, deve-se discretizar o domínio D utilizando volumes elementares. A função incógnita será calculada nos centróides dos volumes. Portanto, o número de variáveis a serem calculadas correspondem exatamente a quantidade de volumes elementares utilizados na discretização.

Como exemplo, a FIGURA 13 representa a discretização do domínio D em uma malha formada por volumes elementares.

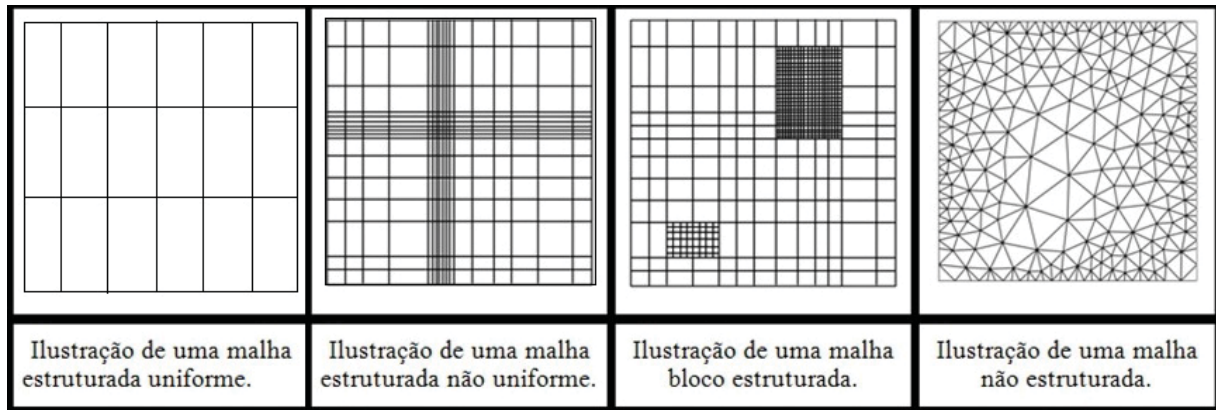


FONTE: A autora (2019).

É de extrema importância que a distribuição e arranjo dos volumes que constituem a malha de discretização sejam capazes de representar adequadamente o domínio físico do problema (TANNEHILL; ANDERSON; PLETCHER, 1997).

Para tanto, Lemos (2011) aponta possibilidades de malha: estruturada e uniforme, bloco estruturada ou não estruturada, conforme FIGURA 14.

FIGURA 14 – Tipos de malha.



FONTE: Adaptado de Lemos (2011).

Lemos (2011) ressalta que, a estrutura utilizada para geração de malha não altera de forma alguma como o MVF é aplicado, já que no desenvolvimento do método é considerado um volume elementar qualquer, seja ele estruturado ou não.

(ii) Balanço de conservação da propriedade

Para o domínio dividido em volumes elementares de controle, realiza-se o balanço de conservação da propriedade em cada um destes volumes elementares.

O balanço é feito usando integração direta das equações governantes em sua forma conservativa, sobre cada volume elementar, gerando um sistema de equações constituídas pelas variáveis localizadas nas interfaces dos volumes elementares.

Como os valores das variáveis localizadas nas faces dos volumes elementares não são conhecidos é necessária a utilização de funções de interpolação que tem por finalidade obter valores aproximados através das variáveis localizadas no centro dos volumes elementares vizinhos adjacentes.

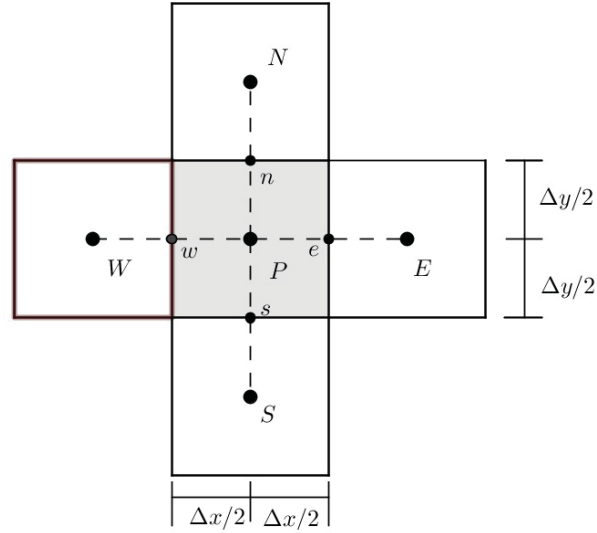
Nesta tese adotou-se a interpolação central de 2ª ordem CDS (*Central Differencing Scheme*), o esquema UDS (*Upwind Differencing Scheme*) de 1ª ordem e a interpolação híbrida CDS/UDS.

Na interpolação central considera-se nas faces dos volumes elementares a média dos valores das variáveis nos centróides vizinhos adjacentes, indicados na FIGURA 15.

Deste modo, o balanço de massa,

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho v \Delta x|_n - \rho v \Delta x|_s = 0, \quad (3.9)$$

FIGURA 15 – Volumes para interpolação central.



FONTE: A autora (2019).

será reescrito da seguinte maneira:

$$\frac{(\rho u)|_E + (\rho u)|_P}{2} \Delta y - \frac{(\rho u)|_P + (\rho u)|_W}{2} \Delta y + \frac{(\rho v)|_N + (\rho v)|_P}{2} \Delta x - \frac{(\rho v)|_P + (\rho v)|_S}{2} \Delta x = 0. \quad (3.10)$$

No esquema *upwind*, os valores das variáveis nas faces dos volumes elementares são calculados considerando primeiramente a direção do fluxo que transporta alguma propriedade do centróide vizinho para a face onde o fluxo é avaliado. Por exemplo,

$$\rho_e = \begin{cases} \rho_E, & \text{se } u_e > 0, \\ \rho_P, & \text{se } u_e < 0. \end{cases} \quad (3.11)$$

Para as equações que admitem produto de variáveis, pode-se linearizar considerando apenas uma das variáveis como ativa, e as outras são constantes ou variáveis secundárias calculadas a partir da condição inicial da iteração de *looping* do tempo anterior e/ou do último passo de tempo. Por exemplo,

$$(\rho h)_e \approx \rho_e^0 h_e, \quad (3.12)$$

onde, h é a variável ativa e o índice 0 representa o valor disponível da variável secundária ρ no passo anterior.

Na interpolação híbrida CDS/UDS, o esquema UDS é escolhido para a variável principal e a aproximação CDS para a variável secundária conhecida. Por exemplo, na

equação (3.12) o UDS é usado para a variável principal h , e para ρ é aplicada a interpolação CDS usando os valores nodais vizinhos já calculados anteriormente, ou seja,

$$(\rho h)_e = \rho_e^0 h_e = \left[\frac{\rho_E^0 + \rho_P^0}{2} \right] \left[(1 + \alpha_e) \frac{h_P}{2} + (1 - \alpha_e) \frac{h_E}{2} \right], \quad (3.13)$$

onde,

$$\alpha_e = 1, \text{ se } u_e > 0, \text{ c.c. } \alpha_e = -1. \quad (3.14)$$

Deve-se ressaltar ainda que, para os casos de escoamento transiente é necessária a avaliação do comportamento temporal das variáveis. Portanto, nas discretizações via MVF para modelos transientes, no balanço da propriedade realiza-se também a integração temporal.

Para a integração temporal, pode-se utilizar a seguinte aproximação numérica:

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} \phi(P,t) dt = [\theta \phi(P,t + \Delta t) + (1 - \theta) \phi(P,t)] \Delta t, \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (3.15)$$

Adotando as notações

$$\phi(P,t + \Delta t) = \phi_P, \quad \phi(P,t) = \phi_P^0, \quad (3.16)$$

a integração numérica (3.15) é reescrita da seguinte maneira:

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} \phi(P,t) dt = [\theta \phi_P + (1 - \theta) \phi_P^0] \Delta t, \quad 0 \leq \theta \leq 1. \quad (3.17)$$

A equação (3.17) admite as formulações explícita, implícita e totalmente implícita.

Na formulação explícita adota-se $\theta = 0$. Deste modo, a equação (3.17) é dada por:

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} \phi(P,t) dt = \phi_P^0 \Delta t. \quad (3.18)$$

Nesta formulação temporal o cálculo das variáveis no passo de tempo $t + \Delta t$ depende somente dos valores das variáveis no tempo t . Computacionalmente, o esquema explícito é o mais simples, porém para obter uma solução estável, o avanço no tempo e no espaço estão limitados por uma condição de estabilidade.

Na formulação implícita, θ assume um valor no intervalo aberto (0,1), ou seja, $0 < \theta < 1$. O mais conhecido método pertencente a esta classe é o método de Crank-

Nicolson em que $\theta = 1/2$ e o valor da variável é aproximada por sua média aritmética entre os instantes de tempo t e $t + \Delta t$. Neste caso, a equação (3.17) é dada por:

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} \phi(P,t)dt = \left[\frac{\phi_P + \phi_P^0}{2} \right] \Delta t. \quad (3.19)$$

Na formulação totalmente implícita, adota-se $\theta = 1$. Assim, a equação (3.17) é reescrita da seguinte maneira:

$$I_T = \int_t^{t+\Delta t} \phi(P,t)dt = \phi_P \Delta t. \quad (3.20)$$

Neste esquema temporal totalmente implícito, o cálculo das variáveis no passo de tempo $t + \Delta t$ depende dos valores das variáveis no tempo final e inicial. Embora sua implementação seja mais complexa, a solução obtida é incondicionalmente estável. Por este motivo, a formulação temporal totalmente implícita foi adotada na maioria dos estudos de casos desenvolvidos nesta tese.

(iii) Incorporação das condições de contorno e iniciais

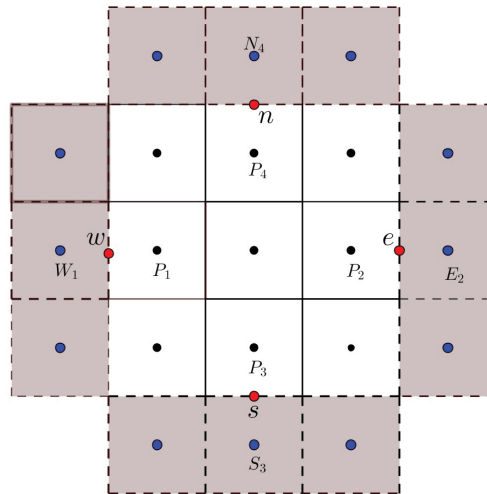
A incorporação das condições de contorno à solução do problema pode ser feita usando volumes fictícios e aproximação central.

A utilização de volumes fictícios permite que toda a malha seja constituída de volumes inteiros, respeitando assim a conservação da propriedade para todos os volumes. Como o próprio nome já diz, este procedimento utiliza volumes elementares imaginários que não existem geometricamente e apenas são utilizados como uma extensão do domínio. Embora seja este um procedimento de fácil implementação, a criação destes volumes aumenta o número de incógnitas do problema, principalmente em problemas multidimensionais, o que acarreta em um aumento do custo computacional. (LEMOS, 2011).

Na Figura 16 destacam-se os pontos de fronteira w, e, s, n nos quais é conhecido o valor de uma propriedade ϕ devido às condições de contorno impostas. Supondo que na implementação numérica o valor da propriedade ϕ nos pontos internos P_1, P_2, P_3, P_4 já estejam calculados, o valor de ϕ nos pontos W_1, E_2, S_3, N_4 será dado por:

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\phi_{W_1} + \phi_{P_1}}{2} = \phi_w, \\ \frac{\phi_{P_2} + \phi_{E_2}}{2} = \phi_e, \\ \frac{\phi_{S_3} + \phi_{P_3}}{2} = \phi_s, \\ \frac{\phi_{P_4} + \phi_{N_4}}{2} = \phi_n, \end{array} \right. \quad (3.21)$$

FIGURA 16 – Volumes Fictícios.



FONTE: A autora (2019).

o que é equivalente a,

$$\begin{cases} \phi_{W_1} = 2\phi_w - \phi_{P_1}, \\ \phi_{E_2} = 2\phi_e - \phi_{P_2}, \\ \phi_{S_3} = 2\phi_s - \phi_{P_3}, \\ \phi_{N_4} = 2\phi_n - \phi_{P_4}. \end{cases} \quad (3.22)$$

A incorporação das condições iniciais, necessária em problemas transientes, estabelece o valor da propriedade ϕ no instante inicial t_0 . Esta condição pode ser prescrita por um valor constante, $\phi(t_0) = \phi_0$, ou pode ser dada por uma função. Por exemplo, para a propriedade ϕ definida em um domínio unidimensional, pode-se adotar $\phi(x, t = 0) = \phi_0 = cte$ ou $\phi(t_0) = f(x)$.

(iv) Resolução do sistema algébrico linear resultante

Realizado o balanço da propriedade e incorporando as condições iniciais e de contorno, deve-se resolver o sistema resultante através de uma rotina numérica apropriada.

As referências Maliska (2013), Versteeg e Malalasekera (2007), Fortuna (2000) e Tannehill, Anderson e Pletcher (1997) Tannehill destacam duas técnicas de resolução dos sistemas algébricos: os métodos diretos (Gauss, LU, Gauss-Jordan, Thomas) e os métodos iterativos (Jacobi, Gauss-Seidel, Sobre-Relaxação, Multigrid), entre outros. Nesta tese adotou-se o método iterativo de Gauss-Seidel.

4 SOLUÇÃO NUMÉRICA DO MODELO DE TRANSFERÊNCIA DE MASSA ACOPLADO

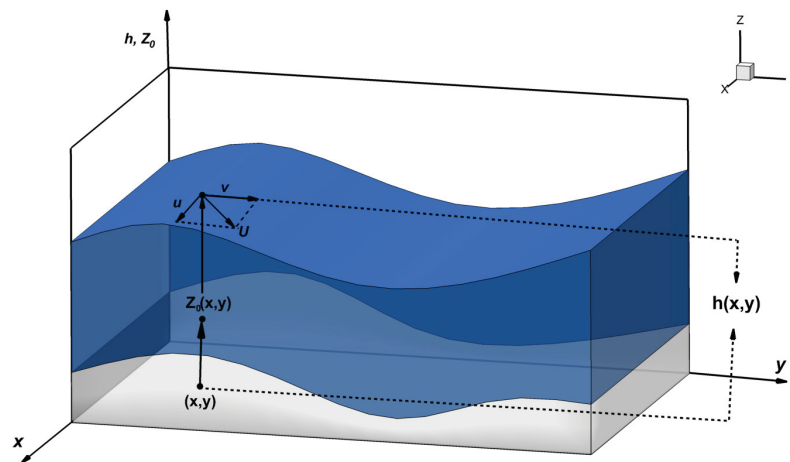
Neste capítulo desenvolve-se o Método dos Volumes Finitos (MVF) para a obtenção da solução numérica do modelo acoplado (hidrodinâmico e de transporte), com o objetivo de propor um código computacional para análise da dispersão transiente e bidimensional de solúveis (transferência de massa) em reservatórios e regiões alagadas.

Como já mencionado na Seção 2.5, nos modelos encontrados na literatura, a variação da massa específica da mistura não é objeto de estudo. Analisa-se somente a concentração mássica de cada poluente injetado, não calculando a massa específica da mistura, que sofre variações com a injeção de poluentes. No modelo apresentado a seguir, considera-se uma mistura de concentração mássica variável e apresenta-se a solução numérica do modelo hidrodinâmico acoplado ao modelo de transporte, com um algoritmo que calcula a massa específica da mistura e carrega esta informação, de forma acoplada, para o modelo hidrodinâmico.

4.1 Considerações

Considera-se o escoamento bidimensional transiente em um reservatório de base retangular contendo inicialmente um fluido de massa específica ρ , com paredes impermeáveis e rígidas, cuja cota da superfície de fundo é descrita por $z_0(x,y)$, com superfície livre $h(x,y,t)$ e campo de velocidade do fluxo $U(u,v)$, conforme FIGURA 17.

FIGURA 17 – Notação adotada na análise de fluxo e transporte de substâncias em águas rasas.



FONTE: A autora (2019).

Para análise da transferência de massa do soluto B no solvente A faz-se ainda as seguintes considerações: (i) a massa específica ρ do fluido no domínio de análise sofre variações significativas ao longo do tempo e do espaço devido a variação da concentração

mássica do soluto injetado no reservatório, (ii) a distribuição de pressão na vertical é puramente hidrostática; (iii) as tensões tangenciais são desprezíveis; (iv) a distribuição de velocidade na direção vertical é uniforme; (v) não há contribuições laterais ao escoamento no domínio analisado; (vi) não há outras fontes poluidoras.

4.2 Sistema de Equações Governantes

O modelo hidrodinâmico acoplado ao modelo de transporte será regido pelas equações de águas rasas juntamente com a equação do transporte (advecção-difusão), podendo ser escrito na forma conservativa (com os fluxos dentro do sinal da derivada):

$$(\rho h)_t + (\rho u h)_x + (\rho v h)_y = 0, \quad (4.1)$$

$$(\rho u h)_t + \left(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2 \right)_x + (\rho u v h)_y = \rho g h (S_{0x} - S_{fx}), \quad (4.2)$$

$$(\rho v h)_t + (\rho u v h)_x + \left(\rho v^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2 \right)_y = \rho g h (S_{0y} - S_{fy}), \quad (4.3)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (c_B u) + \frac{\partial}{\partial y} (c_B v) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right), \quad (4.4)$$

$$\rho = \rho_A \left(1 - \frac{c_B}{\rho_B} + \frac{c_B}{\rho_A} \right), \quad (4.5)$$

$$x_B = \frac{c_B}{\rho}, \quad (4.6)$$

$$x_A = 1 - x_B, \quad (4.7)$$

$$c_A = \rho \cdot x_A, \quad (4.8)$$

sendo: x e y as componentes cartesianas nas direções longitudinal e transversal, respectivamente; $h(m)$ a profundidade da mistura ou nível da superfície livre; $u(m/s)$ a velocidade do fluxo na direção x ; $v(m/s)$ a velocidade do fluxo na direção y ; x_A, x_B frações mássicas da substâncias A, B respectivamente na mistura; $c_A(kg/m^3), c_B(kg/m^3)$ as concentrações mássicas da substâncias A, B respectivamente na mistura; $\Gamma_{AB}(m^2/s)$ o coeficiente de dispersão do soluto B no solvente A ; $\rho_A(kg/m^3), \rho_B(kg/m^3)$ as densidades termodinâmicas constantes das substâncias A, B respectivamente, $\rho(kg/m^3)$ a massa específica variável do fluido composto pela mistura das substâncias A, B ; $g(m/s^2)$ a aceleração da gravidade;

$t(s)$ o tempo, $z_0(m)$ a cota da superfície de fundo, e $S_{0x}(m/m)$, $S_{0y}(m/m)$ os declives desta superfície definidos como:

$$S_{0x} = -\frac{\partial z_0}{\partial x}, \quad S_{0y} = -\frac{\partial z_0}{\partial y}, \quad (4.9)$$

enquanto os declives de resistência ao escoamento (perda de energia), nas direções x e y , respectivamente, são dados por:

$$S_{fx} = \frac{\eta^2 u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad S_{fy} = \frac{\eta^2 v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad (4.10)$$

onde $\eta(m/s^{\frac{1}{3}})$ é o coeficiente de rugosidade de Manning, que quantifica o atrito do fluxo com a superfície do fundo.

As equações de águas rasas (4.1) - (4.3) não possuem solução analítica fechada, portanto, uma abordagem numérica é empregada para resolvê-las de forma discreta e linearizada, onde o domínio é dividido em um número finito de células resultando em um sistema linear algébrico que é resolvido por um algoritmo computacional apropriado codificado em FORTRAN 90.

Nesta tese, diferentes condições de contorno e superfícies de fundo foram impostas para verificar a robustez e aplicabilidade do algoritmo implementado para a solução numérica do modelo acoplado. Na etapa inicial, o nível da água é sempre conhecido e todas as velocidades são iguais a zero para todo o domínio. Essas condições estão detalhadas no Capítulo 5.

4.3 Discretização do Modelo Acoplado

A solução numérica do modelo acoplado descrito pelas equações (4.1) - (4.8) é obtida por meio do método dos volumes finitos (MVF). Os fundamentos matemáticos e físicos do MVF foram apresentados no Capítulo 3 e são bem discutidos por Hirsch (2007), Blazek (2001), Versteeg e Malalasekera (2007) e Maliska (2013).

Realizando a integração espacial e temporal sobre um volume elementar nas equações (4.1) - (4.4), como o volume destacado na FIGURA 15, obtêm-se:

$$\int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial(\rho h)}{\partial t} dt dV + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u h) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y}(\rho v h) dV dt = 0, \quad (4.11)$$

$$\int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u h) dt dV + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y}(\rho u v h) dV dt = \int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \rho g h (S_0^x - S_f^x) dV dt, \quad (4.12)$$

$$\int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (\rho v h) dt dV + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u v h) dV dt = \int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \rho g h (S_0^y - S_f^y) dV dt, \quad (4.13)$$

$$\int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial (c_B)}{\partial t} dt dV + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \left[\frac{\partial}{\partial x} (c_B u) + \frac{\partial}{\partial y} (c_B v) \right] dV dt = \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right) \right] dV dt, \quad (4.14)$$

As equações (4.11) - (4.13) constituem a formulação integral das equações de águas rasas e, a equação (4.14) é a formulação integral da equação da advecção-difusão.

Para obtenção da solução numérica do sistema das equações de águas rasas e do transporte (4.11) - (4.14), calcula-se inicialmente a equação (4.11).

$$\int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial (\rho h)}{\partial t} dt dV + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial x} (\rho u h) dV dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_{CV} \frac{\partial}{\partial y} (\rho v h) dV dt = 0.$$

Usando o volume de controle destacado na FIGURA 15, pode-se reescrever a equação (4.11), da seguinte maneira:

$$\int_s^n \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial (\rho h)}{\partial t} dt dx dy + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} (\rho u h) dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial y} (\rho v h) dy dx dt = 0. \quad (4.15)$$

Aplicando o Teorema Fundamental do Cálculo na equação (4.15), obtêm-se:

$$\left[(\rho h)_P - (\rho h)_P^0 \right] \Delta x \Delta y + \int_t^{t+\Delta t} \left[(\rho u h)_e - (\rho u h)_w \right] \Delta y dt + \int_t^{t+\Delta t} \left[(\rho v h)_n - (\rho v h)_s \right] \Delta x dt = 0. \quad (4.16)$$

Aplica-se então na equação (4.16), a integração numérica temporal apresentada na equação (3.17), para obter a seguinte formulação:

$$\begin{aligned} & \left[(\rho h)_P - (\rho h)_P^0 \right] \Delta x \Delta y + \left[\theta ((\rho u h)_e - (\rho u h)_w) + (1 - \theta) ((\rho u h)_e^0 - (\rho u h)_w^0) \right] \Delta y \Delta t \\ & + \left[\theta ((\rho v h)_n - (\rho v h)_s) + (1 - \theta) ((\rho v h)_n^0 - (\rho v h)_s^0) \right] \Delta x \Delta t = 0. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Dividindo ambos os membros da equação (4.17) por $\Delta x \Delta y$ e isolando o termo $(\rho h)_P$, a discretização resultante é:

$$(\rho h)_P = (\rho h)_P^0 - \frac{\Delta t}{\Delta x} \left[\theta((\rho u h)_e - (\rho u h)_w) + (1 - \theta)((\rho u h)_e^0 - (\rho u h)_w^0) \right] + \frac{\Delta t}{\Delta y} \left[\theta((\rho v h)_n - (\rho v h)_s) + (1 - \theta)((\rho v h)_n^0 - (\rho v h)_s^0) \right], \quad (4.18)$$

com, $0 \leq \theta \leq 1$.

A equação (4.18) admite diferentes formulações que dependem das discretizações temporal e espacial adotadas.

Como citado no Capítulo 3, para discretização temporal pode-se adotar o esquema explícito, implícito ou totalmente implícito. E para a discretização espacial pode-se usar as interpolações central (CDS), *upwind* (UDS) ou híbrida (CDS/UDS).

Ainda como foi sugerido no Capítulo 3, os termos multiplicativos nas faces, por discretização temporal explícita, podem ser escritos usando o cálculo de cada fator no passo de tempo anterior discretizados por interpolação central ou *upwind*. Porém, por discretização temporal totalmente implícita combinada com o esquema híbrido espacial, os termos multiplicativos nas faces são escritos em função das variáveis secundárias (ρu) ou (ρv) e da variável ativa (h). Utilizando estas diferentes interpolações na equação (4.18), obtêm-se:

(i) Discretização temporal explícita ($\theta = 0$) com interpolação *CDS*

$$a_{Ph} h_P = a_{Eh} h_E^0 + a_{Wh} h_W^0 + a_{Nh} h_N^0 + a_{Sh} h_S^0 + b_{Ph}, \quad (4.19)$$

com,

$$a_{Ph} = \rho_P, \quad a_{Ph}^0 = \rho_P^0, \quad (4.20)$$

$$b_{Ph} = [a_{Ph}^0 + a_{Eh} + a_{Wh} + a_{Nh} + a_{Sh}] h_P^0, \quad (4.21)$$

$$(\rho u)_i^0 = \frac{(\rho_I^0 + \rho_P^0)}{2} \frac{(u_I^0 + u_P^0)}{2}, \quad i = e \text{ ou } i = w, \quad (4.22)$$

$$(\rho v)_j^0 = \frac{(\rho_J^0 + \rho_P^0)}{2} \frac{(v_J^0 + v_P^0)}{2} \quad j = n \text{ ou } j = s, \quad (4.23)$$

$$a_{Eh} = -\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u)_e^0, \quad a_{Wh} = \frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u)_w^0, \quad (4.24)$$

$$a_{Nh} = -\frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v)_n^0, \quad a_{Sh} = \frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v)_s^0. \quad (4.25)$$

(ii) Discretização temporal explícita ($\theta = 0$) com interpolação CDS/UDS

$$a_{Ph}h_P = a_{Eh}h_E^0 + a_{Wh}h_W^0 + a_{Nh}h_N^0 + a_{Sh}h_S^0 + b_{Ph}, \quad (4.26)$$

com,

$$a_{Ph} = \rho_P, \quad a_{Ph}^0 = \rho_P^0, \quad (4.27)$$

$$b_{Ph} = [a_{Ph}^0 - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 + \alpha_e)(\rho u)_e^0 + \frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 - \alpha_w)(\rho u)_w^0 + \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 + \alpha_n)(\rho v)_n^0 + \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 - \alpha_s)(\rho v)_s^0]h_P^0, \quad (4.28)$$

$$(\rho u)_i^0 = \frac{(\rho_I^0 + \rho_P^0)(u_I^0 + u_P^0)}{2}, \quad i = e \text{ ou } i = w, \quad (4.29)$$

$$(\rho v)_j^0 = \frac{(\rho_J^0 + \rho_P^0)(v_J^0 + v_P^0)}{2} \quad j = n \text{ ou } j = s, \quad (4.30)$$

$$a_{Eh} = -\frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 - \alpha_e)(\rho u)_e^0, \quad a_{Wh} = \frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 + \alpha_w)(\rho u)_w^0, \quad (4.31)$$

$$a_{Nh} = \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 - \alpha_n)(\rho v)_n^0, \quad a_{Sh} = \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 + \alpha_s)(\rho v)_s^0. \quad (4.32)$$

(iii) Discretização temporal totalmente implícita ($\theta = 1$) com interpolação CDS/UDS

$$a_{Ph}h_P + a_{Eh}h_E + a_{Wh}h_W + a_{Nh}h_N + a_{Sh}h_S = b_{Ph}, \quad (4.33)$$

com,

$$a_{Ph} = \rho_P + \frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 + \alpha_e)(\rho u)_e - \frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 - \alpha_w)(\rho u)_w + \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 + \alpha_n)(\rho v)_n - \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 - \alpha_s)(\rho v)_s, \quad (4.34)$$

$$b_{Ph} = (\rho h)_P^0, \quad (4.35)$$

$$a_{Eh} = \frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 - \alpha_e)(\rho u)_e, \quad a_{Wh} = -\frac{\Delta t}{2\Delta x}(1 + \alpha_w)(\rho u)_w, \quad (4.36)$$

$$a_{Nh} = \frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 - \alpha_n)(\rho v)_n, \quad a_{Sh} = -\frac{\Delta t}{2\Delta y}(1 + \alpha_s)(\rho v)_s, \quad (4.37)$$

$(\rho u)_i^0$, $(\rho v)_j^0$ descritas pelas equações (4.29) e (4.30).

Do mesmo modo, o lado esquerdo da equação (4.12) é reescrita usando o volume de controle destacado na FIGURA 15, da seguinte maneira:

$$\int_s^n \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t}(\rho u h) dt dx dy + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x}(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2) dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial y}(\rho v h) dy dx dt \quad (4.38)$$

Usando o Teorema Fundamental do Cálculo e a integração numérica apontada na equação (3.17), a expressão (4.38) é reescrita em função das variáveis calculadas em P e nas faces w, e, s, n , conforme a expressão (4.39):

$$\begin{aligned}
& [(\rho h)_P - (\rho h)_P^0] \Delta x \Delta y + \\
& \theta \left[(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_e - (\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_w \right] \Delta y \Delta t + \\
& (1 - \theta) \left[(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_e^0 - (\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_w^0 \right] \Delta y \Delta t + \\
& \left(\theta [(\rho u v h)_n - (\rho u v h)_s] + (1 - \theta) [(\rho u v h)_n^0 - (\rho u v h)_s^0] \right) \Delta x \Delta t.
\end{aligned} \tag{4.39}$$

A expressão (4.39) admite diferentes formulações que dependem das discretizações temporal e espacial adotadas.

Adotando o esquema temporal totalmente implícito e a discretização espacial híbrida, o termo u^2 da expressão (4.39) é escrito como $(u^0 u)$ onde u^0 é conhecido e u é a variável ativa a ser calculada. Deste modo, a interpolação UDS é usada para avaliar u , enquanto a interpolação CDS para avaliar u^0 nas faces. Por exemplo,

$$(u_e)^2 = u_e^0 \cdot u_e = \left(\frac{u_E^0 + u_P^0}{2} \right) \left[\frac{(1 + \alpha_e)}{2} u_P + \frac{(1 - \alpha_e)}{2} u_E \right], \tag{4.40}$$

com α_e definido na equação (3.14) para o instante de tempo anterior.

O termo quadrático da expressão (4.39) da variável secundária h é calculado usando a interpolação CDS com os valores disponíveis já calculados para h e assim,

$$(h_e)^2 = \left(\frac{h_E + h_P}{2} \right)^2. \tag{4.41}$$

A mesma abordagem é usada nos termos advectivos da expressão (4.39). O produto $(u v h)$ é dividido em $(h v^0) u$ com UDS para variável ativa u e CDS para as variáveis secundárias, h atualizada e v^0 .

Para o lado direito da equação (4.12), que representa a resistência à declividade, substituí-se os valores de S_{0x} e S_{fx} . Dessa forma, o lado direito da equação (4.12) é representado pela seguinte expressão:

$$\int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \rho g h (S_0^x - S_f^x) = \int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \rho g h \left(-\frac{\partial z_0}{\partial x} \right) dV dt - \int_{CV} \int_t^{t+\Delta t} \rho g h \eta^2 \left(\frac{\sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}} \right) u dV dt. \tag{4.42}$$

Na expressão (4.42), o valor de ρh é calculado no centróide P , pois fisicamente a fonte representa a média integral no volume discreto centrado em P , isto é, o fonte não flui, é um termo volumétrico. Portanto, $(\rho h) = (\rho h)_P$ e a magnitude da velocidade é constante.

Deste modo, a expressão (4.42) é reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} & \left\{ \theta (g(\rho h)_P(-1)[(z_0)_e - (z_0)_w]) + (1 - \theta) \left(g(\rho h)_P^0(-1)[(z_0)_e^0 - (z_0)_w^0] \right) \right\} \Delta y \Delta t + \\ & \quad \left\{ \theta(-1) \left(\frac{g\eta^2 \rho_P}{h_P^{1/3}} \sqrt{(u_P^0)^2 + (v_P^0)^2} \right) \left(\frac{u_e + u_w}{2} \right) \right\} \Delta x \Delta y \Delta t + \\ & \quad \left\{ (1 - \theta)(-1) \left(\frac{g\eta^2 \rho_P^0}{(h_P^0)^{1/3}} \sqrt{(u_P^0)^2 + (v_P^0)^2} \right) \left(\frac{u_e^0 + u_w^0}{2} \right) \right\} \Delta x \Delta y \Delta t, \end{aligned} \quad (4.43)$$

Igualando as expressões (4.39) e (4.43) obtemos a formulação da equação (4.12):

$$\begin{aligned} & [(\rho u h)_P - (\rho u h)_P^0] \Delta x \Delta y + \theta \left[(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_e - (\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_w \right] \Delta y \Delta t + \\ & \quad (1 - \theta) \left[(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_e^0 - (\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2)_w^0 \right] \Delta y \Delta t + \\ & \quad \left(\theta [(\rho u v h)_n - (\rho u v h)_s] + (1 - \theta) [(\rho u v h)_n^0 - (\rho u v h)_s^0] \right) \Delta x \Delta t = \\ & \left\{ \theta (g(\rho h)_P(-1)[(z_0)_e - (z_0)_w]) + (1 - \theta) \left(g(\rho h)_P^0(-1)[(z_0)_e^0 - (z_0)_w^0] \right) \right\} \Delta y \Delta t + \\ & \quad \theta(-1) \left(\frac{g\eta^2 \rho_P}{h_P^{1/3}} \sqrt{(u_P^0)^2 + (v_P^0)^2} \right) \left(\frac{u_e + u_w}{2} \right) \Delta x \Delta y \Delta t + \\ & \quad (1 - \theta)(-1) \left(\frac{g\eta^2 \rho_P^0}{(h_P^0)^{1/3}} \sqrt{(u_P^0)^2 + (v_P^0)^2} \right) \left(\frac{u_e^0 + u_w^0}{2} \right) \Delta x \Delta y \Delta t, \end{aligned} \quad (4.44)$$

que admite diferentes formulações dependentes das discretizações adotadas.

(i) Discretização temporal explícita ($\theta = 0$) com interpolação CDS

$$a_{Pu} u_P = a_{Eu} u_E^0 + a_{Wu} u_W^0 + a_{Nu} u_N^0 + a_{Su} u_S^0 + b_{Pu}, \quad (4.45)$$

com,

$$a_{Pu} = \rho_P h_P, \quad a_{Pu}^0 = \rho_P^0 h_P^0, \quad (4.46)$$

$$a_{Eu} = -\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u h)_e^0 + ATR, \quad a_{Wu} = \frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u h)_w^0 + ATR, \quad \text{sendo } ATR = -\frac{\Delta t}{4} \left(\frac{g\eta^2 \rho_P^0}{(h_P^0)^{1/3}} \sqrt{(u_P^0)^2 + (v_P^0)^2} \right), \quad (4.47)$$

$$(\rho u h)_i^0 = \frac{(\rho_I^0 + \rho_P^0)}{2} \frac{(u_I^0 + u_P^0)}{2} \frac{(h_I^0 + h_P^0)}{2}, \quad i = e \text{ ou } i = w, \quad (4.48)$$

$$(\rho v h)_j^0 = \frac{(\rho_J^0 + \rho_P^0)}{2} \frac{(v_J^0 + v_P^0)}{2} \frac{(h_J^0 + h_P^0)}{2} \quad j = n \text{ ou } j = s, \quad (4.49)$$

$$a_{Nu} = -\frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v h)_n^0, \quad a_{Su} = \frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v h)_s^0, \quad (4.50)$$

$$b_{Pu} = [a_{Pu}^0 + a_{Eu} + a_{Wu} + a_{Nu} + a_{Su}] u_P^0 - \frac{\Delta t}{2\Delta x} g [\rho_e^0 (h_e^0)^2 - \rho_w^0 (h_w^0)^2] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} g (\rho h)_P^0 [(z_0)_E^0 - (z_0)_W^0] \quad (4.51)$$

(ii) Discretização temporal explícita ($\theta = 0$) com interpolação CDS/UDS

$$a_{Pu}u_P = a_{Eu}u_E^0 + a_{Wu}u_W^0 + a_{Nu}u_N^0 + a_{Su}u_S^0 + b_{Pu}, \quad (4.52)$$

com,

$$a_{Pu} = \rho_P h_P, \quad a_{Pu}^0 = \rho_P^0 h_P^0, \quad (4.53)$$

$$a_{Eu} = - \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u h)_e^0 + ATR \right] (1 - \alpha_e), \quad a_{Wu} = \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u h)_w^0 + ATR \right] (1 + \alpha_w) \quad (4.54)$$

$$a_{Nu} = - \frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v h)_n^0 (1 - \alpha_n), \quad (4.55)$$

$$a_{Su} = \frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v h)_s^0 (1 + \alpha_s), \quad (4.56)$$

$$\begin{aligned} b_{Pu} = & a_{Pu}^0 u_P^0 - \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u h)_e^0 + ATR \right] (1 + \alpha_e) u_P^0 + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u h)_w^0 + ATR \right] (1 - \alpha_w) u_P^0 \\ & - \left[\frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v h)_n^0 \right] (1 + \alpha_n) u_P^0 + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho v h)_s^0 \right] (1 - \alpha_s) u_P^0 \\ & - \frac{\Delta t}{2\Delta x} g [\rho_e^0 (h_e^0)^2 - \rho_w^0 (h_w^0)^2] - \frac{\Delta t}{2\Delta x} g (\rho h)_P^0 [(z_0)_E^0 - (z_0)_W^0], \end{aligned} \quad (4.57)$$

$(\rho u h)_i^0$, $(\rho v h)_j^0$ são termos descritos pelas equações (4.48) e (4.49).

(iii) Discretização temporal totalmente implícita ($\theta = 1$) com interpolação CDS/UDS

$$a_{Pu}u_P + a_{Eu}u_E + a_{Wu}u_W + a_{Nu}u_N + a_{Su}u_S = b_{Pu}, \quad (4.58)$$

onde,

$$\begin{aligned} a_{Pu} = & \rho_P h_P + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho h)_e u_e^0 + ATR \right] (1 + \alpha_e) - \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} (\rho u)_w u_w^0 + ATR \right] (1 - \alpha_w) \\ & + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho h)_n v_n^0 \right] (1 + \alpha_n) + \left[\frac{\Delta t}{2\Delta y} (\rho h)_s v_s^0 \right] (1 - \alpha_s) \end{aligned} \quad (4.59)$$

$$a_{Eu} = \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} \rho_e u_e^0 h_e + ATR \right] (1 - \alpha_e), \quad (4.60)$$

$$a_{Wu} = - \left[\frac{\Delta t}{2\Delta x} \rho_w u_w^0 h_w + ATR \right] (1 + \alpha_w), \quad (4.61)$$

$$a_{Nu} = \frac{\Delta t}{2\Delta y} \rho_n v_n^0 h_n (1 - \alpha_n), \quad a_{Su} = - \frac{\Delta t}{2\Delta y} \rho_s v_s^0 h_s (1 + \alpha_s), \quad (4.62)$$

$$b_{Pu} = (\rho h u)_P^0 + \frac{\Delta t}{2\Delta x} g (\rho_w h_w^2 - \rho_e h_e^2) - g \rho_P h_P \frac{\Delta t}{\Delta x} [(z_0)_e - (z_0)_w], \quad (4.63)$$

A mesma abordagem é usada para o cálculo de v , integrando a equação (4.13) sob o volume de controle destacado na FIGURA 15 e no intervalo de tempo $(t, t + \Delta t)$. Assim, são obtidos três sistemas lineares, que regem o modelo hidrodinâmico, a serem resolvidos:

$$A_h h = B_h, A_u u = B_u, A_v v = B_v, \quad (4.64)$$

onde A_ϕ representa a matriz de coeficientes da variável ϕ (h, u ou v), enquanto B_ϕ é o vetor que contém as condições de contorno e termos fontes.

Como no modelo hidrodinâmico, realiza-se também a integração na equação (4.4) através do volume elementar bidimensional, representado na FIGURA 15, para produzir uma equação discretizada para o modelo do transporte no ponto nodal P . A formulação integral da equação (4.4) é dada pela equação (4.13) e pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \int_s^n \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (c_B) dt dx dy + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} (c_B u) + \frac{\partial}{\partial y} (c_B v) \right] dx dy dt = \\ \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right) \right] dx dy dt. \end{aligned} \quad (4.65)$$

Os termos da equação (4.65) são nomeados por:

$$I_1 : \int_s^n \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (c_B) dt dx dy \quad (4.66)$$

$$I_2 : \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} (c_B u) + \frac{\partial}{\partial y} (c_B v) \right] dx dy dt, \quad (4.67)$$

$$I_3 : \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right) \right] dx dy dt. \quad (4.68)$$

Para obtenção da solução numérica da equação do transporte (4.4) calcula-se inicialmente o termo I_1 , utilizando a integração numérica dada pela equação (3.17).

$$\int_s^n \int_w^e \int_t^{t+\Delta t} \frac{\partial}{\partial t} (c_B) dt dx dy = [(c_B)_P - (c_B)_P^0] \Delta x \Delta y. \quad (4.69)$$

O cálculo do termo I_2 é dado por:

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \left[\frac{\partial}{\partial x} (c_B u) + \frac{\partial}{\partial y} (c_B v) \right] dx dy dt = \\ \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} (c_B u) dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial y} (c_B v) dy dx dt. \end{aligned} \quad (4.70)$$

Usando novamente o Teorema Fundamental do Cálculo, a equação (4.70) é equivalente a:

$$\int_t^{t+\Delta t} [(c_B u)_e - (c_B u)_w] \Delta y dt + \int_t^{t+\Delta t} [(c_B v)_n - (c_B v)_s] \Delta x dt \quad (4.71)$$

Para a integração numérica temporal utiliza-se a equação (3.17), obtendo uma nova formulação para o termo I_2 :

$$\begin{aligned} & \left\{ \theta (c_B u)_e + (1 - \theta) (c_B u)_e^0 \right\} \Delta y \Delta t - \left\{ \theta (c_B u)_w + (1 - \theta) (c_B u)_w^0 \right\} \Delta y \Delta t + \\ & \left\{ \theta (c_B v)_n + (1 - \theta) (c_B v)_n^0 \right\} \Delta x \Delta t - \left\{ \theta (c_B v)_s + (1 - \theta) (c_B v)_s^0 \right\} \Delta x \Delta t. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Usando o Teorema Fundamental do Cálculo, o termo I_3 pode ser reescrito como:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right) dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right) dx dy dt = \\ & \int_t^{t+\Delta t} \left[\left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right)_e - \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right)_w \right] \Delta y dt + \left[\int_t^{t+\Delta t} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right)_n - \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right)_s \right] \Delta x dt. \end{aligned} \quad (4.73)$$

Na interpolação dos fluxos difusivos da equação (4.73) utiliza-se o esquema CDS (*Central Differencing Scheme*) ou diferença central:

$$\left(\frac{\partial c_B}{\partial x} \right)_e = \frac{(c_B)_E - (c_B)_P}{\Delta x}, \quad (4.74)$$

$$\left(\frac{\partial c_B}{\partial x} \right)_w = \frac{(c_B)_P - (c_B)_W}{\Delta x}, \quad (4.75)$$

$$\left(\frac{\partial c_B}{\partial y} \right)_n = \frac{(c_B)_N - (c_B)_P}{\Delta y}, \quad (4.76)$$

$$\left(\frac{\partial c_B}{\partial y} \right)_s = \frac{(c_B)_P - (c_B)_S}{\Delta y}. \quad (4.77)$$

Substituindo os fluxos difusivos, descritos pelas equações (4.74) - (4.77), na equação (4.73), obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \Gamma_{AB} \left[\left(\frac{(c_B)_E - (c_B)_P}{\Delta x} \right) - \left(\frac{(c_B)_P - (c_B)_W}{\Delta x} \right) \right] \Delta y dt + \\ & \int_t^{t+\Delta t} \Gamma_{AB} \left[\int_t^{t+\Delta t} \left(\frac{(c_B)_N - (c_B)_P}{\Delta y} \right) - \left(\frac{(c_B)_P - (c_B)_S}{\Delta y} \right) \right] \Delta x dt = \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} \int_t^{t+\Delta t} [(c_B)_E - 2(c_B)_P + (c_B)_W] dt + \Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} \int_t^{t+\Delta t} [(c_B)_N - 2(c_B)_P + (c_B)_S] dt. \end{aligned} \quad (4.78)$$

Usando a integração numérica temporal na equação (4.78), obtêm-se:

$$\begin{aligned} & \Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} \left\{ \theta [(c_B)_E - 2(c_B)_P + (c_B)_W] + (1 - \theta) [(c_B)_E^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_W^0] \right\} \Delta t + \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} \left\{ \theta [(c_B)_N - 2(c_B)_P + (c_B)_S] + (1 - \theta) [(c_B)_N^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_S^0] \right\} \Delta t, \end{aligned} \quad (4.79)$$

para $0 \leq \theta \leq 1$.

Finalmente, substituindo os cálculos obtidos para os termos I_1, I_2 e I_3 na formulação integral do transporte dada pela equação (4.65), resulta:

$$\begin{aligned} & [(c_B)_P - (c_B)_P^0] \Delta x \Delta y + \\ & \left\{ \theta (c_B u)_e + (1 - \theta) (c_B u)_e^0 \right\} \Delta y \Delta t - \left\{ \theta (c_B u)_w + (1 - \theta) (c_B u)_w^0 \right\} \Delta y \Delta t + \\ & \left\{ \theta (c_B v)_n + (1 - \theta) (c_B v)_n^0 \right\} \Delta y \Delta t - \left\{ \theta (c_B v)_s + (1 - \theta) (c_B v)_s^0 \right\} \Delta x \Delta t = \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} \left\{ \theta [(c_B)_E - 2(c_B)_P + (c_B)_W] + (1 - \theta) [(c_B)_E^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_W^0] \right\} \Delta t + \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} \left\{ \theta [(c_B)_N - 2(c_B)_P + (c_B)_S] + (1 - \theta) [(c_B)_N^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_S^0] \right\} \Delta t. \end{aligned} \quad (4.80)$$

Dividindo ambos os lados da equação (4.80) por Δt , a formulação numérica do modelo de transporte bidimensional transiente, governado pela equação (4.4), é dada por:

$$\begin{aligned} & [(c_B)_P - (c_B)_P^0] \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + \\ & \left\{ \theta [u_e (c_B)_e] + (1 - \theta) [u_e^0 (c_B)_e^0] \right\} \Delta y - \left\{ \theta [u_w (c_B)_w] + (1 - \theta) [u_w^0 (c_B)_w^0] \right\} \Delta y + \\ & \left\{ \theta [v_n (c_B)_n] + (1 - \theta) [v_n^0 (c_B)_n^0] \right\} \Delta y - \left\{ \theta [v_s (c_B)_s] + (1 - \theta) [v_s^0 (c_B)_s^0] \right\} \Delta x = \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} \left\{ \theta [(c_B)_E - 2(c_B)_P + (c_B)_W] + (1 - \theta) [(c_B)_E^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_W^0] \right\} + \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} \left\{ \theta [(c_B)_N - 2(c_B)_P + (c_B)_S] + (1 - \theta) [(c_B)_N^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_S^0] \right\}. \end{aligned} \quad (4.81)$$

A equação (4.81) admite diferentes formulações que dependem das discretizações temporal e espacial adotadas.

(i) Discretização temporal explícita ($\theta = 0$) com interpolação *CDS*

$$\begin{aligned} & [(c_B)_P - (c_B)_P^0] \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + \left[u_e^0 \left(\frac{(c_B)_E^0 + (c_B)_P^0}{2} \right) - u_w^0 \left(\frac{(c_B)_W^0 + (c_B)_P^0}{2} \right) \right] \Delta y + \\ & \left[v_n^0 \left(\frac{(c_B)_N^0 + (c_B)_P^0}{2} \right) - v_s^0 \left(\frac{(c_B)_S^0 + (c_B)_P^0}{2} \right) \right] \Delta x = \\ & \Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} [(c_B)_E^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_W^0] + \Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} [(c_B)_N^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_S^0]. \end{aligned} \quad (4.82)$$

Isolando os termos de forma conveniente, a equação (4.82) pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (c_B)_P = & \left\{ \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} - \left[\frac{\Delta y}{2} u_e^0 - \frac{\Delta y}{2} u_w^0 + \frac{\Delta x}{2} v_n^0 - \frac{\Delta x}{2} v_s^0 + 2\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{x} + 2\Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{y} \right] \right\} (c_B)_P^0 + \\ & \left(\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} - \frac{u_e^0 \Delta y}{2} \right) (c_B)_E^0 + \left(\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} + \frac{u_w^0 \Delta y}{2} \right) (c_B)_W^0 + \\ & \left(\Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} - \frac{v_n^0 \Delta x}{2} \right) (c_B)_N^0 + \left(\Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} + \frac{v_s^0 \Delta x}{2} \right) (c_B)_S^0. \end{aligned} \quad (4.83)$$

Fazendo,

$$\left\{ \begin{array}{l} F_e = u_e^0 \Delta y, \quad F_w = u_w^0 \Delta y, \quad F_s = v_s^0 \Delta x, \quad F_n = v_n^0 \Delta x, \\ \Delta F = F_e - F_w + F_n - F_s, \\ D_e = \frac{\Gamma_{AB}}{\Delta x} \Delta y, \quad D_w = \frac{\Gamma_{AB}}{\Delta x} \Delta y, \quad D_n = \frac{\Gamma_{AB}}{\Delta y} \Delta x, \quad D_s = \frac{\Gamma_{AB}}{\Delta y} \Delta x, \end{array} \right. \quad (4.84)$$

resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (c_B)_P = & \left\{ \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} - \left[\left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) + \left(D_w - \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_n + \frac{F_n}{2} \right) + \left(D_s - \frac{F_s}{2} \right) \right] \right\} (c_B)_P^0 + \\ & \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) (c_B)_E^0 + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) (c_B)_W^0 + \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right) (c_B)_N^0 + \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right) (c_B)_S^0. \end{aligned} \quad (4.85)$$

O valor ΔF pode ser utilizado na reformulação da equação (4.85), de modo que estabeleça uma relação entre os coeficientes. Observe que,

$$\begin{aligned} \left(D_e + \frac{F_e}{2} \right) + \left(D_w - \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_n + \frac{F_n}{2} \right) + \left(D_s - \frac{F_s}{2} \right) = \\ \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right) + \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right) + \Delta F. \end{aligned} \quad (4.86)$$

Aplicando a equação (4.86) na equação (4.85), resulta:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (c_B)_P = & \left\{ \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} - \left[\left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) + \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right) + \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right) + \Delta F \right] \right\} (c_B)_P^0 + \\ & \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right) (c_B)_E^0 + \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right) (c_B)_W^0 + \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right) (c_B)_N^0 + \left(D_s + \frac{F_s}{2} \right) (c_B)_S^0. \end{aligned} \quad (4.87)$$

A equação (4.87) pode ser então reescrita em função desta relação entre os coeficientes:

$$\begin{aligned}
a_P(c_B)_P &= \left[a_P^0 - (a_E + a_W + a_N + a_S + \Delta F) \right] (c_B)_P^0 \\
&\quad + a_E(c_B)_E^0 + a_W(c_B)_W^0 + a_N(c_B)_N^0 + a_S(c_B)_S^0,
\end{aligned} \tag{4.88}$$

com,

$$a_P = a_P^0 = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}, \tag{4.89}$$

$$a_E = \left(D_e - \frac{F_e}{2} \right), \quad a_W = \left(D_w + \frac{F_w}{2} \right), \tag{4.90}$$

$$a_N = \left(D_n - \frac{F_n}{2} \right), \quad a_S = \left(D_s - \frac{F_s}{2} \right), \tag{4.91}$$

(ii) Formulação temporal explícita ($\theta = 0$) com interpolação híbrida (CDS/UDS)

Para esta formulação, faz-se $\theta = 0$ na equação (4.81) e realiza-se a interpolação UDS sobre a variável ativa (ρx_B) nas faces, obtendo:

$$\begin{aligned}
&\left[(c_B)_P - (c_B)_P^0 \right] \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + \\
&u_e^0 \left[\frac{(1 + \alpha_e)}{2} (c_B)_P^0 + \frac{(1 - \alpha_e)}{2} (c_B)_E^0 \right] \Delta y - u_w^0 \left[\frac{(1 - \alpha_w)}{2} (c_B)_P^0 + \frac{(1 + \alpha_w)}{2} (c_B)_W^0 \right] \Delta y + \\
&v_n^0 \left[\frac{(1 + \alpha_n)}{2} (c_B)_P^0 + \frac{(1 - \alpha_n)}{2} (c_B)_N^0 \right] \Delta x - v_s^0 \left[\frac{(1 - \alpha_s)}{2} (c_B)_P^0 + \frac{(1 + \alpha_s)}{2} (c_B)_S^0 \right] \Delta x = \\
&\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} \left[(c_B)_E^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_W^0 \right] + \Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} \left[(c_B)_N^0 - 2(c_B)_P^0 + (c_B)_S^0 \right].
\end{aligned} \tag{4.92}$$

Novamente, isolando os termos de forma conveniente, a equação pode ser reescrita da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
&\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (c_B)_P = \\
&\left\{ \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} - \left[\frac{\Delta y}{2} u_e^0 (1 + \alpha_e) - \frac{\Delta y}{2} u_w^0 (1 - \alpha_w) + \frac{\Delta x}{2} v_n^0 (1 + \alpha_n) - \frac{\Delta x}{2} v_s^0 (1 + \alpha_s) \right] \right\} (c_B)_P^0 + \\
&\quad \left[\left(-2\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} \right) + \left(-2\Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} \right) \right] (c_B)_P^0 + \\
&\quad \left[\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} - \frac{\Delta y}{2} u_e^0 (1 - \alpha_e) \right] (c_B)_E^0 + \left[\Gamma_{AB} \frac{\Delta y}{\Delta x} + \frac{\Delta y}{2} u_w^0 (1 + \alpha_w) \right] (c_B)_W^0 + \\
&\quad \left[\Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} - \frac{\Delta x}{2} v_n^0 (1 - \alpha_n) \right] (c_B)_N^0 + \left[\Gamma_{AB} \frac{\Delta x}{\Delta y} + \frac{\Delta x}{2} v_s^0 (1 + \alpha_s) \right] (c_B)_S^0.
\end{aligned} \tag{4.93}$$

Usando, os coeficientes definidos na equação (4.84), resulta:

$$\begin{aligned}
a_P(c_B)_P &= \left[a_P^0 - (a_E + a_W + a_N + a_S + \Delta F) \right] (c_B)_P^0 + \\
&\quad a_E(c_B)_E^0 + a_W(c_B)_W^0 + a_N(c_B)_N^0 + a_S(c_B)_S^0,
\end{aligned} \tag{4.94}$$

com,

$$a_P = a_P^0 = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}, \quad (4.95)$$

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} + \frac{F_e}{2} \alpha_e, \quad a_W = D_w + \frac{F_w}{2} + \frac{F_w}{2} \alpha_w, \quad (4.96)$$

$$a_N = D_n - \frac{F_n}{2} + \frac{F_n}{2} \alpha_n, \quad a_S = D_s - \frac{F_s}{2} + \frac{F_s}{2} \alpha_s, \quad (4.97)$$

(iii) Formulação temporal totalmente implícita ($\theta = 1$) com interpolação híbrida

Fazendo $\theta = 1$ na equação (4.81), obtêm-se de forma análoga a seguinte formulação:

$$\begin{aligned} & [a_P + (a_E + a_W + a_N + a_S + \Delta F)](c_B)_P = \\ & a_P^0 (c_B)_P^0 + a_E (c_B)_E + a_W (c_B)_W + a_N (c_B)_N + a_S (c_B)_S, \end{aligned} \quad (4.98)$$

com,

$$a_P = a_P^0 = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t}, \quad (4.99)$$

$$a_E = D_e - \frac{F_e}{2} + \frac{F_e}{2} \alpha_e, \quad a_W = D_w + \frac{F_w}{2} + \frac{F_w}{2} \alpha_w, \quad (4.100)$$

$$a_N = D_n - \frac{F_n}{2} + \frac{F_n}{2} \alpha_n, \quad a_S = D_s - \frac{F_s}{2} + \frac{F_s}{2} \alpha_s, \quad (4.101)$$

$$F_e = u_e \Delta y, \quad F_w = u_w \Delta y, \quad F_s = v_s \Delta x, \quad F_n = v_n \Delta x. \quad (4.102)$$

Finalmente, escolhendo a discretização temporal e espacial, obtêm-se quatro sistemas lineares, que regem o modelo acoplado (hidrodinâmico e de transporte), a serem resolvidos:

$$A_h h = B_h, \quad A_u u = B_u, \quad A_v v = B_v, \quad A_{c_B} c_B = B_{c_B}, \quad (4.103)$$

onde A_ϕ representa a matriz de coeficientes da variável ϕ (h, u, v ou c_B), enquanto B_ϕ é o vetor que contém as condições de contorno e termos fontes.

Para determinar a variável ρ , substitui-se na equação (4.5) os valores fixos ρ_A e ρ_B e o valor obtido para c_B , em cada ponto do domínio discreto e em cada instante de tempo. Usando o valor de ρ , determinam-se os valores x_B, x_A e c_A , usando as equações (4.6), (4.7) e (4.8).

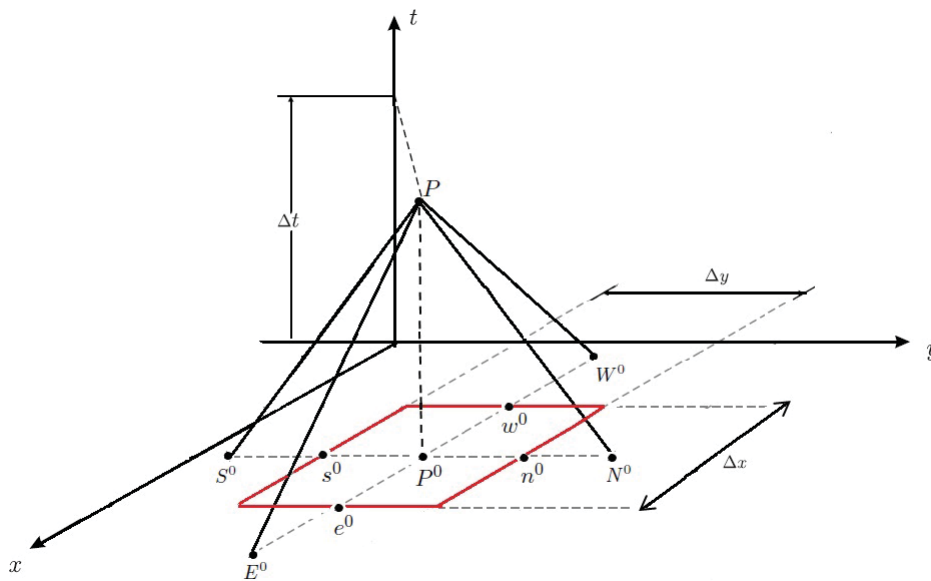
Dos sistemas lineares obtidos, observa-se que adotando a formulação temporal explícita, deve-se garantir também a estabilidade numérica da solução determinando $\Delta t, \Delta x, \Delta y$ que satisfaçam a Condição de *Courant* bidimensional, apresentada em Leveque (2002):

$$\left\| \frac{u \Delta t}{\Delta x} \right\| + \left\| \frac{v \Delta t}{\Delta y} \right\| \leq 1. \quad (4.104)$$

Como o modelo hidrodinâmico governado pelas equações (4.1) - (4.3) é transiente, as componentes da velocidade u e v variam em função do tempo. Portanto, o teste de estabilidade deve ser executado em cada instante de tempo.

Observa-se ainda que na formulação temporal explícita, os coeficientes das equações linearizadas indicam uma dependência das variáveis, destacada na FIGURA 18. Para determinação de h_P, u_P, v_P e c_B é necessário o cálculo prévio destas variáveis no ponto P e nos centróides vizinhos (N, S, E, W), no passo de tempo anterior.

FIGURA 18 – Esquema de dependência das variáveis na formulação numérica



Fonte: A autora (2019).

Esta dependência das variáveis também indica que, o sistema de equações que regem o modelo acoplado só estará completo, para a implementação numérica, quando as condições iniciais e de contorno forem incorporadas ao modelo.

4.4 Condições Iniciais e de Contorno

A natureza do problema exige e para a implementação numérica deve-se indicar, como condições iniciais, o nível do fluido, as componentes da velocidade do escoamento, a massa específica da mistura e a concentração mássica de cada componente da mistura no

instante inicial da simulação, em todos os pontos do domínio.

$$C_I(h,u,v,\rho,c_A,c_B) : \begin{cases} h(x,y,0) = h_0, \\ u(x,y,0) = u_0, \\ v(x,y,0) = v_0, \\ \rho(x,y,0) = \rho_0, \\ c_A(x,y,0) = (c_A)_0, \\ c_B(x,y,0) = (c_B)_0, \end{cases} \quad (4.105)$$

Com relação às condições de contorno, conforme apresentado no Capítulo 3, consideram-se volumes fictícios em torno das fronteiras e que não há variação no nível h da mistura e na concentração mássica do soluto c_B . Deste modo, adota-se a Condição de *Neumann* nula para h e c_B nos contornos do domínio, ou seja:

$$\frac{\partial\phi(e)}{\partial x} = \frac{\partial\phi(w)}{\partial x} = 0, \quad (4.106)$$

$$\frac{\partial\phi(n)}{\partial y} = \frac{\partial\phi(s)}{\partial y} = 0, \quad (4.107)$$

onde, $\phi = h$ ou $\phi = c_B$ e; w, e, s, n são pontos dos contornos esquerdo, direito, inferior e superior, respectivamente, como descrito na FIGURA 19.

Todas as derivadas nas faces fronteiras ($w; e; n; e s$) podem ser interpoladas como funções dos centróides vizinhos destacados na FIGURA (19): um externo fictício ($W; E; S$ ou N) e um interno P pertencente ao domínio. Consequentemente,

$$\frac{\partial\phi(e)}{\partial x} = \frac{\phi_E - \phi_{P_e}}{\Delta x} = \frac{\phi_{P_w} - \phi_W}{\Delta x} = \frac{\partial\phi(w)}{\partial x} = 0 \quad (4.108)$$

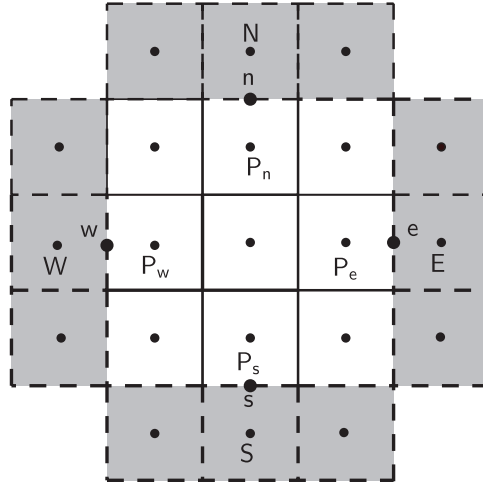
$$\frac{\partial\phi(n)}{\partial y} = \frac{\phi_N - \phi_{P_n}}{\Delta y} = \frac{\phi_{P_s} - \phi_S}{\Delta y} = \frac{\partial\phi(s)}{\partial y} = 0, \quad (4.109)$$

o que permite calcular os valores nos contornos em função das variáveis internas:

$$\phi_E = \phi_{P_e}, \phi_W = \phi_{P_w}, \phi_N = \phi_{P_n}, \phi_S = \phi_{P_s}, \text{ para } \phi = h \text{ ou } \phi = c_B. \quad (4.110)$$

Para as variáveis de fluxo (u e v), as fronteiras são consideradas impermeáveis e todas as componentes de velocidade normal aos contornos são nulas. Esta condição de

FIGURA 19 – Esquema para condição de contorno.



FONTE: A autora (2019).

Dirichlet é imposta considerando o esquema de diferenciação central, ou seja,

$$u_i = \frac{u_{P_i} + u_I}{2} = 0, \quad i = e, w, \quad (4.111)$$

$$v_j = \frac{v_{P_j} + v_J}{2} = 0, \quad j = n, s, \quad (4.112)$$

e portanto,

$$u_I = -u(P_i), \quad i = e, w, \quad v_J = -v(P_j), \quad j = n, s. \quad (4.113)$$

Por outro lado, as componentes da velocidade tangencial são calculadas considerando derivada nula para cada uma, ou seja, uma Condição de *Neumann* nula para cada componente tangencial. Desse modo, usando interpolação em função dos centróides vizinhos, obtêm-se:

$$u_J = u(P_j), \quad j = n, s, \quad v_I = v(P_i), \quad i = e, w. \quad (4.114)$$

Incorporando estas condições iniciais e de contorno ao sistema de equações linearizadas do modelo acoplado, pode-se implementar um algoritmo para determinar a solução numérica do modelo.

4.5 O algoritmo

Para o estudo de casos apresentados no Capítulo 5, adota-se a formulação totalmente implícita, ($\theta = 1$), ou seja, todas as derivadas são avaliadas no nível de tempo $t + \Delta t$. Com uma implementação mais complexa, a formulação totalmente implícita é limitada apenas pela precisão e não sofre instabilidades numéricas devido à mudança de coeficientes

de sinal pela variação do intervalo de tempo. E assim, torna-se possível realizar simulações por longos períodos de tempo, para análise da interpretação física almejada do modelo, sem que haja instabilidade numérica, pois é um método incondicionalmente estável no tempo. Obviamente, esta estabilidade pode ser alterada devido às não linearidades do acoplamento e ao comportamento dos termos de fontes, como a perda de energia devido à declividade, o que pode gerar oscilações numéricas. Portanto, faz-se necessário um tratamento cuidadoso na obtenção de uma solução numérica estável e também precisa.

O sistema de equações (4.11) - (4.14) apresenta produtos de variáveis envolvendo u , v , h , e c_B . Esta característica é a natureza não-linear do modelo acoplado e uma das razões pelas quais não existe uma solução analítica, dependendo das condições adotadas, e assim, o sistema deve ser linearizado para permitir que o método numérico gere um sistema linear que possa ser resolvido por algum método linear. Para os estudos de casos, utilizando a formulação temporal totalmente implícita, o sistema linear é resolvido por um método iterativo de Gauss-Seidel.

Lembrando que, na interpolação híbrida, a linearização é feita considerando no produto de variáveis apenas uma delas como a variável ativa, e as outras são constantes ou variáveis secundárias calculadas a partir da condição inicial da iteração de *looping* do tempo anterior. Naturalmente, outras equações estão disponíveis para resolver as variáveis secundárias como variável ativa (ou variável principal), e estas são empregadas para calcular cada coeficiente, assim, quando uma nova solução é alcançada, um novo cálculo é iniciado e novos coeficientes são definidos, e uma nova solução é executada até a convergência.

No estudo de casos tratados nesta tese, o domínio físico retangular $D = [x_a, x_b] \times [y_a, y_b]$ é dividido em N_x e N_y volumes de controle com comprimentos dados por Δx , Δy nas direções x e y , respectivamente. Da mesma forma, o espaço temporal $[t_0, t_f]$ é dividido em N_t passos de tempo uniformes iguais a Δt .

A malha cartesiana ordenada e estruturada é varrida de acordo com o par (i, j) da esquerda para a direita aumentando o comprimento $(i - 1)\Delta x$ na direção x , e de baixo para cima aumentando o comprimento $(j - 1)\Delta y$ na direção y , começando no centróide $(1, 1)$ que representa o ponto $(x_a + \Delta x/2, y_a + \Delta y/2)$. Desta forma, faz-se a seguinte correspondência:

$$(i, j) \longmapsto ((x_a + \Delta x/2) + (i - 1)\Delta x, (y_a + \Delta y/2) + (j - 1)\Delta y). \quad (4.115)$$

Após a discretização do domínio, são lidas a superfície de fundo, representada por $z_0(x, y)$, e as condições iniciais $h_0, u_0, v_0, \rho_0, (c_A)_0$ e $(c_B)_0$. Para os modelos discretizados por esquemas totalmente implícitos, fez-se necessário utilizar um método iterativo para resolução do sistema linear resultante da discretização das equações via MVF.

O Método iterativo de Gauss-Seidel foi utilizado nesta tese na implementação da

solução numérica obtida, iterando até atingir o número máximo de iterações $itmax$ ou o resíduo global R igual ou inferior ao número máximo residual tol , sendo:

$$R = \frac{1}{N_x N_y} \left[\frac{r_h + r_u + r_v + r_{cB}}{4} \right], \quad (4.116)$$

onde $N_x N_y$ é o número total de volume de controles, e os resíduos r_h, r_u, r_v, r_{cB} são a soma dos resíduos individuais de cada volume de controle, calculados incrementalmente de acordo com a equação (4.117):

$$r_\phi = r_\phi + d_\phi, \quad (4.117)$$

onde d_ϕ representa a diferença absoluta entre os dois lados da equação linearizada para a variável ϕ .

O programa foi implementado em Linguagem Fortran 90, compilado na versão Fortran Power Station 4.0, no ambiente de programação Microsoft Developer Studio, licenciada pela Microsoft Corporation.

No próximo capítulo são apresentados estudos de casos para verificação e validação do modelo numérico obtido.

Uma síntese do algoritmo implementado é apresentado a seguir. O código completo e a listagens com os resíduos podem ser consultados no APÊNDICE.

Algoritmo 1: MÉTODO IMPLÍCITO E HÍBRIDO PARA O MODELO ACOPLADO

Entrada: $N_x, \Delta x, N_y, \Delta y, Nt, \Delta t, h^0, u^0, v^0, \rho^0, (c_A)^0, (c_B)^0, (x_A)^0, (x_B)^0, z_0, \eta, \Gamma_{AB}, itmax$

1 **início**

2 **para** $k = 1, \dots, Nt$ **faça**

3 **para** $it = 1, \dots, itmax$ **faça**

4 Cálculo das variáveis no contorno

5 Zerar os resíduos: $rh = rv = ru = r(c_B) = 0$

6 **para** $i = 2, \dots, N_x - 1, j = 2, \dots, N_y - 1$ **faça**

7 call **Rotina Calculo Interno**

8 **fim**

9 Teste da convergência do Método de Gauss Seidel:

10 **if** $[(rh + ru + rv + r(c_B))/4]/[(nx - 2)(ny - 2)] < tol$ **exit**

11 **fim**

12 Atualizações das variáveis: $\phi = \phi^0$

13 Critério de Parada:

14 **if** $V = \sum_{i,j} (h(i,j) - z_0(i,j))\Delta x\Delta y < 10^{-2}$ **exit**

15 Pós-Processamento

16 **fim**

17 **fim**

Saída: $h, u, v, \rho, c_A, c_B, x_A, x_B$

Algoritmo 2: ROTINA CÁLCULO INTERNO

1 Cálculo dos coeficientes de c_B

2 Cálculo do resíduo para c_B

3 Cálculo de c_B

4 Cálculo de ρ, x_B, x_A, c_A

5 Cálculo dos coeficientes de h

6 **if** $h(i,j) > z(i,j)$ **then**

7 Cálculo de rh

8 Cálculo de h

9 Atualização dos valores de h nas faces

10 Cálculo dos coeficientes de u

11 Cálculo de ru

12 Cálculo de u

13 Atualização dos valores de u nas faces

14 Cálculo dos coeficientes de v

15 Cálculo de rv

16 Cálculo de v

17 **else** $h(i,j) = z_0(i,j)$

18 $r_h = 0, u = v = 0$

5 RESULTADOS

Os estudos de casos apresentados neste capítulo foram desenvolvidos com o propósito de validar e verificar a solução numérica desenvolvida para o modelo hidrodinâmico, de transporte e do modelo acoplado.

Todas as simulações apresentadas neste capítulo foram feitas em um PC com processador de 64 bits, Intel Core i5 3317U, 1,7GHz com 4 GB de memória RAM, executando no sistema operacional Windows 8.1 Pro.

5.1 Simulação Numérica de modelos hidrodinâmicos simplificados

Nos grandes centros urbanos, densamente povoados e com solos impermeabilizados por camadas de concreto, é comum a utilização de reservatórios subterrâneos de captação da água precipitada. Estes reservatórios são estruturas que armazenam temporariamente o volume de águas pluviais garantindo o tempo de recuperação dos solos e redução das enchentes urbanas, devido ao controle das vazões lançadas na rede de drenagem.

Segundo Cruz e Tucci (2007) e Mota (2006), a urbanização das cidades, e o conseqüente aumento nas construções de edificações e execução de pavimentação, torna o solo impermeável, trazendo grandes implicações sobre o escoamento das águas, como a ocorrência ou agravamento das enchentes urbanas. Uma possível solução para o problema das enchentes é o controle do escoamento na fonte, através de reservatórios de detenção. Drumond, Coelho e Moura (2014) e Cruz, Tucci e Silveira (1998) definem tais reservatórios (ou piscinões), como estruturas de acumulação temporária da água da chuva que auxiliam na redução das enchentes urbanas. As águas pluviais podem ser conduzidas e armazenadas nos reservatórios e após a secagem do solo, estas águas são lançadas, por estruturas de descarga dos reservatórios, na rede de drenagem.

Desta forma, é evidente a importância dos reservatórios na detenção da água pluvial e no controle da vazão de despejo. No entanto, Oliveira *et al.* (2016) apontam a dificuldade que há na medição de vazões em cursos d'água, principalmente em situações com rápida alteração do nível, altas velocidades e difícil acesso. Sendo assim, na maioria dos casos, recorre-se a modelagem hidrodinâmica apoiada pela simulação computacional para obtenção do conhecimento prévio do comportamento hidrodinâmico dos reservatórios e das variáveis hidrodinâmicas envolvidas, utilizando sistemas de equações diferenciais parciais que descrevem matematicamente o escoamento de fluidos segundo as leis fundamentais da física.

5.1.1 Equações Governantes

O sistema de equações que governa o escoamento bidimensional transiente, desprezando a resistência ao escoamento e os efeitos gravitacionais, é dado por:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uh) + \frac{\partial}{\partial y}(vh) = 0, \quad (5.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(uh) + \frac{\partial}{\partial x}(u^2h + \frac{1}{2}gh^2) + \frac{\partial}{\partial y}(uvh) = 0, \quad (5.2)$$

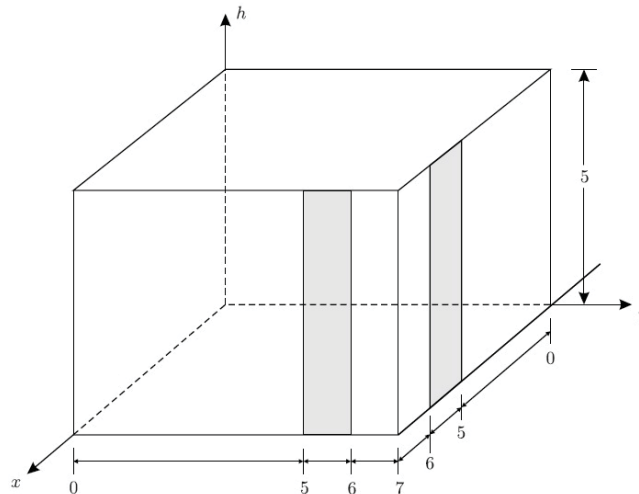
$$\frac{\partial}{\partial t}(vh) + \frac{\partial}{\partial x}(uvh) + \frac{\partial}{\partial y}(v^2h + \frac{1}{2}gh^2) = 0, \quad (5.3)$$

onde $h(m)$ é a profundidade do canal, $u(m/s)$ e $v(m/s)$ são as componentes da velocidade, $g(m/s^2)$ é a aceleração da gravidade e $t(s)$ é o tempo.

5.1.2 Análise de escoamentos em reservatórios de contenção fluvial sem resistência ao escoamento e efeito gravitacional

Considera-se neste caso, o escoamento causado pela abertura de dois dispositivos de descarga num reservatório de base retangular $7 m \times 7 m$ e altura de $5 m$, com paredes impermeáveis e rígida, sem declividade no fundo e sem resistência ao escoamento que, inicialmente está cheio de água em repouso, com densidade uniforme, não havendo ingresso lateral de água, conforme FIGURA 20.

FIGURA 20 – Reservatório de base retangular com dispositivos de descarga lateral.



FONTE: A autora (2019).

(a) Condições Iniciais:

Inicialmente, o fluido está em repouso, ou seja, $u = v = 0$ para todo o domínio, e o nível inicial de água no reservatório é $h_0 = 5 m$.

(b) Condições de Contorno:

A condição de *Neumann* nula é utilizada para o nível de água nas paredes do reservatório. Assim,

$$\frac{\partial h(w)}{\partial x} = \frac{\partial h(e)}{\partial x} = \frac{\partial h(s)}{\partial y} = \frac{\partial h(n)}{\partial y} = 0 \quad (5.4)$$

onde, w e e são os pontos de contorno esquerdo e direito, respectivamente; e s e n são os pontos de contorno superior e pontos de contorno inferiores, respectivamente.

Para as variáveis de fluxo (u, v) , as paredes são consideradas impermeáveis e todas as componentes de velocidade normal aos contornos são nulas. Esta condição de *Dirichlet* é imposta considerando o esquema de diferenciação central, ou seja,

$$u_w = u_e = v_s = v_n = 0, \quad (5.5)$$

onde w e e são os pontos de contorno esquerdo e direito, respectivamente; e s e n são os pontos de contorno inferior e superior, respectivamente. Por outro lado, as componentes da velocidade tangencial são calculadas considerando derivada nula para cada uma, ou seja, uma Condição de *Neumann* nula para cada componente tangencial. Assim,

$$\frac{\partial u(s)}{\partial y} = \frac{\partial u(n)}{\partial y} = \frac{\partial v(w)}{\partial x} = \frac{\partial v(e)}{\partial x} = 0 \quad (5.6)$$

Este estudo de caso é simulado em Lobeiro (2012), via Método das Características (MC) com implementação no software *Maple*, com tempo de simulação máxima de 0,325 s, considerando os dispositivos de saída descritos na FIGURA 20 e adotando velocidades constantes.

Neste estudo de caso, busca-se modelar de forma mais realística as velocidades. Sabendo que quanto menor o nível h , menor é a velocidade do escoamento, adota-se velocidades nas saídas relacionadas ao nível da água h , descritas da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} u(7, y, t) &= C_d h^{\frac{1}{2}}(7, y, t), \quad v(7, y, t) = 0, \quad t \neq 0, \quad 5 \leq y \leq 6, \\ u(x, 7, t) &= 0, \quad v(x, 7, t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(x, 7, t), \quad t \neq 0, \quad 5 \leq x \leq 6, \end{aligned} \quad (5.7)$$

onde, $C_d = 0,1(2g)^{\frac{1}{2}}$ é um coeficiente de descarga arbitrário, $g(m/s^2)$ é a aceleração da gravidade, $t(s)$ é o tempo e $h(m)$ é o nível da água no reservatório. Neste contexto, adotou-se como critério de parada no código a obtenção de um valor mínimo para o nível da água, $h = 10^{-5} m$.

(c) Resultados e Comparações:

Para obtenção da solução numérica do modelo simplificado representado pelas equações (5.1) - (5.3) faz-se uso do método dos volumes finitos (MVF) e dos esquemas

de discretização apresentados no Capítulo 4, considerando a massa específica ρ constante ($\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$) e, a superfície de fundo sem declividade ($z_0 = 0$) e sem atrito ($\eta = 0$).

Os parâmetros físicos e numéricos adotados neste estudo de caso são mostrados na TABELA 1.

TABELA 1 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO.

Δx	Δy	Δt	cota da superfície de fundo	coeficiente de Manning	g
0,05 m	0,05 m	0,01 s	$z_0 = 0$	$\eta = 0,0 \text{ m/s}^{1/3}$	9,81 m/s^2

FONTE: A autora (2019).

O algoritmo foi elaborado com backup de dados, possibilitando a análise do fluxo a qualquer momento. O código de pós-processamento é utilizado para análise de eficiência e verificação do modelo. Para visualização gráfica dos dados obtidos pelo código implementado em linguagem Fortran, foi utilizado o software livre Gnuplot.

Ao adotar as mesmas condições de contorno, comparações podem ser feitas quanto à estabilidade das soluções numéricas.

Para a solução numérica obtida utilizando um esquema de discretização temporal explícito, adota-se $\theta = 0$ com interpolação CDS ou UDS, na integração de equações (5.1) - (5.3), com espaçamentos espaciais $\Delta x, \Delta y$ e temporal Δt satisfazendo a condição de estabilidade prescrita na equação (4.104).

Para o esquema de discretização temporal totalmente implícito, adota-se $\theta = 1$ e a interpolação espacial híbrida CDS/UDS.

As comparações destas soluções estão listadas na TABELA 2, onde t_{max} é o tempo máximo de simulação do código com a solução numérica adotada e $V(t)$ é o volume de água restante no reservatório em $t = t_{max}$.

TABELA 2 – COMPARAÇÃO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS.

θ	Interpolação	Δx	Δy	Δt	t_{max}	$V(t)$
$\theta = 0$	CDS	0,05 m	0,05 m	10^{-4} s	0,99992 s	236,3074 m^3
$\theta = 0$	UDS	0,05 m	0,05 m	10^{-4} s	29,115 s	98,03 m^3
$\theta = 1$	CDS/UDS	0,10 m	0,10 m	10^{-3} s	> 600 s	< 1,45 m^3

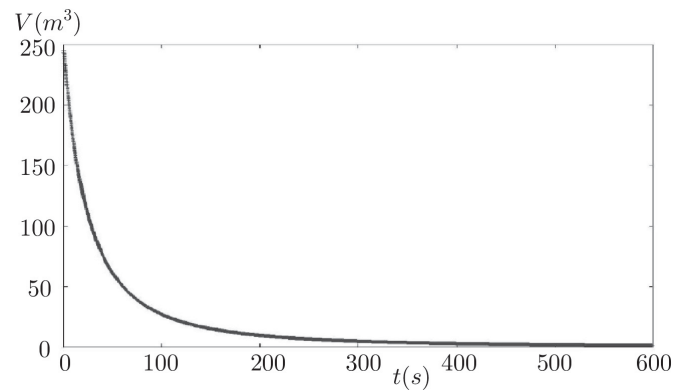
FONTE: A autora (2019).

Os dados ilustrados na TABELA 2 mostram a eficácia e a superioridade do esquema de interpolação híbrida implícita (CDS/UDS) na simulação numérica de modelos regidos por equações de águas rasas simplificadas. Observa-se que, ao adotar o esquema de discretização temporal totalmente implícito, mesmo adotando malhas mais grossas (temporal e espacial), não há instabilidade na solução, permitindo a simulação do esvaziamento completo do reservatório, o que não foi possível utilizando o esquema explícito, pois neste caso a solução deixa de atender o critério de estabilidade em um curto espaço de tempo. Deste modo, não foram estabelecidas comparação de tempo de CPU neste caso, pois o tempo total de

simulação para cada solução se difere expressivamente.

O código elaborado permite não somente a validação da solução numérica temporalmente implícita e espacialmente híbrida, mas também a verificação da fidelidade do modelo hidrodinâmico com o fenômeno do esvaziamento total do reservatório, de acordo com as FIGURAS 21 e 22.

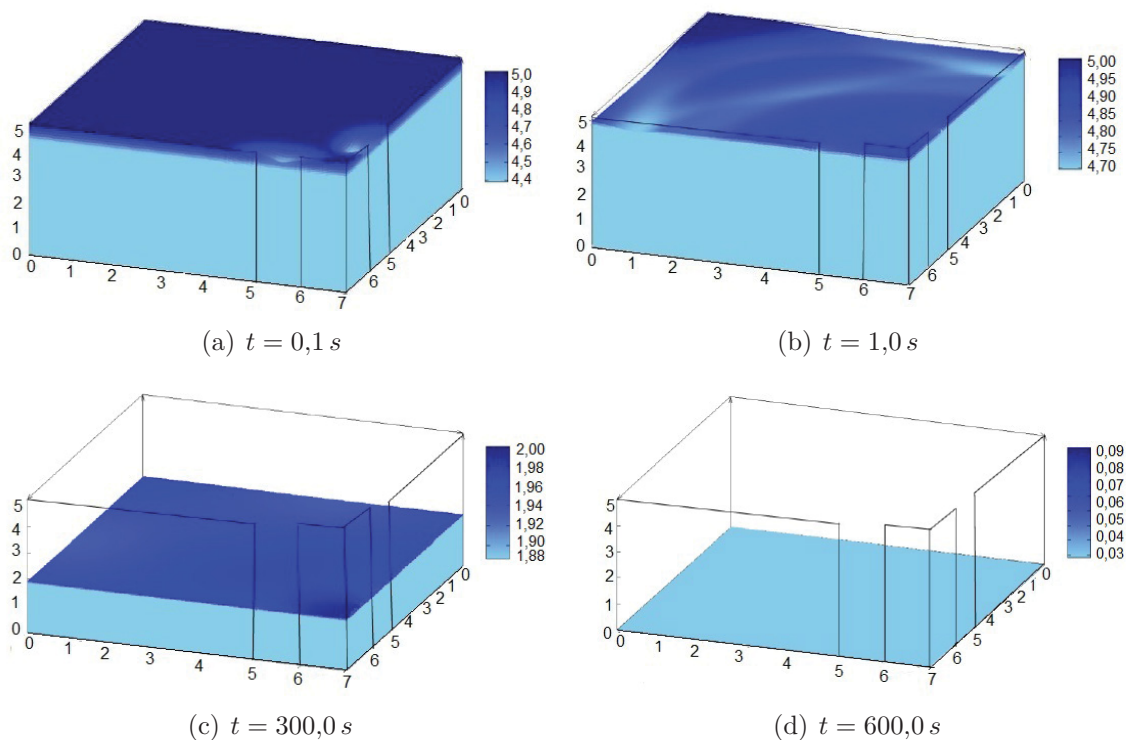
FIGURA 21 – Variação temporal do volume no reservatório.



FONTE: A autora (2019).

Da FIGURA 21 conclui-se que, devido aos dispositivos de descarga, o volume no reservatório diminui tendendo a zero. O nível em diferentes instantes de tempo é exibido na FIGURA 22.

FIGURA 22 – Variação temporal do nível da água no reservatório.

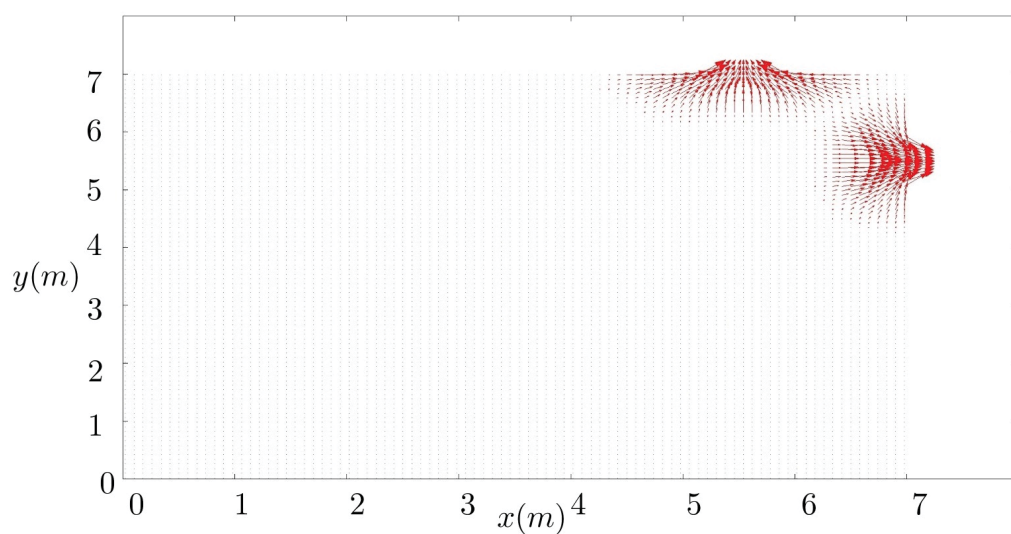


FONTE: A autora (2019).

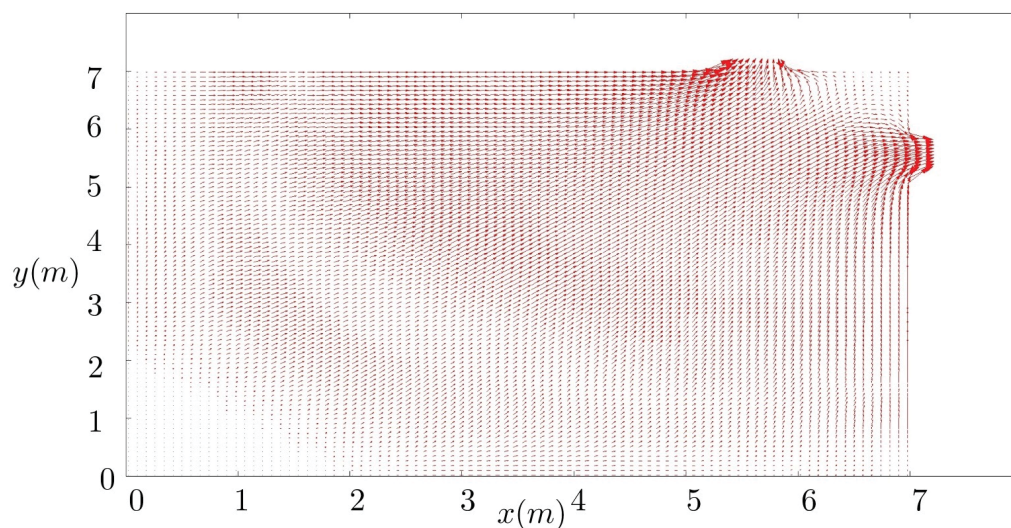
Conforme FIGURA 22, no instante $t = 0,1 s$, o nível da água em quase todo o reservatório é $h = 5 m$, com um pequeno declive na profundidade somente nas proximidades das aberturas de saída. Para $t = 1,0 s$, observa-se ondas de pequena elevação no reservatório e um pequeno declive no nível da água. Para $t = 300,0 s$ a água está praticamente nivelada, e dentro dos primeiros $600,0 s$, o nível no reservatório é praticamente nulo.

O modelo numérico implementado também fornece o campo de velocidade para todo o domínio. A FIGURA 23 exhibe as direções do escoamento nos primeiros instantes de simulação.

FIGURA 23 – Campo de Velocidades do escoamento nos instantes $t = 0,1 s$ e $t = 1,0 s$.



(a) $t = 0,1 s$



(b) $t = 1,0 s$

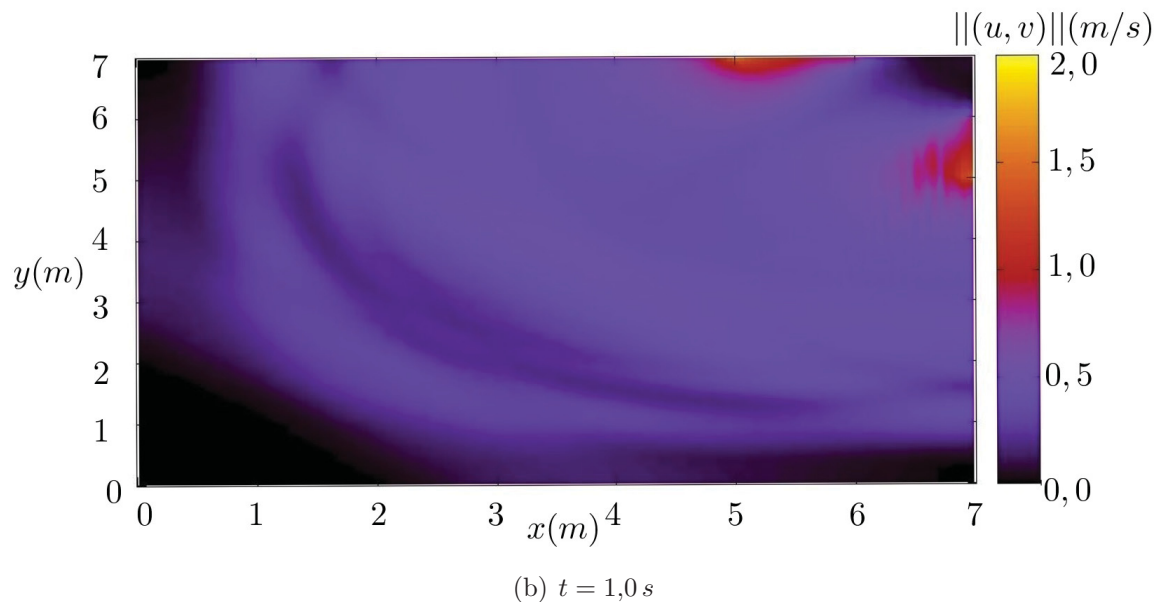
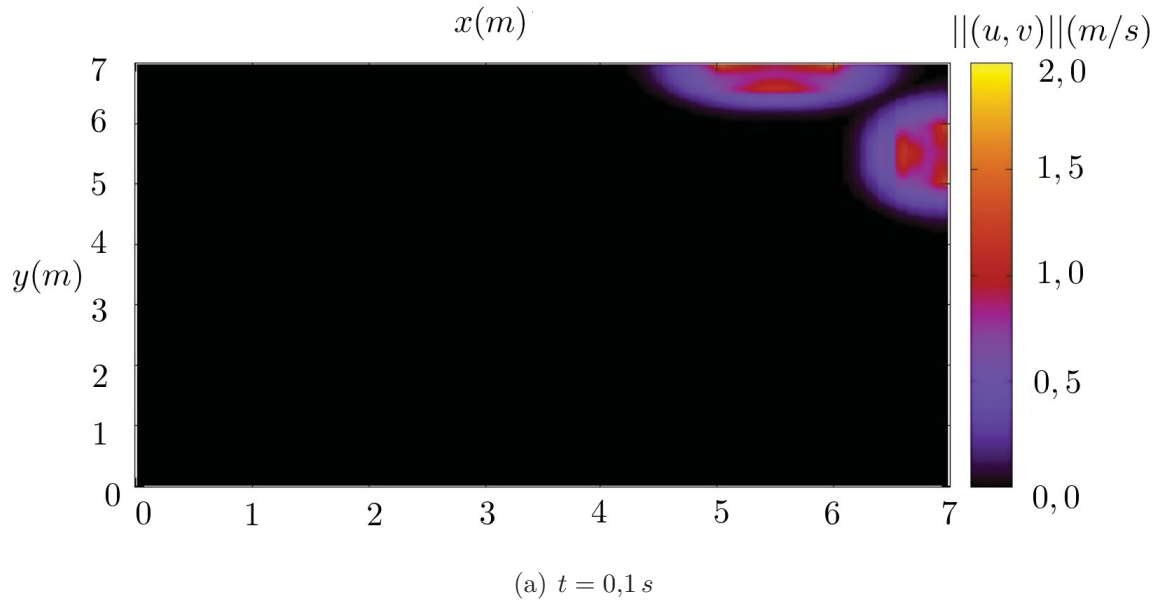
FONTE: A autora (2019).

Na FIGURA 23 observa-se que para $t = 0,1 s$ a velocidade é praticamente nula em todo o reservatório exceto nas saídas e, para $t = 1,0 s$ a intensidade do escoamento se

propaga para o interior do canal, não atingindo ainda o canto inferior esquerdo do canal, sendo muito fraca no canto superior direito.

A magnitude da velocidade do escoamento é representada pela norma do vetor velocidade em cada ponto do domínio bidimensional. A FIGURA 24 mostra a propagação do fluxo no reservatório ao longo do tempo.

FIGURA 24 – Norma do vetor velocidade $\vec{U}(u,v)$ nos instantes $t = 0,1 s$ e $t = 1,0 s$.



FONTE: A autora (2019).

Observa-se na FIGURA 24 que em $t = 0,1 s$ a velocidade é praticamente nula em todo reservatório, com maior intensidade somente nas saídas. E, para $t = 1,0 s$, ocorre a propagação do fluxo em grande parte do reservatório, exceto nos cantos.

Validação Numérica:

Para validação da solução numérica obtida, faz-se a análise da consistência das equações discretizadas e verifica-se a estabilidade e convergência do método empregado no estudo de caso apresentado.

Na análise da consistência, expandem-se em série de Taylor as variáveis descritas nos centróides E, W, N, S em torno de P , nas equações linearizadas para recuperar as equações de águas rasas a partir do modelo discreto, calculando o limite com os espaçamentos espacial e temporal tendendo a zero.

Quanto à estabilidade, estabeleceram-se condições iniciais e de contorno condizentes com o fenômeno físico investigado e um esquema de discretização temporal totalmente implícito foi adotado, que em geral é incondicionalmente estável. Observa-se que não houve instabilidade numérica ou acúmulo de erros na simulação.

Para análise da convergência do método, como a solução analítica é desconhecida, faz-se necessário obter uma estimativa para solução analítica e então faz-se o cálculo do erro estimado, que também é chamado de incerteza (U). Segundo Mehta (1996) e Chapra e Canale (1994), a incerteza da solução numérica de uma variável de interesse é avaliada pela diferença entre a solução analítica estimada (solução na malha mais fina) e a solução numérica própria (em malha intermediária). Conforme a malha é refinada, a convergência da solução numérica é garantida se, o erro estimado se tornar cada vez menor. Para determinarmos o erro em todos os pontos da malha, ao invés da análise em um ponto específico da malha, definimos a variável global $V(t)$, que indica o volume de água no reservatório no instante de tempo t , de acordo com a equação (5.8):

$$V(t) = \sum_{i,j} (h(i,j,t) - z_0(i,j,t)) \Delta x \Delta y, \quad (5.8)$$

onde h é o nível da água e $z_0 = 0$ é a cota da superfície de fundo.

Fixado um instante de tempo t , faz-se o cálculo de $V(t)$ na malha mais fina (V_∞) e nas malhas intermediárias (V_i), $i = 1, 2, \dots, k$, considerando que a malha grossa foi refinada i vezes. Deste modo, a incerteza da solução numérica (erro) usando o refinamento i é calculada pelo estimador de Richardson (RICHARDSON; GAUNT, 1927; BLOTTNER, 1990), dado por:

$$U_{Ri}(V_i) = V_\infty - V_i \quad (5.9)$$

Para o cálculo de V_∞ utiliza-se a extrapolação de Richardson, apresentada em (RICHARDSON, 1910; RICHARDSON; GAUNT, 1927) e generalizada por Roache (1994), da seguinte

maneira:

$$V_\infty = V_i + \frac{V_i - V_{i+1}}{q^{p_L - 1}}, \quad (5.10)$$

onde V_i e V_{i+1} são as soluções numéricas obtidas usando a malha refinada i e $i + 1$ vezes de espaçamentos Δ_i e Δ_{i+1} , respectivamente, p_L é a ordem assintótica do erro de discretização e q é a razão de refino da malha, definida por:

$$\frac{\Delta_i}{\Delta_{i+1}} \quad (5.11)$$

O esquema de discretização adotado nesta tese é de 1ª ordem, portanto $p_L = 1$ e, para a razão de refino da malha adota-se $q = 2$, ou seja, na malha mais grossa o espaçamento Δ_i possui o dobro do comprimento do espaçamento na malha mais fina Δ_{i+1} .

Deste modo, substituindo a equação (5.10) na equação (5.9), resulta:

$$U_{Ri}(V_i) = \frac{V_i - V_{i+1}}{q^{p_L - 1}} \quad (5.12)$$

Usando o estimador GCI (*Grid Convergence Index*) apresentado em Marchi (2001), reescreve-se o erro da seguinte maneira:

$$Err(V_i) = U_{GCI}(V_i) = F_S \frac{|V_i - V_{i+1}|}{q^{p_L - 1}}, \quad (5.13)$$

onde F_S é um fator de segurança com valor igual a três para aplicações em geral.

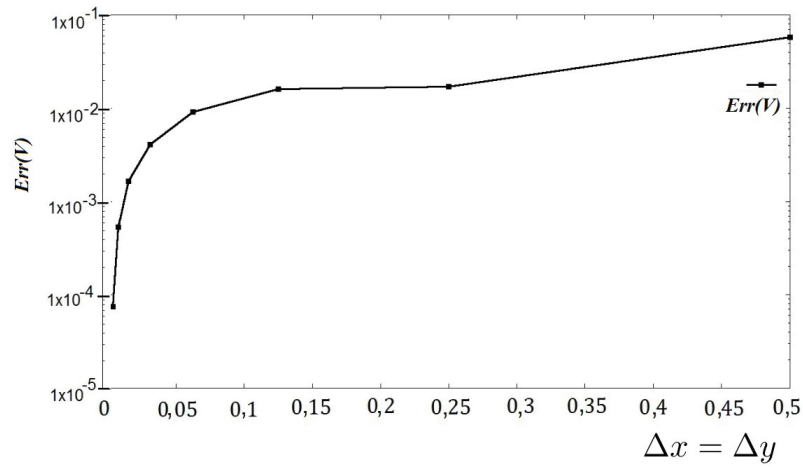
Adotando $\Delta_i = \Delta x = \Delta y = \left(\frac{1}{2}\right)^i$, $i = 1, 2, \dots, 8$, verifica-se que quanto menor o comprimento e largura dos volumes finitos da malha, menor é o erro numérico no cálculo do volume V no reservatório, conforme FIGURA 25.

(e) Verificação Numérica:

A validação numérica, apresentada anteriormente, assegura que o modelo é capaz de fornecer uma resposta física correta sob certas condições iniciais e de contorno. Nesta seção faz-se a verificação da solução, ou seja, mais testes são feitos para descobrir se, sob outro cenário, o modelo computacional é capaz de prever o comportamento físico do sistema. Esta etapa, juntamente com a validação anterior, permite definir se o modelo computacional é útil como uma ferramenta preditiva para qualquer escoamento superficial sob condições diversas.

Para apresentar um estudo de caso mais próximo da realidade, considera-se um reservatório de detenção retangular ($10\text{ m} \times 7\text{ m}$), com nove pilares de sustentação em seu interior, conforme FIGURA 26. Para simulação completa do esvaziamento do reservatório,

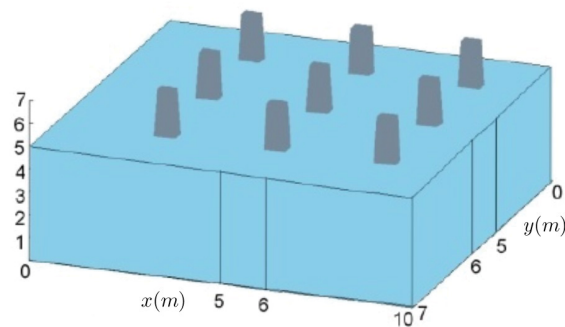
FIGURA 25 – Convergência da solução.



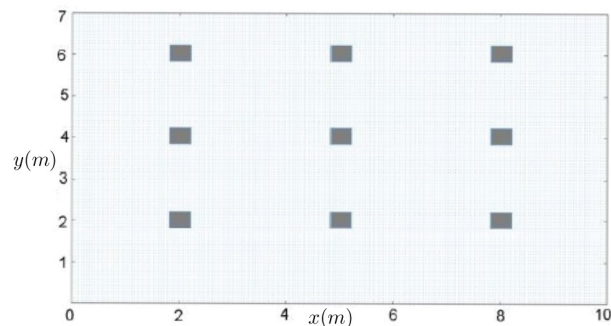
FONTE: A autora (2019).

utiliza-se o modelo numérico descrito pelas equações (5.1) - (5.3) e a solução numérica obtida pelo esquema totalmente implícito e híbrido de volumes finitos, apresentado anteriormente.

FIGURA 26 – Reservatório de contenção com pilares em seu interior e dois dispositivos de despejo.



(a) Esboço do reservatório



(b) Domínio com contornos internos e externos

FONTE: A autora (2019).

Inicialmente considera-se que a água no reservatório está em repouso e o nível da superfície da água em todo reservatório é de 5 m de altura. Como as paredes e os pilares

são impermeáveis, a vazão d'água armazenada se dá somente nas saídas, pela abertura de dispositivos controladores da descarga. Esta vazão, descrita pelas componentes da velocidade do escoamento nas aberturas leste e norte, é dada por:

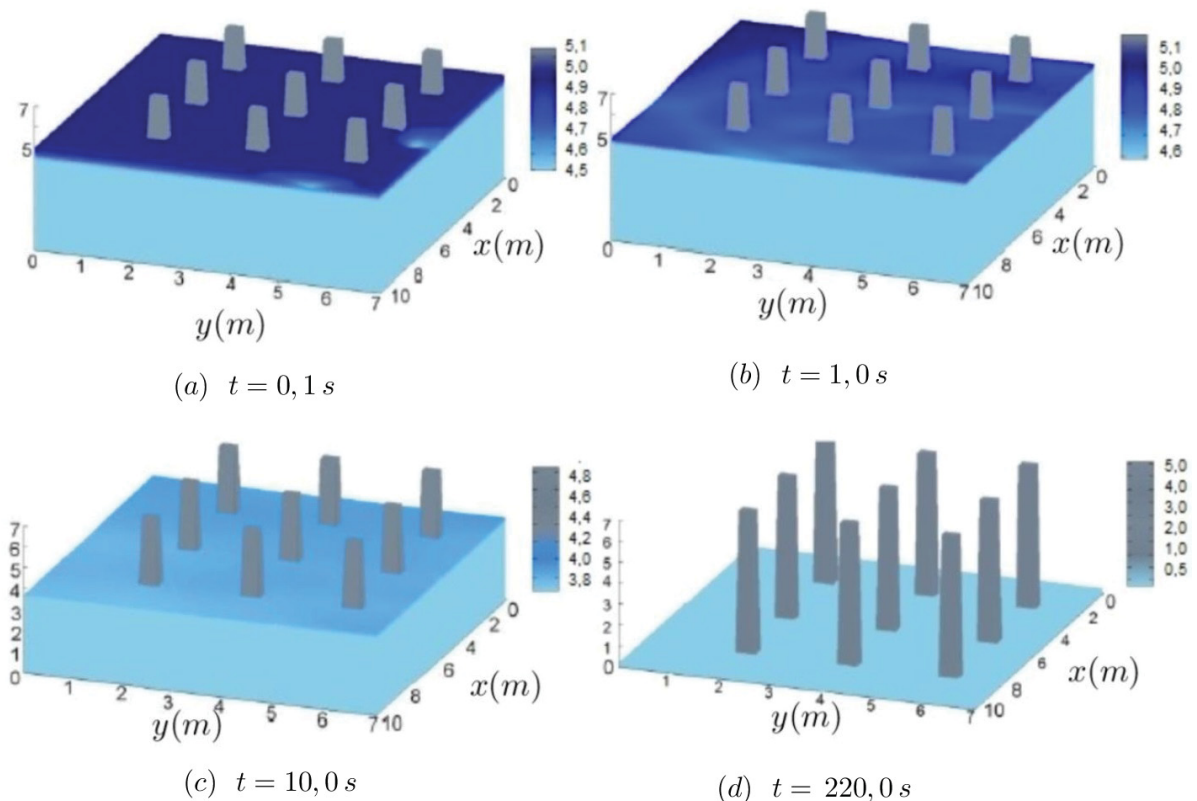
$$\begin{aligned} u(10,y,t) &= C_d h^{\frac{1}{2}}(10,y,t), \quad v(10,y,t) = 0, \quad t \neq 0, \quad 5 \leq y \leq 6, \\ u(x,7,t) &= 0, \quad v(x,7,t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(x,7,t), \quad t \neq 0, \quad 5 \leq x \leq 6, \end{aligned} \quad (5.14)$$

onde, $C_d = 0,1(2g)^{\frac{1}{2}}$ é um coeficiente arbitrário, $g(m/s^2)$ é a aceleração da gravidade, $t(s)$ é o tempo e $h(m)$ é o nível da água no reservatório.

Os parâmetros físicos e numéricos adotados são os mesmos do caso anterior, exibidos na TABELA 1, exceto para o passo de tempo que se tornou menor, $\Delta t = 0,001 s$. Como critério de parada no código, é estabelecido a obtenção do valor mínimo $h = 0,0001 m$.

Devido aos dispositivos de descarga, observam-se inicialmente ondas de pequena elevação no reservatório e um declive expressivo do nível da água já nos primeiros 220,0 s de simulação, conforme FIGURA 27.

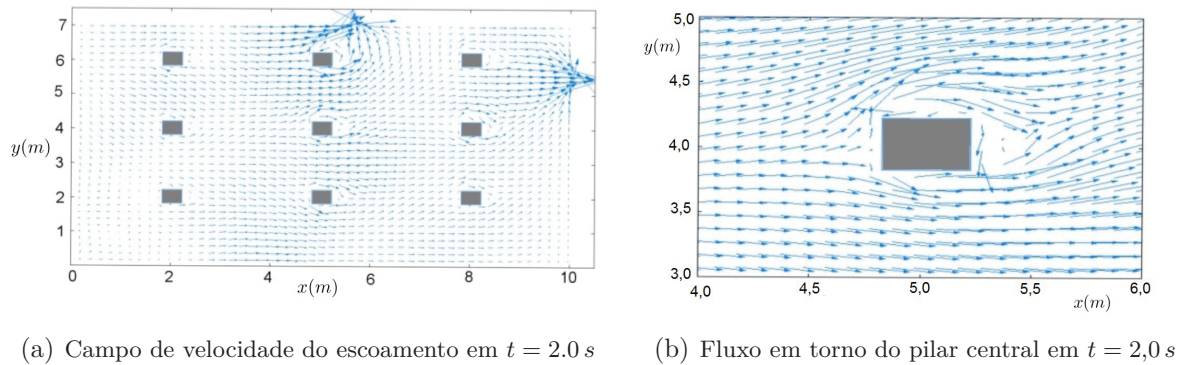
FIGURA 27 – Nível da água no reservatório com pilares em diferentes instantes de tempo.



FONTE: A autora (2019).

A FIGURA 28 mostra a intensidade e a direção do escoamento em todos os pontos do reservatório para $t = 2,0 s$, evidenciando o fluxo em torno do pilar central.

Nota-se maior intensidade do fluxo nas saídas com propagação para todo o reservatório ao longo do tempo e o esperado contorno do fluxo em torno das fronteiras

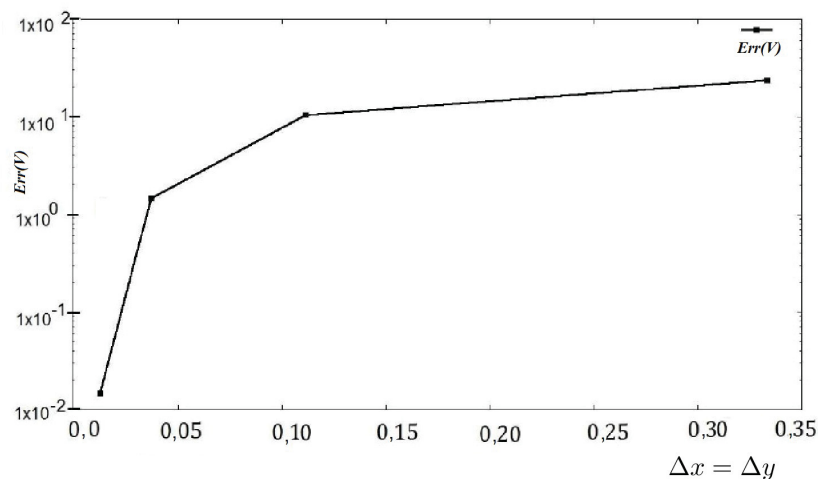
FIGURA 28 – Análise do fluxo para $t = 2,0$ s.

FONTE: A autora (2019).

internas.

Para análise da convergência da solução numérica obtida, utiliza-se novamente o refinamento da malha espacial e faz-se a comparação com uma estimativa da solução analítica, obtida por extrapolação de Richardson. Como no caso anterior, verifica-se que quanto menor o espaçamento da malha, menor é o erro estimado no cálculo do volume V no reservatório, conforme FIGURA 29.

FIGURA 29 – Convergência da solução



FONTE: A autora (2019).

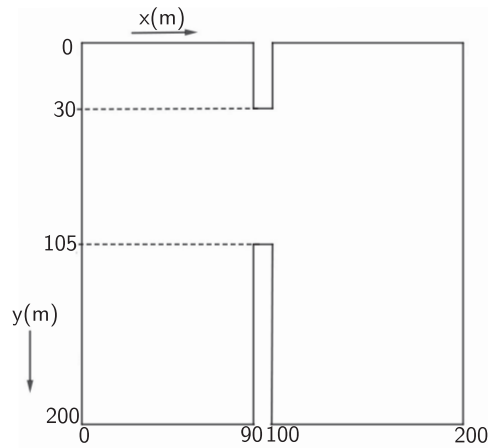
5.1.3 Análise do escoamento de onda abrupta causada por abertura repentina de comportas

O algoritmo proposto e a formulação numérica podem ser validados para determinar sua precisão e robustez, usando dados da literatura. Isso é feito por meio da aplicação do modelo e do código numérico a um problema representativo de águas rasas: o problema da abertura instantânea de comportas, amplamente utilizado para testar códigos numéricos

ou modelos matemáticos que tratam de vazões superficiais sujeitas a mudanças abruptas, mudanças no tempo e no espaço. A abertura instantânea de comportas tem esses detalhes físicos, podendo ser encontrado em Fennema e Chaudhry (1990), Melo, Gramani e Kaviski (2018), Rezende *et al.* (2015), Hirt (1981), Jahanbakhsh, Panahi e Seif (2007) e Villota e Codina (2018), entre outros.

Com este objetivo de validação por comparação com dados da literatura, apresenta-se os resultados obtidos num estudo de caso apresentado em Fennema e Chaudhry (1990), para um modelo de abertura instantânea de comportas. Este problema consiste em um domínio quadrado de 200 m de comprimento com uma barragem interna de 10 m de largura, disposta na faixa de $90\text{ m} - 100\text{ m}$, que divide o domínio como é mostrado na FIGURA 30. Para simulação da abertura de comportas, considera-se uma abertura não simétrica e instantânea com 75 m de largura entre 30 e 105 m . Essa abertura causa uma liberação brusca da coluna de água a jusante, resultando em um fluxo com gradientes espaciais e temporais acentuados.

FIGURA 30 – Domínio do modelo



FONTE: A autora (2019).

Todos os parâmetros numéricos e físicos são mostrados na TABELA 3. De acordo com Fennema e Chaudhry (1990), neste problema a resistência ao escoamento é desprezada e sua parte inferior é plana.

TABELA 3 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE ESCOAMENTO.

Tamanho da malha	$\Delta x \times \Delta y$	Δt	z_0	coeficiente de <i>Manning</i>	g
$200\text{ m} \times 200\text{ m}$	$5\text{ m} \times 5\text{ m}$	$0,01\text{ s}$	0	0,0	$9,81\text{ m/s}^2$

FONTE: A autora (2019).

Para o tempo inicial, o fluido é quiescente, ou seja, $u = v = 0$ para todo o domínio,

enquanto a coluna d'água inicial é dada por:

$$h_0(x,y) : \begin{cases} h_l, \text{ se } x \leq 100 \text{ m} \\ h_r, \text{ se } x > 100 \text{ m}, \end{cases} \quad (5.15)$$

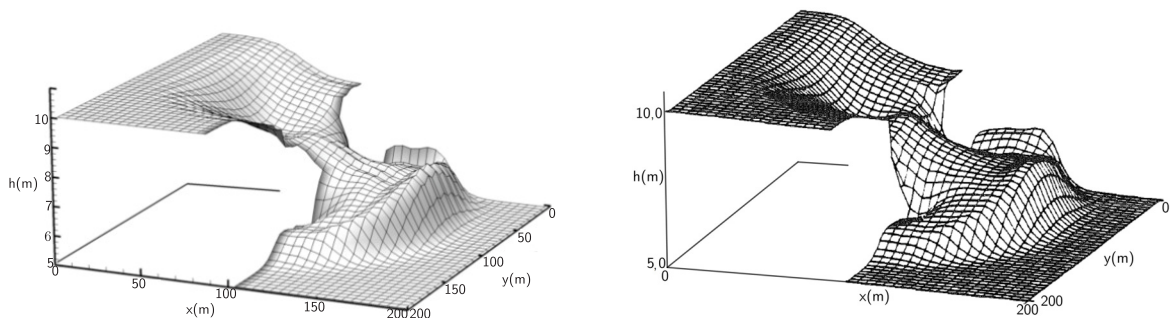
com o nível da água à montante $h_l = 10 \text{ m}$, e a jusante $h_r = 5 \text{ m}$. Consequentemente, a razão entre os níveis de água é $h_r/h_l = 0.5 \text{ m}$.

As condições de contorno são as mesmas adotadas anteriormente, incorporadas usando volumes fictícios. Utiliza-se a Condição de *Neumann* nula para o nível da água nas paredes externas e nos contornos da represa. E para as variáveis que representam a velocidade do escoamento (u,v) é imposta a Condição de *Dirichlet* nos contornos, descrita na equação (5.5), e a Condição de *Neumann* para cada componente tangencial ao contorno dada pela equação (5.6).

(a) Resultados:

A FIGURA 31 mostra a superfície livre de água após 7,1 segundos depois da abertura da comporta. Os resultados são comparados com aqueles obtidos em Fennema e Chaudhry (1990). Observa-se na FIGURA 31 uma frente de onda após a abertura da eclusa e uma onda de depressão no lado esquerdo à barreira. Os níveis de superfície computados estão de acordo com os apresentados por Fennema e Chaudhry (1990) para o mesmo instante de tempo.

FIGURA 31 – Comparação do comportamento da superfície livre 3D após 7,1 s após a abertura da comporta



(a) Resultado obtido pelo esquema híbrido proposto (b) Resultado obtido em Fennema e Chaudhry (1990)

FONTE: A autora (2019) e Fennema e Chaudhry (1990).

Da FIGURA 31 conclui-se que há grande semelhança entre os resultados obtidos pelo dois esquemas, pois observa-se a mesma frente de onda em todo o domínio.

Para uma análise mais pontual e comparação quantitativa, a TABELA 4 exhibe o valor do nível h em alguns pontos amostrais do domínio, após $t = 7,1 \text{ s}$ da abertura da comporta.

TABELA 4 – VALORES DO NÍVEL USANDO A RELAÇÃO $h_r/h_l = 0,5$.

$\begin{matrix} x \\ y \end{matrix}$	0	25	50	75	100	125	150	175	200
0	9,99932	9,96352	9,43066	8,76246	5,06748	7,08372	5,31831	5,00090	5,0
25	9,99497	9,88268	9,18459	8,70866	5,16149	6,34225	6,43242	5,01876	5,0
50	9,98848	9,77139	8,67804	8,08645	7,28272	6,84739	7,01455	5,08294	5,0
75	9,98760	9,75073	8,51860	7,88839	7,52336	6,87814	7,10481	5,09955	5,0
100	9,99177	9,83175	8,98309	8,49358	5,82968	6,54152	6,75214	5,04260	5,0
125	9,99851	9,95297	9,51005	9,17919	5,68769	5,94785	5,60476	5,00278	5,0
150	9,99996	9,99796	9,93089	9,72443	5,48812	5,30022	5,00670	5,00001	5,0
175	9,99999	9,99997	9,99829	9,98574	5,00626	5,00135	5,00001	5,00000	5,0
200	10,0000	9,99999	9,99999	9,99985	3,75001	5,00000	5,00000	5,00000	5,0

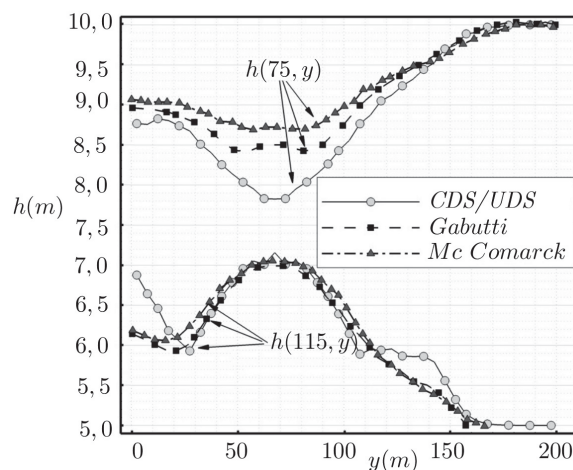
FONTE: A autora (2019).

Comparações mais pontuais podem ser feitas extraindo linhas amostrais do domínio, (x_0, y) ou (x, y_0) .

Duas linhas de amostra foram extraídas em 7,1 s antes da abertura da comporta ($x = 75 m$) e após a abertura ($x = 105 m$) e os dados foram comparados a (FENNEMA; CHAUDHRY, 1990), onde são confrontados outros dois esquemas numéricos descritos em (MACCORMACK, 1969; GABUTTI, 1983), e ambos os métodos são de precisão de segunda ordem e requerem um cálculo mais complexo, uma vez que uma etapa do preditor deve ser avaliada em $t + \Delta t/2$.

A FIGURA 32 apresenta a comparação dos perfis transversais do nível da água após 7,1 s da abertura da barreira interna, e os dados estão em boa concordância com Fennema e Chaudhry (1990). Algumas diferenças podem ser observadas antes e depois da abertura da barragem, principalmente com a onda de depressão antes do portão, mas os níveis estão na mesma ordem e com o mesmo comportamento físico. Além disso, observa-se algumas elevações locais na frente de onda.

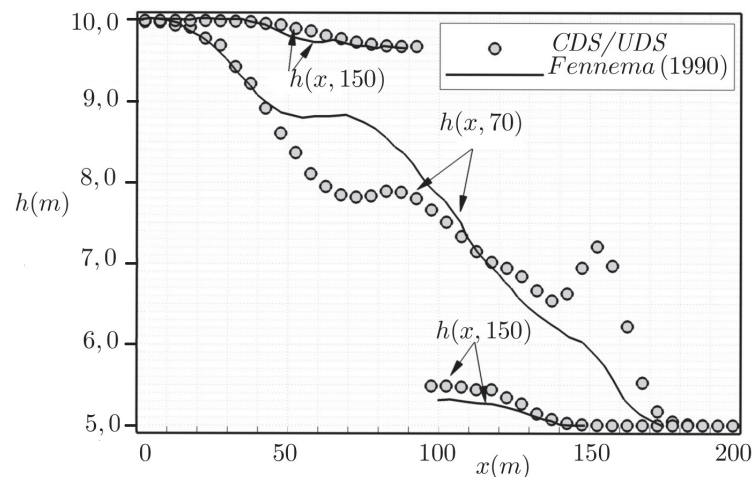
FIGURA 32 – Comparação do perfil do nível de água em duas linhas de amostra em $x = 115 m$ e $x = 75 m$



FONTE: A autora (2019).

A FIGURA 33 mostra os perfis longitudinais em $y = 70\text{ m}$ e $y = 150\text{ m}$ a $7,1\text{ s}$. A linha $h(x, 150)$ está quebrada porque intercepta a parede da barragem, enquanto a linha $h(x, 75)$ passa pela abertura da comporta. Pode ser visto na linha $h(x, 150)$ que a onda frontal após a abertura da eclusa mostra uma elevação de pico que é devida à diferença de velocidade entre a frente de onda e a onda de depressão em movimento a jusante. A frente de onda é desacelerada pelo corpo de água em repouso na frente dela. Embora esse comportamento não seja mostrado nos resultados de Fennema e Chaudhry (1990), a posição da frente de onda e o início da onda de depressão são coincidentes. O perfil $h(x, 150)$ tem uma melhor correspondência, uma vez que nesta posição o comportamento do fluido é mais suave e menos dinâmico devido à presença da parede. É evidente que o local mais sensível a ser resolvido é a região de abertura da comporta devido ao abrupto colapso da coluna de água.

FIGURA 33 – Comparação das linhas de amostra longitudinais do nível de água em $y = 70\text{ m}$ e $y = 150\text{ m}$

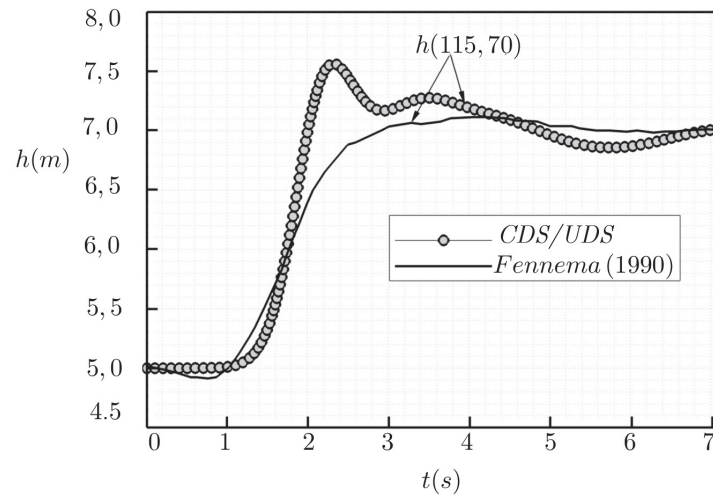


FONTE: A autora (2019).

Na FIGURA 33 observa-se valores muito semelhantes na faixa $(x, 150)$. Já na faixa $(x, 70)$ a solução numérica obtida nesta tese mostrou-se mais sensível e capaz de captar frentes de ondas não exibidas em Fennema e Chaudhry (1990).

As mudanças no nível da água podem ser monitoradas por um período de tempo, em um ponto fixo do domínio. Na FIGURA 34, pode-se ver a amostragem do nível de água em $P(115, 70)$, localizado na frente da abertura da comporta que permite capturar o avanço da frente de onda, durante $7,1\text{ s}$.

Pode ser visto em ambos os resultados que a frente de onda leva $1,0\text{ s}$ após a abertura para alcançar o ponto de teste P , e depois de $3,0\text{ s}$, o nível da água está próximo de 7 m em ambos os casos. Novamente, há um comportamento mais dinâmico em comparação com os resultados de Fennema e Chaudhry (1990), que é mais suave com oscilações brandas devido a utilização de termos dissipativos artificiais, enquanto os resultados obtidos pelo

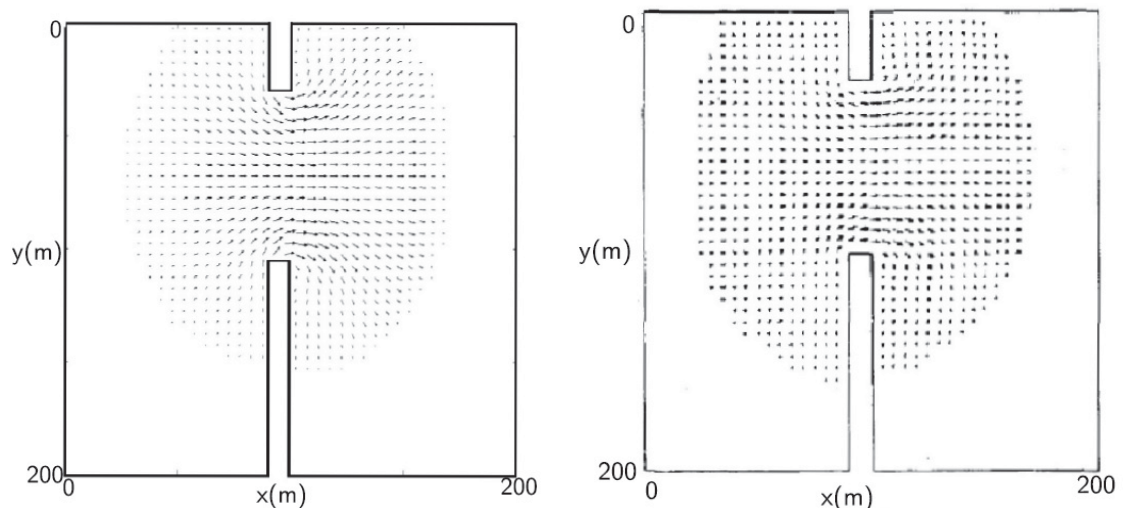
FIGURA 34 – Comparação do tempo de amostragem do nível da água em $P(115,70)$ 

FONTE: A autora (2019).

esquema híbrido proposto apresentam um pico que tende a ser atenuado com o tempo, de acordo com o fenômeno físico esperado.

Foram realizadas comparações com relação ao campo de velocidade do escoamento em $t = 7,1$ s, conforme FIGURA 35.

FIGURA 35 – Comparação do campo de velocidade em torno da abertura da comporta em 7,1 s



(a) Campo de velocidade usando o esquema híbrido (b) Campo de velocidade apresentado em Fennema e Chaudhry (1990)

FONTE: A autora (2019) e Fennema e Chaudhry (1990).

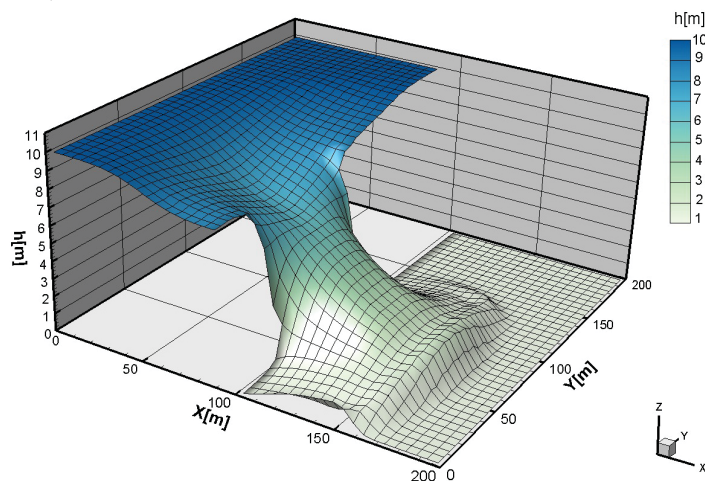
A FIGURA 35 mostra boa concordância com os resultados apresentados em Fennema e Chaudhry (1990), apresentando as mesmas direções, magnitudes (representadas pelos tamanhos das flechas) com um espalhamento pela mesma área ao redor da abertura da comporta.

(b) Teste da condição de leito seco:

Para avaliar a robustez do código na análise de dam-break sobre leito seco, considera-se no estudo de caso anterior a razão h_r/h_l tendendo a zero, isto é, h_r é considerado com uma fina película líquida, como uma *wet condition*. Esta situação é geralmente uma situação física difícil de resolver devido às singularidades que podem surgir nos termos fontes de atrito, e o possível mau condicionamento da matriz de coeficientes devido a valores nulos que surgirão ao longo dos cálculos quando h tende a zero. Nesta situação, as equações de águas rasas tendem a enfraquecer seu significado físico. Em vista disso, h_r não pode ser exatamente zero, e o código deve ser capaz de lidar com essa situação.

Na FIGURA 36, pode-se observar o nível da água para os primeiros 7,1 s com $h_r/h_l = 0,00002$.

FIGURA 36 – Visão tridimensional da superfície livre em 7,1 s após a abertura da comporta com $h_r/h_l = 0,00002$



FONTE: A autora (2019).

Os valores dos níveis são reproduzidos na TABELA 5, com todas as unidades em metros.

Em Fennema e Chaudhry (1990), Sheu e Fang (2001) e Fernández-Pato, Morales-Hernández e García-Navarro (2018) são apontadas as dificuldades em lidar com modelo que representam leitos quase secos, devido as possíveis singularidades.

O esquema numérico híbrido CDS/UDS aqui proposto mostrou-se eficaz e com baixo custo computacional para simular escoamentos transientes em águas rasas para leitos quase secos, o que evidencia a acurácia e robustez do esquema.

TABELA 5 – VALORES DO NÍVEL PARA $h_r/h_l = 0,00002$.

$\begin{matrix} x \\ y \end{matrix}$	0	25	50	75	100	125	150	175	200
0	9,9984	9,9274	9,1889	8,4453	0,0303	0,8589	1,2135	0,0002	0,0002
25	9,9904	9,8118	8,9461	8,3330	0,4597	1,1416	1,1143	0,0583	0,0002
50	9,9789	9,6532	8,3391	7,3257	5,4764	3,3378	1,9742	0,4390	0,0002
75	9,9773	9,6221	8,1432	6,9206	5,6710	3,7372	2,1506	0,6072	0,0002
100	9,9848	9,7398	8,7161	8,0375	3,4672	1,9603	1,4454	0,1380	0,0002
125	9,9969	9,9163	9,3453	8,9770	0,1084	0,5429	0,6798	0,0058	0,0002
150	9,9999	9,9950	9,8806	9,6130	0,0002	0,0235	0,0028	0,0002	0,0002
175	9,9999	9,9999	9,9960	9,9728	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002
200	10,000	9,9999	9,9999	9,9996	0,00015	0,0002	0,0002	0,0002	0,0002

FONTE: A autora (2019).

5.2 Simulação Numérica de modelos hidrodinâmicos completos

Para testar a solução numérica obtida para as equações de águas rasas completas, analisou-se dois estudos de casos, considerando a resistência ao escoamento e declives na superfície de fundo.

5.2.1 Equações Governantes

O sistema de equações que governa o escoamento bidimensional transiente, considerando o atrito e declividade na superfície de fundo, apresenta-se em Mahmood e Yevjevich (1975) como:

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uh) + \frac{\partial}{\partial y}(vh) = 0, \quad (5.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(uh) + \frac{\partial}{\partial x}(u^2h + \frac{1}{2}gh^2) + \frac{\partial}{\partial y}(uvh) = gh(S_{0x} - S_{fx}), \quad (5.17)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}(vh) + \frac{\partial}{\partial x}(uvh) + \frac{\partial}{\partial y}(v^2h + \frac{1}{2}gh^2) = gh(S_{0y} - S_{fy}), \quad (5.18)$$

onde $h(m)$ é a profundidade do canal, $u(m/s)$ e $v(m/s)$ são as componentes da velocidade, $g(m/s^2)$ é a aceleração da gravidade, $t(s)$ é o tempo, z_0 é a cota da superfície de fundo, e S_{0x} , S_{0y} os declives desta superfície definidos como:

$$S_{0x} = -\frac{\partial z_0}{\partial x}, \quad S_{0y} = -\frac{\partial z_0}{\partial y}, \quad (5.19)$$

enquanto os declives de resistência ao escoamento (perda de energia), nas direções x e y , respectivamente, são dados por:

$$S_{fx} = \frac{\eta^2 u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad S_{fy} = \frac{\eta^2 v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad (5.20)$$

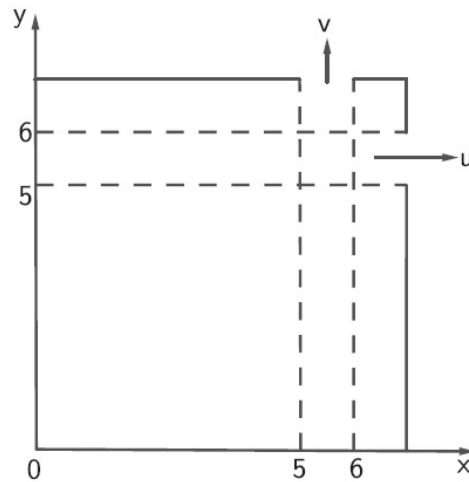
onde $\eta(m/s^{\frac{1}{3}})$ é o coeficiente de rugosidade de Manning, que quantifica o atrito do fluxo com a superfície do fundo.

5.2.2 Análise de escoamentos em reservatórios de contenção fluvial com resistência ao escoamento e efeito gravitacional

Para simular o escoamento num reservatório de contenção de água de chuva, considerou-se um reservatório retangular ($7\text{ m} \times 7\text{ m}$), de paredes rígidas e impermeáveis com dois dispositivos de despejo.

O estudo de caso aqui apresentado tem um apelo prático, visando simular escoamentos em reservatórios de contenção da água da chuva que possuem alguma inclinação na superfície de fundo, facilitando a drenagem quando necessária. Na FIGURA 37 está representado o domínio físico que consiste em um reservatório retangular com dimensões de $7\text{ m} \times 7\text{ m}$, com paredes rígidas e impermeáveis com duas aberturas de saída.

FIGURA 37 – Domínio físico do reservatório de contenção fluvial



FONTE: A autora (2019).

O fundo do reservatório consiste em um plano inclinado de concreto, representado por:

$$z_0 : z = 1 - (1/7)y. \tag{5.21}$$

Como a superfície de fundo, agora é contabilizada, os termos que modelam a resistência do fluxo estão ativos e adota-se $\eta = 0,013\text{ m/s}^{1/3}$, como o coeficiente de Manning para superfícies de concreto, conforme Porto (2006). Todos os parâmetros físicos e numéricos são dados na TABELA 6.

TABELA 6 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE ABERTURA DAS COMPORTAS.

Tamanho da malha	$\Delta x \times \Delta y$	Δt	z_0	coeficiente de Manning	g
$7\text{ m} \times 7\text{ m}$	$0,1\text{ m} \times 0,1\text{ m}$	$0,001\text{ s}$	$z = 1 - 7y$	$0,013\text{ m/s}^{1/3}$	$9,81\text{ m/s}^2$

FONTE: A autora (2019).

A água está inicialmente em repouso ($u_0 = v_0 = 0$) com um nível inicial $h_0 = 5\text{ m}$.

As condições de contorno são as mesmas adotadas anteriormente, incorporadas

usando volumes fictícios. Utiliza-se a Condição de *Neumann* nula para o nível da água nas paredes do reservatório. E para as variáveis do fluxo (u,v) é imposta a Condição de *Dirichlet* no contornos, descrita na equação (5.5), e a Condição de *Neumann* para cada componente tangencial ao contorno dada pela equação (5.6). Por simplicidade, as velocidades de saída são iguais e empiricamente proporcionais a h^α , ou seja,

$$u = v = C_d h^\alpha \tag{5.22}$$

onde C_d é um coeficiente arbitrário de descarga.

Neste caso, as velocidades de saída são hipoteticamente dadas por:

$$u(7,y,t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(7,y,t), \quad v(7,y,t) = 0, \quad t \neq 0, \quad 5 \leq y \leq 6, \tag{5.23}$$

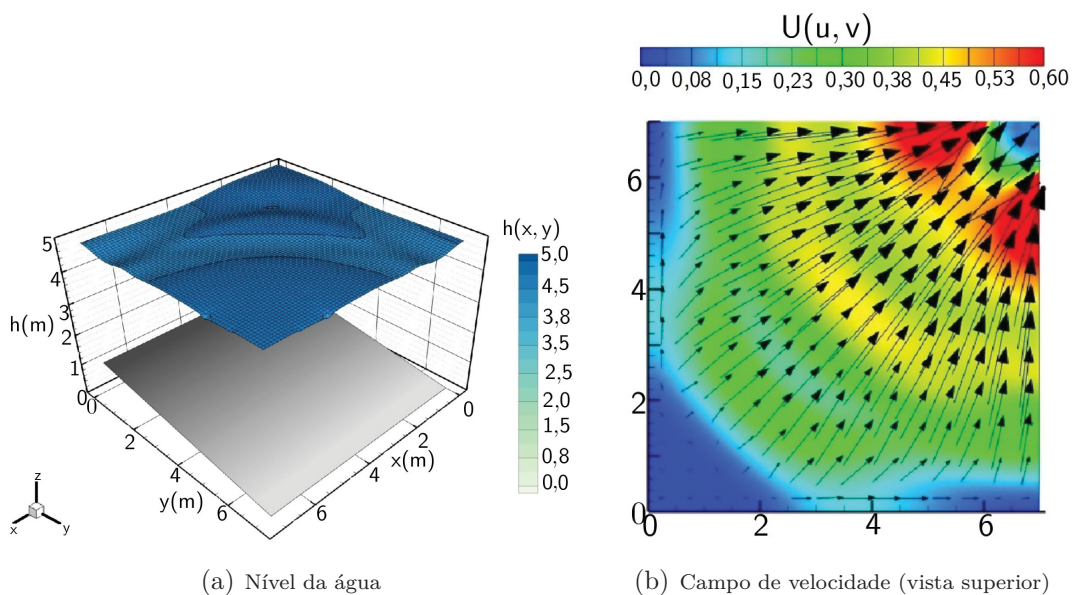
$$u(x,7,t) = 0, \quad v(x,7,t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(x,7,t), \quad t \neq 0, \quad 5 \leq x \leq 6, \tag{5.24}$$

onde, $C_d = 0,1(2g)^{\frac{1}{2}}$ é um coeficiente arbitrário de descarga, $g(m/s^2)$ é a aceleração da gravidade e $h(m)$ é o nível da água.

(a) Resultados:

Um segundo após a abertura das comportas, o nível da água começa a diminuir e algumas ondas ocorrem. A água é rapidamente conduzida para as saídas como indicado no campo vetorial e no mapa de contorno da velocidade na FIGURA 38.

FIGURA 38 – Visão da superfície livre e do campo de velocidade após 1,0 s da abertura das comportas

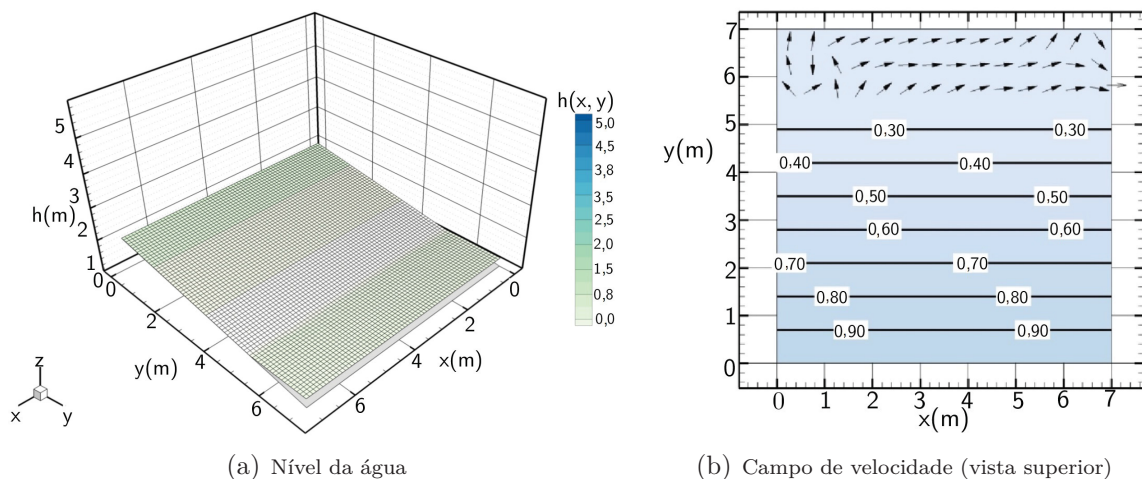


FONTE: A autora (2019).

A FIGURA 38(b) mostra a velocidade do escoamento mais intensa nas saídas, garantindo o resultado esperado do modelo.

Após 120,0 s da abertura das comportas, a velocidade do escoamento torna-se nula nos pontos onde o nível da água toca o fundo do reservatório. Nesses pontos, as curvas de nível de h coincidem com curvas de nível da superfície de fundo, como mostrado na FIGURA 39.

FIGURA 39 – Visão da superfície livre e do campo de velocidade após 120,0 s da abertura das comportas



(a) Nível da água

(b) Campo de velocidade (vista superior)

FONTE: A autora (2019).

A FIGURA 39 evidencia novamente a capacidade do código em simular o esvaziamento total do reservatório.

Para computar o tempo de drenagem total calcula-se o volume de água no reservatório em cada instante de tempo, de acordo com a equação (5.8). A FIGURA 40 representa o volume de água no reservatório em função do tempo.

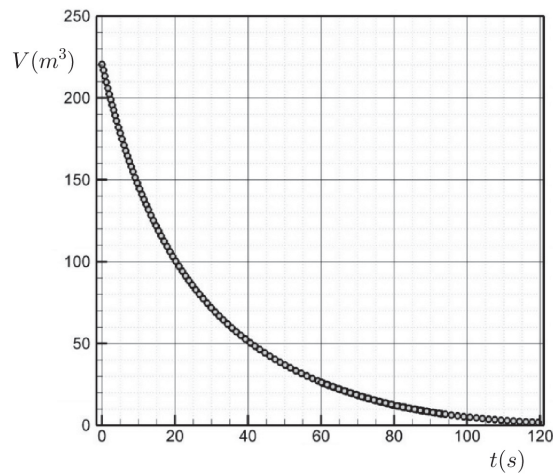
Observa-se na FIGURA 40 que o tempo total de drenagem é de aproximadamente 120,0 s.

De acordo com os resultados apresentados, a solução numérica obtida mostrou-se não oscilatória e não apresenta nenhum comportamento não-físico. Mesmo com os termos fonte ativados nas equações, o procedimento numérico não foi sensível à sua presença. Também a declividade do fundo não foi um problema e o código foi capaz de lidar com as equações de águas rasas completas.

(b) Validação Numérica:

Para análise da convergência da solução numérica para as equações completas, utiliza-se novamente o refinamento da malha espacial e faz-se a comparação com uma estimativa da solução analítica, obtida por extrapolação de Richardson. Como nos casos

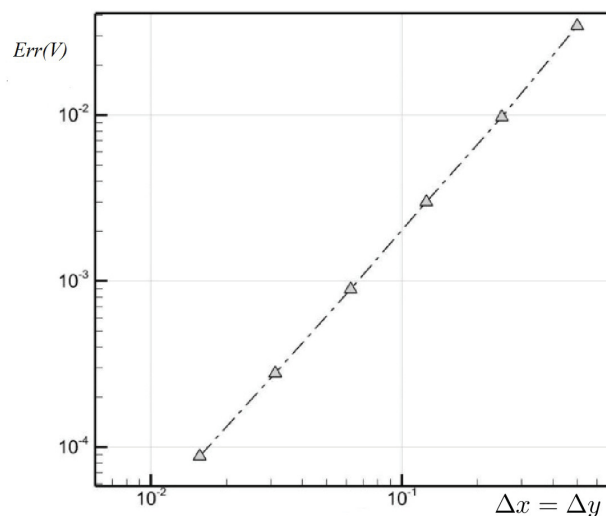
FIGURA 40 – Variação no volume de água dentro do reservatório para os primeiros 120,0 s após a abertura das comportas



FONTE: A autora (2019).

anteriores, verifica-se que quanto menor o espaçamento da malha, menor é o erro estimado no cálculo do volume V no reservatório, conforme FIGURA 41.

FIGURA 41 – Análise da convergência da solução numérica do modelo hidrodinâmico completo



FONTE: A autora (2019).

A FIGURA 41 mostra o erro da solução numérica em relação à solução na malha fina. Embora um pequeno número de refinamentos seja utilizado, observa-se a rápida convergência da solução obtida pelo esquema híbrido. Esta convergência da solução também pode ser comprovada usando dados tabelados, conforme TABELA 7.

Observa-se na TABELA 7 que, considerando $\Delta x (= \Delta y)$ tendendo a zero, o erro na aproximação também tende a zero. Em outras palavras, a TABELA 7 também mostra a convergência da solução numérica adotada.

TABELA 7 – CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA O MODELO HIDRODINÂMICO COMPLETO.

Δx	Δy	$Err(V)$	$Err(V)/V$
$5,0000 \times 10^{-1}$	$5,0000 \times 10^{-1}$	$3,442381 \times 10^{-3}$	$1,6648407439 \times 10^{-2}$
$2,5000 \times 10^{-1}$	$2,5000 \times 10^{-1}$	$9,752908 \times 10^{-3}$	$4,7093998382 \times 10^{-3}$
$1,2500 \times 10^{-1}$	$1,2500 \times 10^{-1}$	$2,995748 \times 10^{-3}$	$1,4458638075 \times 10^{-3}$
$6,2500 \times 10^{-2}$	$6,2500 \times 10^{-2}$	$8,929959 \times 10^{-4}$	$4,3093242249 \times 10^{-4}$
$3,1250 \times 10^{-2}$	$3,1250 \times 10^{-2}$	$2,782701 \times 10^{-4}$	$1,3427860188 \times 10^{-4}$
$1,5625 \times 10^{-2}$	$1,5625 \times 10^{-2}$	$8,811179 \times 10^{-5}$	$4,2517545471 \times 10^{-5}$

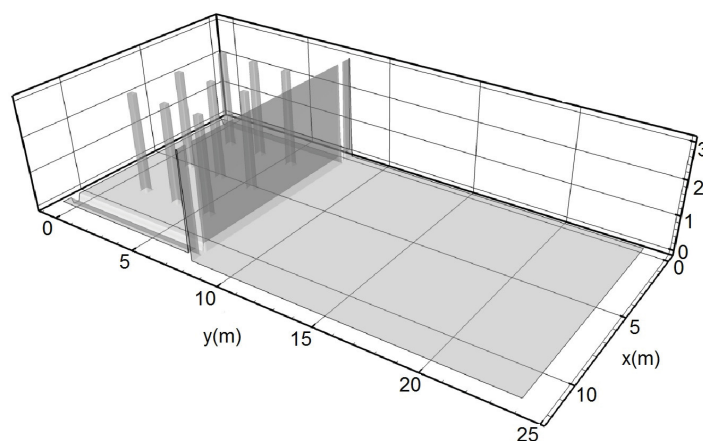
FONTE: A autora (2019).

(c) Verificação Numérica:

Como dito anteriormente, a validação numérica assegura que o modelo matemático é capaz de fornecer uma resposta física correta sob certas condições iniciais e de contorno. No entanto, mais testes devem ser feitos para descobrir se, sob outro cenário, o modelo é capaz de prever o comportamento físico do sistema. Esta etapa, juntamente com a validação numérica, permite definir se o modelo é útil como uma ferramenta preditiva para qualquer escoamento de água superficial sob condições diversas.

Para apresentar um estudo de caso mais próximo da realidade, considera-se um reservatório de contenção projetado para zonas urbanas populosas, com dificuldades na drenagem da água de chuva. Este reservatório é projetado com uma rede de pilares de sustentação e canais de drenagem na parte inferior, como ilustrado na FIGURA 42.

FIGURA 42 – Reservatório de águas pluviais subterrâneas



FONTE: A autora (2019).

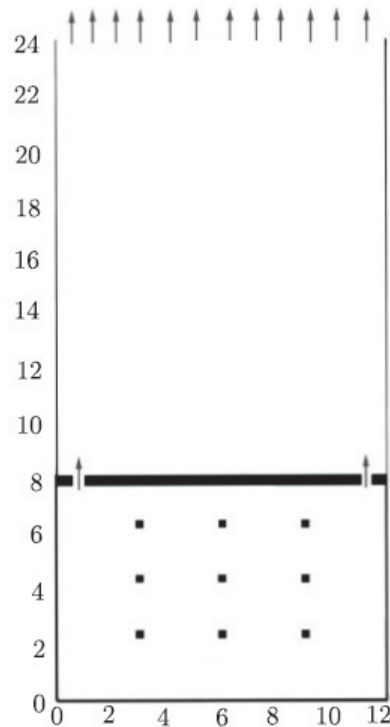
Para testar a solução numérica obtida para as equações completas das águas rasas, analisou-se o escoamento em um reservatório com obstáculos como colunas estruturais, e drenos controlados por saídas estreitas como fendas na barragem. Neste caso, analisa-se também a influência do escoamento sobre a região externa que será alagada.

A superfície de fundo foi considerada com inclinações não nulas e com resistência ao escoamento no fundo do canal, com coeficiente de atrito de Manning $\eta = 0,013m/s^{1/3}$, que quantifica a resistência ao escoamento no fundo do canal para superfícies de cimento, apresentado em Porto (2006).

O fundo tem a presença de canais que conduzem a água pelas aberturas de saída até uma área aberta sem paredes. Pode-se dizer que o problema considerado é uma composição do problema de abertura instantânea de comportas, para leitos molhado/seco, com topografia e domínio irregulares.

A FIGURA 43 representa a configuração do domínio físico, consiste em um reservatório retangular de $12\text{ m} \times 8\text{ m}$ de dimensão com nove pilares de sustentação e uma região externa ao reservatório de $12\text{ m} \times 16\text{ m}$ de dimensão.

FIGURA 43 – Domínio físico do reservatório subterrâneo e da região externa



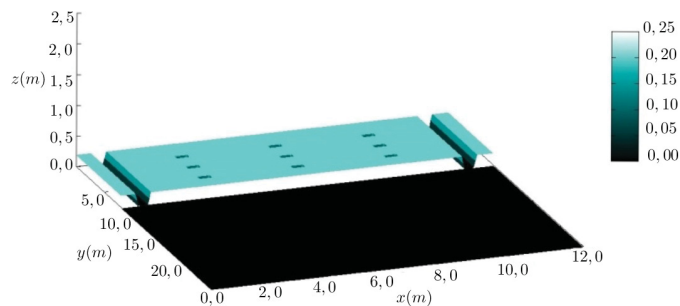
FONTE: A autora (2019).

As configurações da superfície de fundo são descritas por z_0 na equação (5.25):

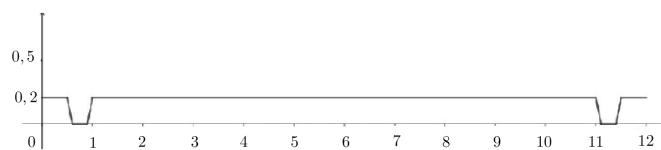
$$z_0(x,y,t) = \begin{cases} 0,2, & \text{se } 0 \leq x \leq 0,5 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 1,2 - 2x, & \text{se } 0,5 < x < 0,6 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 0,0, & \text{se } 0,6 \leq x \leq 0,9 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ -1,8 + 2x, & \text{se } 0,9 < x < 1,0 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 0,2, & \text{se } 1,0 \leq x \leq 11,0 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 22,0 - 2x, & \text{se } 11,0 < x < 11,1 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 0,0, & \text{se } 11,1 \leq x \leq 11,4 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ -22,8 + 2x & \text{se } 11,4 < x < 11,5 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 0,2, & \text{se } 11,5 \leq x \leq 12,0 \text{ e } 0 \leq y \leq 8, \\ 0,0, & \text{se } 0 \leq x \leq 12,0 \text{ e } 8,15 \leq y \leq 24. \end{cases} \quad (5.25)$$

Como ilustrado na FIGURA 44, a parte inferior do reservatório possui dois canais de drenagem com seção trapezoidal e um declive sutil em direção às fendas da barragem.

FIGURA 44 – Superfície de fundo do reservatório



(a) representação tridimensional do fundo

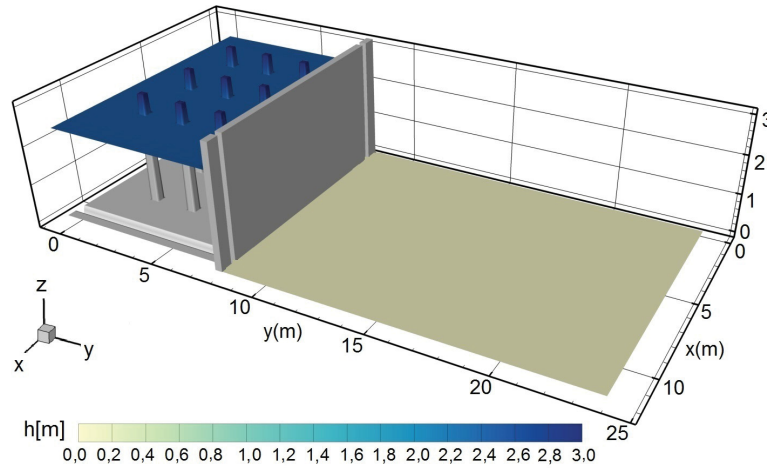


(b) Perfil frontal do fundo do reservatório

FONTE: A autora (2019).

No reservatório, o nível da água está inicialmente em repouso e tem 2,5 m de profundidade, enquanto na zona de inundação, há apenas uma camada fina de água, ou seja, *wet condition*, a altura da água é tão pequena quanto possível, como foi testado na Subseção 5.1.3, na análise de dam-break sob leito seco. Neste caso, a razão fixada é $h_r/h_l = 0,0002$, como mostrado na FIGURA 45. Todas as condições de contorno para o nível da água são as mesmas dos estudos de casos já apresentados anteriormente.

FIGURA 45 – Condições iniciais para o nível da água



FONTE: A autora (2019).

Com relação aos componentes de velocidade, é necessário dizer que: como as paredes do reservatório, os pilares e paredes laterais do domínio externo são considerados impermeáveis; o fluxo da água que é armazenada no reservatório ocorre apenas nas saídas da parede norte do reservatório e na extremidade norte do domínio externo, como indicado na FIGURA 43. Mais precisamente, a componente de velocidade u nas paredes internas leste-oeste e nos contornos internos é nula, enquanto a componente de velocidade v é considerada nula no limite sul e nos limites internos norte-sul. Por outro lado, nos contornos norte-sul para a componente u e nos contornos leste-oeste para a componente v respectivamente, é adotada a condição de *Neumann* nula, dada pela equação (5.6).

Para o domínio externo, uma vez que existem apenas paredes laterais, o fluxo é livre para todos os pontos da extremidade norte. Essa condição de contorno é descrita pelas expressões:

$$v(x,24,t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(x,24,t), \quad t \neq 0, \quad 0 \leq x \leq 12, \quad (5.26)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} u(x,24,t) = 0, \quad 0 \leq x \leq 12, \quad (5.27)$$

sendo $C_d = 1,0(2g)^{\frac{1}{2}}$ um coeficiente arbitrário, $h(m)$ o nível da água e $g(m/s^2)$ a aceleração da gravidade.

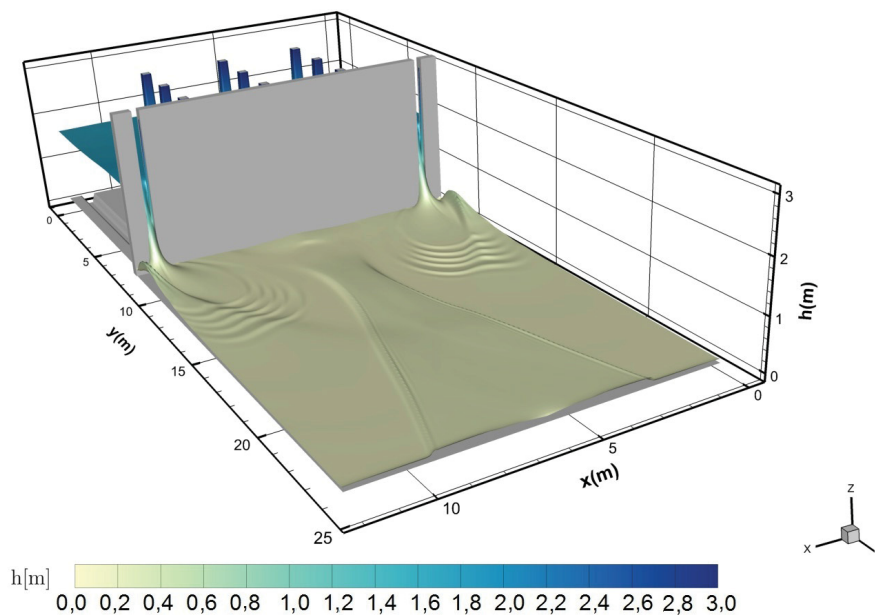
Para a simulação computacional do modelo proposto utiliza-se uma malha estruturada, de espaçamento $\Delta x = \Delta y = 0,05 m$, no espaço bidimensional, com intervalo de tempo de $\Delta t = 0,001 s$. Como há uma superfície na parte inferior do reservatório, é necessário estabelecer uma condição compatível com a física do modelo: se o nível da água atingir o fundo do reservatório, o fluxo será considerado nulo neste ponto. Mais precisamente se, $h(x, y, t) > z_0(x, y, t)$ os cálculos para h, u, v são feitos para o próximo passo de tempo, caso contrário faz-se: $h(x, y, t) = z_0(x, y, t)$ e as componentes de velocidade são anuladas neste ponto.

O volume de fluido armazenado no interior do reservatório foi calculado em cada ponto de tempo e estabeleceu-se como critério de parada no código, o volume mínimo $V = 0,01 m^3$.

Ao iniciar a simulação do escoamento, devido às aberturas na parede norte do reservatório, há um declínio no nível da água dentro do reservatório e ondas de elevação no domínio externo, especialmente nas proximidades das aberturas.

A FIGURA 46 é uma representação em perspectiva da superfície da água em todo o domínio para $t = 21,0 s$ após a abertura das saídas.

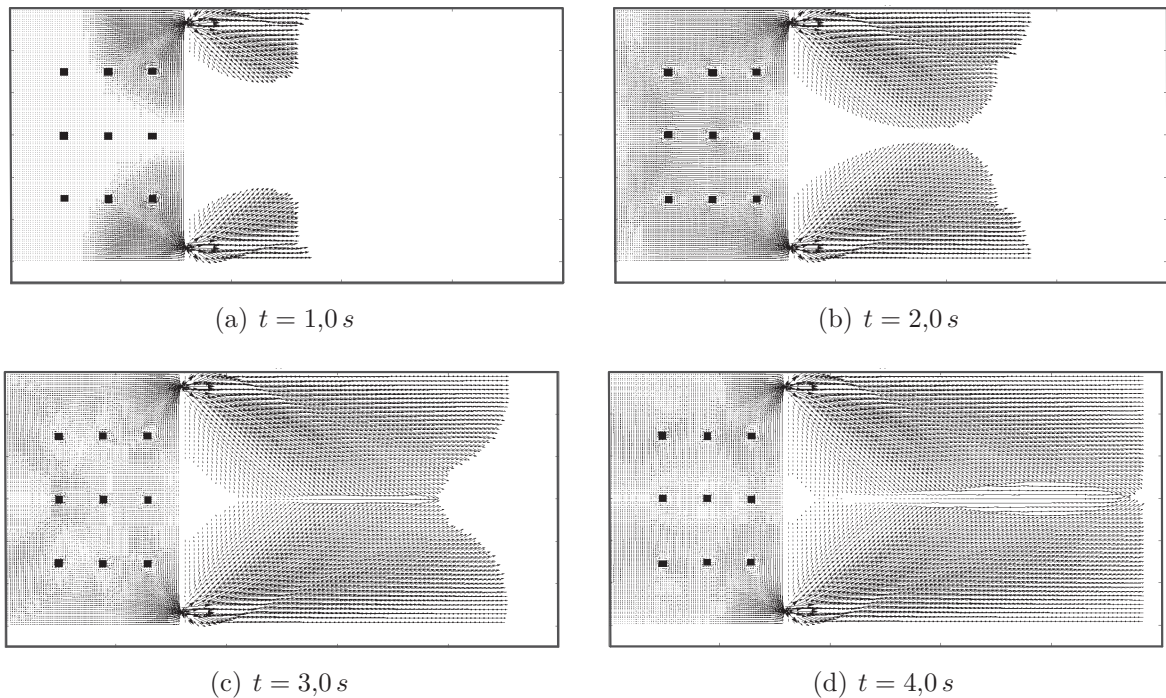
FIGURA 46 – Visão tridimensional do nível da água após 21 s do início do despejo



FONTE: A autora (2019).

A representação gráfica do campo vetorial é usada para a análise da intensidade e direção do escoamento, em cada ponto da malha. A FIGURA 47 mostra as direções e a intensidade do escoamento nos primeiros 4,0 s. Observa-se que a direção do escoamento ocorre de dentro para fora do reservatório, a partir das saídas, com gradientes mais acentuados próximos às aberturas.

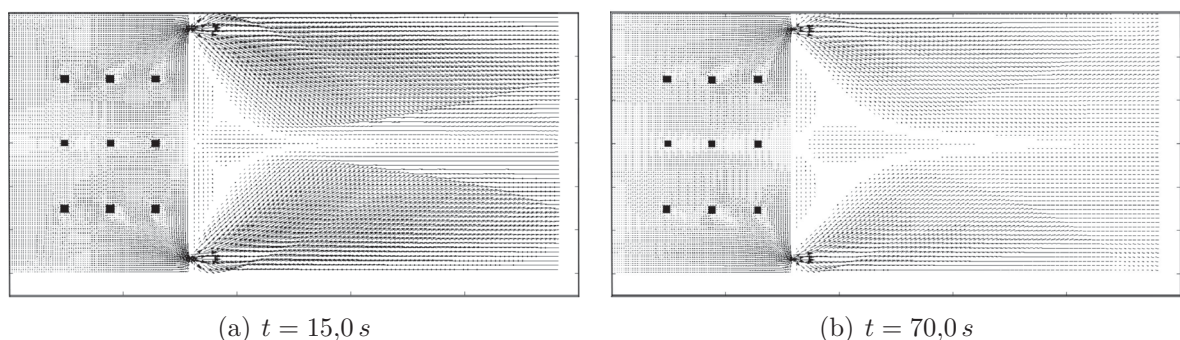
FIGURA 47 – Campo de velocidade nos primeiros 4,0 segundos



FONTE: A autora (2019).

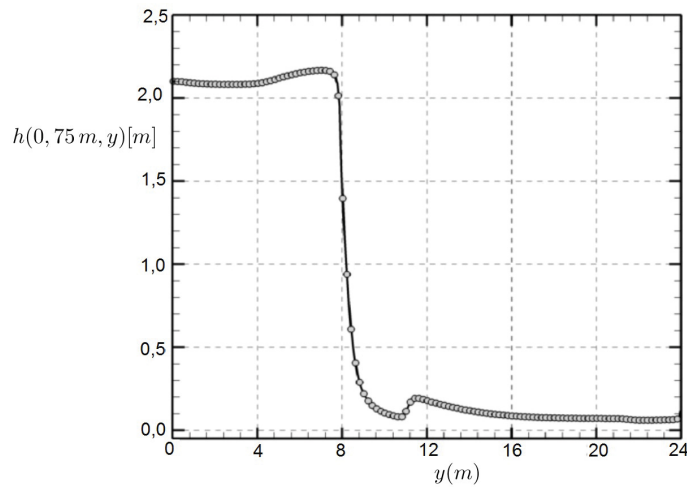
Para $t = 15,0 s$ observa-se que ainda não há fluxo na região estreita à frente da parede norte do reservatório, nas seções onde não há aberturas. Por sua vez, nas regiões à frente das aberturas, o fluxo é mais acentuado e o campo de velocidade assume um perfil hiperbólico no domínio externo, como na FIGURA 48(a). Por outro lado, como mostra a FIGURA 48(b), a magnitude do vetor velocidade torna-se menos acentuada e mais uniforme, após 70,0 s de simulação do escoamento.

FIGURA 48 – Campo de velocidade após o início do despejo



FONTE: A autora (2019).

O perfil transversal do nível da água pode ser analisado em um determinado instante de tempo. Na FIGURA 49, o perfil $h(0,75, y)$ é representado para $t = 10 s$. Uma inclinação significativa no nível da água é observada na faixa de $8 m < y < 8,15 m$, o que era esperado devido à condição inicial descontínua imposta.

FIGURA 49 – Perfil do nível de água em uma linha de amostra em $x = 0,75\text{ m}$ para $t = 10,0\text{ s}$ 

FONTE: A autora (2019).

O código implementado foi utilizado para análises como: variação de volume no reservatório em função do tempo, o comportamento do escoamento ao redor dos pilares e na vizinhança das paredes. Em todas essas análises, os resultados obtidos são satisfatórios e consistentes com a física do problema.

5.3 Simulação numérica da dispersão de poluente em mistura de massa específica variável

O estudo de caso apresentado nesta seção foi desenvolvido para análise temporal da dispersão de substâncias diversas em escoamentos que ocorrem em reservatórios de geometria retangular sobre superfícies de fundo com atrito e declividade e sobre áreas alagadas.

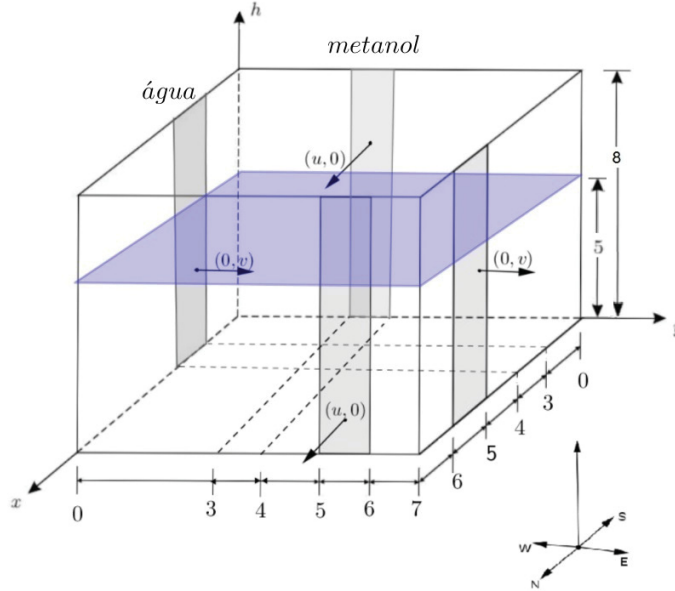
No estudo de caso apresentado, simula-se o escoamento bidimensional transiente juntamente com o processo de transporte de uma mistura em um reservatório, utilizando a solução numérica obtida para o modelo acoplado (hidrodinâmico e de transporte) descrito no Capítulo 4. As saídas e entradas de substâncias foram impostas nas condições de contorno do modelo, considerando aberturas em trechos das paredes do reservatório que causam gradientes de escoamento e o conseqüente transporte das substâncias na mistura.

5.3.1 Descrição do modelo

Considera-se um reservatório de base retangular $7\text{ m} \times 7\text{ m}$ e altura de 8 m , com paredes impermeáveis e rígidas, sem declividade no fundo e sem atrito, com nível da água inicial no reservatório igual a 5 m em todos os pontos do domínio. Para simulação do escoamento no reservatório, considera-se a abertura abrupta de comportas nas paredes

norte e leste, que causam a descarga da mistura para fora do reservatório. Além dessas comportas de saída, considera-se também a entrada de água (substância *A*) por uma abertura na parede oeste e a injeção permanente de um jato de metanol (substância *B*) em um trecho da parede sul. A Figura 50 representa o caso em análise.

FIGURA 50 – Reservatório de base retangular com entradas e saídas.



FONTE: A autora (2019).

Neste estudo de caso, considera-se as seguintes características simplificadoras:

- (i) a base do reservatório é retangular com largura constante;
- (ii) as fronteiras são rígidas e impermeáveis;
- (iii) não há ingresso lateral de água no reservatório;
- (iv) a água armazenada no reservatório possui densidade uniforme sem estratificação térmica ou de massa.

5.3.2 Equações governantes

Adotando as características simplificadoras descritas na Seção 5.3.1, o sistema de equações que governam o modelo hidrodinâmico e de transporte é descrito por:

$$(\rho h)_t + (\rho u h)_x + (\rho v h)_y = 0, \quad (5.28)$$

$$(\rho u h)_t + \left(\rho u^2 h + \frac{1}{2} g \rho h^2 \right)_x + (\rho u v h)_y = \rho g h (S_{0x} - S_{fx}), \quad (5.29)$$

$$(\rho v h)_t + \rho u v h)_x + \left(\rho v^2 h + \frac{1}{2} \rho g h^2 \right)_y = \rho g h (S_{0y} - S_{fy}), \quad (5.30)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(c_B u) + \frac{\partial}{\partial y}(c_B v) = \frac{\partial}{\partial x} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(\Gamma_{AB} \frac{\partial c_B}{\partial y} \right), \quad (5.31)$$

$$\rho = \rho_A \left(1 - \frac{c_B}{\rho_B} + \frac{c_B}{\rho_A} \right), \quad (5.32)$$

$$x_B = \frac{c_B}{\rho}, \quad (5.33)$$

$$x_A = 1 - x_B, \quad (5.34)$$

$$c_A = \rho \cdot x_A, \quad (5.35)$$

sendo: x e y as componentes cartesianas nas direções longitudinal e transversal, respectivamente; $h(m)$ a profundidade da mistura ou nível da superfície livre; $u(m/s)$ a velocidade do fluxo na direção x ; $v(m/s)$ a velocidade do fluxo na direção y ; x_A, x_B frações mássicas da substâncias A, B respectivamente na mistura; c_A, c_B as concentrações mássicas da substâncias A, B respectivamente na mistura; $\Gamma_{AB} = 8,4 \cdot 10^{-10} m^2/s$ o coeficiente de dispersão do soluto B (metanol) no solvente A (água)¹; $\rho_A = 1000 kg/m^3, \rho_B = 792 kg/m^3$ as densidades termodinâmicas constantes das substâncias A, B respectivamente², $\rho(kg/m^3)$ a massa específica variável do fluido composto pela mistura das substâncias A, B ; $g(m/s^2)$ a aceleração da gravidade; $t(s)$ o tempo, z_0 a cota da superfície de fundo do reservatório, e S_{0x}, S_{0y} os declives desta superfície de fundo definidos como:

$$S_{0x} = -\frac{\partial z_0}{\partial x}, \quad S_{0y} = -\frac{\partial z_0}{\partial y}, \quad (5.36)$$

enquanto os declives de resistência ao escoamento (perda de energia), nas direções x e y , respectivamente, são dados por:

$$S_{fx} = \frac{\eta^2 u \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad S_{fy} = \frac{\eta^2 v \sqrt{u^2 + v^2}}{h^{\frac{4}{3}}}, \quad (5.37)$$

onde $\eta(m/s^{\frac{1}{3}})$ é o coeficiente de rugosidade de Manning, que quantifica o atrito do fluxo com a superfície de fundo.

5.3.3 Condições Iniciais

Considera-se inicialmente que o nível da água é igual a $5 m$ em todos os pontos do domínio e, a água armazenada no reservatório encontra-se em repouso e sem mistura, ou seja, não há nenhuma abertura nas paredes que causem gradientes de escoamento e substância alguma encontra-se misturada à água. Portanto, o nível da água é $h_0 = 5 m$, as componentes da velocidade são nulas ($u_0 = v_0 = 0$) e, não há mistura de metanol com a água. Deste modo, $(c_A)_0 = 1000(kg/m^3), (c_B)_0 = 0(kg/m^3)$ e $\rho_0 = 1000(kg/m^3)$.

¹ Valor descrito em Cussler (2009).

² Os valores adotados para ρ_A e ρ_B estão descritos em Cremasco (1962).

5.3.4 Condições de Contorno

Considera-se que não há variação do nível h da mistura no contorno do domínio. Ou seja, adota-se a Condição de *Neumann* nula para o nível da mistura nas paredes do reservatório, fazendo uso da equação (5.4).

Para as componentes (u,v) da velocidade do escoamento, como as paredes são impermeáveis e há abertura somente em alguns trechos, têm-se duas situações:

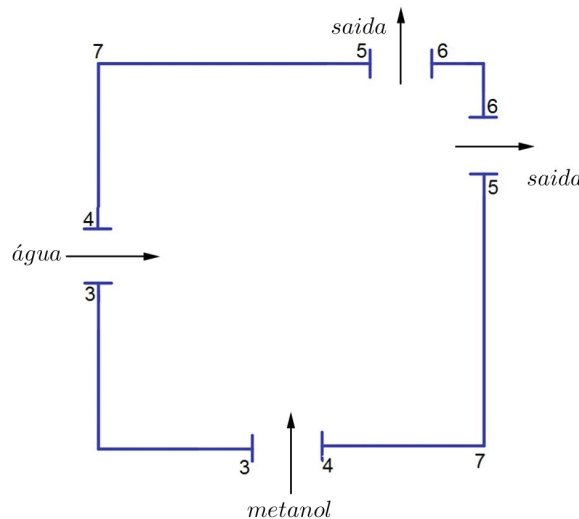
(i) Nos trechos onde não há abertura, não haverá entrada ou saída de água (ou metanol).

Adota-se nestes contornos, a Condição de *Dirichlet* conforme a equação (5.5). E as componentes da velocidade tangencial são calculadas considerando derivada nula para cada uma, ou seja, uma Condição de *Neumann* nula para cada componente tangencial, conforme equação (5.6).

(ii) Nos trechos onde há abertura, a velocidade de saída/descarga de água é dependente do nível da água no reservatório e a velocidade de entrada/abastecimento de água e de metanol são constantes.

Os trechos de entradas e saídas do reservatório, nos primeiros 60 s estão indicados na FIGURA 51.

FIGURA 51 – Fluxo de entradas e saídas nos contornos do reservatório.



FONTE: A autora (2019).

Hipoteticamente, as velocidades de entrada são dadas por:

$$u(0,y,t) = 1,0 \text{ m/s}, 0 < t < 60, 3 \leq y \leq 4, \quad (\text{água}) \quad (5.38)$$

$$v(x,0,t) = 1,2 \text{ m/s}, 0 < t < 60, 3 \leq x \leq 4. \quad (\text{metanol}) \quad (5.39)$$

Por simplicidade, as velocidades de saída são iguais e empiricamente proporcionais a h^α , ou seja,

$$u = v = C_d h^\alpha \quad (5.40)$$

onde C_d é um coeficiente arbitrário.

Neste caso, as velocidades de saída são hipoteticamente dadas por:

$$u(7,y,t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(7,y,t), \quad v(7,y,t) = 0, \quad t \neq 0, \quad 5 \leq y \leq 6, \quad (5.41)$$

$$u(x,7,t) = 0, \quad v(x,7,t) = C_d h^{\frac{1}{2}}(x,7,t), \quad t \neq 0, \quad 5 \leq x \leq 6, \quad (5.42)$$

onde, $C_d = 0,1(2g)^{\frac{1}{2}}$ é um coeficiente arbitrário, $g(m/s^2)$ é a constante gravitacional e $h(m)$ é o nível da água.

Para a concentração mássica do etanol c_B nos contornos, utiliza-se também Condição de *Neumann* nula nos trechos onde não há aberturas.

Na abertura da parede sul é injetado (durante os primeiros 60 s) etanol puro na mistura, deste modo, tem-se:

$$c_B(x,0,t) = 789, \quad 0 \leq t \leq 60, \quad 3 \leq x \leq 4, \quad (5.43)$$

$$c_A(x,0,t) = 0, \quad 3 \leq x \leq 4. \quad (5.44)$$

Na abertura da parede oeste é injetada água pura na mistura, deste modo, tem-se:

$$c_A(0,y,t) = 1000, \quad 3 \leq y \leq 4, \quad (5.45)$$

$$c_B(0,y,t) = 0, \quad 3 \leq y \leq 4. \quad (5.46)$$

Nas saídas, considera-se hipoteticamente que não há variação da concentração mássica c_B . Mais especificamente, faz-se:

$$\frac{\partial c_B}{\partial y}(x,7,t) = 0, \quad 5 \leq x \leq 6 \quad (5.47)$$

$$\frac{\partial c_B}{\partial x}(7,y,t) = 0, \quad 5 \leq y \leq 6. \quad (5.48)$$

Estas condições de contorno podem ser alteradas a partir de um determinado instante. As TABELAS 8, 9, 10 e 11 indicam as variações temporais nas condições de contorno nos trechos de aberturas de entrada (sul, oeste), saída (leste) e entrada/saída (norte).

TABELA 8 – CONDIÇÕES DO CONTORNO SUL ($y = 0$).

tempo	trecho de abertura	u	v	c_A	c_B
$0 < t \leq 60$	$3 \leq x \leq 4$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,0,t) = 1,2 \text{ m/s}$	$c_A = 0 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 792 \text{ kg/m}^3$
$60 < t \leq 180$	fechado	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,0,t) = 0,0 \text{ m/s}$	$\frac{\partial c_A}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial c_B}{\partial y} = 0$
$180 < t \leq 360$	$3 \leq x \leq 4$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,0,t) = 1,2 \text{ m/s}$	$c_A = 1000 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 0 \text{ kg/m}^3$
$360 < t \leq 1440$	$3 \leq x \leq 4$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,y,t) = 2,0 \text{ m/s}$	$c_A = 0 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 792 \text{ kg/m}^3$
$1440 < t \leq 1800$	$3 \leq x \leq 4$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,0,t) = 1,2 \text{ m/s}$	$c_A = 1000 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 0 \text{ kg/m}^3$

FONTE: A autora (2019).

Na TABELA 8 observa-se que é injetado metanol nos primeiros 60 s, em seguida essa abertura é fechado por 120 s e passa-se a injetar água limpa por mais 180 s para limpeza do reservatório. A partir de 360 s da simulação injeta-se novamente metanol por 1080 s e faz-se a limpeza com água por 360 s. A injeção de água pura também é feita no contorno oeste, conforme indica a TABELA 9.

TABELA 9 – CONDIÇÕES DO CONTORNO OESTE ($x = 0$).

tempo	trecho de abertura	u	v	c_A	c_B
$0 < t \leq 60$	$3 \leq y \leq 4$	$u(0,y,t) = 1,0 \text{ m/s}$	$\frac{\partial v}{\partial x} = 0$	$c_A = 1000 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 0 \text{ kg/m}^3$
$60 < t \leq 360$	$3 \leq y \leq 4$	$u(0,y,t) = 2,0 \text{ m/s}$	$\frac{\partial v}{\partial x} = 0$	$c_A = 1000 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 0 \text{ kg/m}^3$
$360 < t \leq 1440$	fechado	$u(0,y,t) = 0,0 \text{ m/s}$	$\frac{\partial v}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial c_A}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial c_B}{\partial x} = 0$
$1440 < t \leq 1800$	$3 \leq y \leq 4$	$u(0,y,t) = 2,0 \text{ m/s}$	$\frac{\partial v}{\partial x} = 0$	$c_A = 1000 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 0 \text{ kg/m}^3$

FONTE: A autora (2019).

A TABELA 9 indica a injeção de água pura nos primeiros 360 s, em seguida essa abertura é fechada por 1080 s. A partir de 1440 s da simulação inicia-se a limpeza do reservatório com água por 360 s. Para intensificar esta limpeza do reservatório também há

injeção de água pura no contorno norte, conforme TABELA 10.

TABELA 10 – CONDIÇÕES DO CONTORNO NORTE ($y = 7$).

tempo	trecho de abertura	u	v	c_A	c_B
$0 < t \leq 1440$	$5 \leq x \leq 6$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,7,t) = \sqrt{0,2gh} \text{ m/s}$	$\frac{\partial c_A}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial c_B}{\partial y} = 0$
$1440 < t \leq 1800$	$3 \leq x \leq 4$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,7,t) = -1,2 \text{ m/s}$	$c_A = 1000 \text{ kg/m}^3$	$c_B = 0 \text{ kg/m}^3$
$1440 < t \leq 1800$	$5 \leq x \leq 6$	$\frac{\partial u}{\partial y} = 0$	$v(x,7,t) = \sqrt{0,2gh} \text{ m/s}$	$\frac{\partial c_A}{\partial y} = 0$	$\frac{\partial c_B}{\partial y} = 0$

FONTE: A autora (2019).

Observa-se na TABELA 10 que a velocidade de saída da mistura é dependente do nível (h) da mistura e a partir dos 1440 s de simulação é aberto mais um trecho do contorno ($3 \leq x \leq 4$) para injeção de água, o que torna o processo de limpeza do reservatório mais rápido. As condições do contorno leste destacam-se na TABELA 11.

TABELA 11 – CONDIÇÕES DO CONTORNO LESTE ($x = 7$).

tempo	trecho de abertura	u	v	c_A	c_B
$0 < t \leq 1800 \text{ s}$	$5 \leq y \leq 6$	$u(7,y,t) = \sqrt{0,2gh} \text{ m/s}$	$\frac{\partial v}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial c_A}{\partial x} = 0$	$\frac{\partial c_B}{\partial x} = 0$

FONTE: A autora (2019).

5.3.5 Implementação Numérica e Comparações

Para obtenção da solução numérica do modelo acoplado (hidrodinâmico e de transporte) representado pelas equações (5.28) - (5.35) faz-se uso do método dos volumes finitos (MVF) e dos esquemas de discretização apresentados no Capítulo 4.

A solução numérica foi implementada em Linguagem Fortran, de acordo com o algoritmo esboçado na Seção 4.5. Os parâmetros físicos e numéricos adotados para implementação da solução são mostrados na TABELA 12.

TABELA 12 – PARÂMETROS PARA SIMULAÇÃO DE DISPERSÃO DE METANOL EM ÁGUA.

ρ_A	ρ_B	Γ_{AB}	Δx	Δy	Δt	z_0	η	g
1000 kg/m^3	792 kg/m^3	$8,4 \times 10^{-10} \text{ m}^2/\text{s}$	$0,25 \text{ m}$	$0,25 \text{ m}$	10^{-3} s	$z = 0,0 \text{ m}$	$0 \text{ m/s}^{1/3}$	$9,81 \text{ m/s}^2$

FONTE: A autora (2019).

O pós-processamento do código implementado é utilizado para análise de eficiência e interpretação física do modelo.

Ao adotar as mesmas condições de contorno, podem ser feitas comparações quanto à estabilidade das soluções numéricas.

Para a solução numérica obtida utilizando um esquema de discretização temporal explícito, adota-se $\theta = 0$ com interpolação CDS ou UDS, na integração de equações (5.28) - (5.31), com espaçamentos espaciais $\Delta x, \Delta y$ e temporal Δt satisfazendo a condição de estabilidade prescrita na equação (4.104). Para o esquema de discretização temporal totalmente implícito, adota-se $\theta = 1$ e a interpolação espacial híbrida CDS/UDS.

As comparações de estabilidade das soluções estão listadas na TABELA 13, onde t_{max} é o tempo máximo de simulação permitido pelo código com a solução numérica adotada.

TABELA 13 – COMPARAÇÃO DO TEMPO MÁXIMO DE SIMULAÇÃO DAS SOLUÇÕES NUMÉRICAS.

θ	Interpolação	Δx	Δy	Δt	t_{max}
$\theta = 0$	CDS	0,05 m	0,05 m	10^{-4} s	1,0 s
$\theta = 0$	CDS/UDS	0,05 m	0,05 m	10^{-4} s	27,9 s
$\theta = 1$	CDS/UDS	0,125 m	0,125 m	10^{-3} s	> 1800,0 s

FONTE: A autora (2019).

Os dados ilustrados em TABELA 13 mostram a eficácia e a superioridade do esquema de discretização temporal implícita com interpolação espacial híbrida (CDS/UDS) na simulação numérica de modelos de dispersão de substância, regidos pelas equações de águas rasas acopladas às equações de transporte. Como no caso apresentado na Seção 5.1.2, ao adotar o esquema de discretização temporal totalmente implícito, mesmo adotando malhas mais grossas (temporal e espacial), não há instabilidade na solução, permitindo a simulação completa da injeção e limpeza do poluente, o que não foi possível utilizando o esquema explícito, pois neste caso a solução deixa de atender o critério de estabilidade em um curto espaço de tempo. Deste modo, como na Seção 5.1.2, não foram estabelecidas comparação de tempo de CPU, pois o tempo total de simulação para cada solução se difere expressivamente.

A comparação do tempo de CPU é apresentada na TABELA , onde $\Delta x, \Delta y$ são os espaçamentos espaciais; Δt é o passo de tempo; t_{CPU} é o tempo de CPU para simulação dos 1800 s descritos no modelo.

TABELA 14 – COMPARAÇÃO DO TEMPO DE CPU DA SIMULAÇÃO.

Δx	Δy	Δt	t_{CPU}
0,250 m	0,250 m	10^{-3} s	0 h 32 min 16s
0,125 m	0,125 m	10^{-3} s	2 h 31 min 36s

FONTE: A autora (2019).

A TABELA 14 evidencia o aumento no custo computacional quando adota-se malha mais refinada. Faz-se necessário determinar uma solução numérica cujo erro

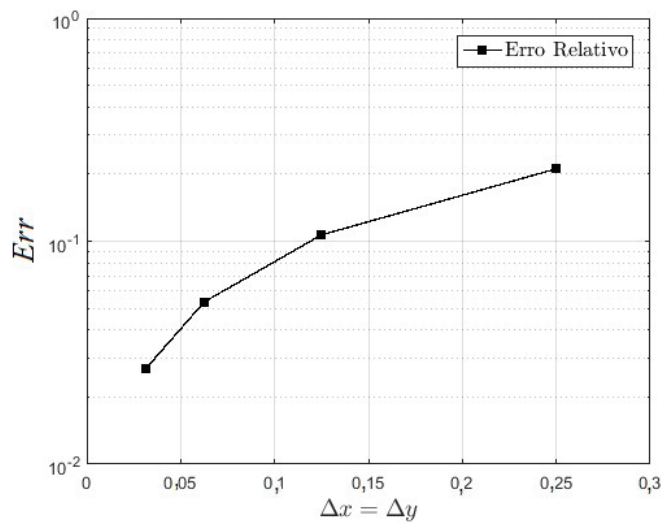
de aproximação seja tolerável, com o menor custo computacional possível. Com este intuito, estima-se o erro por extrapolação de Richardson, como nas Seções 5.1.2 e 5.2.2, adotando uma variável global $\rho_m(t)$, que indica a concentração mássica média da mistura no reservatório no instante de tempo t , de acordo com a equação 5.49 :

$$\rho_m(t) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{i,j} (\rho(i,j,t)), \quad (5.49)$$

onde $N_x N_y$ é o número total de volumes elementares da malha espacial, e $\rho(i,j,t)$ é a concentração mássica da mistura no centroide $P(i,j)$ no instante de tempo t .

Considerando t fixo e $\Delta x = \Delta y = \left(\frac{1}{2}\right)^i$, faz-se o cálculo de ρ_m nas malhas intermediárias, $(\rho_m)_i$, e na malha mais fina, $(\rho_m)_\infty$, que representa uma estimativa para a solução analítica. A FIGURA 52 mostra que quanto menor o comprimento e largura dos volumes elementares da malha, menor é o erro numérico no cálculo da concentração média da mistura ρ_m no reservatório.

FIGURA 52 – Convergência da solução



FONTE: A autora (2019).

A TABELA 15 também evidencia a convergência da solução numérica adotada.

TABELA 15 – CONVERGÊNCIA DA SOLUÇÃO NUMÉRICA PARA O MODELO ACOPLADO.

Δx	Δy	Erro	Erro Relativo
$2,5000 \times 10^{-1}$	$2,5000 \times 10^{-1}$	$1,8300 \times 10^2$	$2,1127 \times 10^{-1}$
$1,2500 \times 10^{-1}$	$1,2500 \times 10^{-1}$	$9,9000 \times 10^1$	$1,0677 \times 10^{-1}$
$6,2500 \times 10^{-2}$	$6,2500 \times 10^{-2}$	$5,1300 \times 10^1$	$5,3426 \times 10^{-2}$
$3,1250 \times 10^{-2}$	$3,1250 \times 10^{-2}$	$2,6100 \times 10^1$	$2,6706 \times 10^{-2}$

FONTE: A autora (2019).

Analisando as TABELAS 14 e 15 pode-se afirmar que mesmo adotando uma malha mais grossa, cujo tempo de CPU é muito menor, o erro relativo é pequeno. Portanto, havendo necessidade de rápida simulação, na tomada de decisões em casos de acidentes, pode-se adotar uma malha mais grossa e obter resultados mais rápidos com uma pequena margem de erro. E, não havendo urgência na obtenção dos dados, pode-se optar por uma malha mais refinada, com solução numérica mais precisa, com um maior custo computacional.

O código elaborado permite não somente a validação da solução numérica temporalmente implícita e espacialmente híbrida, mas também a verificação da fidelidade do modelo acoplado com o fenômeno de dispersão de substâncias na mistura contida no reservatório.

5.3.6 Resultados

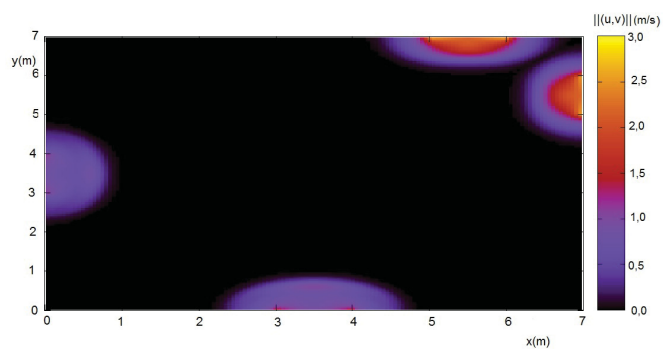
Nesta seção apresentam-se os resultados obtidos na implementação numérica do modelo hidrodinâmico e de transporte.

O modelo implementado nos fornece a variação temporal do nível da mistura, do campo de velocidades, da massa específica da mistura e as concentrações mássicas das substâncias, em cada ponto do domínio bidimensional.

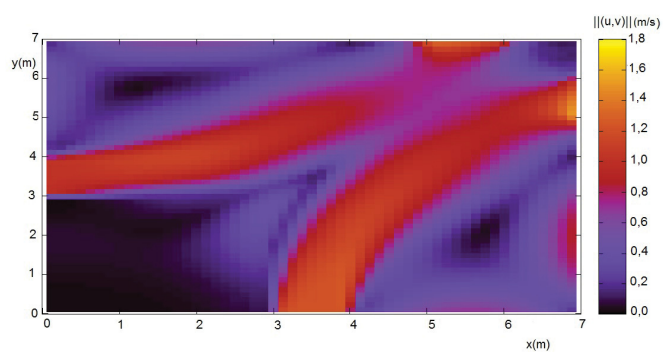
Nas FIGURAS 53 e 54 utilizou-se uma escala de cor para representar a norma do vetor velocidade em diferentes instantes de simulação do escoamento. Observa-se na FIGURA 53(a) que inicialmente a velocidade é praticamente nula em todo reservatório e, se intensifica, das entradas para as saídas, nos primeiros 60 s, conforme FIGURA 53 (b). Após o fechamento da abertura da parede sul, para $60 s < t \leq 180 s$, observa-se nas FIGURAS 53 (c) e 53(d), o aumento da intensidade do escoamento da entrada oeste para as saídas. Porém, tornando a abrir novamente o trecho da parede sul, em $180 s < t \leq 360 s$, registra-se na FIGURA 54(a) o crescimento da velocidade do escoamento nas entradas sul e oeste e, na região à frente da entrada sul, no sentido sul-norte. O fechamento da abertura oeste, para $360 s < t \leq 1440 s$, diminui a velocidade do escoamento no contorno oeste, o que pode ser observado na FIGURA 54(b). E nos instantes finais da simulação, para $1440 s < t \leq 1800 s$, a abertura simultânea dos trechos dos contornos norte, sul, leste e oeste alteram novamente a velocidade do escoamento, conforme FIGURAS 54(c) e 54(d).

O campo de velocidade do escoamento bidimensional modelado pode ser observado nas FIGURAS 55 e 56. Como esperado, nota-se que a velocidade é praticamente nula em todo o reservatório inicialmente, exceto nas entradas e saídas. Das FIGURAS 55 e 56 constata-se que o escoamento se propaga para o interior do canal, no sentido das entradas para as saídas, contornando as paredes e formando vórtices.

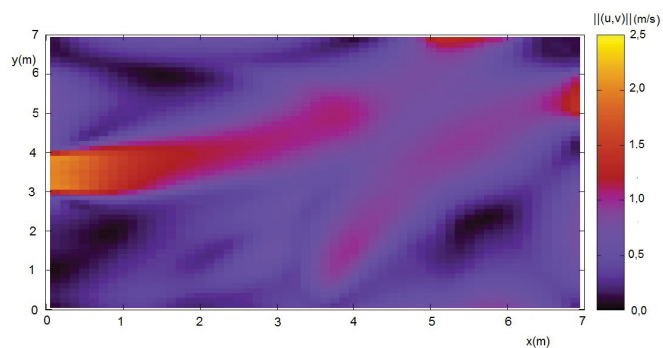
FIGURA 53 – Norma da Velocidade nos primeiros 180,0 s.



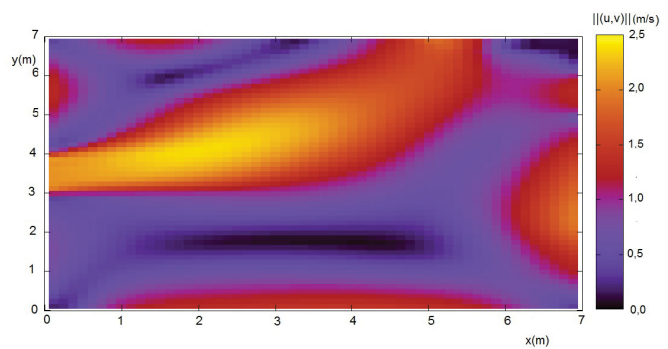
(a) $t = 0,1 s$



(b) $t = 60,0 s$



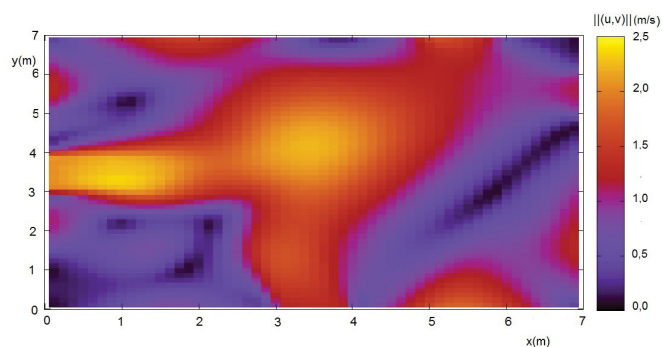
(c) $t = 61,0 s$



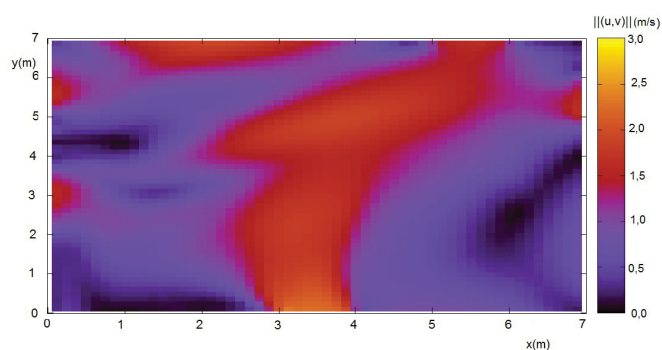
(d) $t = 180,0 s$

FONTE: A autora (2019).

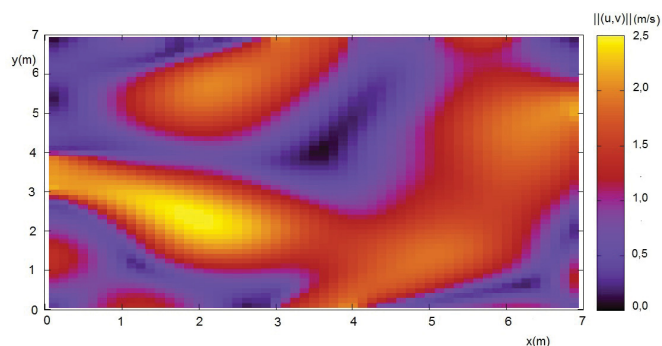
FIGURA 54 – Norma da Velocidade após 180 s.



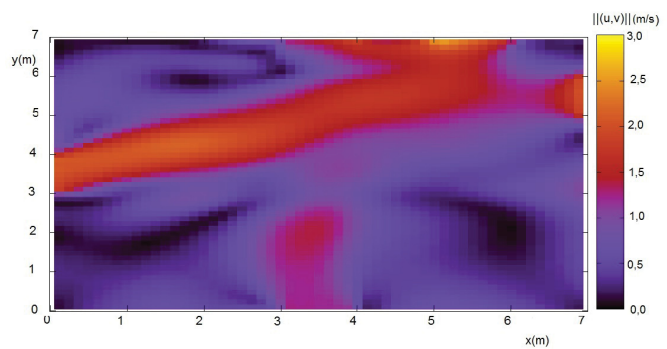
(a) $t = 200 s$



(b) $t = 361,0 s$



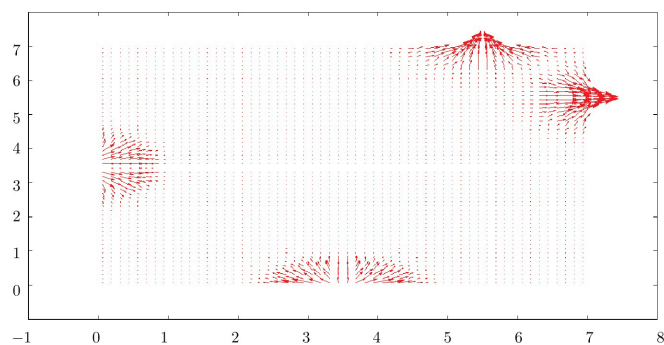
(c) $t = 1445,0 s$



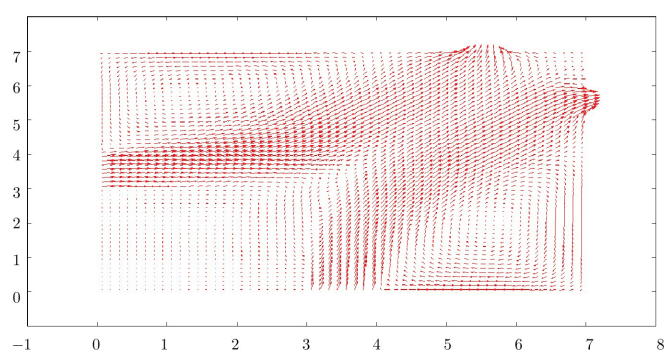
(d) $t = 1800,0 s$

FONTE: A autora (2019).

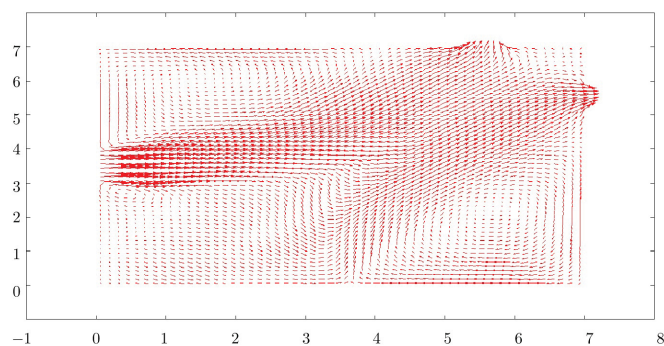
FIGURA 55 – Campo de Velocidade nos primeiros 180,0 s.



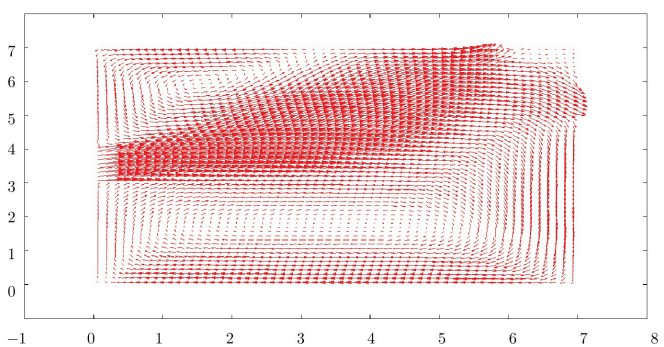
(a) $t = 0,1 s$



(b) $t = 60,0 s$



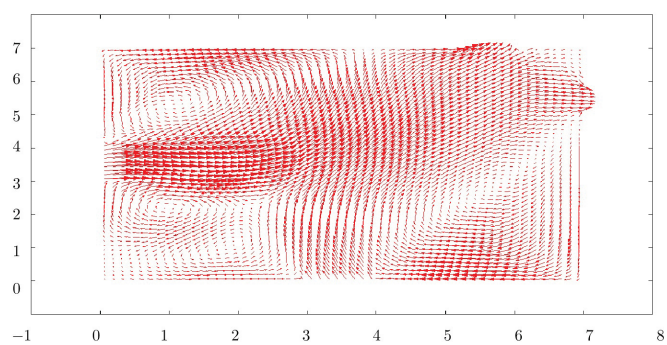
(c) $t = 61,0 s$



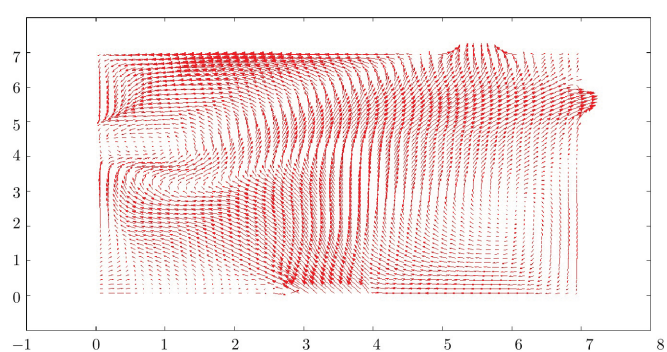
(d) $t = 180,0 s$

FONTE: A autora (2019).

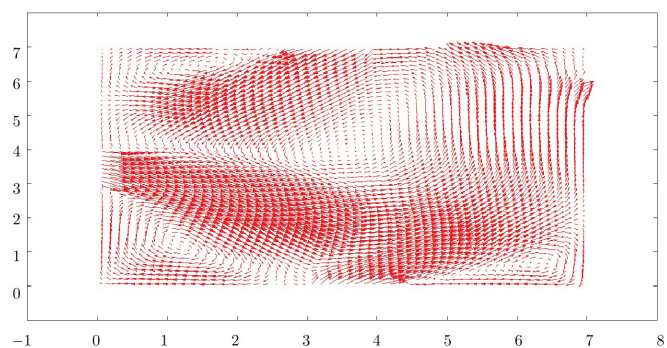
FIGURA 56 – Campo de Velocidade após 180,0 s.



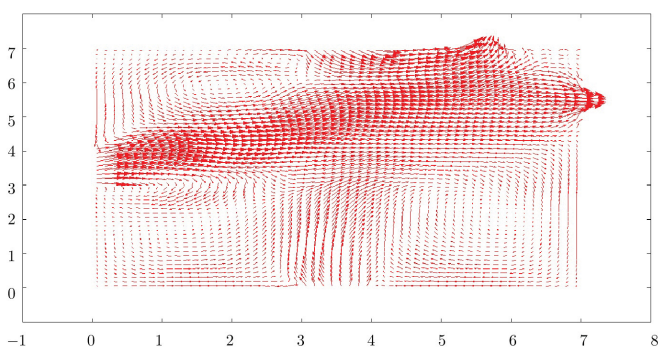
(a) $t = 200 s$



(b) $t = 361,0 s$



(c) $t = 1445,0 s$

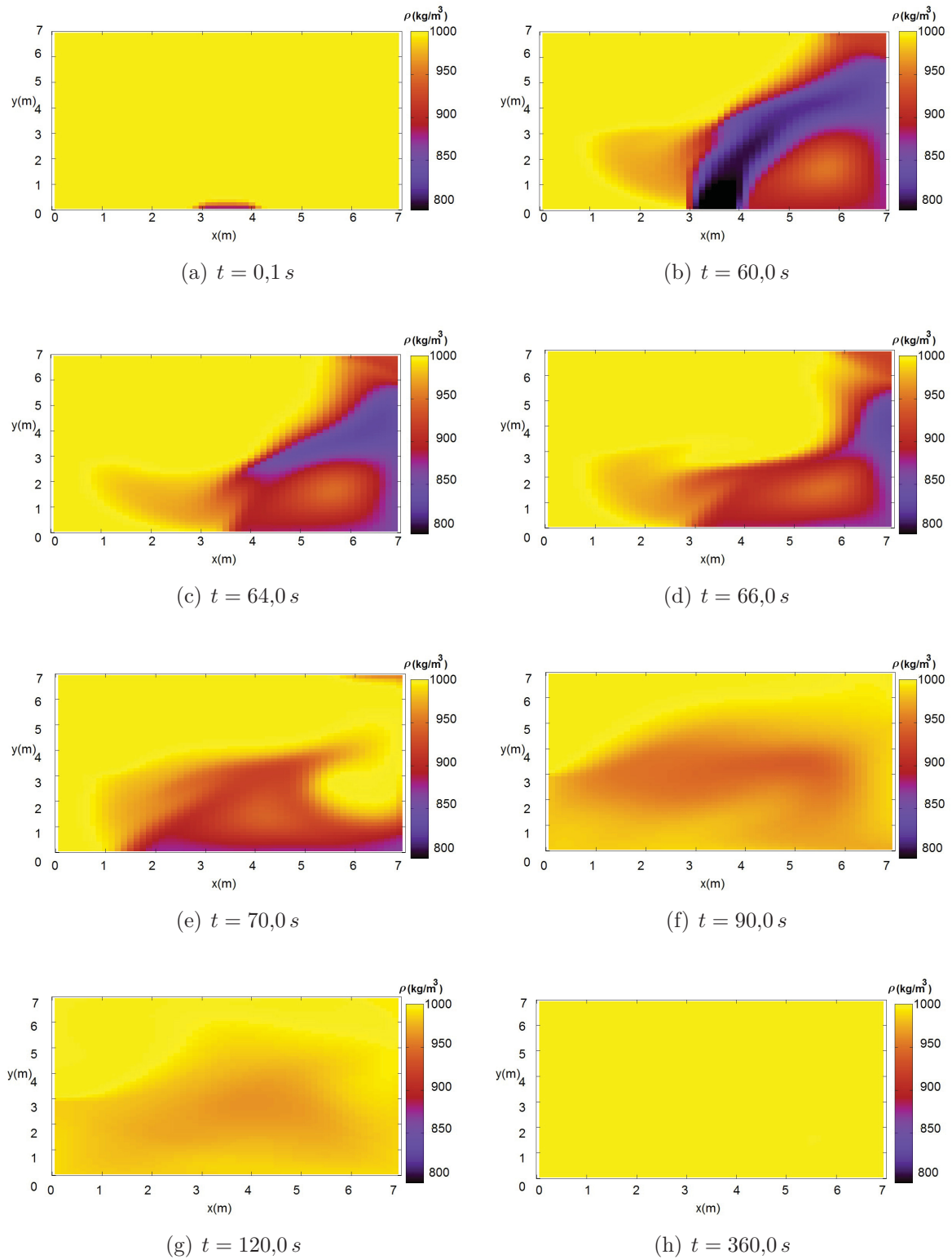


(d) $t = 1800,0 s$

FONTE: A autora (2019).

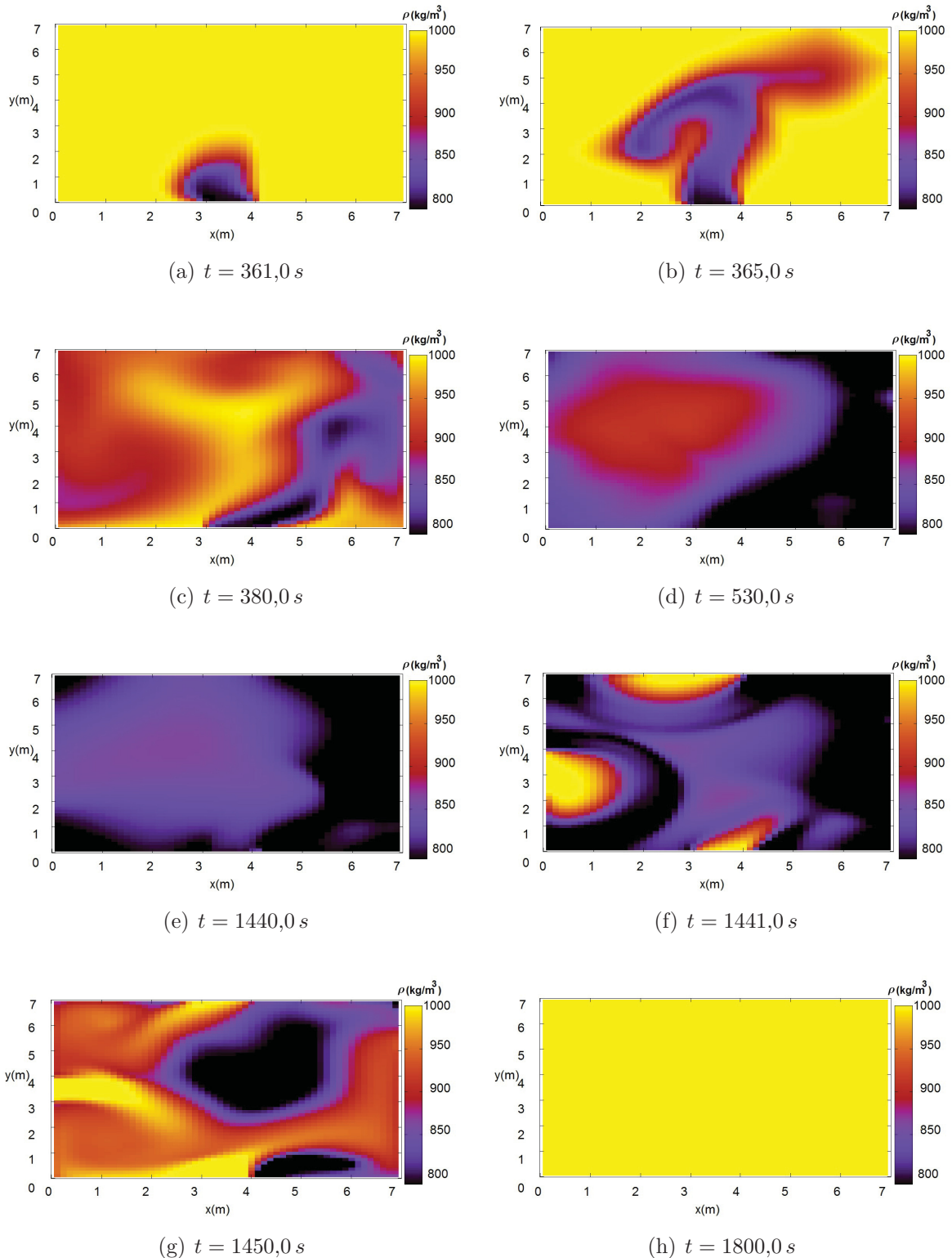
Para análise da variação da massa específica da mistura é utilizada as FIGURAS 57 e 58.

FIGURA 57 – Massa específica da mistura nos primeiros 360,0 s.



FONTE: A autora (2019).

FIGURA 58 – Massa específica da mistura após 360,0 s.



FONTE: A autora (2019).

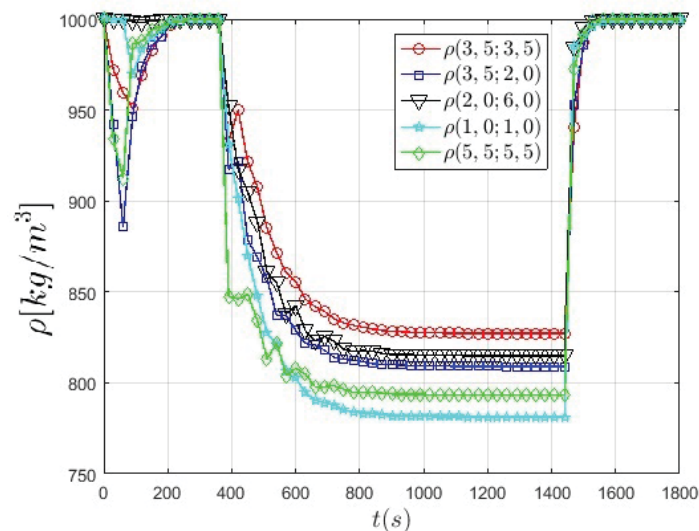
Pode-se observar nas FIGURAS 57(a) - (b) que inicialmente a concentração mássica em quase todo o reservatório é $\rho = 1000 \text{ kg/m}^3$, mas rapidamente essa concentração se torna menor, devido a entrada de metanol no reservatório. Porém, a partir de $t = 60 s$, após

o fechamento da entrada de metanol no reservatório, as FIGURAS 57(c)-(d)-(e)-(f)-(g) e (h) indicam que, o contaminante é eliminado da mistura, devido a entrada de água nas fronteiras sul e oeste.

A partir de $t = 360\text{ s}$ a mistura recebe novamente o contaminante e sofre variações em sua concentração mássica, conforme FIGURAS 58 (a)-(b)-(c)-(d) e (e). Porém, as FIGURAS 58 (f) -(g) e (h), mostram que, injetando água pura pelas aberturas norte, sul e oeste, a partir de $t = 1440\text{ s}$, limpa-se novamente o reservatório, pois a concentração mássica da mistura torna-se cada vez mais próxima da massa específica da água.

Para uma análise pontual da massa específica, são selecionados alguns pontos do reservatório, evidenciados na FIGURA 59.

FIGURA 59 – Variação temporal da massa específica da mistura



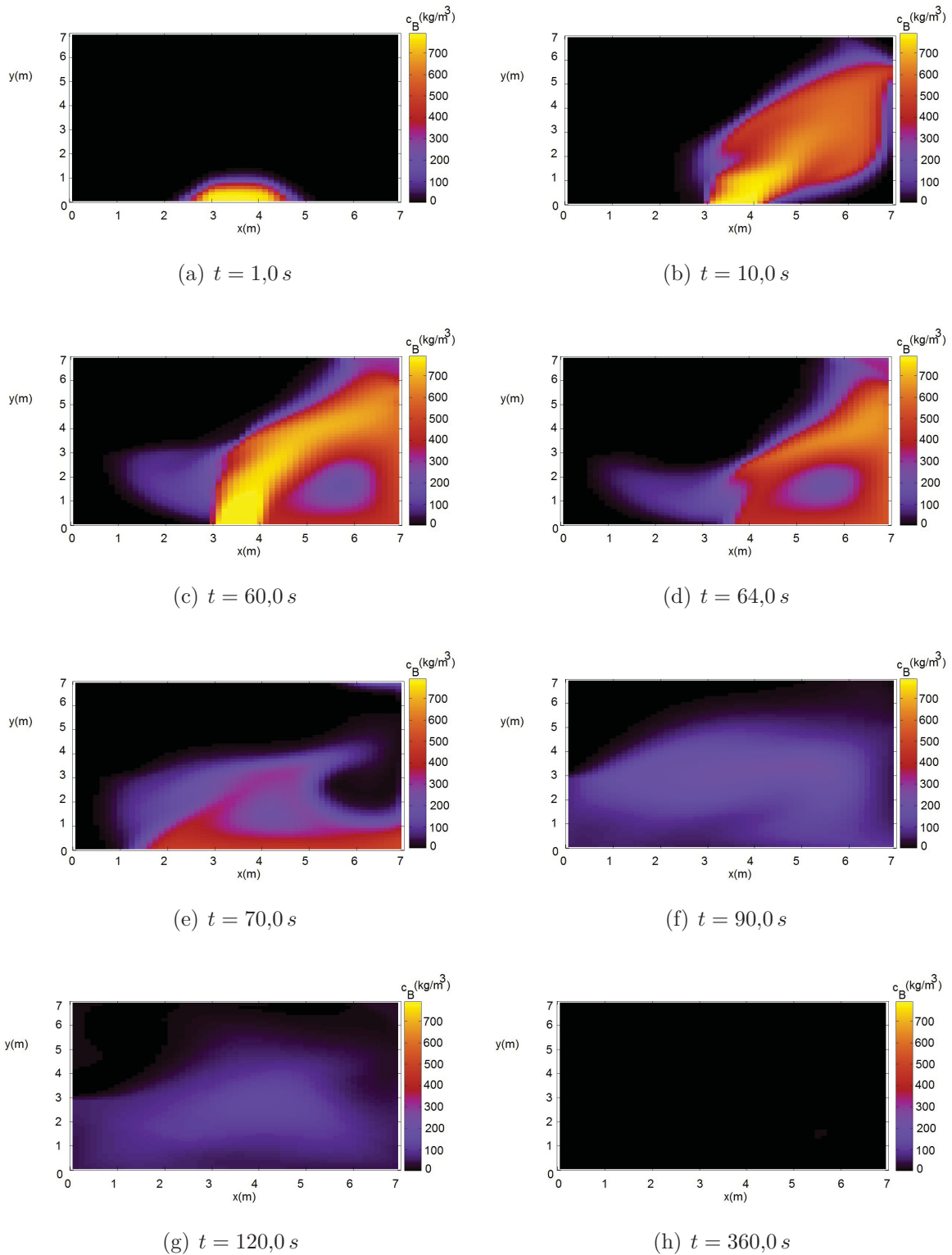
FONTE: A autora (2019).

Observa-se na FIGURA 59 que a massa específica da mistura inicialmente é 1000 kg/m^3 em todos os pontos selecionados, mas dentro dos primeiros $60,0\text{ s}$, ela decresce, devido a injeção de metanol na mistura, havendo variações nessa massa específica para pontos mais próximos ou mais distantes do ponto de lançamento de metanol. Cessando essa injeção de metanol no reservatório e continuando com a entrada de água pura, rapidamente a massa específica nos pontos especificados tende a 1000 kg/m^3 .

A FIGURA 60 representa a concentração mássica de metanol no reservatório nos primeiros $360,0\text{ s}$. As FIGURAS 60(a)-(c) evidenciam a dispersão do metanol na água do reservatório e as FIGURAS 60(d)-(h) mostram como a concentração mássica de metanol no reservatório tende a zero, quando é fechado o fluxo de metanol, mantendo somente a injeção de água limpa pelas fronteiras sul e oeste. No intervalo de tempo $360\text{ s} < t \leq 1440\text{ s}$ são fechadas as entradas de água e é injetado metanol novamente no reservatório pela fronteira sul, como indicado nas FIGURAS 61(a)-(e). A partir de $t = 1440\text{ s}$ é feita novamente

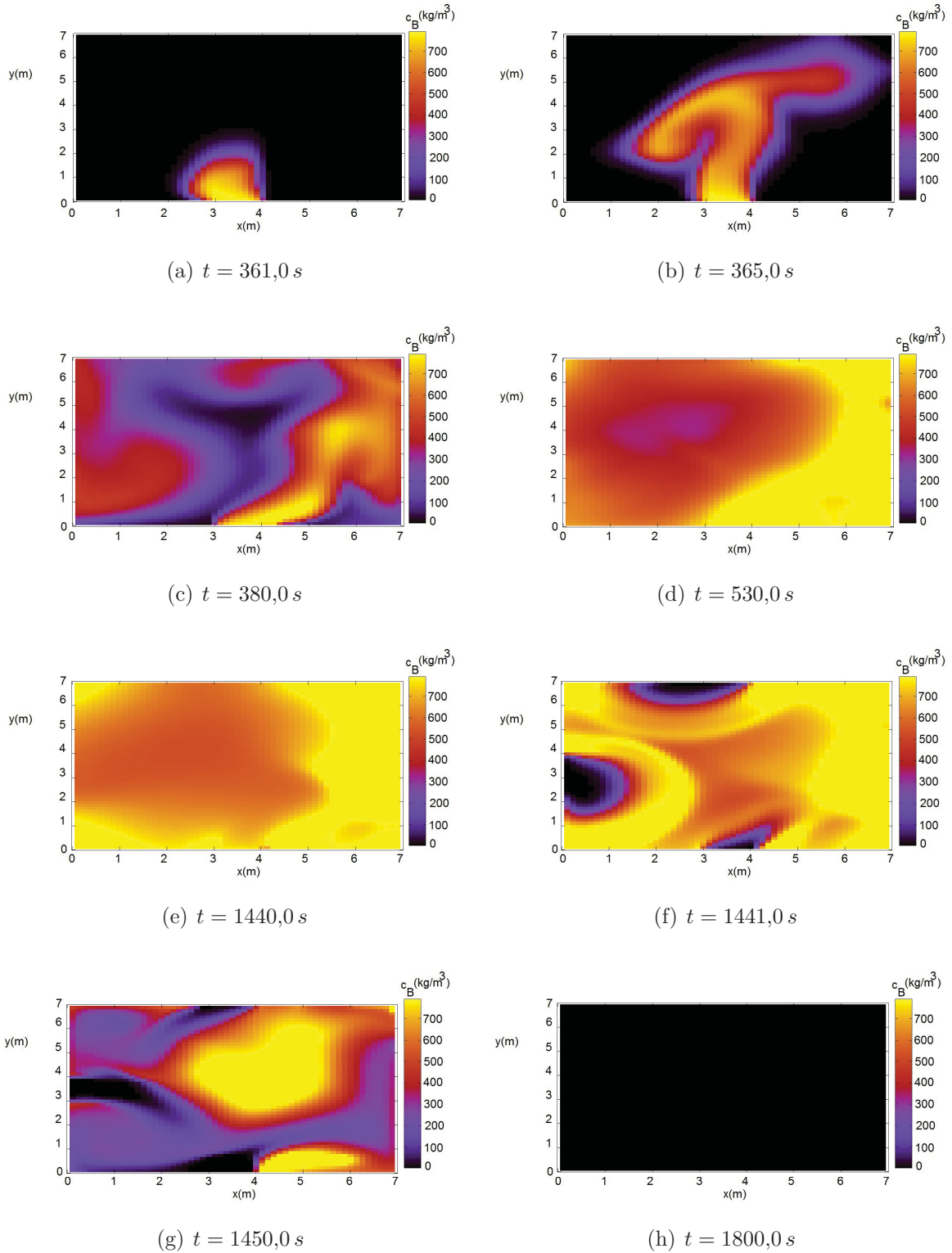
a limpeza do reservatório, injetando água pelas entradas sul, norte e leste, conforme FIGURAS 61(f)-(h). Deste modo, é perceptível que o modelo atende a interpretação física da dispersão de substâncias em escoamentos bidimensionais transientes.

FIGURA 60 – Concentração mássica de metanol nos primeiros 360,0 s.



FONTE: A autora (2019).

FIGURA 61 – Concentração mássica de metanol após 360,0 s.



FONTE: A autora (2019).

6 CONCLUSÃO

A proposta da tese em formular uma discretização numérica via MVF para o modelo acoplado bidimensional transiente, considerando os termos fontes de resistência ao escoamento e efeitos gravitacionais, na simulação da dispersão de poluentes em uma mistura de massa específica variável foi atendida, de modo ainda não apresentado na literatura revisada.

O código desenvolvido mostrou bom desempenho na obtenção da solução numérica, permitindo a análise temporal e espacial das variáveis envolvidas e a análise do erro de aproximação, com baixo custo computacional.

A validação e verificação da solução numérica foi testada em diferentes casos. Em todos estes, o modelo implementado se mostrou robusto.

O modelo hidrodinâmico apresentado nesta tese simula eficientemente o escoamento bidimensional em reservatórios, permitindo a previsão do tempo de esvaziamento e controle da descarga em reservatórios de contenção fluvial. A incorporação de condições de contorno adequadas, como velocidades de saídas dependentes do nível no reservatório, se mostraram essenciais para a fidelidade ao fenômeno físico modelado.

Para geometria com contornos internos, o código se mostrou robusto, evidenciando o contorno do fluxo em torno das fronteiras internas. Do mesmo modo, inserindo os termos fontes para simular modelos com declives sobre superfícies com resistência ao escoamento, o modelo se mostrou satisfatório.

Na simulação do escoamento causado por abertura de comportas, os resultados estão em boa concordância com os dados da literatura, o que reflete a habilidade da abordagem numérica proposta em lidar e capturar o comportamento físico de onda abrupta. É importante enfatizar que, em Fennema e Chaudhry (1990) artifícios numéricos foram usados como uma viscosidade artificial para lidar com as oscilações da superfície livre, o que torna os resultados de Fennema e Chaudhry (1990) mais difusivos e quase sem flutuações locais no nível da superfície. Por outro lado, na solução numérica obtida pelo esquema implícito e híbrido proposto nesta tese, nenhuma abordagem de suavização foi empregada para lidar com uma possível instabilidade numérica. O esquema totalmente implícito de 1ª ordem proposto se mostrou capaz de capturar o comportamento físico e os gradientes sem etapas de tempo proibitivas. A formulação espacial híbrida UDS/CDS foi capaz de lidar com mudanças abruptas nos campos de variáveis sem instabilidades ou oscilações não físicas. Como apontado em Fennema e Chaudhry (1990), dependendo do esquema de discretização adotado, as oscilações numéricas puras podem não ser amortecidas com o tempo e, em vez disso, elas podem ser amplificadas com gradientes rígidos, o que faz com que o sistema divirja. Porém, usando o esquema apresentado, a solução se mantém suave

com resíduos muito baixo inferiores a tolerância máxima imposta. O mesmo desempenho foi obtido na simulação de escoamento sobre leitos secos, o que é de extrema importância na análise dos impactos de escoamentos sobre regiões alagadas.

O código para simulação de dispersão de poluentes em mistura, foi implementado com *backup* de dados, de modo que após a simulação em um intervalo de tempo, pode-se simular efeitos futuros utilizando os dados já simulados e impondo novas condições de contorno, como fechamento/abertura de entradas, para simulação de interrupção de injeção de poluentes ou a injeção de novas substâncias na mistura. Deste modo, tornou-se possível analisar o tempo necessário para que a mistura contaminada voltasse a ser constituída somente de água pura, o que é essencial na simulação de fenômenos de limpeza de rejeitos e controle na dispersão de poluentes.

A solução numérica obtida utilizando o esquema de discretização temporal totalmente implícita e a interpolação espacial CDS/UDS mostrou-se superior as demais em relação ao tempo máximo de simulação de vazão com solução estável.

A formulação numérica proposta tem a vantagem de ser de fácil codificação em comparação com soluções numéricas disponíveis na literatura. Além disso, o apelo físico da conservação do fluxo, que é uma característica do MVF, torna o método escolhido uma excelente opção. A forma conservativa das equações de águas rasas facilitou a utilização do MVF, obtendo boa precisão física, com implementação simples. A convergência do método iterativo de Gauss-Seidel, mesmo impondo máximo residual muito pequeno, é obtida em poucas iterações. Mesmo para grandes intervalos de tempo, não há crescimento no valor residual, atingindo a tolerância imposta em poucas iterações, o que também garante o baixo custo computacional.

Outros estudos de caso podem ser investigados alterando a superfície de fundo, as condições iniciais e as condições de contorno. Para lidar com geometrias não retangulares, pode-se utilizar coordenadas cilíndricas ou esféricas, pois a discretização pelo MVF independente da malha adotada. Embora, na maioria dos casos de engenharia hidráulica, haja um número reduzido de informações, portanto domínios descritos por malhas retangulares facilitam a implementação e se mostram suficientes na previsão das variáveis envolvidas.

A solução numérica obtida pode ser utilizada para simular fluxos sobre topografias reais, pois o código foi implementado para a leitura de uma superfície de fundo qualquer. Para estudos futuros, sugere-se à aplicação do modelo formulado em casos reais simulados na literatura, para comparação de dados. Sugere-se ainda, um estudo comparativo de resultados e de tempo de CPU em simulações utilizando o esquema híbrido proposto e simulações por softwares comerciais de dinâmica dos fluidos.

REFERÊNCIAS

- ABREU JR, V. *Simulação Numérica da Ruptura de Barragens*. 2015. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.
- AUDUSSE, E.; BRISTEAU, M. O. Finite volume solver for a multilayer saint venant system. *International Journal of applied mathematics and computer science*, v. 17, n. 3, p. 311–320, 2007. Nenhuma citação no texto.
- BEGNUDELLI, L.; SANDERS, B. F. Conservative wetting and drying methodology for quadrilateral grid finite volume models. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 133, n. 3, p. 312–322, 2007. Nenhuma citação no texto.
- BELLOS, C. V.; SOULIS, J. V.; SAKKAS, J. G. Computation of two dimensional dam break induced flows. *Advances in Water Resources*, v. 14, n. 1, p. 31–41, 1991. Nenhuma citação no texto.
- BENKHALDOUN, F.; ELMAHI, I.; SEAID, M. Well-balanced finite volume schemes for pollutant transport on unstructured meshes. *Journal of Computational Physics*, v. 226, p. 180–203, 2007. Nenhuma citação no texto.
- BI, S.; ZHOU, J.; LIU, Y.; SONG, L. A finite volume method for modeling shallow flows with wet/dry fronts on adaptive cartesian grids. *Mathematical Problems in Engineering - Hindawi Publishing Corporation*, v. 2014, Article ID 209562, p. 21 pages, 2014. Nenhuma citação no texto.
- BLAZEK, J. *Computational fluid dynamics: principles and applications*. 1nd edition. ed. [S.l.]: Elsevier Science Ltd, Oxford, 2001. Nenhuma citação no texto.
- BLOTTNER, F. G. Accurate navier-stokes results for the hypersonic flow over a spherical nosetip. *Journal of Spacecraft and Rockets*, v. 27, n. 2, p. 113–122, 1990. Nenhuma citação no texto.
- BUDINSKI, L. Solute transport in shallow water flows using the coupled curvilinear lattice boltzmann method. *Modelling and Simulation in Engineering*, v. 573, p. 557–567, 2019. Nenhuma citação no texto.
- CEBECI, T.; SHAO, J.; LAURENDEAU, E. *Computational Fluid Dynamics for Engineers*. 1nd edition. ed. [S.l.]: Springer, New York, 2005. Nenhuma citação no texto.
- CHAABELASRI, E. M.; AMAHMOUJ, A.; JEYAR, M.; BORTHWICK, A. G. L.; SALHI, N.; ELMAHI, I. Numerical survey of contaminant transport and self-cleansing of water in nador lagoon, morocco. *Modelling and Simulation in Engineering*, v. 2014, p. 1–8, 2014. Nenhuma citação no texto.
- CHAPRA, S. C.; CANALE, R. P. *Introduction to Computing for Engineers*. 2nd edition. ed. New York: McGraw - Hill, 1994. Nenhuma citação no texto.
- CHAUDHRY, M. H. *Open Channel Flow*. Columbia: Springer Science, 2008. Nenhuma citação no texto.

- CHERTOCK, A.; KARSHDAN, E.; KURGANOV, A. Propagation of diffusing pollutant by a hybrid eulerian - lagrangian method. *Hyperbolic Problems: Theory, Numerics, Applications*, Lyon 2006, p. 371–380, 2008. Nenhuma citação no texto.
- COSTA, C. T.; CASTRO, M. A. H. Uma metodologia numérico analítica aplicada a problemas transparentes de transporte de contaminantes. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 12, n. 4, p. 183–197, 2007. Nenhuma citação no texto.
- CREMASCO, M. A. *Fundamentos de transferência de massa*. Campinas: Editora Unicamp, 1962. Nenhuma citação no texto.
- CRUZ, M. A. S.; TUCCI, C. E. M. Otimização das obras de controle de cheias em uma bacia urbana. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 2, n. 2, p. 63–80, 2007. Nenhuma citação no texto.
- CRUZ, M. A. S.; TUCCI, C. E. M.; SILVEIRA, A. L. L. Controle do escoamento em lotes urbanos. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 3, n. 4, p. 19–31, 1998. Nenhuma citação no texto.
- CUNGE, J.; HOLLY, F.; VERWEY, A. *Practical aspects of computational river hydraulics*. [S.l.]: Pitman, Boston, 1980. Nenhuma citação no texto.
- CUSSLER, E. L. *Diffusion: Mass transfer in fluid systems*. 3rd edition. ed. [S.l.]: Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2009. Nenhuma citação no texto.
- DEVENS, J. A.; JUNIOR, A. R. B.; SILVA, G. Q. Modelo de quantificação do coeficiente de dispersão longitudinal de pequenos cursos de água naturais. *Revista Engenharia Sanitária Ambiental*, v. 2, n. 3, p. 269–276, 2006. Nenhuma citação no texto.
- DIOGENES, D. F. *Escoamento uniforme em condutos livres*. [S.l.], 2011. Nenhuma citação no texto.
- DRUMOND, P. P.; COELHO, M. M. L. P.; MOURA, P. Investigação experimental dos valores de coeficiente de descarga em tubos de saída de microrreservatórios. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 19, n. 2, p. 267–279, 2014. Nenhuma citação no texto.
- FAVERO, J. L. Análise teórico -experimental da dispersão de poluentes líquidos em solos. *Revista Engenharia Sanitária Ambiental*, v. 12, n. 4, p. 410–416, 2007. Nenhuma citação no texto.
- FELDER, R. M.; ROUSSEAU, R. W. *Elementary Principles fo Chemical Processes*. Georgia: Jonh Wiley Sons, Inc., 2005. Nenhuma citação no texto.
- FENNEMA, R. J.; CHAUDHRY, M. Explicit methods for 2-d transient free surface flows. *J. Hydraul. Eng.*, v. 116, n. 8, p. 1013–1034, 1990. Nenhuma citação no texto.
- FERNÁNDEZ-PATO, J.; MORALES-HERNÁNDEZ, M.; GARCÍA-NAVARRO, P. Implicit finite volume simulation of 2d shallow water flows in flexible meshes. *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg*, v. 328, p. 1–25, 2018. Nenhuma citação no texto.
- FERREIRA, D. B.; MÜHLENHOFF, A. P.; FERNANDES, C. V. S. Modelos de poluição difusa: desafios, estratégias e impacto para a gestão de recursos hídricos. *REGA - Revista de Gestão de Água da América Latina*, v. 15, p. 1–16, 2018. Nenhuma citação no texto.

- FERREIRA, D. M. *Simulação hidrodinâmica e de qualidade da água em rios: impacto para os instrumentos de gestão de recursos hídricos*. 2015. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.
- FERREIRA, D. M.; FERNANDES, C. V. S.; GOMES, J. Verification of saint-venant equations solution based on the lax diffusive method for flow routing in natural channels. *Brazilian Journal of Water Resources*, v. 22, p. 1–9, 2017. Nenhuma citação no texto.
- FERREIRA, D. M.; FERNANDES, C. V. S.; KAVISKI, E.; FONTANE, D. Water quality modelling under unsteady state analysis: Strategies for planning and management. *Journal of Environmental Management*, v. 239, p. 150–158, 2019. Nenhuma citação no texto.
- FISCHER, H. B.; BROOKS, N. H.; IMBERGER J. AND KOH, R. C. Y.; LIST, E. J. *Mixing in Inland and Coastal Waters*. San Diego: Academic Press, Inc., 1979. Nenhuma citação no texto.
- FORTUNA, A. O. *Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos*. [S.l.]: Edusp, 2000. Nenhuma citação no texto.
- FOX, R.; MCDONALD, A.; PRITCHARD, P. *Introdução à mecânica dos fluidos*. Rio de Janeiro: LTC, 2006. Nenhuma citação no texto.
- FRAGOSO JR, C. *Simulação da Dinâmica de Fitoplâncton no Sistema Hidrológico do Taim (RS)*. 2005. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.
- GABUTTI, B. On two upwind finite-difference schemes for hyperbolic equations in non-conservative form. *Comput. Fluids*, v. 11, n. 3, p. 207–230, 1983. Nenhuma citação no texto.
- GRAEBEL, W. P. *Advanced Fluid Mechanics*. USA: Elsevier, 2007. Nenhuma citação no texto.
- HENDERSON, F. *Open Channel Flow*. New York: Macmillan, 1966. Nenhuma citação no texto.
- HIRSCH, C. *Numerical Computation of Internal and External Flows: The Fundamentals of Computational Fluid Dynamics*. 2nd edition. ed. [S.l.]: John Wiley & Sons, 2007. Nenhuma citação no texto.
- HIRT, C. W. Volume of fluid (vof) method for dynamics of free boundaries. *J. Comput. Phys*, v. 39, p. 201–225, 1981. Nenhuma citação no texto.
- IMBONDEN, D. M. *The Lakes Handbook, Limnology and Limnetic Ecology*. [S.l.]: Blackwell Science Ltd, 2004. v. 1. 115-152 p. Nenhuma citação no texto.
- ISLAM, M. R.; CHAUDHRY, M. H. Numerical solution of transport for application in environmental hydraulics and hydrology. *Journal of Hydrology*, v. 191, p. 106–121, 1997. Nenhuma citação no texto.
- JAHANBAKHSI, E.; PANABI, R.; SEIF, M. S. Numerical simulation of three-dimensional interfacial flows. *Int. J. Numer. Methods Heat Fluid Flow*, v. 17, p. 384–404, 2007. Nenhuma citação no texto.

- KAVISKI, E. *Solução de problemas de fenômenos de transporte pelo método de Monte Carlo*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2006. Nenhuma citação no texto.
- LEE, C.; LIN, S. *Handbook of environmental engineering calculations*. [S.l.]: McGraw-Hill, 2000. 1223-1261 p. Nenhuma citação no texto.
- LEMOS, E. M. d. *Implementação de um método de volumes finitos de ordem superior com tratamento multibloco aplicado à simulação de escoamentos de fluídos viscoelásticos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2011. Nenhuma citação no texto.
- LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. New York, USA: Cambridge University Press, 2002. Nenhuma citação no texto.
- LI, S.; DUFFY, C. J. Fully coupled approach to modeling shallow water flow, sediment transport, and bed evolution in rivers. *Water Resources Research*, v. 47, p. 1–20, 2011. Nenhuma citação no texto.
- LI, S.; DUFFY, C. J. Fully-coupled modeling of shallow water flow and pollutant transport on unstructured grids. *Procedia Environmental Sciences*, v. 13, p. 2098–2121, 2012. Nenhuma citação no texto.
- LOBEIRO, A. M. *Solução das equações de Saint Venant em uma e duas dimensões usando o Método das Características*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Paraná, Curitiba, 2012. Nenhuma citação no texto.
- LOUKILI, Y.; SOULAIMANI, A. Numerical tracking of shallow water waves by the unstructured finite volume waf approximation. *International Journal for computational methods in engineering science and mechanics*, v. 8, p. 1–14, 2007. Nenhuma citação no texto.
- LUKACOVA, M.; NOELLE, S.; KRAFT, M. Well balanced finite volume evolution galerkin methods for the shallow water equations. *Journal of Computational Physics*, v. 221, Issue 1, p. 122–147, 2007. Nenhuma citação no texto.
- MACCORMACK, R. W. The effect of viscosity in hypervelocity impact cratering. *American Institutue Aeronautics Astronautics*, Cincinnati, Ohio, p. 69–354, 1969. Nenhuma citação no texto.
- MAHMOOD, K.; YEVJEVICH, V. *Unsteady flow in open channels*. Colorado,USA: Water Resources Publications, 1975. Nenhuma citação no texto.
- MALISKA, C. R. *Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional*. 2nd edição. ed. Rio de Janeiro: LTC, 2013. Nenhuma citação no texto.
- MARCHI, C. H. *Verificação de soluções numéricas unidimensionais em dinâmica dos fluídos*. Tese (Doutorado) — Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2001. Nenhuma citação no texto.
- MARTINEZ, D. M. V.; SANTOS, M. A. V. Uma formulação explícita para a solução de escoamentos em águas rasas. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 4, n. 4, p. 63–73, 1999. Nenhuma citação no texto.

- MCCUTCHEON, S. C. *Transport and surface exchange in rivers*. Boca Raton: CRC Press, 1989. Nenhuma citação no texto.
- MEHTA, U. Guide to credible simulations of fluid flows. *Journal of Propulsion and Power*, v. 12, n. 5, p. 940–948, 1996. Nenhuma citação no texto.
- MELO, A.; GRAMANI, L. M.; KAVISKI, E. High-order ce/se scheme for dam-break flow simulation. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ing.*, v. 34, n. 1, p. 1–12, 2018. Nenhuma citação no texto.
- MONTEIRO, L. R.; FAN, F. M.; COLLISHONN, W.; SCHETTINI, E. B. C. Simulação da onda superficial provocada pelo fechamento de comportas utilizando uma aproximação inercial da equação de saint venant. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 20, n. 4, p. 927–936, 2015. Nenhuma citação no texto.
- MOTA, S. *Introdução à Engenharia Ambiental*. 4th edition. ed. Rio de Janeiro, RJ: ABES, 2006. Nenhuma citação no texto.
- MURILLO, J.; PALLARES, M.; URRUTIA, A. A.; BRUFAU, P.; NAVARRO, G. A mathematical model for numerical simulation of shallow water flow: description and practical application of guad 2d. In: MARRE, M. S.; BEJAR, J.; COMAS, J.; RIZZOLI, A. E.; GUARISO, G. (Ed.). *Proceedings of the iEMSs Fourth Biennial Meeting*. [S.l.]: International Environmental Modelling and Software Society, 2008. p. 1431–1438. Nenhuma citação no texto.
- NIKOLOS, I.; DELIS, A. An unstructured node centered finite volume scheme for shallow water flows with wet/dry fronts over complex topography. *Computer methods in applied mechanics and engineering*, v. 198, p. 3723–3750, 2009. Nenhuma citação no texto.
- OLIVEIRA, F. A.; PEREIRA, T. S. R.; SOARES, A. K.; FORMIGA, K. T. M. Controle do escoamento em lotes urbanos. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 3, n. 4, p. 19–31, 2016. Nenhuma citação no texto.
- PAIVA, R. C. D.; COLLISHONN, W.; BRAVO, J. Modelo hidrodinâmico 1d para redes de canais baseado no esquema de mac cormack. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 16, n. 3, p. 151–161, 2011. Nenhuma citação no texto.
- PATANKAR, S. *Numerical heat transfer and fluid flow*. USA: Hemisphere Publishing Corporation, 1980. Nenhuma citação no texto.
- PATO, J.; NAVARRO, P. G. Finite volume simulation of unsteady water pipe flow. *Drinking water Engineering and Science*, v. 7, p. 83–92, 2014. Nenhuma citação no texto.
- PAZ, A. R. *Análise dos principais fatores intervenientes no comportamento hidrodinâmico do Banhado do Taim*. 2003. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.
- PEDLOSKY, J. *Geophysical Fluid Dynamics*. Massachusetts, USA: Springer Verlag, 1987. Nenhuma citação no texto.
- PEREIRA, F. F. *Modelo hidrodinâmico e de transporte bidimensional de grade não estruturada para lagos rasos*. 2010. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.

- PEREIRA, F. F.; FRAGOSO JR., C.; COLLISHONN, W.; MARQUES, D. M. L. M. Simulação de transporte de escalares em corpos d'água rasos usando um modelo de grades não estruturadas. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 18, n. 1, p. 7–18, 2013. Nenhuma citação no texto.
- PEREIRA, R. *Métodos Numéricos para solução da equação de transporte de massa*. [S.l.], 2015. Nenhuma citação no texto.
- PORTO, R. M. *Hidráulica Básica*. 4 th. ed. São Paulo, Brazil: EESC-USP, 2006. (in Portuguese). Nenhuma citação no texto.
- RAPP, B. E. *Microfluidics: Modeling, Mechanics and Mathematics*. 1nd edition. ed. Cambridge, UK: Elsevier, 2017. Nenhuma citação no texto.
- REYNOLDS, C. *The ecology of freshwater phytoplankton*. [S.l.]: Cambridge University Press, 1984. Nenhuma citação no texto.
- REZENDE, R. V. P.; ALMEIDA, R. A.; SOUZA, A. A. U.; SOUZA, S. M. A. G. U. A two-fluid model with a tensor closure model approach for free surface flow simulations. *Chemical Engineering Science*, v. 122, p. 596–613, 2015. Nenhuma citação no texto.
- RIBEIRO, V. G.; POFFAL, C. A.; ZABADAL, J. R. Uma nova formulação analítica para a resolução de problemas de poluição aquática. *Revista Liberato*, v. 10, n. 13, p. 35–51, 2009. Nenhuma citação no texto.
- RICHARDSON, L. The approximate arithmetical solution by finite differences of physical problems involving differential equations, with an application to the stresses in a masonry dam. *Philosophical Proceedings of the Royal Society of London Serial A*, v. 210, p. 307–357, 1910. Nenhuma citação no texto.
- RICHARDSON, L.; GAUNT, J. A. The deferred approach to the limit. *Proceedings of the Royal Society of London Serial A*, v. 226, p. 299–361, 1927. Nenhuma citação no texto.
- ROACHE, P. J. *Computational Fluid Dynamics*. USA: Albuquerque: Hermosa, 1994. Nenhuma citação no texto.
- ROCHA, E. J. T.; MENESCAL, G. C.; PITOMBEIRA, E. S.; CASTRO, M. A. Análise comparativa da dispersão de poluentes em rios por meio dos métodos numéricos de elementos finitos e diferenças finitas e da solução analítica. In: ABRH (Ed.). São Paulo: XVII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, 2007. Nenhuma citação no texto.
- RODRIGUES, P. P. G. W.; SOUZA, E. P.; NETO, F. D. M.; GONZALES, Y. M. Estimativa de parâmetros de dispersão em rios montanhosos através do algoritmo de luus-jaakola. *Revista Brasileira de Recursos Hídricos*, v. 17, n. 1, p. 87–95, 2012. Nenhuma citação no texto.
- SHEU, T. W. H.; FANG, C. C. High resolution finite-element analysis of shallow water equations in two dimensions. *Comput. Methods. Appl. Mech. Engrg*, v. 190, p. 2581–2601, 2001. Nenhuma citação no texto.
- SIMÕES, A.; CANDEZANO, M. A. C.; SCHULZ, H. E.; PORTO, R. M.; FERREIRA, V. G. Comparação de esquemas numéricos para as equações de saint venant usando códigos livres. In: ABRH (Ed.). Maceió: XIX Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, 2011. Nenhuma citação no texto.

- SIMOES, F. J. M. A finite volume model for two dimensional shallow environmental flow. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 137, n.2, p. 1–10, 2011. Nenhuma citação no texto.
- STEINSTRASSER, C. *Método Difusivo de Lax aplicado na solução das equações de Saint Venant*. 2005. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.
- SZYDLOWSKI, M. Implicit versus explicit finite volume schemes of extreme, free surface water flow modelling. *Archives of Hydro-Engineering and Environmental Mechanics*, v. 51, p. 287–303, 2004. Nenhuma citação no texto.
- TANNEHILL, J. C.; ANDERSON, D. A.; PLETCHER, R. H. *Computational Fluid Mechanics and Heat Transfer*. Philadelphia: Taylor & Francis, 1997. Nenhuma citação no texto.
- TAYFUR, G.; KAVVAS, M. L.; GOVINDARAJU, R. S.; STORM, D. E. Applicability of saint venant equations for two dimensional overland flows over rough infiltrating surfaces. *Journal of Hydraulic Engineering*, v. 119, n.1, p. 51–63, 1993. Nenhuma citação no texto.
- TEIXEIRA, C. A.; PORTO, R. L. L. Avaliação da qualidade da água e autodepuração dos rios da bacia do rio piracicaba. *Revista Brasileira de Ciências Ambientais*, n. 16, p. 20–31, 2008. Nenhuma citação no texto.
- TELLES, W.; RODRIGUES, P. P. G. W.; NETO, A. J. S. Simulação bidimensional horizontal da dispersão de um traçador em meio fluvial. In: A., M.; BORTOLI, A. L.; ABREU, E. C.; KARAS, E. W.; BEZERRA, L. H.; BARBANTI, L.; JAFELICE, R. S. M.; MALTA, S. M. C.; PETRY, V. (Ed.). *Águas de Lindóia: XXXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional*, 2012. Nenhuma citação no texto.
- TELLES, W. R. *Simulação do Transporte Bidimensional Horizontal de Substância Conservativa*. 2009. Dissertação (Mestrado). Nenhuma citação no texto.
- THONGTHA, K.; KASEMSUWAN, K. Numerical simulations of water quality measurement model in an opened-closed reservoir with contaminant removal mechanism. *Modelling and Simulation in Engineering*, v. 2018, p. 1–12, 2018. Nenhuma citação no texto.
- TIBURTIUS, E.; ZAMORA, P. P. P.; LEAL, E. Contaminação de águas por btxs e processos utilizados na remediação de sítios contaminados. *Revista Química Nova*, v. 27, n. 3, 2004. Nenhuma citação no texto.
- TUCCI, C. *Modelos hidrológicos*. 2a edition. ed. [S.l.]: UFRGS/ABRH, Porto Alegre, 2005. Nenhuma citação no texto.
- VALIANI, A.; CALEFFI, V.; ZANNI, A. Case study: Malpasset dam-break simulation using a two-dimensional finite volume method. *J. Hydraul. Eng.*, v. 128, n. 5, p. 460–472, 2002. Nenhuma citação no texto.
- VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. *An Introduction to Computational Fluid Dynamics*. 2nd edition. ed. [S.l.]: Pearson Education Limited, 2007. Nenhuma citação no texto.
- VILLOTA, A.; CODINA, R. Approximation of the shallow water equations with higher order finite elements and variational multiscale methods. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ing.*, v. 34, n. 1, p. 1–25, 2018. Nenhuma citação no texto.

VREUGDENHIL, C. B. *Numerical Methods for Shallow-Water flow*. USA: Springer Science+Business Media Dordrecht, 1994. Nenhuma citação no texto.

WU, G.; HE, Z.; LIU, G. Development of a cell-centered godunov-type finite volume model finite volume model for shallow water flow basead on unstructured mesh. *Mathematical Problems in Engineering - Hindawi Publishing Corporation*, v. 2014, Article ID257915, p. 15 pages, 2014. Nenhuma citação no texto.

Apêndices

APÊNDICE A – CÓDIGO DO MODELO ACOPLADO

```

program MODELOACOPLADO

use portlib
implicit none

logical cond !variacao logica
integer cont !conta o numero de vezes que as tabelas foram feitas
character*128 Arquivo, texto ! temp (se for chamar as tabelas)
real*8 dx,dy,dt,cW,cE,cS,cN,g,Lt,Lx,Ly
real*8:: start, finish !para indicar o tempo de CPU
integer i,j,k,nx,ny,nt,ver,inteiro
real*8, allocatable, dimension(:,:) :: h,u,v,ztopo, Hca,xA,cA,cB,xB,rhoh,rhohinv,rho,rhoinv
real*8, allocatable, dimension(:,:) :: h0,u0,v0,xA0,cA0,cB0,xB0,rho0
real*8 :: arho,arhoinv
real*8 :: apE,apW,apN,apS,ahp,ahE,ahW,ahN,ahS,bhp !coeficientes auxiliares para calculo de h
real*8 :: aup,auE,auW,auN,auS,bup,ATR !coeficientes auxiliares para calculo de u
real*8 :: avp,avE,avW,avN,avS,bvp !coeficientes auxiliares para calculo de v
real*8 :: cc
real*8 :: Lta
integer :: bckp
real*8 :: tempo
real*8:: normaU,coU
real*8:: he,hw,hn,hs,ue,ue0,uw,uw0,un,us,ve,vw,vn,vs,rhoe,rhow,rhon,rhos
real*8:: zetopo,zwtopo, zntopo, zstopo,alphaE,alphaW,alphaN,alphaS
real*8:: vn0,vs0
integer:: it, itmax
real*8 :: rhoM,rhoT
real*8 :: tol
real*8 :: eta
real*8 :: rh,ru,rv,rcb
real*8 :: aP !coeficientes auxiliares para o calculo de cA,cB
real*8 :: aP0 !coeficientes auxiliares para o calculo de cA,cB
real*8 :: Fe,Fw,Fn,Fs,deltaF !coeficientes auxiliares para o calculo de cA,cB
real*8 :: De,Dw,Dn,Ds !coeficientes auxiliares para o calculo de cA,cB
real*8 :: aE,aW,aN,aS !coeficientes auxiliares para o calculo de cA,cB
real*8 :: sigma !coeficiente de dispersão do metanol na água
real*8 :: rhoA, rhoB

CALL dados

start= timef()

Lta = 0.0d0

dx = Lx/nx

```

```

dy = Ly/ny
dt = Lt/Nt
cW=-(0.5d0*dt)/dx !coeficiente da equação discretizada
cE=(0.5d0*dt)/dx !coeficiente da equação discretizada
cS=-(0.5d0*dt)/dy !coeficiente da equação discretizada
cN=(0.5d0*dt)/dy !coeficiente da equação discretizada

print*,"nx=", nx

print*,"ny=", ny

print*,"nt=", nt

print*,"dx=",dx

print*,"dy=",dy

print*,"dt=",dt

!-----malha-----

nx = nx+2 !para incluir os pontos fictícios de bordas W,E
ny = ny+2 !para incluir os pontos fictícios de borda S,N

!-----
allocate(h(nx,ny),h0(nx,ny)) !matriz das alturas
allocate(u(nx,ny),u0(nx,ny)) !matriz das velocidades na direcao x
allocate(v(nx,ny),v0(nx,ny)) !matriz das velocidades na direcao y
allocate(ztopo(nx,ny))
allocate(Hca(nx,ny))
allocate(rhoh(nx,ny),rhohinv(nx,ny)) !matriz auxiliar para o calculo rhoh
allocate(cA(nx,ny), cAO(nx,ny)) !matriz da concentracao massica de agua
allocate(cB(nx,ny), cBO(nx,ny)) !matriz da concentracao massica de metanol
allocate(xB(nx,ny), xBO(nx,ny)) !matriz da fracao massica de metanol
allocate(xA(nx,ny), xAO(nx,ny)) !matriz da fracao massica de agua
allocate(rho(nx,ny),rho0(nx,ny),rhoinv(nx,ny)) !matriz da massa especifica da mistura
!-----

call DADOS_TOPOGRAFIA

call DADOS_INICIAIS_ALTURA

call DADOS_INICIAIS_VELOCIDADE

call DADOS_INICIAIS_A

```

```
call DADOS_INICIAIS_B
```

```
call DADOS_INICIAIS_rho
```

```
!-----BACKUP DOS RESULTADOS ou DADOS INICIAIS-----!
```

```
if (bckp==1) then
```

```
  write(*,*) "LEU BCKUP"
```

```
  open(1,file='backup.dat')
```

```
    do j=1,ny
```

```
      do i =1, nx
```

```
read(1,*) h0(i,j), u0(i,j), v0(i,j), xA0(i,j), cA0(i,j), xB0(i,j), cB0(i,j), rho0(i,j)
```

```
      end do
```

```
    end do
```

```
read(1,*) Lta
```

```
close(1)
```

```
!-----tempoCPU-----!
```

```
  open(1,file='tempoCPU.dat')
```

```
read(1,*) finish
```

```
close(1)
```

```
start = start+ finish
```

```
!-----!
```

```
end if
```

```
tempo = Lta
```

```
cont = tempo * 10
```

```
call CALCULO_NA_MALHA
```

```
!-----
```

```
CONTAINS
```

```
!-----
```

```
subroutine dados
```

```
  ver = system("notepad dadosMODELOACOPLADO.txt")
```

```
open(1, file="dadosMODELOACOPLADO.txt")

read(1,*) nx
read(1,*) ny
read(1,*) nt
read(1,*) Lx
read(1,*) Ly
read(1,*) Lt
read(1,*) g
read(1,*) eta      !coeficiente de manning para revestimento em cimento (Porto, 1998)
read(1,*) sigma !coeficiente de dispersão de A em B ou de B em A.
read(1,*) bckp
read(1,*) arquivo
read(1,*) tol
read(1,*) itmax

close(1)

end subroutine dados

!-----

subroutine DADOS_TOPOGRAFIA

open(1, file='TOPOGRAFIA.dat')  !Lê a topografia de fundo

do j=2, ny-1

do i=2, nx-1

ztopo(i,j)=0.0d0  !plano xy

write(1,*) (i-1.5d0)*dx, (j-1.5d0)*dy, ztopo(i,j)

1044 format (100(1pe25.10E02))
end do
write(1,*)
end do

close(1)

end subroutine DADOS_TOPOGRAFIA

!-----
```

```
subroutine DADOS_INICIAIS_ALTURA

do j=2, ny-1
  do i=2, nx-1
    h(i,j) = 5.0d0
  end do
end do

h0 = h

end subroutine DADOS_INICIAIS_ALTURA

!-----
subroutine DADOS_INICIAIS_VELOCIDADE
do j=1,ny
  do i=1,nx

u = 0
v = 0
u0 = u
v0 = v

  end do
end do
end subroutine DADOS_INICIAIS_VELOCIDADE
!-----
subroutine DADOS_INICIAIS_A

xA0=1.0d0
cA0 = 1000.0d0
end subroutine DADOS_INICIAIS_A

!-----

subroutine DADOS_INICIAIS_B
xB0=0.0d0
cB0 = 0.0d0 !não há metanol na mistura no instante inicial
end subroutine DADOS_INICIAIS_B

!-----

subroutine DADOS_INICIAIS_rho
rho0= 1000.0d0 !massa específica da água no reservatorio
end subroutine DADOS_INICIAIS_rho

!-----
subroutine CALCULO_NA_MALHA
```



```
rhoA=1000.0d0
rhoB=792.0d0

!arquivo de dados para a concentração em 5 pontos do reservatório
if (bckp ==0) then
open(33,file = '.\tempTESE\concentracao.dat')
write(33,331) 0.d0, 1000.0d0, 1000.0d0,1000.0d0, 1000.0d0,1000.0d0

331 format (100(1pe25.10E02))

open(34,file = '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat')
write(34,341) 0.d0, 1.0d0,1.0d0,1.0d0, 1.0d0,1.0d0

341 format (100(1pe25.10E02))

open(35,file = '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat')
write(35,351) 0.d0, 0.0d0,0.0d0,0.0d0, 0.0d0,0.0d0
351 format (100(1pe25.10E02))

else
open(33, file = '.\tempTESE\concentracao.dat',position="append")

open(34, file = '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat',position="append")

open(35, file = '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat',position="append")
END IF

!-----
do k=1,nt !looping temporal

tempo = Lta + k*dt

    do it=1, itmax !looping do gs

!CONTORNO
!-----
!CONTORNOSUL (Parte Inferior)
!ENTRADA DE METANOL com concentração 100% e velocidade 0.6 para 3<x<4

if (tempo <=60.0d0) then

!-----entrada de metanol-----! de t= 0 até t=60s
j=1
!1a Parte
!
```

```

do i = 2,(3*(nx-1)/7)+1           !0<x<3
    h(i,j) = h(i,j+1)
    u(i,j) =u(i,j+1)
    v(i,j) =-v(i,j+1)
    cB(i,j)= cB(i,j+1)
    rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
    xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
    cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
    end do

!2a Parte
    do i = (3*(nx-1)/7)+2, (4*(nx-1)/7)+1 !3<=x<=4
h(i,j) = h(i,j+1)
cc = 1.2d0 !0.6
v(i,j) = 2*cc -v(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
cc=0.0d0
cA(i,j) = 2*cc - cA(i,j+1)
cc=792.0d0
cB(i,j)= 2*cc - cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
    xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
    end do

!3a Parte
    do i = (4*(nx-1)/7)+2, nx-1           !4<x<7
h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) = -v(i,j+1)
        cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
        end do

else

!-----sem a entrada de metanol-----! t=60s...180s
!comporta fechada

if ( tempo <=180.d0)then

j=1
! 1a Parte

```

```

do i=2, nx-1
h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) = u(i,j+1)
v(i,j) = -v(i,j+1)
cB(i,j) = cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
xA(i,j) = 1-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

end do

else

if ( tempo <=360.d0)then

!-----comporta aberta entrando água-----!

!a partir de 180 s

      j=1
!1a Parte
      !
do i = 2, (3*(nx-1)/7)+1           !0<x<3
      h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) =-v(i,j+1)
cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
      end do

!2a Parte
      do i = (3*(nx-1)/7)+2, (4*(nx-1)/7)+1 !3<=x<=4
h(i,j) = h(i,j+1)
cc = 1.2d0
v(i,j) = 2*cc -v(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
cc=0.0d0
cB(i,j) = 2*cc - cB(i,j+1)
cc=1000.0d0
cA(i,j)= 2*cc - cA(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
      xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)

```

```

end do

!3a Parte
do i = (4*(nx-1)/7)+2, nx-1      !4<x<7
h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) = -v(i,j+1)
cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

else

if ( tempo <=1440.d0)then

!-----entrada de metanol com mais velocidade-----!

!a partir de 360s
j=1
!1a Parte
!
do i = 2, (3*(nx-1)/7)+1      !0<x<3
h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) =-v(i,j+1)
cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

!2a Parte
do i = (3*(nx-1)/7)+2, (4*(nx-1)/7)+1 !3<=x<=4
h(i,j) = h(i,j+1)
cc = 2.0d0 !0.6
v(i,j) = 2*cc -v(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
cc=0.0d0
cA(i,j) = 2*cc - cA(i,j+1)
cc=792.0d0
cB(i,j)= 2*cc - cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))

```

```

        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
end do

!3a Parte
    do i = (4*(nx-1)/7)+2, nx-1          !4<x<7
h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) = -v(i,j+1)
        cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
        end do
else

!-----comporta aberta entrando água-----!

    j=1
!1a Parte
    !
do i = 2,(3*(nx-1)/7)+1          !0<x<3
        h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) =-v(i,j+1)
cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
        end do

!2a Parte
    do i = (3*(nx-1)/7)+2, (4*(nx-1)/7)+1 !3<=x<=4
h(i,j) = h(i,j+1)
cc = 1.2d0
v(i,j) = 2*cc -v(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
cc=0.0d0
cB(i,j) = 2*cc - cB(i,j+1)
cc=1000.0d0
cA(i,j)= 2*cc - cA(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
        xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
    end do

```

```

!3a Parte
do i = (4*(nx-1)/7)+2, nx-1      !4<x<7
h(i,j) = h(i,j+1)
u(i,j) =u(i,j+1)
v(i,j) = -v(i,j+1)
cB(i,j)= cB(i,j+1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

end if

end if

end if
end if
!-----!

!CONTORNO Norte (Parte Superior)      saída da mistura

if ( tempo <=1440.d0)then

j = ny
! 1a Parte !y=7.01
do i=2,(5*(nx-2)/7)+1 !0<x<5

h(i,j) = h(i,j-1)
u(i,j) =u(i,j-1)
v(i,j) = -v(i,j-1)
cB(i,j)= cB(i,j-1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

end do

! 2a Parte
do i=((5*(nx-2))/7)+2, (6*(nx-2)/7)+1 !5<=x<=6
h(i,j) = h(i,j-1)
u(i,j) =u(i,j-1)
cc = sqrt(0.2*g*h(i,j))
v(i,j) = 2*(cc) - v(i,j-1)
!cc=0.2d0*dy

```

```

cB(i,j)= cB(i,j-1) !+1.0d0*cc
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

      ! 3a Parte
      do i=(6*(nx-2)/7)+2, nx-1 !6<x<7

          h(i,j) = h(i,j-1)
          u(i,j) =u(i,j-1)
          v(i,j)= -v(i,j-1)
cB(i,j)= cB(i,j-1)
          rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
          xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
          end do

else
j = ny
      ! 1a Parte !y=7.01
      do i=2, (3*(nx-2)/7)+1 !0<x<3

          h(i,j) = h(i,j-1)
          u(i,j) =u(i,j-1)
          v(i,j) = -v(i,j-1)
cB(i,j)= cB(i,j-1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
          xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

          end do

      ! 2a Parte

      do i=((3*(nx-2))/7)+2, (4*(nx-2)/7)+1 !5<=x<=6

h(i,j) = h(i,j-1)
          u(i,j) =u(i,j-1)
cc = -1.2d0
          v(i,j) = 2*(cc) - v(i,j-1)
          cc = 1000.0d0
cA(i,j) = 2*cc - cA(i,j-1)
cc= 0.0d0

```

```

cB(i,j)=2*cc- cB(i,j-1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)

end do

! 3a Parte

do i=((4*(nx-2))/7)+2, (5*(nx-2)/7)+1 !5<=x<=6

      h(i,j) = h(i,j-1)
      u(i,j) =u(i,j-1)
      v(i,j) = -v(i,j-1)
cB(i,j)= cB(i,j-1)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

end do

! 4a Parte

      do i=((5*(nx-2))/7)+2, (6*(nx-2)/7)+1 !5<=x<=6
            h(i,j) = h(i,j-1)
            u(i,j) =u(i,j-1)
            cc = sqrt(0.2*g*h(i,j))
            v(i,j) = 2*(cc) - v(i,j-1)
!cc=0.2d0*dy
cB(i,j)= cB(i,j-1) !+1.0d0*cc
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

! 5a Parte
do i=(6*(nx-2)/7)+2, nx-1 !6<x<7

      h(i,j) = h(i,j-1)
      u(i,j) =u(i,j-1)
      v(i,j)= -v(i,j-1)
cB(i,j)= cB(i,j-1)
      rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))

```



```

        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
        end do

end if

!-----

!CONTORNO Oeste (Lado Esquerdo)  entrada de água
if (tempo <=60.0d0) then

        i = 1

! 1a Parte

        do j=2, (3*(ny-2)/7)+1
            h(i,j) = h(i+1,j)
            u(i,j) = -u(i+1,j)
            v(i,j) = v(i+1,j)
cB(i,j)= cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
        end do

! 2a Parte
        do j=((3*(ny-2))/7)+2, ((4*(ny-2))/7 )+1
            h(i,j) = h(i+1,j)
cc = 1.0d0 ! (usada na injeção simultanea agua/metanol)
            u(i,j) = 2*(cc) - u(i+1,j)
v(i,j) =v(i+1,j)
cc=1000.0d0
cA(i,j) = 2*cc - cA(i+1,j)
cc=0.0d0
cB(i,j) = 2*cc - cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
        xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
        end do

! 3a Parte
        do j= ((4*(ny-2))/7)+2, ny-1
            h(i,j) = h(i+1,j)
            u(i,j) = -u(i+1,j)
            v(i,j) = v(i+1,j)
cB(i,j)= cB(i+1,j)

```

```

rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

end do

else

if (tempo <=360.0d0) then

!-----entrada de ÁGUA COM MAIS VELOCIDADE-----!

!a partir de t=60s

i = 1

! 1a Parte

      do j=2, (3*(ny-2)/7)+1
          h(i,j) = h(i+1,j)
          u(i,j) = -u(i+1,j)
          v(i,j) = v(i+1,j)
cB(i,j)= cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
      end do

      ! 2a Parte
      do j=((3*(ny-2))/7)+2, ((4*(ny-2))/7 )+1
          h(i,j) = h(i+1,j)
cc= 2.0d0 !(usada para limpeza do reservatório)
          u(i,j) = 2*(cc) - u(i+1,j)
v(i,j) =v(i+1,j)
cc=1000.0d0
cA(i,j) = 2*cc - cA(i+1,j)
cc=0.0d0
cB(i,j) = 2*cc - cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
      end do

! 3a Parte

```

```

        do j= ((4*(ny-2))/7)+2, ny-1
            h(i,j) = h(i+1,j)
            u(i,j) = -u(i+1,j)
            v(i,j) = v(i+1,j)
        cB(i,j)= cB(i+1,j)
        rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
        xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
            xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
        cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

    end do

!-----!

else

if (tempo <=1440.0d0) then

!-----sem entrada de ÁGUA-----! a partir de t=360s

    i = 1

    ! 1a Parte

        do j=2, ny-1
            h(i,j) = h(i+1,j)
            u(i,j) = -u(i+1,j)
            v(i,j) = v(i+1,j)
        cB(i,j)= cB(i+1,j)
        rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))
        xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
            xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
        cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
    end do

else

!-----entrada de ÁGUA COM MAIS VELOCIDADE-----! a partir de t=1440s

    i = 1

    ! 1a Parte

        do j=2, (3*(ny-2))/7)+1
            h(i,j) = h(i+1,j)
            u(i,j) = -u(i+1,j)
            v(i,j) = v(i+1,j)

```

```

cB(i,j)= cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
  end do

      ! 2a Parte
      do j=((3*(ny-2))/7)+2, ((4*(ny-2))/7 )+1
h(i,j) = h(i+1,j)
cc= 2.0d0 !(usada para limpeza do reservatório)
      u(i,j) = 2*(cc) - u(i+1,j)
v(i,j) =v(i+1,j)
cc=1000.0d0
cA(i,j) = 2*cc - cA(i+1,j)
cc=0.0d0
cB(i,j) = 2*cc - cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
      end do

      ! 3a Parte
      do j= ((4*(ny-2))/7)+2, ny-1
h(i,j) = h(i+1,j)
      u(i,j) = -u(i+1,j)
      v(i,j) = v(i+1,j)
cB(i,j)= cB(i+1,j)
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
      xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

end do

!-----!

  end if
  end if
  end if

!-----!

      !CONTORNO Leste (Lado Direito)  SAÍDA DA MISTURA

      i = nx
      ! x = 7.01
      ! 1a Parte

```

```

do j=2,(5*(ny-2)/7)+1      !0<y<5
  h(i,j) =h(i-1,j)
  u(i,j) =-u(i-1,j)
  v(i,j) =v(i-1,j)
  cB(i,j)= cB(i-1,j)
  rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
  xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

! 2a Parte
do j=((5*(ny-2))/7)+2, (6*(ny-2)/7)+1 !5<=y<=6

  h(i,j) = h(i-1,j)
  cc = sqrt(0.2*g*h(i,j))
  u(i,j) = 2*(cc) - u(i-1,j)
  v(i,j) =v(i-1,j)
!cc=0.2d0*dy
cB(i,j)= cB(i-1,j) !+1.0d0*cc
rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
  xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)
end do

! 3a Parte
do j= ((6*(nx-2))/7)+2, ny-1      !6<y<7

  h(i,j) =h(i-1,j)
  u(i,j) =-u(i-1,j)
  v(i,j) =v(i-1,j)

  cB(i,j)=cB(i-1,j)
  rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(1.0d0*rhoB))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA)))
xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
  xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

end do

!-----cálculo nos pontos internos da malha-----!

rh=0.0d0
ru=0.0d0
rv=0.0d0
rcb=0.0d0

```

```

do j=2,ny-1
  do i=2,nx-1

ue = (u(i+1,j)+u(i,j))/(2.0d0)
ve = (v(i+1,j)+v(i,j))/(2.0d0)
he = (h(i+1,j)+h(i,j))/(2.0d0)
rhoe = (rho(i+1,j) + rho(i,j))/(2.0d0)
zetopo = (ztopo(i+1,j)+ztopo(i,j))/(2.0d0)

uw = (u(i-1,j)+u(i,j))/(2.0d0)
vw = (v(i-1,j)+v(i,j))/(2.0d0)
hw = (h(i-1,j)+h(i,j))/(2.0d0)
rhow = (rho(i-1,j) + rho(i,j))/(2.0d0)
zwtopo = (ztopo(i-1,j)+ztopo(i,j))/(2.0d0)

  un = (u(i,j+1)+u(i,j))/(2.0d0)
  vn = (v(i,j+1)+v(i,j))/(2.0d0)
  hn = (h(i,j+1)+h(i,j))/(2.0d0)
  rhon = (rho(i,j+1) + rho(i,j))/(2.0d0)
  zntopo = (ztopo(i,j+1)+ztopo(i,j))/(2.0d0)

  us = (u(i,j-1)+u(i,j))/(2.0d0)
  vs = (v(i,j-1)+v(i,j))/(2.0d0)
  hs = (h(i,j-1)+h(i,j))/(2.0d0)
  rhos = (rho(i,j-1) + rho(i,j))/(2.0d0)
  zstopo = (ztopo(i,j-1)+ztopo(i,j))/(2.0d0)

normaU=sqrt((u0(i,j))**(2.0d0)+(v0(i,j))**(2.0d0))

alphaE = sign(1.0d0, ue)
alphaW = sign(1.0d0, uw)
alphaN = sign(1.0d0, vn)
alphaS = sign(1.0d0, vs)

!coeficientes da discretização totalmente implícita
apE=cE*rhoe*ue*(1.0d0+alphaE)
apW=cW*rhow*uw*(1.0d0-alphaW)
apN=cN*rhon*vn*(1.0d0+alphaN)
apS=cS*rhos*vs*(1.0d0-alphaS)

!coeficientes para o cálculo de rhoxB

Fe = ue*dy
Fw = uw*dy
Fn = vn*dx
Fs = vs*dx

```

```

deltaF = Fe-Fw+Fn-Fs

De = ((sigma*dy)/(dx))
Dw = ((sigma*dy)/(dx))
Dn = ((sigma*dx)/(dy))
Ds = ((sigma*dx)/(dy))

aE=De-0.5d0*Fe+0.5d0*Fe*alphaE
    aW=Dw+0.5d0*Fw+0.5d0*Fw*alphaW
    aN=Dn-0.5d0*Fn+0.5d0*Fn*alphaN
    aS=Ds+0.5d0*Fs+0.5d0*Fs*alphaS
    aP = (1.0d0*dx*dy)/dt
aP0= (1.0d0*dx*dy)/dt
arho=aP+aE+aW+aN+aS+deltaF
arhoinv =(1.0d0)/(arho*1.0d0)

!-----concentracaoB-----!
    !calculo de residuo de cB
    rcb=rcb+abs(cB(i,j)*arho-1.0d0*(aP0*cB0(i,j)+aE*cB(i+1,j)+aW*cB(i-1,j)+
        aN*cB(i,j+1)+aS*cB(i,j-1)))

    cB(i,j) = 1.0d0*arhoinv*(aP0*cB0(i,j)+aE*cB(i+1,j)+aW*cB(i-1,j)+
        aN*cB(i,j+1)+aS*cB(i,j-1))

!-----massa especifica da mistura-----!

    rho(i,j) = rhoA*(1.0d0-(cB(i,j)/(rhoB*1.0d0)))+(cB(i,j)/(1.0d0*rhoA))

!-----Fracoes massicas -----!
    xB(i,j) = cB(i,j)/(1.0d0*rho(i,j))
    xA(i,j) = 1.0d0-xB(i,j)
!-----concentracaoA-----!

cA(i,j)=xA(i,j)*rho(i,j)

!-----altura h-----!
!coeficientes para o cálculo de h

ahp=rho(i,j)+apE+apW+apN+apS
bhp=rho0(i,j)*h0(i,j)
ahE=(cE)*ue*rhoe*(1-alphaE)
ahW=(cW)*uw*rhow*(1+alphaW)
ahN=(cN)*vn*rhon*(1-alphaN)
ahS=(cS)*vs*rhos*(1+alphaS)

!calculo de h

```

```

!condição para cálculo de h até chegar no fundo (ztopo)
!-----
  if (h(i,j)>ztopo(i,j)) then
!-----
  !calculo de residuo de h
  rh=rh+abs(bhP-ahP*h(i,j)-ahE*h(i+1,j)-ahW*h(i-1,j)-ahN*h(i,j+1)-ahS*h(i,j-1))

  h(i,j) = (bhP-ahE*h(i+1,j)-ahW*h(i-1,j)-ahN*h(i,j+1)-ahS*h(i,j-1))/(1.0d0*ahp)
  Hca(i,j)=h(i,j)-ztopo(i,j)
      ! (RESISTÊNCIA AO ESCOAMENTO)
  ATR = (dt/(4.0d0))*g*eta*eta*((h(i,j))**(-(1.0d0)/(3.0d0)))*rho(i,j)*normaU

!atualização de h nas faces
      he = (h(i+1,j)+h(i,j))/(2.0d0)
  hw = (h(i-1,j)+h(i,j))/(2.0d0)
  hn = (h(i,j+1)+h(i,j))/(2.0d0)
  hs = (h(i,j-1)+h(i,j))/(2.0d0)

!coeficientes para o cálculo de u

  ue0= (u0(i+1,j)+u0(i,j))/(2.0d0)
  uw0= (u0(i-1,j)+u0(i,j))/(2.0d0)

  apE=cE*rhoe*ue0*(1.0d0+alphaE)
  apW=cW*rhow*uw0*(1.0d0-alphaW)
  coU= rho(i,j)*h(i,j)+apE*he+apW*hw+apN*hn+apS*hs
  aup=coU+ATR*((1.0d0+alphaE)+(1.0d0-alphaW))
  bup=h0(i,j)*u0(i,j)*rho0(i,j)+cE*g*rhow*((hw)**(2.0d0))+
      cW*g*rhoe*((he)**(2.0d0))-1.0d0*g*rho(i,j)*h(i,j)*(dt/1.0d0*dx)*(zetopo - zwtopo)
  auE=ahE*he+ATR*(1.0d0-alphaE)
  auW=ahW*hw+ATR*(1.0d0+alphaW)
  auN=ahN*hn
  auS=ahS*hs

!calculo de residuo de u
  ru=ru+abs(buP-auP*u(i,j)-auE*u(i+1,j)-auW*u(i-1,j)-auN*u(i,j+1)-auS*u(i,j-1))
      !calculo de u
  u(i,j) = (bup-auE*u(i+1,j)-auW*u(i-1,j)-auN*u(i,j+1)-auS*u(i,j-1))/(1.0d0*aup)

!atualização
  ue = (u(i+1,j)+u(i,j))/(2.0d0)
  uw = (u(i-1,j)+u(i,j))/(2.0d0)
  vn0 = (v0(i,j+1)+v0(i,j))/(2.0d0)
  vs0 = (v0(i,j-1)+v0(i,j))/(2.0d0)

  alphaE = sign(1.d0, ue)

```



```

alphaW = sign(1.d0, uw)

      apE=cE*ue*rhoe*(1.0d0+alphaE)
      apW=cW*uw*rhow*(1.0d0-alphaW)
      apN=cN*vn*rhon*(1.0d0+alphaN)
      apS=cS*vs*rhos*(1.0d0-alphaS)

ahE=(cE)*ue*rhoe*(1.0d0-alphaE)
ahW=(cW)*uw*rhow*(1.0d0+alphaW)
ahN=(cN)*vn*rhon*(1.0d0-alphaN)
ahS=(cS)*vs*rhos*(1.0d0+alphaS)

normaU=sqrt((u(i,j))**(2.0d0)+(v0(i,j))**(2.0d0))

      ATR=(dt/(4.0d0))*g*eta*eta*(h(i,j))**(-(1.0d0)/(3.0d0))*rho(i,j)*normaU

coU= rho(i,j)*h(i,j)+apE*he+apW*hw+apN*hn+apS*hs

!coeficientes para o cálculo de v

avp=coU+ATR*((1.0d0+alphaN)+(1.0d0-alphaS))

bvp=h0(i,j)*v0(i,j)*rho0(i,j)+cN*g*rhos*((hs)**(2.0d0))+
cS*g*rhon*((hn)**(2.0d0))-1.0d0*g*rho(i,j)*h(i,j)*(dt/1.0d0*dy)*(zntopo - zstopo)

avE=ahE*he
avW=ahW*hw
avN=ahN*hn+ATR*(1.0d0-alphaN)
avS=ahS*hs+ATR*(1.0d0+alphaS)

!calculo de residuo de v
rv=rv+abs(bvP-avP*v(i,j)-avE*v(i+1,j)-avW*v(i-1,j)-avN*v(i,j+1)-avS*v(i,j-1))
!calculo de u
v(i,j) = (bvp-avE*v(i+1,j)-avW*v(i-1,j)-avN*v(i,j+1)-avS*v(i,j-1))/(1.0d0*avp)

!-----

else !se o nível do fluido já está no fundo do reservatório

      h(i,j) = ztopo(i,j)
      !calculo de residuo de h

rh=0.d0

Hca(i,j)=h(i,j)-ztopo(i,j)
      ATR=0.0d0

```

```

u(i,j)=0.0d0

                v(i,j)=0.0d0
end if
!-----
end do
end do
!-----
!teste a convergencia Gauss Seidel

if ((rh+ru+rv+rcb)/4/(nx-2)/(ny-2)<tol) exit

end do !fim looping do gs

!-----concentração media-----

rhoM=0.0d0
rhoT=0.0d0
do i=2,nx-1
do j=2,ny-1
rhoT =(rhoT+ rho(i,j))
end do
end do
rhoM = rhoT/(1.0d0*nx*ny)

!-----

u0 = u
v0 = v
h0 = h
cB0=cB
xB0=xB
xA0=xA
cA0=cA
rho0=rho

!-----PÓS-PROCESSAMENTO-----!

cond = abs((Lta+dt*k)*10.0d0-cont-1.0d0) < 1d-10 ! Critério para chegar perto do tempo 0.1
!cond = .true.
if (cond) then
cont = cont+1
inteiro = 0.1*cont
write(texto,*) inteiro
endif
!-----

```

```

if (mod(k,30000) == 0) then
  WRITE(33,332) tempo, rho(14,14), rho(14,8), rho(8,24), rho(4,4), rho(22,22)
  332 format (100(1pe25.10E02))

  WRITE(34,342) tempo, xA(14,14), xA(14,8), xA(8,24), xA(4,4), xA(22,22)

  342 format (100(1pe25.10E02))

  WRITE(35,352) tempo, xB(14,14), xB(14,8), xB(8,24), xB(4,4), xB(22,22)

  352 format (100(1pe25.10E02))
end if

!-----INFORMAÇÕES SOBRE O RESÍDUO E NUMERO DE ITERAÇÕES-----
  if (mod(k,1000) == 0) then
    write(93,932) tempo, (rh+ru+rv+rcb)/4/(nx-2)/(ny-2), it, xA(10,10), xB(10,10), rho(10,10), rhoM

    932 format (2(1PE15.3),I4,4(1PE15.3))
  end if

!-----RESULTADOS NA TELA-----

write(*,'(1PE15.3,1PE15.3)') tempo, rhoM

!-----finalizacao do looping temporal-----
end do
!-----

close(33)
close(34)
close(35)
close(93)

!-----backup-----
  open(20,file='backup.dat')
  do j=1,ny

    do i = 1, nx

write(20,*) h0(i,j), u0(i,j), v0(i,j), xA0(i,j), cA0(i,j), xB0(i,j), cB0(i,j), rho0(i,j)

  1045 format (100(1pe25.10E02))

end do
end do

```

```

write(20,*) Lt + Lta

close(20)

call GRAFIC

call GRAFIC_CONCENTRACAO_MASSICA

call GRAFIC_FRACAO_MASSIC_A

call GRAFIC_FRACAO_MASSIC_B

!-----TEMPO DE CPU-----
finish = timef()+start

open(777, file = 'tempoCPU.dat')
write(777,71) finish

71 format (1PE15.8)

close(777)

!-----
end subroutine CALCULO_NA_MALHA
!-----

subroutine GRAFIC_CONCENTRACAO_MASSICA
open(1, file = 'graficrho.gnu')
write(1,*) "reset"
write(1,*) "set style data linespoints"
write(1,*) "set ticslevel 0"
write(1,*) "set xlabel 't (s)'"
write(1,*) "set time "
write(1,*) "set ylabel 'massa especifica da mistura'"
write(1,*) "plot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:2 title 'rho(3.5,3.5)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:3 title 'rho(3.5,2.0)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:4 title 'rho(2.0,6.0)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:5 title 'rho(1.0,1.0)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:6 title 'rho(5.5,5.5)'"
write(1,*) "set term png nocrop enhanced size 1280,720"
write(1,*) " set out '.\tempTESE\C.png' "
write(1,*) "replot"
close(1)
i = system("start .\gnuplot\Wgnuplot graphicrho.gnu")

```

```
END SUBROUTINE GRAFIC_CONCENTRACAO_MASSICA
```

```
!-----
```

```
subroutine GRAFIC_CONCENTRACAO_MASSICA_MEDIA
  open(1, file = 'graficrhoM.gnu')
  write(1,*) "reset"
  write(1,*) "set style data linespoints"
  write(1,*) "set ticslevel 0"
  write(1,*) "set xlabel 't (s)'"
  write(1,*) "set time "
  write(1,*) "set ylabel 'concentração mássica média da mistura'"
  write(1,*) "plot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:7 title 'rhoM'"
  !write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:3 title 'rho(3.5,2.0)'"
  !write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:4 title 'rho(2.0,6.0)'"
  !write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:5 title 'rho(1.0,1.0)'"
  !write(1,*) "replot '.\tempTESE\concentracao.dat' using 1:6 title 'rho(5.5,5.5)'"
  write(1,*) "set term png nocrop enhanced size 1280,720"
  write(1,*) " set out '.\tempTESE\Cmedia.png' "
  write(1,*) "replot"
close(1)
i = system("start .\gnuplot\Wgnuplot graficrhoM.gnu")
END SUBROUTINE GRAFIC_CONCENTRACAO_MASSICA_MEDIA
```

```
!-----
```

```
subroutine GRAFIC_FRACAO_MASSIC_A
  open(1, file = 'graficXA.gnu')
  write(1,*) "reset"
  write(1,*) "set style data linespoints"
  write(1,*) "set ticslevel 0"
  write(1,*) "set xlabel 't (s)'"
  write(1,*) "set time "
  write(1,*) "set ylabel 'xA(0-1)'"
  write(1,*) "plot '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat' using 1:2 title 'xA(3.5,3.5)'"
  write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat' using 1:3 title 'xA(3.5,2.0)'"
  write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat' using 1:4 title 'xA(2.0,6.0)'"
  write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat' using 1:5 title 'xA(1.0,1.0)'"
  write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaA.dat' using 1:6 title 'xA(5.5,5.5)'"
  write(1,*) "set term png nocrop enhanced size 1280,720"
  write(1,*) " set output '.\tempTESE\XA.png' "
  write(1,*) "replot"
  close(1)
i = system("start .\gnuplot\Wgnuplot graficXA.gnu")

end subroutine GRAFIC_FRACAO_MASSIC_A
```

```
!-----
```

```

subroutine GRAFIC_FRACAO_MASSIC_B
open(1, file = 'graficXB.gnu')
write(1,*) "reset"
write(1,*) "set style data linespoints"
write(1,*) "set ticslevel 0"
write(1,*) "set xlabel 't (s) '"
write(1,*) "set time "
write(1,*) "set ylabel 'xB(0-1)'"
write(1,*) "plot '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat' using 1:2 title 'xB(3.5,3.5)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat' using 1:3 title 'xB(3.5,2.0)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat' using 1:4 title 'xB(2.0,6.0)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat' using 1:5 title 'xB(1.0,1.0)'"
write(1,*) "replot '.\tempTESE\fracaomassicaB.dat' using 1:6 title 'xB(5.5,5.5)'"
write(1,*) "set term png nocrop enhanced size 1280,720"
write(1,*) " set output '.\tempTESE\XB.png' "
write(1,*) "replot"
close(1)

i = system("start .\gnuplot\Wgnuplot graficXB.gnu")

end subroutine GRAFIC_FRACAO_MASSIC_B

```

```

!-----
subroutine GRAFIC

```

```

open(2, file='h.dat')
open(3, file='u.dat')
open(4, file='v.dat')
open(5, file='norma.dat')
open(6, file = 'xB.dat')
open(7, file = 'xA.dat')
open(8, file = 'rho.dat')
open(9, file = 'cB.dat')
open(10, file = 'cA.dat')
open(11, file = 'uv.dat')

do j=2, ny-1
do i=2, nx-1

write(2,21) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, h(i,j)
21 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
write(3,31) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, u(i,j)
31 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
write(4,41) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, v(i,j)
41 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
write(5,51) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, sqrt(u(i,j)**2+v(i,j)**2)
51 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)

```

```
        write(6,61) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, xB(i,j)
            61 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
write(7,71) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, xA(i,j)
            71 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
write(8,81) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, rho(i,j)
            81 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)

write(9,91) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, cB(i,j)
            91 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
write(10,101) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, cA(i,j)
            101 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5)
        end do
        write(2,*)
write(3,*)
write(4,*)
write(5,*)
write(6,*)
write(7,*)
write(8,*)
write(9,*)
write(10,*)
        end do

        do j=2, ny-1
            do i=2, nx-1
write(11,1001) (i-2)*dx+dx/2, (j-2)*dy+dy/2, 0.2*u(i,j),0.2*v(i,j)
                1001 format ( 1PE15.5,2x, 1PE15.5, 2x, 1PE15.5,2x, 1PE15.5)
            end do
write(11,*)
            end do
        close(2)
        close(3)
        close(4)
        close(5)
        close(6)
        close(7)
        close(8)
        close(9)
        close(10)
        close(11)

        open(1,file = 'graf.gnu')
write(1,*) "reset"
write(1,*) " set term png nocrop enhanced size 1280,720"
write(1,*) " set style data pm3d"
write(1,*) " set ticslevel 0"
write(1,*) " set view map"
```

```
write(1,*) " set pm3d map "  
write(1,*) " set palette "  
write(1,*) " set palette color "  
write(1,*) " set xlabel 'x (m)'"  
write(1,*) " set ylabel 'y (m)'"  
write(1,*) " set time "  
  
write(1,*) " "  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\h"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
write(1,*) " splot 'h.dat' using 1:2:3 title ''"  
write(1,*) " set autoscale "  
  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\norma"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
write(1,*) " splot 'norma.dat' using 1:2:3 title ''"  
  
write(1,*) " set cbrange [0:1] "  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\xA"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
write(1,*) " splot 'xA.dat' using 1:2:3 title ''"  
  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\xB"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
  
write(1,*) " splot 'xB.dat' using 1:2:3 title ''"  
  
write(1,*) " set cbrange [0:1000] "  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\cA"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
write(1,*) " splot 'cA.dat' using 1:2:3 title ''"  
  
write(1,*) " set cbrange [0:792] "  
  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\cB"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
  
write(1,*) " splot 'cB.dat' using 1:2:3 title ''"  
  
write(1,*) " set title 't=",0.1d0*cont,"s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\rho"//trim(adjustl(texto))//".png' "  
write(1,*) " set cbrange[792:1000] "  
write(1,*) " splot 'rho.dat' using 1:2:3 title ''"
```



```
write(1,*) " set decimalsign "  
write(1,*) " set key top right box #font,12 "  
  
write(1,*) " set xrange [-1:8] "  
write(1,*) " set yrange [-1:8] "  
!write(1,*) " set title 't=',0.1d0*cont,'s' "  
write(1,*) " set out '.\tempTESE\uv'//trim(adjustl(texto))//".png' "  
  
write(1,*) " plot 'uv.dat' using 1:2:3:4 with vectors head filled lt 1 title '' "  
  
close(1)  
  
i = system("start .\gnuplot\Wgnuplot graf.gnu")  
  
end subroutine GRAFIC  
!-----  
  
end program MODELOACOPLADO
```

APÊNDICE B – RESÍDUOS E ITERAÇÕES

tempo(s)	resíduo	número de iterações do G.S	fração massica de água xA(3,5;3,5)	fração massica de metanol xB(3,5;3,5)	massa esp. da mistura rho(3,5;3,5)
0.000E+00	0.000E+00	0	1.000E+00	0.000E+00	1.000E+03
1.000E+00	2.028E-05	4	1.000E+00	6.960E-08	1.000E+03
2.000E+00	1.154E-05	4	9.999E-01	7.125E-05	1.000E+03
3.000E+00	9.249E-06	4	9.995E-01	5.016E-04	9.999E+02
4.000E+00	6.423E-06	4	9.942E-01	5.803E-03	9.985E+02
5.000E+00	4.303E-06	4	9.877E-01	1.227E-02	9.968E+02
6.000E+00	3.761E-06	4	9.710E-01	2.895E-02	9.925E+02
7.000E+00	2.912E-06	4	9.690E-01	3.103E-02	9.919E+02
8.000E+00	1.912E-06	4	9.669E-01	3.312E-02	9.914E+02
9.000E+00	2.021E-06	4	9.601E-01	3.989E-02	9.896E+02
1.000E+01	9.347E-05	3	9.598E-01	4.018E-02	9.896E+02
1.100E+01	7.868E-05	3	9.650E-01	3.498E-02	9.909E+02
1.200E+01	6.251E-05	3	9.541E-01	4.587E-02	9.881E+02
1.300E+01	5.077E-05	3	9.457E-01	5.429E-02	9.859E+02
1.400E+01	5.682E-05	3	9.353E-01	6.472E-02	9.833E+02
1.500E+01	4.090E-05	3	9.259E-01	7.409E-02	9.809E+02
1.600E+01	3.793E-05	3	9.126E-01	8.737E-02	9.776E+02
1.700E+01	3.447E-05	3	9.033E-01	9.673E-02	9.752E+02
1.800E+01	3.326E-05	3	8.987E-01	1.013E-01	9.741E+02
1.900E+01	3.227E-05	3	8.938E-01	1.062E-01	9.729E+02
2.000E+01	2.522E-05	3	8.949E-01	1.051E-01	9.732E+02
2.100E+01	2.551E-05	3	9.015E-01	9.852E-02	9.748E+02
2.200E+01	2.741E-05	3	9.052E-01	9.484E-02	9.757E+02
2.300E+01	2.079E-05	3	9.099E-01	9.006E-02	9.769E+02
2.400E+01	1.727E-05	3	9.163E-01	8.368E-02	9.785E+02
2.500E+01	2.069E-05	3	9.122E-01	8.779E-02	9.775E+02
2.600E+01	1.576E-05	3	9.062E-01	9.385E-02	9.759E+02
2.700E+01	1.562E-05	3	9.094E-01	9.064E-02	9.767E+02
2.800E+01	1.925E-05	3	9.011E-01	9.886E-02	9.747E+02
2.900E+01	1.104E-05	3	8.905E-01	1.095E-01	9.720E+02
3.000E+01	1.328E-05	3	8.904E-01	1.096E-01	9.720E+02
3.100E+01	1.228E-05	3	8.900E-01	1.100E-01	9.719E+02
3.200E+01	1.412E-05	3	8.833E-01	1.167E-01	9.703E+02
3.300E+01	1.126E-05	3	8.814E-01	1.186E-01	9.698E+02

3.400E+01	1.005E-05	3	8.960E-01	1.040E-01	9.734E+02
3.500E+01	1.232E-05	3	8.924E-01	1.076E-01	9.725E+02
3.600E+01	1.108E-05	3	8.882E-01	1.118E-01	9.715E+02
3.700E+01	9.632E-06	3	8.955E-01	1.045E-01	9.733E+02
3.800E+01	8.116E-06	3	9.055E-01	9.453E-02	9.758E+02
3.900E+01	1.279E-05	3	9.005E-01	9.945E-02	9.745E+02
4.000E+01	8.005E-06	3	8.943E-01	1.057E-01	9.730E+02
4.100E+01	9.656E-06	3	9.069E-01	9.311E-02	9.761E+02
4.200E+01	6.686E-06	3	9.097E-01	9.030E-02	9.768E+02
4.300E+01	1.204E-05	3	8.975E-01	1.025E-01	9.738E+02
4.400E+01	6.164E-06	3	8.856E-01	1.144E-01	9.708E+02
4.500E+01	8.687E-06	3	8.955E-01	1.045E-01	9.733E+02
4.600E+01	6.820E-06	3	8.880E-01	1.120E-01	9.714E+02
4.700E+01	1.107E-05	3	8.606E-01	1.394E-01	9.647E+02
4.800E+01	5.762E-06	3	8.371E-01	1.629E-01	9.590E+02
4.900E+01	7.816E-06	3	8.499E-01	1.501E-01	9.621E+02
5.000E+01	6.333E-06	3	8.403E-01	1.597E-01	9.598E+02
5.100E+01	1.049E-05	3	8.118E-01	1.882E-01	9.529E+02
5.200E+01	6.976E-06	3	7.885E-01	2.115E-01	9.474E+02
5.300E+01	8.358E-06	3	8.216E-01	1.784E-01	9.552E+02
5.400E+01	6.289E-06	3	8.352E-01	1.648E-01	9.585E+02
5.500E+01	1.076E-05	3	8.217E-01	1.783E-01	9.553E+02
5.600E+01	8.293E-06	3	8.065E-01	1.935E-01	9.516E+02
5.700E+01	9.486E-06	3	8.439E-01	1.561E-01	9.606E+02
5.800E+01	7.411E-06	3	8.736E-01	1.264E-01	9.679E+02
5.900E+01	1.072E-05	3	8.611E-01	1.389E-01	9.648E+02
6.000E+01	8.980E-06	3	8.406E-01	1.594E-01	9.598E+02
6.100E+01	5.402E-05	3	9.280E-01	7.198E-02	9.814E+02
6.200E+01	5.182E-05	3	9.780E-01	2.203E-02	9.942E+02
6.300E+01	4.444E-05	3	9.983E-01	1.724E-03	9.995E+02
6.400E+01	3.240E-05	3	9.991E-01	9.487E-04	9.998E+02
6.500E+01	3.184E-05	3	9.839E-01	1.609E-02	9.958E+02
6.600E+01	2.986E-05	3	9.620E-01	3.799E-02	9.901E+02
6.700E+01	3.515E-05	3	9.459E-01	5.405E-02	9.860E+02
6.800E+01	2.850E-05	3	9.378E-01	6.220E-02	9.839E+02
6.900E+01	2.639E-05	3	8.044E-01	1.956E-01	9.511E+02
7.000E+01	1.886E-05	3	7.163E-01	2.837E-01	9.307E+02
7.100E+01	1.910E-05	3	6.795E-01	3.205E-01	9.224E+02
7.200E+01	2.696E-05	3	7.157E-01	2.843E-01	9.305E+02
7.300E+01	1.698E-05	3	7.256E-01	2.744E-01	9.328E+02
7.400E+01	1.372E-05	3	6.722E-01	3.278E-01	9.207E+02

7.500E+01	1.304E-05	3	6.487E-01	3.513E-01	9.155E+02
7.600E+01	2.233E-05	3	6.240E-01	3.760E-01	9.101E+02
7.700E+01	9.806E-06	3	6.922E-01	3.078E-01	9.252E+02
7.800E+01	1.305E-05	3	6.752E-01	3.248E-01	9.214E+02
7.900E+01	1.035E-05	3	6.702E-01	3.298E-01	9.203E+02
8.000E+01	1.072E-05	3	6.814E-01	3.186E-01	9.228E+02
8.100E+01	1.651E-05	3	6.793E-01	3.207E-01	9.223E+02
8.200E+01	7.446E-06	3	7.211E-01	2.789E-01	9.318E+02
8.300E+01	8.551E-06	3	7.385E-01	2.615E-01	9.357E+02
8.400E+01	8.948E-06	3	7.897E-01	2.103E-01	9.476E+02
8.500E+01	1.127E-05	3	8.210E-01	1.790E-01	9.551E+02
8.600E+01	1.279E-05	3	8.229E-01	1.771E-01	9.556E+02
8.700E+01	5.977E-06	3	8.516E-01	1.484E-01	9.625E+02
8.800E+01	5.421E-06	3	8.417E-01	1.583E-01	9.601E+02
8.900E+01	8.219E-06	3	8.238E-01	1.762E-01	9.558E+02
9.000E+01	9.819E-06	3	8.027E-01	1.973E-01	9.507E+02
9.100E+01	9.943E-06	3	7.677E-01	2.323E-01	9.425E+02
9.200E+01	6.311E-06	3	7.882E-01	2.118E-01	9.473E+02
9.300E+01	5.036E-06	3	7.890E-01	2.110E-01	9.475E+02
9.400E+01	6.501E-06	3	7.888E-01	2.112E-01	9.475E+02
9.500E+01	8.312E-06	3	7.969E-01	2.031E-01	9.494E+02
9.600E+01	7.516E-06	3	7.932E-01	2.068E-01	9.485E+02
9.700E+01	7.102E-06	3	8.091E-01	1.909E-01	9.523E+02
9.800E+01	5.597E-06	3	8.290E-01	1.710E-01	9.570E+02
9.900E+01	4.085E-06	3	8.339E-01	1.661E-01	9.582E+02
1.000E+02	6.388E-06	3	8.392E-01	1.608E-01	9.595E+02
1.010E+02	5.693E-06	3	8.383E-01	1.617E-01	9.593E+02
1.020E+02	5.064E-06	3	8.324E-01	1.676E-01	9.578E+02
1.030E+02	4.257E-06	3	8.501E-01	1.499E-01	9.621E+02
1.040E+02	3.826E-06	3	8.598E-01	1.402E-01	9.645E+02
1.050E+02	3.665E-06	3	8.649E-01	1.351E-01	9.657E+02
1.060E+02	4.998E-06	3	8.595E-01	1.405E-01	9.644E+02
1.070E+02	3.123E-06	3	8.517E-01	1.483E-01	9.625E+02
1.080E+02	3.127E-06	3	8.502E-01	1.498E-01	9.621E+02
1.090E+02	4.049E-06	3	8.604E-01	1.396E-01	9.646E+02
1.100E+02	2.694E-06	3	8.735E-01	1.265E-01	9.678E+02
1.110E+02	3.286E-06	3	8.710E-01	1.290E-01	9.672E+02
1.120E+02	3.708E-06	3	8.635E-01	1.365E-01	9.654E+02
1.130E+02	2.491E-06	3	8.609E-01	1.391E-01	9.648E+02
1.140E+02	3.072E-06	3	8.608E-01	1.392E-01	9.647E+02
1.150E+02	3.800E-06	3	8.715E-01	1.285E-01	9.674E+02

1.160E+02	2.027E-06	3	8.860E-01	1.140E-01	9.709E+02
1.170E+02	2.896E-06	3	8.833E-01	1.167E-01	9.703E+02
1.180E+02	3.368E-06	3	8.814E-01	1.186E-01	9.698E+02
1.190E+02	2.840E-06	3	8.820E-01	1.180E-01	9.699E+02
1.200E+02	3.624E-06	3	8.789E-01	1.211E-01	9.692E+02
1.210E+02	3.460E-06	3	8.916E-01	1.084E-01	9.723E+02
1.220E+02	2.017E-06	3	9.035E-01	9.646E-02	9.753E+02
1.230E+02	2.485E-06	3	8.995E-01	1.005E-01	9.743E+02
1.240E+02	3.358E-06	3	8.964E-01	1.036E-01	9.735E+02
1.250E+02	2.995E-06	3	8.956E-01	1.044E-01	9.733E+02
1.260E+02	3.370E-06	3	8.900E-01	1.100E-01	9.719E+02
1.270E+02	3.160E-06	3	9.015E-01	9.851E-02	9.748E+02
1.280E+02	2.038E-06	3	9.123E-01	8.766E-02	9.775E+02
1.290E+02	2.008E-06	3	9.097E-01	9.035E-02	9.768E+02
1.300E+02	3.120E-06	3	9.060E-01	9.397E-02	9.759E+02
1.310E+02	2.802E-06	3	9.056E-01	9.443E-02	9.758E+02
1.320E+02	2.802E-06	3	9.006E-01	9.943E-02	9.746E+02
1.330E+02	2.868E-06	3	9.082E-01	9.182E-02	9.765E+02
1.340E+02	2.084E-06	3	9.186E-01	8.135E-02	9.791E+02
1.350E+02	1.534E-06	3	9.199E-01	8.011E-02	9.794E+02
1.360E+02	2.646E-06	3	9.170E-01	8.299E-02	9.787E+02
1.370E+02	2.511E-06	3	9.168E-01	8.319E-02	9.786E+02
1.380E+02	2.149E-06	3	9.141E-01	8.592E-02	9.779E+02
1.390E+02	2.473E-06	3	9.166E-01	8.342E-02	9.786E+02
1.400E+02	2.023E-06	3	9.261E-01	7.389E-02	9.810E+02
1.410E+02	1.382E-06	3	9.308E-01	6.918E-02	9.822E+02
1.420E+02	2.020E-06	3	9.285E-01	7.154E-02	9.816E+02
1.430E+02	2.271E-06	3	9.268E-01	7.317E-02	9.811E+02
1.440E+02	1.705E-06	3	9.255E-01	7.452E-02	9.808E+02
1.450E+02	1.978E-06	3	9.237E-01	7.625E-02	9.804E+02
1.460E+02	1.948E-06	3	9.308E-01	6.925E-02	9.821E+02
1.470E+02	1.465E-06	3	9.376E-01	6.237E-02	9.839E+02
1.480E+02	1.374E-06	3	9.375E-01	6.249E-02	9.839E+02
1.490E+02	2.050E-06	3	9.348E-01	6.525E-02	9.832E+02
1.500E+02	1.754E-06	3	9.339E-01	6.607E-02	9.829E+02
1.510E+02	1.585E-06	3	9.320E-01	6.805E-02	9.824E+02
1.520E+02	1.921E-06	3	9.344E-01	6.565E-02	9.831E+02
1.530E+02	1.589E-06	3	9.415E-01	5.847E-02	9.849E+02
1.540E+02	1.070E-06	3	9.450E-01	5.501E-02	9.858E+02
1.550E+02	1.608E-06	3	9.430E-01	5.695E-02	9.853E+02
1.560E+02	1.780E-06	3	9.418E-01	5.819E-02	9.849E+02

1.570E+02	1.359E-06	3	9.412E-01	5.884E-02	9.848E+02
1.580E+02	1.613E-06	3	9.399E-01	6.009E-02	9.845E+02
1.590E+02	1.623E-06	3	9.450E-01	5.501E-02	9.858E+02
1.600E+02	1.214E-06	3	9.506E-01	4.942E-02	9.872E+02
1.610E+02	1.053E-06	3	9.512E-01	4.878E-02	9.874E+02
1.620E+02	1.616E-06	3	9.493E-01	5.069E-02	9.869E+02
1.630E+02	1.520E-06	3	9.486E-01	5.143E-02	9.867E+02
1.640E+02	1.235E-06	3	9.474E-01	5.265E-02	9.864E+02
1.650E+02	1.539E-06	3	9.480E-01	5.198E-02	9.865E+02
1.660E+02	1.342E-06	3	9.533E-01	4.671E-02	9.879E+02
1.670E+02	9.176E-07	3	9.567E-01	4.330E-02	9.888E+02
1.680E+02	1.146E-06	3	9.560E-01	4.397E-02	9.886E+02
1.690E+02	1.459E-06	3	9.546E-01	4.539E-02	9.882E+02
1.700E+02	1.202E-06	3	9.540E-01	4.600E-02	9.881E+02
1.710E+02	1.177E-06	3	9.528E-01	4.718E-02	9.878E+02
1.720E+02	1.352E-06	3	9.552E-01	4.482E-02	9.884E+02
1.730E+02	1.124E-06	3	9.596E-01	4.040E-02	9.895E+02
1.740E+02	7.796E-07	3	9.616E-01	3.837E-02	9.900E+02
1.750E+02	1.159E-06	3	9.607E-01	3.928E-02	9.898E+02
1.760E+02	1.283E-06	3	9.598E-01	4.022E-02	9.895E+02
1.770E+02	9.556E-07	3	9.592E-01	4.080E-02	9.894E+02
1.780E+02	1.087E-06	3	9.586E-01	4.139E-02	9.892E+02
1.790E+02	1.151E-06	3	9.615E-01	3.852E-02	9.900E+02
1.800E+02	9.384E-07	3	9.650E-01	3.502E-02	9.909E+02
1.810E+02	3.065E-06	3	9.648E-01	3.519E-02	9.908E+02
1.820E+02	3.264E-06	3	9.625E-01	3.755E-02	9.902E+02
1.830E+02	4.123E-06	3	9.628E-01	3.720E-02	9.903E+02
1.840E+02	4.631E-06	3	9.681E-01	3.193E-02	9.917E+02
1.850E+02	3.533E-06	3	9.666E-01	3.338E-02	9.913E+02
1.860E+02	2.842E-06	3	9.721E-01	2.787E-02	9.927E+02
1.870E+02	2.476E-06	3	9.757E-01	2.427E-02	9.937E+02
1.880E+02	2.523E-06	3	9.753E-01	2.470E-02	9.936E+02
1.890E+02	3.239E-06	3	9.749E-01	2.511E-02	9.934E+02
1.900E+02	4.143E-06	3	9.744E-01	2.560E-02	9.933E+02
1.910E+02	4.370E-06	3	9.692E-01	3.082E-02	9.920E+02
1.920E+02	3.209E-06	3	9.760E-01	2.396E-02	9.937E+02
1.930E+02	2.574E-06	3	9.792E-01	2.084E-02	9.946E+02
1.940E+02	2.713E-06	3	9.785E-01	2.147E-02	9.944E+02
1.950E+02	4.062E-06	3	9.782E-01	2.180E-02	9.943E+02
1.960E+02	3.902E-06	3	9.758E-01	2.422E-02	9.937E+02
1.970E+02	4.642E-06	3	9.745E-01	2.549E-02	9.934E+02

1.980E+02	3.795E-06	3	9.811E-01	1.888E-02	9.951E+02
1.990E+02	3.293E-06	3	9.825E-01	1.747E-02	9.954E+02
2.000E+02	4.493E-06	3	9.849E-01	1.508E-02	9.961E+02
2.010E+02	4.587E-06	3	9.835E-01	1.651E-02	9.957E+02
2.020E+02	5.546E-06	3	9.787E-01	2.132E-02	9.944E+02
2.030E+02	4.094E-06	3	9.835E-01	1.651E-02	9.957E+02
2.040E+02	4.487E-06	3	9.853E-01	1.475E-02	9.961E+02
2.050E+02	5.165E-06	3	9.871E-01	1.289E-02	9.966E+02
2.060E+02	6.145E-06	3	9.863E-01	1.370E-02	9.964E+02
2.070E+02	6.009E-06	3	9.810E-01	1.896E-02	9.950E+02
2.080E+02	5.386E-06	3	9.842E-01	1.580E-02	9.959E+02
2.090E+02	6.058E-06	3	9.869E-01	1.312E-02	9.966E+02
2.100E+02	6.161E-06	3	9.888E-01	1.124E-02	9.971E+02
2.110E+02	7.375E-06	3	9.889E-01	1.114E-02	9.971E+02
2.120E+02	6.749E-06	3	9.849E-01	1.506E-02	9.961E+02
2.130E+02	7.233E-06	3	9.870E-01	1.300E-02	9.966E+02
2.140E+02	7.835E-06	3	9.902E-01	9.795E-03	9.974E+02
2.150E+02	7.922E-06	3	9.914E-01	8.575E-03	9.978E+02
2.160E+02	8.321E-06	3	9.912E-01	8.768E-03	9.977E+02
2.170E+02	7.914E-06	3	9.876E-01	1.241E-02	9.968E+02
2.180E+02	9.862E-06	3	9.889E-01	1.106E-02	9.971E+02
2.190E+02	7.917E-06	3	9.925E-01	7.463E-03	9.980E+02
2.200E+02	9.519E-06	3	9.931E-01	6.925E-03	9.982E+02
2.210E+02	9.515E-06	3	9.924E-01	7.558E-03	9.980E+02
2.220E+02	1.014E-05	3	9.890E-01	1.102E-02	9.971E+02
2.230E+02	1.036E-05	3	9.918E-01	8.152E-03	9.979E+02
2.240E+02	7.181E-06	3	9.940E-01	5.990E-03	9.984E+02
2.250E+02	1.191E-05	3	9.952E-01	4.809E-03	9.987E+02
2.260E+02	1.133E-05	3	9.936E-01	6.388E-03	9.983E+02
2.270E+02	1.514E-05	3	9.917E-01	8.294E-03	9.978E+02
2.280E+02	1.180E-05	3	9.948E-01	5.211E-03	9.986E+02
2.290E+02	1.134E-05	3	9.958E-01	4.223E-03	9.989E+02
2.300E+02	1.587E-05	3	9.968E-01	3.170E-03	9.992E+02
2.310E+02	1.489E-05	3	9.942E-01	5.828E-03	9.985E+02
2.320E+02	1.468E-05	3	9.952E-01	4.766E-03	9.987E+02
2.330E+02	1.352E-05	3	9.962E-01	3.760E-03	9.990E+02
2.340E+02	1.876E-05	3	9.974E-01	2.580E-03	9.993E+02
2.350E+02	1.662E-05	3	9.969E-01	3.125E-03	9.992E+02
2.360E+02	1.741E-05	3	9.961E-01	3.903E-03	9.990E+02
2.370E+02	1.351E-05	3	9.971E-01	2.927E-03	9.992E+02
2.380E+02	1.567E-05	3	9.977E-01	2.278E-03	9.994E+02

2.390E+02	1.637E-05	3	9.982E-01	1.826E-03	9.995E+02
2.400E+02	1.682E-05	3	9.968E-01	3.175E-03	9.992E+02
2.410E+02	1.760E-05	3	9.974E-01	2.581E-03	9.993E+02
2.420E+02	1.398E-05	3	9.980E-01	1.961E-03	9.995E+02
2.430E+02	1.781E-05	3	9.986E-01	1.356E-03	9.996E+02
2.440E+02	1.490E-05	3	9.977E-01	2.297E-03	9.994E+02
2.450E+02	1.829E-05	3	9.977E-01	2.296E-03	9.994E+02
2.460E+02	1.493E-05	3	9.983E-01	1.742E-03	9.995E+02
2.470E+02	1.975E-05	3	9.988E-01	1.162E-03	9.997E+02
2.480E+02	1.659E-05	3	9.985E-01	1.459E-03	9.996E+02
2.490E+02	1.925E-05	3	9.981E-01	1.884E-03	9.995E+02
2.500E+02	1.566E-05	3	9.986E-01	1.427E-03	9.996E+02
2.510E+02	1.954E-05	3	9.990E-01	1.002E-03	9.997E+02
2.520E+02	1.729E-05	3	9.991E-01	9.165E-04	9.998E+02
2.530E+02	1.983E-05	3	9.985E-01	1.484E-03	9.996E+02
2.540E+02	1.696E-05	3	9.988E-01	1.172E-03	9.997E+02
2.550E+02	1.889E-05	3	9.991E-01	8.702E-04	9.998E+02
2.560E+02	1.713E-05	3	9.994E-01	6.326E-04	9.998E+02
2.570E+02	1.958E-05	3	9.988E-01	1.225E-03	9.997E+02
2.580E+02	1.935E-05	3	9.990E-01	1.014E-03	9.997E+02
2.590E+02	1.736E-05	3	9.992E-01	7.869E-04	9.998E+02
2.600E+02	1.942E-05	3	9.995E-01	4.913E-04	9.999E+02
2.610E+02	2.011E-05	3	9.990E-01	1.049E-03	9.997E+02
2.620E+02	2.026E-05	3	9.991E-01	9.105E-04	9.998E+02
2.630E+02	1.741E-05	3	9.993E-01	7.285E-04	9.998E+02
2.640E+02	2.091E-05	3	9.996E-01	4.150E-04	9.999E+02
2.650E+02	2.061E-05	3	9.991E-01	9.060E-04	9.998E+02
2.660E+02	2.093E-05	3	9.992E-01	8.186E-04	9.998E+02
2.670E+02	1.843E-05	3	9.993E-01	6.673E-04	9.998E+02
2.680E+02	2.199E-05	3	9.996E-01	3.622E-04	9.999E+02
2.690E+02	2.102E-05	3	9.992E-01	7.792E-04	9.998E+02
2.700E+02	2.167E-05	3	9.993E-01	7.259E-04	9.998E+02
2.710E+02	1.934E-05	3	9.994E-01	5.960E-04	9.998E+02
2.720E+02	2.242E-05	3	9.997E-01	3.169E-04	9.999E+02
2.730E+02	2.114E-05	3	9.993E-01	6.733E-04	9.998E+02
2.740E+02	2.211E-05	3	9.994E-01	6.399E-04	9.998E+02
2.750E+02	1.969E-05	3	9.995E-01	5.264E-04	9.999E+02
2.760E+02	2.231E-05	3	9.997E-01	2.778E-04	9.999E+02
2.770E+02	2.117E-05	3	9.994E-01	5.928E-04	9.998E+02
2.780E+02	2.235E-05	3	9.994E-01	5.661E-04	9.999E+02
2.790E+02	1.979E-05	3	9.995E-01	4.657E-04	9.999E+02

2.800E+02	2.202E-05	3	9.998E-01	2.439E-04	9.999E+02
2.810E+02	2.140E-05	3	9.995E-01	5.276E-04	9.999E+02
2.820E+02	2.268E-05	3	9.995E-01	4.991E-04	9.999E+02
2.830E+02	2.000E-05	3	9.996E-01	4.082E-04	9.999E+02
2.840E+02	2.166E-05	3	9.998E-01	2.133E-04	9.999E+02
2.850E+02	2.185E-05	3	9.995E-01	4.677E-04	9.999E+02
2.860E+02	2.294E-05	3	9.996E-01	4.360E-04	9.999E+02
2.870E+02	2.061E-05	3	9.997E-01	3.499E-04	9.999E+02
2.880E+02	2.103E-05	3	9.998E-01	1.873E-04	1.000E+03
2.890E+02	2.225E-05	3	9.996E-01	4.112E-04	9.999E+02
2.900E+02	2.171E-05	3	9.996E-01	3.794E-04	9.999E+02
2.910E+02	2.235E-05	3	9.997E-01	2.937E-04	9.999E+02
2.920E+02	1.998E-05	3	9.998E-01	1.687E-04	1.000E+03
2.930E+02	2.280E-05	3	9.996E-01	3.606E-04	9.999E+02
2.940E+02	2.056E-05	3	9.997E-01	3.324E-04	9.999E+02
2.950E+02	2.481E-05	3	9.998E-01	2.430E-04	9.999E+02
2.960E+02	2.055E-05	3	9.998E-01	1.590E-04	1.000E+03
2.970E+02	2.332E-05	3	9.997E-01	3.179E-04	9.999E+02
2.980E+02	2.000E-05	3	9.997E-01	2.954E-04	9.999E+02
2.990E+02	2.574E-05	3	9.998E-01	1.991E-04	9.999E+02
3.000E+02	2.224E-05	3	9.998E-01	1.575E-04	1.000E+03
3.010E+02	2.261E-05	3	9.997E-01	2.826E-04	9.999E+02
3.020E+02	1.979E-05	3	9.997E-01	2.663E-04	9.999E+02
3.030E+02	2.464E-05	3	9.998E-01	1.618E-04	1.000E+03
3.040E+02	2.218E-05	3	9.998E-01	1.624E-04	1.000E+03
3.050E+02	2.213E-05	3	9.997E-01	2.513E-04	9.999E+02
3.060E+02	1.996E-05	3	9.998E-01	2.399E-04	9.999E+02
3.070E+02	2.655E-05	3	9.999E-01	1.303E-04	1.000E+03
3.080E+02	2.125E-05	3	9.998E-01	1.697E-04	1.000E+03
3.090E+02	2.332E-05	3	9.998E-01	2.224E-04	9.999E+02
3.100E+02	2.130E-05	3	9.998E-01	2.105E-04	9.999E+02
3.110E+02	2.659E-05	3	9.999E-01	1.044E-04	1.000E+03
3.120E+02	2.232E-05	3	9.998E-01	1.740E-04	1.000E+03
3.130E+02	2.452E-05	3	9.998E-01	1.971E-04	9.999E+02
3.140E+02	2.231E-05	3	9.998E-01	1.800E-04	1.000E+03
3.150E+02	2.464E-05	3	9.999E-01	8.503E-05	1.000E+03
3.160E+02	2.413E-05	3	9.998E-01	1.712E-04	1.000E+03
3.170E+02	2.526E-05	3	9.998E-01	1.751E-04	1.000E+03
3.180E+02	2.292E-05	3	9.998E-01	1.512E-04	1.000E+03
3.190E+02	2.327E-05	3	9.999E-01	7.354E-05	1.000E+03
3.200E+02	2.457E-05	3	9.998E-01	1.603E-04	1.000E+03

3.210E+02	2.338E-05	3	9.998E-01	1.562E-04	1.000E+03
3.220E+02	2.639E-05	3	9.999E-01	1.227E-04	1.000E+03
3.230E+02	2.182E-05	3	9.999E-01	7.005E-05	1.000E+03
3.240E+02	2.502E-05	3	9.999E-01	1.449E-04	1.000E+03
3.250E+02	2.178E-05	3	9.999E-01	1.407E-04	1.000E+03
3.260E+02	2.748E-05	3	9.999E-01	9.633E-05	1.000E+03
3.270E+02	2.388E-05	3	9.999E-01	7.363E-05	1.000E+03
3.280E+02	2.329E-05	3	9.999E-01	1.308E-04	1.000E+03
3.290E+02	2.073E-05	3	9.999E-01	1.289E-04	1.000E+03
3.300E+02	2.693E-05	3	9.999E-01	7.512E-05	1.000E+03
3.310E+02	2.242E-05	3	9.999E-01	8.205E-05	1.000E+03
3.320E+02	2.395E-05	3	9.999E-01	1.170E-04	1.000E+03
3.330E+02	2.224E-05	3	9.999E-01	1.156E-04	1.000E+03
3.340E+02	2.805E-05	3	9.999E-01	5.835E-05	1.000E+03
3.350E+02	2.341E-05	3	9.999E-01	8.968E-05	1.000E+03
3.360E+02	2.568E-05	3	9.999E-01	1.046E-04	1.000E+03
3.370E+02	2.361E-05	3	9.999E-01	9.891E-05	1.000E+03
3.380E+02	2.572E-05	3	1.000E+00	4.639E-05	1.000E+03
3.390E+02	2.578E-05	3	9.999E-01	9.125E-05	1.000E+03
3.400E+02	2.647E-05	3	9.999E-01	9.385E-05	1.000E+03
3.410E+02	2.491E-05	3	9.999E-01	8.211E-05	1.000E+03
3.420E+02	2.368E-05	3	1.000E+00	4.042E-05	1.000E+03
3.430E+02	2.601E-05	3	9.999E-01	8.591E-05	1.000E+03
3.440E+02	2.342E-05	3	9.999E-01	8.483E-05	1.000E+03
3.450E+02	2.916E-05	3	9.999E-01	6.493E-05	1.000E+03
3.460E+02	2.405E-05	3	1.000E+00	4.038E-05	1.000E+03
3.470E+02	2.531E-05	3	9.999E-01	7.844E-05	1.000E+03
3.480E+02	2.217E-05	3	9.999E-01	7.827E-05	1.000E+03
3.490E+02	2.708E-05	3	9.999E-01	5.026E-05	1.000E+03
3.500E+02	2.432E-05	3	1.000E+00	4.529E-05	1.000E+03
3.510E+02	2.407E-05	3	9.999E-01	7.123E-05	1.000E+03
3.520E+02	2.249E-05	3	9.999E-01	7.226E-05	1.000E+03
3.530E+02	2.933E-05	3	1.000E+00	3.868E-05	1.000E+03
3.540E+02	2.363E-05	3	9.999E-01	5.179E-05	1.000E+03
3.550E+02	2.638E-05	3	9.999E-01	6.397E-05	1.000E+03
3.560E+02	2.413E-05	3	9.999E-01	6.285E-05	1.000E+03
3.570E+02	2.674E-05	3	1.000E+00	3.006E-05	1.000E+03
3.580E+02	2.653E-05	3	9.999E-01	5.477E-05	1.000E+03
3.590E+02	2.731E-05	3	9.999E-01	5.766E-05	1.000E+03
3.600E+02	2.551E-05	3	9.999E-01	5.242E-05	1.000E+03
3.610E+02	6.091E-05	3	9.846E-01	1.537E-02	9.960E+02

3.620E+02	6.064E-05	3	5.639E-01	4.361E-01	8.972E+02
3.630E+02	7.198E-05	3	1.463E-01	8.537E-01	8.169E+02
3.640E+02	7.182E-05	3	4.361E-02	9.564E-01	7.992E+02
3.650E+02	7.192E-05	3	2.267E-01	7.733E-01	8.312E+02
3.660E+02	7.568E-05	3	1.265E-01	8.735E-01	8.134E+02
3.670E+02	8.020E-05	3	1.553E-01	8.447E-01	8.184E+02
3.680E+02	1.025E-06	4	3.382E-01	6.618E-01	8.519E+02
3.690E+02	5.962E-05	3	7.211E-01	2.789E-01	9.318E+02
3.700E+02	8.491E-05	3	6.852E-01	3.148E-01	9.236E+02
3.710E+02	7.728E-05	3	7.829E-01	2.171E-01	9.461E+02
3.720E+02	9.506E-05	3	8.336E-01	1.664E-01	9.581E+02
3.730E+02	6.237E-05	3	8.867E-01	1.133E-01	9.711E+02
3.740E+02	5.654E-05	3	9.069E-01	9.308E-02	9.761E+02
3.750E+02	5.553E-05	3	9.477E-01	5.233E-02	9.864E+02
3.760E+02	8.603E-05	3	9.606E-01	3.935E-02	9.898E+02
3.770E+02	7.581E-05	3	9.705E-01	2.953E-02	9.923E+02
3.780E+02	4.088E-05	3	9.701E-01	2.989E-02	9.922E+02
3.790E+02	6.650E-05	3	9.358E-01	6.423E-02	9.834E+02
3.800E+02	8.901E-05	3	8.800E-01	1.200E-01	9.694E+02
3.810E+02	6.674E-05	3	8.328E-01	1.672E-01	9.579E+02
3.820E+02	3.844E-05	3	8.264E-01	1.736E-01	9.564E+02
3.830E+02	5.140E-05	3	7.445E-01	2.555E-01	9.371E+02
3.840E+02	6.882E-05	3	7.144E-01	2.856E-01	9.302E+02
3.850E+02	5.106E-05	3	6.549E-01	3.451E-01	9.169E+02
3.860E+02	4.319E-05	3	6.618E-01	3.382E-01	9.184E+02
3.870E+02	3.529E-05	3	6.314E-01	3.686E-01	9.117E+02
3.880E+02	5.262E-05	3	6.743E-01	3.257E-01	9.212E+02
3.890E+02	6.342E-05	3	7.141E-01	2.859E-01	9.302E+02
3.900E+02	4.498E-05	3	7.251E-01	2.749E-01	9.327E+02
3.910E+02	2.930E-05	3	7.545E-01	2.455E-01	9.394E+02
3.920E+02	3.144E-05	3	7.636E-01	2.364E-01	9.415E+02
3.930E+02	4.551E-05	3	8.105E-01	1.895E-01	9.526E+02
3.940E+02	3.606E-05	3	8.366E-01	1.634E-01	9.589E+02
3.950E+02	3.949E-05	3	8.438E-01	1.562E-01	9.606E+02
3.960E+02	2.876E-05	3	8.446E-01	1.554E-01	9.608E+02
3.970E+02	3.020E-05	3	8.438E-01	1.562E-01	9.606E+02
3.980E+02	4.269E-05	3	8.610E-01	1.390E-01	9.648E+02
3.990E+02	2.422E-05	3	8.577E-01	1.423E-01	9.640E+02
4.000E+02	3.713E-05	3	8.499E-01	1.501E-01	9.621E+02
4.010E+02	2.758E-05	3	8.352E-01	1.648E-01	9.585E+02
4.020E+02	2.476E-05	3	8.207E-01	1.793E-01	9.550E+02

4.030E+02	3.764E-05	3	8.209E-01	1.791E-01	9.551E+02
4.040E+02	2.069E-05	3	8.044E-01	1.956E-01	9.511E+02
4.050E+02	3.418E-05	3	7.855E-01	2.145E-01	9.467E+02
4.060E+02	2.790E-05	3	7.639E-01	2.361E-01	9.416E+02
4.070E+02	1.772E-05	3	7.402E-01	2.598E-01	9.361E+02
4.080E+02	3.306E-05	3	7.451E-01	2.549E-01	9.373E+02
4.090E+02	2.074E-05	3	7.555E-01	2.445E-01	9.397E+02
4.100E+02	2.914E-05	3	7.418E-01	2.582E-01	9.365E+02
4.110E+02	3.014E-05	3	7.223E-01	2.777E-01	9.320E+02
4.120E+02	1.252E-05	3	7.073E-01	2.927E-01	9.286E+02
4.130E+02	2.910E-05	3	7.336E-01	2.664E-01	9.346E+02
4.140E+02	2.581E-05	3	7.745E-01	2.255E-01	9.441E+02
4.150E+02	2.073E-05	3	7.758E-01	2.242E-01	9.444E+02
4.160E+02	3.347E-05	3	7.624E-01	2.376E-01	9.413E+02
4.170E+02	1.738E-05	3	7.508E-01	2.492E-01	9.386E+02
4.180E+02	2.039E-05	3	7.562E-01	2.438E-01	9.398E+02
4.190E+02	2.828E-05	3	7.898E-01	2.102E-01	9.477E+02
4.200E+02	2.090E-05	3	7.998E-01	2.002E-01	9.501E+02
4.210E+02	3.253E-05	3	7.794E-01	2.206E-01	9.452E+02
4.220E+02	2.664E-05	3	7.641E-01	2.359E-01	9.417E+02
4.230E+02	1.445E-05	3	7.434E-01	2.566E-01	9.369E+02
4.240E+02	2.939E-05	3	7.601E-01	2.399E-01	9.407E+02
4.250E+02	3.022E-05	3	7.812E-01	2.188E-01	9.457E+02
4.260E+02	2.371E-05	3	7.649E-01	2.351E-01	9.418E+02
4.270E+02	3.518E-05	3	7.400E-01	2.600E-01	9.361E+02
4.280E+02	2.003E-05	3	7.173E-01	2.827E-01	9.309E+02
4.290E+02	2.022E-05	3	7.045E-01	2.955E-01	9.280E+02
4.300E+02	3.215E-05	3	7.316E-01	2.684E-01	9.341E+02
4.310E+02	2.738E-05	3	7.507E-01	2.493E-01	9.386E+02
4.320E+02	2.831E-05	3	7.211E-01	2.789E-01	9.318E+02
4.330E+02	3.177E-05	3	7.018E-01	2.982E-01	9.274E+02
4.340E+02	1.681E-05	3	6.775E-01	3.225E-01	9.219E+02
4.350E+02	2.460E-05	3	6.909E-01	3.091E-01	9.249E+02
4.360E+02	3.128E-05	3	7.320E-01	2.680E-01	9.343E+02
4.370E+02	2.233E-05	3	7.438E-01	2.562E-01	9.370E+02
4.380E+02	3.179E-05	3	7.178E-01	2.822E-01	9.310E+02
4.390E+02	2.808E-05	3	6.998E-01	3.002E-01	9.269E+02
4.400E+02	1.558E-05	3	6.789E-01	3.211E-01	9.222E+02
4.410E+02	2.669E-05	3	6.983E-01	3.017E-01	9.266E+02
4.420E+02	3.076E-05	3	7.343E-01	2.657E-01	9.348E+02
4.430E+02	1.991E-05	3	7.322E-01	2.678E-01	9.343E+02

4.440E+02	3.270E-05	3	7.053E-01	2.947E-01	9.282E+02
4.450E+02	2.563E-05	3	6.844E-01	3.156E-01	9.235E+02
4.460E+02	1.461E-05	3	6.629E-01	3.371E-01	9.187E+02
4.470E+02	2.743E-05	3	6.799E-01	3.201E-01	9.225E+02
4.480E+02	3.000E-05	3	7.131E-01	2.869E-01	9.299E+02
4.490E+02	1.990E-05	3	7.053E-01	2.947E-01	9.282E+02
4.500E+02	3.238E-05	3	6.757E-01	3.243E-01	9.215E+02
4.510E+02	2.459E-05	3	6.539E-01	3.461E-01	9.167E+02
4.520E+02	1.413E-05	3	6.332E-01	3.668E-01	9.121E+02
4.530E+02	2.712E-05	3	6.532E-01	3.468E-01	9.165E+02
4.540E+02	2.954E-05	3	6.916E-01	3.084E-01	9.251E+02
4.550E+02	2.029E-05	3	6.881E-01	3.119E-01	9.243E+02
4.560E+02	3.135E-05	3	6.588E-01	3.412E-01	9.178E+02
4.570E+02	2.484E-05	3	6.396E-01	3.604E-01	9.135E+02
4.580E+02	1.397E-05	3	6.211E-01	3.789E-01	9.095E+02
4.590E+02	2.595E-05	3	6.405E-01	3.595E-01	9.137E+02
4.600E+02	2.909E-05	3	6.796E-01	3.204E-01	9.224E+02
4.610E+02	2.057E-05	3	6.813E-01	3.187E-01	9.228E+02
4.620E+02	2.933E-05	3	6.495E-01	3.505E-01	9.157E+02
4.630E+02	2.613E-05	3	6.308E-01	3.692E-01	9.116E+02
4.640E+02	1.423E-05	3	6.102E-01	3.898E-01	9.071E+02
4.650E+02	2.370E-05	3	6.207E-01	3.793E-01	9.094E+02
4.660E+02	2.816E-05	3	6.564E-01	3.436E-01	9.172E+02
4.670E+02	2.191E-05	3	6.655E-01	3.345E-01	9.192E+02
4.680E+02	2.615E-05	3	6.292E-01	3.708E-01	9.113E+02
4.690E+02	2.807E-05	3	6.106E-01	3.894E-01	9.072E+02
4.700E+02	1.517E-05	3	5.898E-01	4.102E-01	9.027E+02
4.710E+02	1.991E-05	3	5.920E-01	4.080E-01	9.032E+02
4.720E+02	2.769E-05	3	6.255E-01	3.745E-01	9.104E+02
4.730E+02	2.431E-05	3	6.476E-01	3.524E-01	9.153E+02
4.740E+02	2.222E-05	3	6.137E-01	3.863E-01	9.079E+02
4.750E+02	2.969E-05	3	5.955E-01	4.045E-01	9.040E+02
4.760E+02	1.840E-05	3	5.776E-01	4.224E-01	9.002E+02
4.770E+02	1.548E-05	3	5.725E-01	4.275E-01	8.991E+02
4.780E+02	2.712E-05	3	5.996E-01	4.004E-01	9.049E+02
4.790E+02	2.632E-05	3	6.322E-01	3.678E-01	9.119E+02
4.800E+02	1.940E-05	3	6.122E-01	3.878E-01	9.076E+02
4.810E+02	2.901E-05	3	5.875E-01	4.125E-01	9.023E+02
4.820E+02	2.141E-05	3	5.711E-01	4.289E-01	8.988E+02
4.830E+02	1.271E-05	3	5.578E-01	4.422E-01	8.959E+02
4.840E+02	2.406E-05	3	5.722E-01	4.278E-01	8.990E+02

4.850E+02	2.647E-05	3	6.067E-01	3.933E-01	9.064E+02
4.860E+02	1.934E-05	3	6.079E-01	3.921E-01	9.066E+02
4.870E+02	2.491E-05	3	5.726E-01	4.274E-01	8.991E+02
4.880E+02	2.533E-05	3	5.571E-01	4.429E-01	8.958E+02
4.890E+02	1.362E-05	3	5.407E-01	4.593E-01	8.924E+02
4.900E+02	1.841E-05	3	5.432E-01	4.568E-01	8.929E+02
4.910E+02	2.518E-05	3	5.723E-01	4.277E-01	8.990E+02
4.920E+02	2.276E-05	3	5.947E-01	4.053E-01	9.038E+02
4.930E+02	1.979E-05	3	5.625E-01	4.375E-01	8.969E+02
4.940E+02	2.740E-05	3	5.448E-01	4.552E-01	8.932E+02
4.950E+02	1.850E-05	3	5.307E-01	4.693E-01	8.903E+02
4.960E+02	1.281E-05	3	5.234E-01	4.766E-01	8.888E+02
4.970E+02	2.389E-05	3	5.410E-01	4.590E-01	8.924E+02
4.980E+02	2.486E-05	3	5.741E-01	4.259E-01	8.994E+02
4.990E+02	1.789E-05	3	5.672E-01	4.328E-01	8.979E+02
5.000E+02	2.444E-05	3	5.363E-01	4.637E-01	8.914E+02
5.010E+02	2.289E-05	3	5.238E-01	4.762E-01	8.888E+02
5.020E+02	1.230E-05	3	5.108E-01	4.892E-01	8.861E+02
5.030E+02	1.835E-05	3	5.147E-01	4.853E-01	8.869E+02
5.040E+02	2.352E-05	3	5.421E-01	4.579E-01	8.926E+02
5.050E+02	2.091E-05	3	5.608E-01	4.392E-01	8.966E+02
5.060E+02	1.881E-05	3	5.280E-01	4.720E-01	8.897E+02
5.070E+02	2.547E-05	3	5.123E-01	4.877E-01	8.865E+02
5.080E+02	1.746E-05	3	5.001E-01	4.999E-01	8.839E+02
5.090E+02	1.197E-05	3	4.930E-01	5.070E-01	8.825E+02
5.100E+02	2.212E-05	3	5.066E-01	4.934E-01	8.853E+02
5.110E+02	2.331E-05	3	5.370E-01	4.630E-01	8.916E+02
5.120E+02	1.687E-05	3	5.326E-01	4.674E-01	8.907E+02
5.130E+02	2.209E-05	3	5.015E-01	4.985E-01	8.842E+02
5.140E+02	2.225E-05	3	4.915E-01	5.085E-01	8.822E+02
5.150E+02	1.227E-05	3	4.803E-01	5.197E-01	8.799E+02
5.160E+02	1.574E-05	3	4.816E-01	5.184E-01	8.802E+02
5.170E+02	2.186E-05	3	5.048E-01	4.952E-01	8.849E+02
5.180E+02	2.042E-05	3	5.269E-01	4.731E-01	8.895E+02
5.190E+02	1.682E-05	3	5.007E-01	4.993E-01	8.841E+02
5.200E+02	2.347E-05	3	4.830E-01	5.170E-01	8.805E+02
5.210E+02	1.773E-05	3	4.735E-01	5.265E-01	8.785E+02
5.220E+02	1.062E-05	3	4.655E-01	5.345E-01	8.769E+02
5.230E+02	1.924E-05	3	4.731E-01	5.269E-01	8.785E+02
5.240E+02	2.164E-05	3	5.002E-01	4.998E-01	8.840E+02
5.250E+02	1.678E-05	3	5.062E-01	4.938E-01	8.852E+02

5.260E+02	1.844E-05	3	4.736E-01	5.264E-01	8.786E+02
5.270E+02	2.202E-05	3	4.641E-01	5.359E-01	8.766E+02
5.280E+02	1.415E-05	3	4.545E-01	5.455E-01	8.747E+02
5.290E+02	1.206E-05	3	4.512E-01	5.488E-01	8.740E+02
5.300E+02	2.008E-05	3	4.657E-01	5.343E-01	8.770E+02
5.310E+02	2.037E-05	3	4.911E-01	5.089E-01	8.821E+02
5.320E+02	1.491E-05	3	4.799E-01	5.201E-01	8.798E+02
5.330E+02	2.013E-05	3	4.547E-01	5.453E-01	8.747E+02
5.340E+02	1.930E-05	3	4.478E-01	5.522E-01	8.734E+02
5.350E+02	1.061E-05	3	4.392E-01	5.608E-01	8.716E+02
5.360E+02	1.457E-05	3	4.406E-01	5.594E-01	8.719E+02
5.370E+02	1.929E-05	3	4.609E-01	5.391E-01	8.760E+02
5.380E+02	1.784E-05	3	4.787E-01	5.213E-01	8.796E+02
5.390E+02	1.490E-05	3	4.547E-01	5.453E-01	8.747E+02
5.400E+02	2.042E-05	3	4.391E-01	5.609E-01	8.716E+02
5.410E+02	1.617E-05	3	4.325E-01	5.675E-01	8.703E+02
5.420E+02	9.450E-06	3	4.258E-01	5.742E-01	8.690E+02
5.430E+02	1.643E-05	3	4.311E-01	5.689E-01	8.700E+02
5.440E+02	1.899E-05	3	4.538E-01	5.462E-01	8.745E+02
5.450E+02	1.516E-05	3	4.610E-01	5.390E-01	8.760E+02
5.460E+02	1.548E-05	3	4.329E-01	5.671E-01	8.704E+02
5.470E+02	1.945E-05	3	4.238E-01	5.762E-01	8.686E+02
5.480E+02	1.360E-05	3	4.170E-01	5.830E-01	8.672E+02
5.490E+02	9.741E-06	3	4.132E-01	5.868E-01	8.665E+02
5.500E+02	1.693E-05	3	4.227E-01	5.773E-01	8.683E+02
5.510E+02	1.813E-05	3	4.447E-01	5.553E-01	8.727E+02
5.520E+02	1.306E-05	3	4.417E-01	5.583E-01	8.721E+02
5.530E+02	1.619E-05	3	4.164E-01	5.836E-01	8.671E+02
5.540E+02	1.794E-05	3	4.105E-01	5.895E-01	8.659E+02
5.550E+02	1.129E-05	3	4.039E-01	5.961E-01	8.646E+02
5.560E+02	1.083E-05	3	4.026E-01	5.974E-01	8.644E+02
5.570E+02	1.651E-05	3	4.156E-01	5.844E-01	8.669E+02
5.580E+02	1.664E-05	3	4.341E-01	5.659E-01	8.706E+02
5.590E+02	1.214E-05	3	4.225E-01	5.775E-01	8.683E+02
5.600E+02	1.647E-05	3	4.024E-01	5.976E-01	8.643E+02
5.610E+02	1.619E-05	3	3.978E-01	6.022E-01	8.634E+02
5.620E+02	9.291E-06	3	3.916E-01	6.084E-01	8.622E+02
5.630E+02	1.185E-05	3	3.924E-01	6.076E-01	8.624E+02
5.640E+02	1.576E-05	3	4.078E-01	5.922E-01	8.654E+02
5.650E+02	1.491E-05	3	4.214E-01	5.786E-01	8.681E+02
5.660E+02	1.181E-05	3	4.043E-01	5.957E-01	8.647E+02

5.670E+02	1.624E-05	3	3.895E-01	6.105E-01	8.618E+02
5.680E+02	1.436E-05	3	3.855E-01	6.145E-01	8.610E+02
5.690E+02	8.017E-06	3	3.803E-01	6.197E-01	8.600E+02
5.700E+02	1.241E-05	3	3.832E-01	6.168E-01	8.606E+02
5.710E+02	1.530E-05	3	3.997E-01	6.003E-01	8.638E+02
5.720E+02	1.316E-05	3	4.083E-01	5.917E-01	8.655E+02
5.730E+02	1.160E-05	3	3.888E-01	6.112E-01	8.617E+02
5.740E+02	1.562E-05	3	3.781E-01	6.219E-01	8.596E+02
5.750E+02	1.267E-05	3	3.744E-01	6.256E-01	8.589E+02
5.760E+02	7.445E-06	3	3.702E-01	6.298E-01	8.581E+02
5.770E+02	1.253E-05	3	3.750E-01	6.250E-01	8.590E+02
5.780E+02	1.467E-05	3	3.910E-01	6.090E-01	8.621E+02
5.790E+02	1.157E-05	3	3.948E-01	6.052E-01	8.628E+02
5.800E+02	1.144E-05	3	3.751E-01	6.249E-01	8.590E+02
5.810E+02	1.476E-05	3	3.672E-01	6.328E-01	8.575E+02
5.820E+02	1.125E-05	3	3.636E-01	6.364E-01	8.568E+02
5.830E+02	7.244E-06	3	3.605E-01	6.395E-01	8.562E+02
5.840E+02	1.230E-05	3	3.669E-01	6.331E-01	8.574E+02
5.850E+02	1.386E-05	3	3.816E-01	6.184E-01	8.603E+02
5.860E+02	1.020E-05	3	3.815E-01	6.185E-01	8.603E+02
5.870E+02	1.129E-05	3	3.631E-01	6.369E-01	8.567E+02
5.880E+02	1.385E-05	3	3.570E-01	6.430E-01	8.555E+02
5.890E+02	1.007E-05	3	3.537E-01	6.463E-01	8.549E+02
5.900E+02	7.227E-06	3	3.516E-01	6.484E-01	8.545E+02
5.910E+02	1.187E-05	3	3.591E-01	6.409E-01	8.559E+02
5.920E+02	1.295E-05	3	3.721E-01	6.279E-01	8.584E+02
5.930E+02	9.112E-06	3	3.692E-01	6.308E-01	8.579E+02
5.940E+02	1.105E-05	3	3.525E-01	6.475E-01	8.547E+02
5.950E+02	1.295E-05	3	3.475E-01	6.525E-01	8.537E+02
5.960E+02	9.042E-06	3	3.445E-01	6.555E-01	8.531E+02
5.970E+02	7.254E-06	3	3.434E-01	6.566E-01	8.529E+02
5.980E+02	1.134E-05	3	3.514E-01	6.486E-01	8.544E+02
5.990E+02	1.204E-05	3	3.626E-01	6.374E-01	8.566E+02
6.000E+02	8.280E-06	3	3.576E-01	6.424E-01	8.557E+02
6.010E+02	1.071E-05	3	3.426E-01	6.574E-01	8.528E+02
6.020E+02	1.208E-05	3	3.384E-01	6.616E-01	8.520E+02
6.030E+02	8.151E-06	3	3.358E-01	6.642E-01	8.515E+02
6.040E+02	7.242E-06	3	3.356E-01	6.644E-01	8.514E+02
6.050E+02	1.078E-05	3	3.437E-01	6.563E-01	8.530E+02
6.060E+02	1.114E-05	3	3.533E-01	6.467E-01	8.548E+02
6.070E+02	7.637E-06	3	3.470E-01	6.530E-01	8.536E+02

6.080E+02	1.028E-05	3	3.336E-01	6.664E-01	8.511E+02
6.090E+02	1.124E-05	3	3.300E-01	6.700E-01	8.504E+02
6.100E+02	7.391E-06	3	3.278E-01	6.722E-01	8.500E+02
6.110E+02	7.159E-06	3	3.283E-01	6.717E-01	8.500E+02
6.120E+02	1.021E-05	3	3.362E-01	6.638E-01	8.516E+02
6.130E+02	1.030E-05	3	3.442E-01	6.558E-01	8.531E+02
6.140E+02	7.121E-06	3	3.372E-01	6.628E-01	8.517E+02
6.150E+02	9.791E-06	3	3.252E-01	6.748E-01	8.495E+02
6.160E+02	1.046E-05	3	3.221E-01	6.779E-01	8.489E+02
6.170E+02	6.743E-06	3	3.202E-01	6.798E-01	8.485E+02
6.180E+02	6.991E-06	3	3.212E-01	6.788E-01	8.487E+02
6.190E+02	9.662E-06	3	3.288E-01	6.712E-01	8.501E+02
6.200E+02	9.530E-06	3	3.355E-01	6.645E-01	8.514E+02
6.210E+02	6.667E-06	3	3.281E-01	6.719E-01	8.500E+02
6.220E+02	9.278E-06	3	3.174E-01	6.826E-01	8.480E+02
6.230E+02	9.740E-06	3	3.146E-01	6.854E-01	8.475E+02
6.240E+02	6.194E-06	3	3.131E-01	6.869E-01	8.472E+02
6.250E+02	6.755E-06	3	3.145E-01	6.855E-01	8.474E+02
6.260E+02	9.127E-06	3	3.217E-01	6.783E-01	8.488E+02
6.270E+02	8.823E-06	3	3.271E-01	6.729E-01	8.498E+02
6.280E+02	6.244E-06	3	3.198E-01	6.802E-01	8.484E+02
6.290E+02	8.748E-06	3	3.102E-01	6.898E-01	8.466E+02
6.300E+02	9.078E-06	3	3.076E-01	6.924E-01	8.461E+02
6.310E+02	5.730E-06	3	3.064E-01	6.936E-01	8.459E+02
6.320E+02	6.466E-06	3	3.080E-01	6.920E-01	8.462E+02
6.330E+02	8.600E-06	3	3.147E-01	6.853E-01	8.475E+02
6.340E+02	8.181E-06	3	3.192E-01	6.808E-01	8.483E+02
6.350E+02	5.842E-06	3	3.121E-01	6.879E-01	8.470E+02
6.360E+02	8.216E-06	3	3.033E-01	6.967E-01	8.453E+02
6.370E+02	8.472E-06	3	3.010E-01	6.990E-01	8.449E+02
6.380E+02	5.331E-06	3	3.000E-01	7.000E-01	8.447E+02
6.390E+02	6.140E-06	3	3.018E-01	6.982E-01	8.450E+02
6.400E+02	8.082E-06	3	3.080E-01	6.920E-01	8.462E+02
6.410E+02	7.602E-06	3	3.118E-01	6.882E-01	8.469E+02
6.420E+02	5.452E-06	3	3.050E-01	6.950E-01	8.457E+02
6.430E+02	7.693E-06	3	2.970E-01	7.030E-01	8.441E+02
6.440E+02	7.917E-06	3	2.948E-01	7.052E-01	8.437E+02
6.450E+02	4.986E-06	3	2.941E-01	7.059E-01	8.436E+02
6.460E+02	5.790E-06	3	2.959E-01	7.041E-01	8.439E+02
6.470E+02	7.580E-06	3	3.016E-01	6.984E-01	8.450E+02
6.480E+02	7.079E-06	3	3.047E-01	6.953E-01	8.456E+02

6.490E+02	5.075E-06	3	2.985E-01	7.015E-01	8.444E+02
6.500E+02	7.183E-06	3	2.910E-01	7.090E-01	8.430E+02
6.510E+02	7.410E-06	3	2.889E-01	7.111E-01	8.426E+02
6.520E+02	4.690E-06	3	2.884E-01	7.116E-01	8.425E+02
6.530E+02	5.428E-06	3	2.903E-01	7.097E-01	8.429E+02
6.540E+02	7.095E-06	3	2.954E-01	7.046E-01	8.438E+02
6.550E+02	6.610E-06	3	2.981E-01	7.019E-01	8.444E+02
6.560E+02	4.712E-06	3	2.923E-01	7.077E-01	8.433E+02
6.570E+02	6.690E-06	3	2.854E-01	7.146E-01	8.420E+02
6.580E+02	6.942E-06	3	2.834E-01	7.166E-01	8.416E+02
6.590E+02	4.431E-06	3	2.831E-01	7.169E-01	8.415E+02
6.600E+02	5.062E-06	3	2.849E-01	7.151E-01	8.419E+02
6.610E+02	6.628E-06	3	2.895E-01	7.105E-01	8.428E+02
6.620E+02	6.186E-06	3	2.919E-01	7.081E-01	8.432E+02
6.630E+02	4.367E-06	3	2.866E-01	7.134E-01	8.422E+02
6.640E+02	6.216E-06	3	2.802E-01	7.198E-01	8.410E+02
6.650E+02	6.509E-06	3	2.782E-01	7.218E-01	8.407E+02
6.660E+02	4.205E-06	3	2.780E-01	7.220E-01	8.406E+02
6.670E+02	4.696E-06	3	2.798E-01	7.202E-01	8.409E+02
6.680E+02	6.181E-06	3	2.840E-01	7.160E-01	8.417E+02
6.690E+02	5.801E-06	3	2.861E-01	7.139E-01	8.421E+02
6.700E+02	4.038E-06	3	2.813E-01	7.187E-01	8.412E+02
6.710E+02	5.763E-06	3	2.753E-01	7.247E-01	8.401E+02
6.720E+02	6.104E-06	3	2.734E-01	7.266E-01	8.398E+02
6.730E+02	4.005E-06	3	2.732E-01	7.268E-01	8.397E+02
6.740E+02	4.336E-06	3	2.749E-01	7.251E-01	8.400E+02
6.750E+02	5.755E-06	3	2.787E-01	7.213E-01	8.407E+02
6.760E+02	5.449E-06	3	2.807E-01	7.193E-01	8.411E+02
6.770E+02	3.731E-06	3	2.764E-01	7.236E-01	8.403E+02
6.780E+02	5.332E-06	3	2.707E-01	7.293E-01	8.393E+02
6.790E+02	5.723E-06	3	2.688E-01	7.312E-01	8.389E+02
6.800E+02	3.829E-06	3	2.687E-01	7.313E-01	8.389E+02
6.810E+02	3.985E-06	3	2.703E-01	7.297E-01	8.392E+02
6.820E+02	5.350E-06	3	2.738E-01	7.262E-01	8.398E+02
6.830E+02	5.125E-06	3	2.756E-01	7.244E-01	8.402E+02
6.840E+02	3.449E-06	3	2.717E-01	7.283E-01	8.394E+02
6.850E+02	4.920E-06	3	2.665E-01	7.335E-01	8.385E+02
6.860E+02	5.363E-06	3	2.645E-01	7.355E-01	8.381E+02
6.870E+02	3.671E-06	3	2.645E-01	7.355E-01	8.381E+02
6.880E+02	3.645E-06	3	2.660E-01	7.340E-01	8.384E+02
6.890E+02	4.967E-06	3	2.691E-01	7.309E-01	8.390E+02

6.900E+02	4.825E-06	3	2.708E-01	7.292E-01	8.393E+02
6.910E+02	3.195E-06	3	2.674E-01	7.326E-01	8.386E+02
6.920E+02	4.530E-06	3	2.625E-01	7.375E-01	8.377E+02
6.930E+02	5.022E-06	3	2.605E-01	7.395E-01	8.374E+02
6.940E+02	3.528E-06	3	2.605E-01	7.395E-01	8.374E+02
6.950E+02	3.321E-06	3	2.619E-01	7.381E-01	8.376E+02
6.960E+02	4.605E-06	3	2.647E-01	7.353E-01	8.381E+02
6.970E+02	4.544E-06	3	2.663E-01	7.337E-01	8.384E+02
6.980E+02	2.972E-06	3	2.633E-01	7.367E-01	8.379E+02
6.990E+02	4.160E-06	3	2.587E-01	7.413E-01	8.370E+02
7.000E+02	4.696E-06	3	2.568E-01	7.432E-01	8.367E+02
7.010E+02	3.396E-06	3	2.567E-01	7.433E-01	8.367E+02
7.020E+02	3.014E-06	3	2.580E-01	7.420E-01	8.369E+02
7.030E+02	4.264E-06	3	2.606E-01	7.394E-01	8.374E+02
7.040E+02	4.278E-06	3	2.621E-01	7.379E-01	8.377E+02
7.050E+02	2.781E-06	3	2.595E-01	7.405E-01	8.372E+02
7.060E+02	3.811E-06	3	2.552E-01	7.448E-01	8.364E+02
7.070E+02	4.385E-06	3	2.532E-01	7.468E-01	8.360E+02
7.080E+02	3.272E-06	3	2.532E-01	7.468E-01	8.360E+02
7.090E+02	2.726E-06	3	2.543E-01	7.457E-01	8.362E+02
7.100E+02	3.941E-06	3	2.567E-01	7.433E-01	8.367E+02
7.110E+02	4.027E-06	3	2.582E-01	7.418E-01	8.369E+02
7.120E+02	2.623E-06	3	2.560E-01	7.440E-01	8.365E+02
7.130E+02	3.480E-06	3	2.520E-01	7.480E-01	8.358E+02
7.140E+02	4.086E-06	3	2.500E-01	7.500E-01	8.354E+02
7.150E+02	3.151E-06	3	2.498E-01	7.502E-01	8.354E+02
7.160E+02	2.459E-06	3	2.509E-01	7.491E-01	8.356E+02
7.170E+02	3.634E-06	3	2.531E-01	7.469E-01	8.360E+02
7.180E+02	3.787E-06	3	2.545E-01	7.455E-01	8.363E+02
7.190E+02	2.490E-06	3	2.526E-01	7.474E-01	8.359E+02
7.200E+02	3.166E-06	3	2.489E-01	7.511E-01	8.352E+02
7.210E+02	3.799E-06	3	2.469E-01	7.531E-01	8.349E+02
7.220E+02	3.032E-06	3	2.467E-01	7.533E-01	8.348E+02
7.230E+02	2.215E-06	3	2.477E-01	7.523E-01	8.350E+02
7.240E+02	3.345E-06	3	2.497E-01	7.503E-01	8.354E+02
7.250E+02	3.555E-06	3	2.510E-01	7.490E-01	8.356E+02
7.260E+02	2.384E-06	3	2.495E-01	7.505E-01	8.353E+02
7.270E+02	2.874E-06	3	2.460E-01	7.540E-01	8.347E+02
7.280E+02	3.523E-06	3	2.440E-01	7.560E-01	8.343E+02
7.290E+02	2.916E-06	3	2.438E-01	7.562E-01	8.343E+02
7.300E+02	2.000E-06	3	2.447E-01	7.553E-01	8.345E+02

7.310E+02	3.072E-06	3	2.465E-01	7.535E-01	8.348E+02
7.320E+02	3.331E-06	3	2.478E-01	7.522E-01	8.350E+02
7.330E+02	2.297E-06	3	2.465E-01	7.535E-01	8.348E+02
7.340E+02	2.598E-06	3	2.434E-01	7.566E-01	8.342E+02
7.350E+02	3.258E-06	3	2.414E-01	7.586E-01	8.339E+02
7.360E+02	2.798E-06	3	2.411E-01	7.589E-01	8.338E+02
7.370E+02	1.821E-06	3	2.419E-01	7.581E-01	8.340E+02
7.380E+02	2.813E-06	3	2.435E-01	7.565E-01	8.343E+02
7.390E+02	3.116E-06	3	2.448E-01	7.552E-01	8.345E+02
7.400E+02	2.220E-06	3	2.437E-01	7.563E-01	8.343E+02
7.410E+02	2.344E-06	3	2.409E-01	7.591E-01	8.338E+02
7.420E+02	3.005E-06	3	2.389E-01	7.611E-01	8.334E+02
7.430E+02	2.679E-06	3	2.385E-01	7.615E-01	8.333E+02
7.440E+02	1.680E-06	3	2.392E-01	7.608E-01	8.335E+02
7.450E+02	2.568E-06	3	2.407E-01	7.593E-01	8.337E+02
7.460E+02	2.908E-06	3	2.419E-01	7.581E-01	8.340E+02
7.470E+02	2.147E-06	3	2.411E-01	7.589E-01	8.338E+02
7.480E+02	2.103E-06	3	2.385E-01	7.615E-01	8.333E+02
7.490E+02	2.768E-06	3	2.365E-01	7.635E-01	8.330E+02
7.500E+02	2.558E-06	3	2.361E-01	7.639E-01	8.329E+02
7.510E+02	1.572E-06	3	2.368E-01	7.632E-01	8.330E+02
7.520E+02	2.336E-06	3	2.381E-01	7.619E-01	8.333E+02
7.530E+02	2.707E-06	3	2.393E-01	7.607E-01	8.335E+02
7.540E+02	2.078E-06	3	2.387E-01	7.613E-01	8.334E+02
7.550E+02	1.880E-06	3	2.363E-01	7.637E-01	8.329E+02
7.560E+02	2.546E-06	3	2.344E-01	7.656E-01	8.326E+02
7.570E+02	2.435E-06	3	2.339E-01	7.661E-01	8.325E+02
7.580E+02	1.493E-06	3	2.344E-01	7.656E-01	8.326E+02
7.590E+02	2.118E-06	3	2.357E-01	7.643E-01	8.328E+02
7.600E+02	2.513E-06	3	2.368E-01	7.632E-01	8.330E+02
7.610E+02	2.008E-06	3	2.364E-01	7.636E-01	8.330E+02
7.620E+02	1.676E-06	3	2.343E-01	7.657E-01	8.326E+02
7.630E+02	2.336E-06	3	2.324E-01	7.676E-01	8.322E+02
7.640E+02	2.310E-06	3	2.318E-01	7.682E-01	8.321E+02
7.650E+02	1.435E-06	3	2.323E-01	7.677E-01	8.322E+02
7.660E+02	1.912E-06	3	2.334E-01	7.666E-01	8.324E+02
7.670E+02	2.325E-06	3	2.345E-01	7.655E-01	8.326E+02
7.680E+02	1.936E-06	3	2.342E-01	7.658E-01	8.326E+02
7.690E+02	1.496E-06	3	2.323E-01	7.677E-01	8.322E+02
7.700E+02	2.140E-06	3	2.305E-01	7.695E-01	8.319E+02
7.710E+02	2.185E-06	3	2.299E-01	7.701E-01	8.318E+02

7.720E+02	1.394E-06	3	2.303E-01	7.697E-01	8.318E+02
7.730E+02	1.720E-06	3	2.313E-01	7.687E-01	8.320E+02
7.740E+02	2.142E-06	3	2.323E-01	7.677E-01	8.322E+02
7.750E+02	1.861E-06	3	2.322E-01	7.678E-01	8.322E+02
7.760E+02	1.339E-06	3	2.305E-01	7.695E-01	8.319E+02
7.770E+02	1.953E-06	3	2.288E-01	7.712E-01	8.316E+02
7.780E+02	2.059E-06	3	2.281E-01	7.719E-01	8.314E+02
7.790E+02	1.365E-06	3	2.284E-01	7.716E-01	8.315E+02
7.800E+02	1.540E-06	3	2.293E-01	7.707E-01	8.317E+02
7.810E+02	1.968E-06	3	2.303E-01	7.697E-01	8.318E+02
7.820E+02	1.783E-06	3	2.303E-01	7.697E-01	8.318E+02
7.830E+02	1.206E-06	3	2.288E-01	7.712E-01	8.316E+02
7.840E+02	1.776E-06	3	2.272E-01	7.728E-01	8.313E+02
7.850E+02	1.931E-06	3	2.264E-01	7.736E-01	8.311E+02
7.860E+02	1.340E-06	3	2.267E-01	7.733E-01	8.312E+02
7.870E+02	1.370E-06	3	2.275E-01	7.725E-01	8.313E+02
7.880E+02	1.807E-06	3	2.284E-01	7.716E-01	8.315E+02
7.890E+02	1.701E-06	3	2.285E-01	7.715E-01	8.315E+02
7.900E+02	1.103E-06	3	2.272E-01	7.728E-01	8.313E+02
7.910E+02	1.610E-06	3	2.257E-01	7.743E-01	8.310E+02
7.920E+02	1.804E-06	3	2.249E-01	7.751E-01	8.309E+02
7.930E+02	1.313E-06	3	2.250E-01	7.750E-01	8.309E+02
7.940E+02	1.213E-06	3	2.258E-01	7.742E-01	8.310E+02
7.950E+02	1.656E-06	3	2.267E-01	7.733E-01	8.312E+02
7.960E+02	1.617E-06	3	2.268E-01	7.732E-01	8.312E+02
7.970E+02	1.029E-06	3	2.257E-01	7.743E-01	8.310E+02
7.980E+02	1.454E-06	3	2.243E-01	7.757E-01	8.308E+02
7.990E+02	1.679E-06	3	2.235E-01	7.765E-01	8.306E+02
8.000E+02	1.283E-06	3	2.235E-01	7.765E-01	8.306E+02
8.010E+02	1.072E-06	3	2.242E-01	7.758E-01	8.307E+02
8.020E+02	1.517E-06	3	2.250E-01	7.750E-01	8.309E+02
8.030E+02	1.530E-06	3	2.252E-01	7.748E-01	8.309E+02
8.040E+02	9.798E-07	3	2.243E-01	7.757E-01	8.308E+02
8.050E+02	1.308E-06	3	2.230E-01	7.770E-01	8.305E+02
8.060E+02	1.557E-06	3	2.221E-01	7.779E-01	8.304E+02
8.070E+02	1.250E-06	3	2.221E-01	7.779E-01	8.304E+02
8.080E+02	9.469E-07	3	2.227E-01	7.773E-01	8.305E+02
8.090E+02	1.385E-06	3	2.235E-01	7.765E-01	8.306E+02
8.100E+02	1.443E-06	3	2.238E-01	7.762E-01	8.307E+02
8.110E+02	9.470E-07	3	2.230E-01	7.770E-01	8.305E+02
8.120E+02	1.171E-06	3	2.217E-01	7.783E-01	8.303E+02

8.130E+02	1.436E-06	3	2.209E-01	7.791E-01	8.301E+02
8.140E+02	1.210E-06	3	2.208E-01	7.792E-01	8.301E+02
8.150E+02	9.432E-05	2	2.214E-01	7.786E-01	8.302E+02
8.160E+02	1.261E-06	3	2.221E-01	7.779E-01	8.304E+02
8.170E+02	1.356E-06	3	2.224E-01	7.776E-01	8.304E+02
8.180E+02	9.264E-07	3	2.218E-01	7.782E-01	8.303E+02
8.190E+02	1.046E-06	3	2.206E-01	7.794E-01	8.301E+02
8.200E+02	1.320E-06	3	2.198E-01	7.802E-01	8.299E+02
8.210E+02	1.167E-06	3	2.196E-01	7.804E-01	8.299E+02
8.220E+02	8.508E-05	2	2.201E-01	7.799E-01	8.300E+02
8.230E+02	1.144E-06	3	2.208E-01	7.792E-01	8.301E+02
8.240E+02	1.268E-06	3	2.211E-01	7.789E-01	8.302E+02
8.250E+02	9.080E-07	3	2.206E-01	7.794E-01	8.301E+02
8.260E+02	9.281E-07	3	2.195E-01	7.805E-01	8.299E+02
8.270E+02	1.210E-06	3	2.187E-01	7.813E-01	8.297E+02
8.280E+02	1.120E-06	3	2.185E-01	7.815E-01	8.297E+02
8.290E+02	7.852E-05	2	2.189E-01	7.811E-01	8.298E+02
8.300E+02	1.033E-06	3	2.195E-01	7.805E-01	8.299E+02
8.310E+02	1.182E-06	3	2.199E-01	7.801E-01	8.300E+02
8.320E+02	8.886E-07	3	2.195E-01	7.805E-01	8.299E+02
8.330E+02	9.436E-05	2	2.185E-01	7.815E-01	8.297E+02
8.340E+02	1.108E-06	3	2.177E-01	7.823E-01	8.296E+02
8.350E+02	1.069E-06	3	2.175E-01	7.825E-01	8.295E+02
8.360E+02	7.411E-05	2	2.178E-01	7.822E-01	8.296E+02
8.370E+02	9.298E-07	3	2.184E-01	7.816E-01	8.297E+02
8.380E+02	1.096E-06	3	2.188E-01	7.812E-01	8.298E+02
8.390E+02	8.670E-07	3	2.185E-01	7.815E-01	8.297E+02
8.400E+02	8.243E-05	2	2.176E-01	7.824E-01	8.295E+02
8.410E+02	1.013E-06	3	2.168E-01	7.832E-01	8.294E+02
8.420E+02	1.014E-06	3	2.165E-01	7.835E-01	8.294E+02
8.430E+02	7.327E-05	2	2.168E-01	7.832E-01	8.294E+02
8.440E+02	9.823E-05	2	2.173E-01	7.827E-01	8.295E+02
8.450E+02	1.012E-06	3	2.177E-01	7.823E-01	8.296E+02
8.460E+02	8.421E-07	3	2.175E-01	7.825E-01	8.295E+02
8.470E+02	7.233E-05	2	2.167E-01	7.833E-01	8.294E+02
8.480E+02	9.226E-07	3	2.160E-01	7.840E-01	8.292E+02
8.490E+02	9.585E-07	3	2.157E-01	7.843E-01	8.292E+02
8.500E+02	7.414E-05	2	2.159E-01	7.841E-01	8.292E+02
8.510E+02	8.669E-05	2	2.163E-01	7.837E-01	8.293E+02
8.520E+02	9.294E-07	3	2.167E-01	7.833E-01	8.294E+02
8.530E+02	8.140E-07	3	2.166E-01	7.834E-01	8.294E+02

8.540E+02	6.433E-05	2	2.159E-01	7.841E-01	8.292E+02
8.550E+02	8.371E-07	3	2.152E-01	7.848E-01	8.291E+02
8.560E+02	9.008E-07	3	2.148E-01	7.852E-01	8.290E+02
8.570E+02	7.475E-05	2	2.150E-01	7.850E-01	8.291E+02
8.580E+02	7.607E-05	2	2.154E-01	7.846E-01	8.292E+02
8.590E+02	8.508E-07	3	2.158E-01	7.842E-01	8.292E+02
8.600E+02	9.749E-05	2	2.157E-01	7.843E-01	8.292E+02
8.610E+02	5.838E-05	2	2.151E-01	7.849E-01	8.291E+02
8.620E+02	9.118E-05	2	2.144E-01	7.856E-01	8.290E+02
8.630E+02	8.420E-07	3	2.141E-01	7.859E-01	8.289E+02
8.640E+02	7.474E-05	2	2.142E-01	7.858E-01	8.289E+02
8.650E+02	6.626E-05	2	2.146E-01	7.854E-01	8.290E+02
8.660E+02	9.456E-05	2	2.149E-01	7.851E-01	8.291E+02
8.670E+02	9.320E-05	2	2.149E-01	7.851E-01	8.291E+02
8.680E+02	5.398E-05	2	2.144E-01	7.856E-01	8.290E+02
8.690E+02	8.178E-05	2	2.138E-01	7.862E-01	8.289E+02
8.700E+02	9.546E-05	2	2.134E-01	7.866E-01	8.288E+02
8.710E+02	7.405E-05	2	2.134E-01	7.866E-01	8.288E+02
8.720E+02	5.752E-05	2	2.138E-01	7.862E-01	8.289E+02
8.730E+02	8.628E-05	2	2.142E-01	7.858E-01	8.289E+02
8.740E+02	8.848E-05	2	2.142E-01	7.858E-01	8.289E+02
8.750E+02	5.148E-05	2	2.137E-01	7.863E-01	8.289E+02
8.760E+02	7.280E-05	2	2.131E-01	7.869E-01	8.287E+02
8.770E+02	8.792E-05	2	2.128E-01	7.872E-01	8.287E+02
8.780E+02	7.266E-05	2	2.128E-01	7.872E-01	8.287E+02
8.790E+02	5.011E-05	2	2.131E-01	7.869E-01	8.287E+02
8.800E+02	7.842E-05	2	2.134E-01	7.866E-01	8.288E+02
8.810E+02	8.345E-05	2	2.135E-01	7.865E-01	8.288E+02
8.820E+02	5.129E-05	2	2.131E-01	7.869E-01	8.287E+02
8.830E+02	6.440E-05	2	2.125E-01	7.875E-01	8.286E+02
8.840E+02	8.073E-05	2	2.122E-01	7.878E-01	8.286E+02
8.850E+02	7.070E-05	2	2.121E-01	7.879E-01	8.286E+02
8.860E+02	4.412E-05	2	2.124E-01	7.876E-01	8.286E+02
8.870E+02	7.096E-05	2	2.127E-01	7.873E-01	8.287E+02
8.880E+02	7.820E-05	2	2.128E-01	7.872E-01	8.287E+02
8.890E+02	5.160E-05	2	2.125E-01	7.875E-01	8.286E+02
8.900E+02	5.659E-05	2	2.120E-01	7.880E-01	8.285E+02
8.910E+02	7.396E-05	2	2.116E-01	7.884E-01	8.285E+02
8.920E+02	6.827E-05	2	2.115E-01	7.885E-01	8.285E+02
8.930E+02	3.972E-05	2	2.118E-01	7.882E-01	8.285E+02
8.940E+02	6.391E-05	2	2.121E-01	7.879E-01	8.286E+02

8.950E+02	7.285E-05	2	2.122E-01	7.878E-01	8.286E+02
8.960E+02	5.174E-05	2	2.120E-01	7.880E-01	8.285E+02
8.970E+02	4.939E-05	2	2.115E-01	7.885E-01	8.284E+02
8.980E+02	6.765E-05	2	2.111E-01	7.889E-01	8.284E+02
8.990E+02	6.545E-05	2	2.110E-01	7.890E-01	8.284E+02
9.000E+02	3.665E-05	2	2.112E-01	7.888E-01	8.284E+02
9.010E+02	5.723E-05	2	2.115E-01	7.885E-01	8.284E+02
9.020E+02	6.740E-05	2	2.116E-01	7.884E-01	8.285E+02
9.030E+02	5.142E-05	2	2.114E-01	7.886E-01	8.284E+02
9.040E+02	4.291E-05	2	2.110E-01	7.890E-01	8.284E+02
9.050E+02	6.184E-05	2	2.106E-01	7.894E-01	8.283E+02
9.060E+02	6.230E-05	2	2.105E-01	7.895E-01	8.283E+02
9.070E+02	3.494E-05	2	2.107E-01	7.893E-01	8.283E+02
9.080E+02	5.087E-05	2	2.109E-01	7.891E-01	8.283E+02
9.090E+02	6.208E-05	2	2.111E-01	7.889E-01	8.284E+02
9.100E+02	5.064E-05	2	2.109E-01	7.891E-01	8.283E+02
9.110E+02	3.731E-05	2	2.106E-01	7.894E-01	8.283E+02
9.120E+02	5.635E-05	2	2.102E-01	7.898E-01	8.282E+02
9.130E+02	5.886E-05	2	2.101E-01	7.899E-01	8.282E+02
9.140E+02	3.511E-05	2	2.102E-01	7.898E-01	8.282E+02
9.150E+02	4.489E-05	2	2.104E-01	7.896E-01	8.283E+02
9.160E+02	5.696E-05	2	2.106E-01	7.894E-01	8.283E+02
9.170E+02	4.938E-05	2	2.105E-01	7.895E-01	8.283E+02
9.180E+02	3.275E-05	2	2.101E-01	7.899E-01	8.282E+02
9.190E+02	5.108E-05	2	2.098E-01	7.902E-01	8.281E+02
9.200E+02	5.525E-05	2	2.096E-01	7.904E-01	8.281E+02
9.210E+02	3.568E-05	2	2.097E-01	7.903E-01	8.281E+02
9.220E+02	3.934E-05	2	2.100E-01	7.900E-01	8.282E+02
9.230E+02	5.210E-05	2	2.101E-01	7.899E-01	8.282E+02
9.240E+02	4.778E-05	2	2.101E-01	7.899E-01	8.282E+02
9.250E+02	2.931E-05	2	2.097E-01	7.903E-01	8.281E+02
9.260E+02	4.609E-05	2	2.094E-01	7.906E-01	8.281E+02
9.270E+02	5.153E-05	2	2.092E-01	7.908E-01	8.280E+02
9.280E+02	3.598E-05	2	2.093E-01	7.907E-01	8.281E+02
9.290E+02	3.424E-05	2	2.095E-01	7.905E-01	8.281E+02
9.300E+02	4.754E-05	2	2.097E-01	7.903E-01	8.281E+02
9.310E+02	4.586E-05	2	2.096E-01	7.904E-01	8.281E+02
9.320E+02	2.684E-05	2	2.094E-01	7.906E-01	8.281E+02
9.330E+02	4.135E-05	2	2.091E-01	7.909E-01	8.280E+02
9.340E+02	4.774E-05	2	2.089E-01	7.911E-01	8.280E+02
9.350E+02	3.590E-05	2	2.089E-01	7.911E-01	8.280E+02

9.360E+02	2.961E-05	2	2.091E-01	7.909E-01	8.280E+02
9.370E+02	4.333E-05	2	2.093E-01	7.907E-01	8.280E+02
9.380E+02	4.369E-05	2	2.093E-01	7.907E-01	8.280E+02
9.390E+02	2.522E-05	2	2.090E-01	7.910E-01	8.280E+02
9.400E+02	3.681E-05	2	2.087E-01	7.913E-01	8.279E+02
9.410E+02	4.400E-05	2	2.086E-01	7.914E-01	8.279E+02
9.420E+02	3.545E-05	2	2.086E-01	7.914E-01	8.279E+02
9.430E+02	2.561E-05	2	2.087E-01	7.913E-01	8.279E+02
9.440E+02	3.941E-05	2	2.089E-01	7.911E-01	8.280E+02
9.450E+02	4.130E-05	2	2.089E-01	7.911E-01	8.280E+02
9.460E+02	2.480E-05	2	2.087E-01	7.913E-01	8.279E+02
9.470E+02	3.255E-05	2	2.084E-01	7.916E-01	8.279E+02
9.480E+02	4.039E-05	2	2.082E-01	7.918E-01	8.279E+02
9.490E+02	3.465E-05	2	2.082E-01	7.918E-01	8.279E+02
9.500E+02	2.237E-05	2	2.084E-01	7.916E-01	8.279E+02
9.510E+02	3.567E-05	2	2.085E-01	7.915E-01	8.279E+02
9.520E+02	3.878E-05	2	2.086E-01	7.914E-01	8.279E+02
9.530E+02	2.500E-05	2	2.084E-01	7.916E-01	8.279E+02
9.540E+02	2.858E-05	2	2.082E-01	7.918E-01	8.278E+02
9.550E+02	3.698E-05	2	2.080E-01	7.920E-01	8.278E+02
9.560E+02	3.357E-05	2	2.079E-01	7.921E-01	8.278E+02
9.570E+02	1.991E-05	2	2.081E-01	7.919E-01	8.278E+02
9.580E+02	3.213E-05	2	2.082E-01	7.918E-01	8.279E+02
9.590E+02	3.617E-05	2	2.083E-01	7.917E-01	8.279E+02
9.600E+02	2.516E-05	2	2.081E-01	7.919E-01	8.278E+02
9.610E+02	2.493E-05	2	2.079E-01	7.921E-01	8.278E+02
9.620E+02	3.377E-05	2	2.077E-01	7.923E-01	8.278E+02
9.630E+02	3.227E-05	2	2.077E-01	7.923E-01	8.278E+02
9.640E+02	1.822E-05	2	2.078E-01	7.922E-01	8.278E+02
9.650E+02	2.878E-05	2	2.079E-01	7.921E-01	8.278E+02
9.660E+02	3.350E-05	2	2.080E-01	7.920E-01	8.278E+02
9.670E+02	2.511E-05	2	2.079E-01	7.921E-01	8.278E+02
9.680E+02	2.161E-05	2	2.077E-01	7.923E-01	8.278E+02
9.690E+02	3.083E-05	2	2.075E-01	7.925E-01	8.277E+02
9.700E+02	3.078E-05	2	2.074E-01	7.926E-01	8.277E+02
9.710E+02	1.716E-05	2	2.075E-01	7.925E-01	8.277E+02
9.720E+02	2.558E-05	2	2.076E-01	7.924E-01	8.277E+02
9.730E+02	3.087E-05	2	2.077E-01	7.923E-01	8.278E+02
9.740E+02	2.481E-05	2	2.076E-01	7.924E-01	8.277E+02
9.750E+02	1.873E-05	2	2.074E-01	7.926E-01	8.277E+02
9.760E+02	2.808E-05	2	2.072E-01	7.928E-01	8.277E+02

9.770E+02	2.913E-05	2	2.072E-01	7.928E-01	8.277E+02
9.780E+02	1.707E-05	2	2.072E-01	7.928E-01	8.277E+02
9.790E+02	2.257E-05	2	2.074E-01	7.926E-01	8.277E+02
9.800E+02	2.832E-05	2	2.074E-01	7.926E-01	8.277E+02
9.810E+02	2.426E-05	2	2.074E-01	7.926E-01	8.277E+02
9.820E+02	1.637E-05	2	2.072E-01	7.928E-01	8.277E+02
9.830E+02	2.544E-05	2	2.070E-01	7.930E-01	8.276E+02
9.840E+02	2.737E-05	2	2.070E-01	7.930E-01	8.276E+02
9.850E+02	1.739E-05	2	2.070E-01	7.930E-01	8.276E+02
9.860E+02	1.976E-05	2	2.071E-01	7.929E-01	8.277E+02
9.870E+02	2.590E-05	2	2.072E-01	7.928E-01	8.277E+02
9.880E+02	2.352E-05	2	2.072E-01	7.928E-01	8.277E+02
9.890E+02	1.458E-05	2	2.070E-01	7.930E-01	8.276E+02
9.900E+02	2.294E-05	2	2.068E-01	7.932E-01	8.276E+02
9.910E+02	2.555E-05	2	2.068E-01	7.932E-01	8.276E+02
9.920E+02	1.759E-05	2	2.068E-01	7.932E-01	8.276E+02
9.930E+02	1.718E-05	2	2.069E-01	7.931E-01	8.276E+02
9.940E+02	2.362E-05	2	2.070E-01	7.930E-01	8.276E+02
9.950E+02	2.261E-05	2	2.070E-01	7.930E-01	8.276E+02
9.960E+02	1.330E-05	2	2.068E-01	7.932E-01	8.276E+02
9.970E+02	2.057E-05	2	2.067E-01	7.933E-01	8.276E+02
9.980E+02	2.368E-05	2	2.066E-01	7.934E-01	8.276E+02
9.990E+02	1.761E-05	2	2.066E-01	7.934E-01	8.276E+02
1.000E+03	1.483E-05	2	2.067E-01	7.933E-01	8.276E+02
1.001E+03	2.152E-05	2	2.068E-01	7.932E-01	8.276E+02
1.002E+03	2.157E-05	2	2.068E-01	7.932E-01	8.276E+02
1.003E+03	1.244E-05	2	2.066E-01	7.934E-01	8.276E+02
1.004E+03	1.831E-05	2	2.065E-01	7.935E-01	8.275E+02
1.005E+03	2.183E-05	2	2.064E-01	7.936E-01	8.275E+02
1.006E+03	1.743E-05	2	2.064E-01	7.936E-01	8.275E+02
1.007E+03	1.280E-05	2	2.065E-01	7.935E-01	8.275E+02
1.008E+03	1.957E-05	2	2.066E-01	7.934E-01	8.276E+02
1.009E+03	2.041E-05	2	2.066E-01	7.934E-01	8.276E+02
1.010E+03	1.217E-05	2	2.065E-01	7.935E-01	8.275E+02
1.011E+03	1.618E-05	2	2.063E-01	7.937E-01	8.275E+02
1.012E+03	2.003E-05	2	2.063E-01	7.937E-01	8.275E+02
1.013E+03	1.707E-05	2	2.063E-01	7.937E-01	8.275E+02
1.014E+03	1.114E-05	2	2.063E-01	7.937E-01	8.275E+02
1.015E+03	1.771E-05	2	2.064E-01	7.936E-01	8.275E+02
1.016E+03	1.917E-05	2	2.064E-01	7.936E-01	8.275E+02
1.017E+03	1.228E-05	2	2.063E-01	7.937E-01	8.275E+02

1.018E+03	1.420E-05	2	2.062E-01	7.938E-01	8.275E+02
1.019E+03	1.833E-05	2	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.020E+03	1.656E-05	2	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.021E+03	9.883E-06	2	2.062E-01	7.938E-01	8.275E+02
1.022E+03	1.595E-05	2	2.062E-01	7.938E-01	8.275E+02
1.023E+03	1.789E-05	2	2.063E-01	7.937E-01	8.275E+02
1.024E+03	1.238E-05	2	2.062E-01	7.938E-01	8.275E+02
1.025E+03	1.238E-05	2	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.026E+03	1.673E-05	2	2.060E-01	7.940E-01	8.275E+02
1.027E+03	1.593E-05	2	2.060E-01	7.940E-01	8.274E+02
1.028E+03	9.019E-06	2	2.060E-01	7.940E-01	8.275E+02
1.029E+03	1.428E-05	2	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.030E+03	1.657E-05	2	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.031E+03	1.237E-05	2	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.032E+03	1.072E-05	2	2.059E-01	7.941E-01	8.274E+02
1.033E+03	1.526E-05	2	2.059E-01	7.941E-01	8.274E+02
1.034E+03	1.521E-05	2	2.058E-01	7.942E-01	8.274E+02
1.035E+03	8.473E-06	2	2.059E-01	7.941E-01	8.274E+02
1.036E+03	1.269E-05	2	2.059E-01	7.941E-01	8.274E+02
1.037E+03	1.527E-05	2	2.060E-01	7.940E-01	8.274E+02
1.038E+03	1.224E-05	2	2.059E-01	7.941E-01	8.274E+02
1.039E+03	9.278E-06	2	2.058E-01	7.942E-01	8.274E+02
1.040E+03	1.389E-05	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.041E+03	1.440E-05	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.042E+03	8.406E-06	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.043E+03	1.119E-05	2	2.058E-01	7.942E-01	8.274E+02
1.044E+03	1.400E-05	2	2.058E-01	7.942E-01	8.274E+02
1.045E+03	1.197E-05	2	2.058E-01	7.942E-01	8.274E+02
1.046E+03	8.102E-06	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.047E+03	1.258E-05	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02
1.048E+03	1.353E-05	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02
1.049E+03	8.570E-06	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02
1.050E+03	9.787E-06	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.051E+03	1.280E-05	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.052E+03	1.161E-05	2	2.057E-01	7.943E-01	8.274E+02
1.053E+03	7.204E-06	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02
1.054E+03	1.134E-05	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.055E+03	1.263E-05	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.056E+03	8.680E-06	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.057E+03	8.505E-06	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02
1.058E+03	1.167E-05	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02

1.059E+03	1.117E-05	2	2.056E-01	7.944E-01	8.274E+02
1.060E+03	6.568E-06	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.061E+03	1.016E-05	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.062E+03	1.170E-05	2	2.054E-01	7.946E-01	8.273E+02
1.063E+03	8.696E-06	2	2.054E-01	7.946E-01	8.274E+02
1.064E+03	7.334E-06	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.065E+03	1.063E-05	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.066E+03	1.065E-05	2	2.055E-01	7.945E-01	8.274E+02
1.067E+03	6.146E-06	2	2.054E-01	7.946E-01	8.274E+02
1.068E+03	9.040E-06	2	2.054E-01	7.946E-01	8.273E+02
1.069E+03	1.078E-05	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.070E+03	8.613E-06	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.071E+03	6.322E-06	2	2.054E-01	7.946E-01	8.273E+02
1.072E+03	9.665E-06	2	2.054E-01	7.946E-01	8.273E+02
1.073E+03	1.008E-05	2	2.054E-01	7.946E-01	8.273E+02
1.074E+03	6.017E-06	2	2.054E-01	7.946E-01	8.273E+02
1.075E+03	7.982E-06	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.076E+03	9.892E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.077E+03	8.435E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.078E+03	5.500E-06	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.079E+03	8.742E-06	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.080E+03	9.466E-06	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.081E+03	6.072E-06	2	2.053E-01	7.947E-01	8.273E+02
1.082E+03	7.000E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.083E+03	9.049E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.084E+03	8.185E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.085E+03	4.877E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.086E+03	7.870E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.087E+03	8.829E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.088E+03	6.122E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.089E+03	6.098E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.090E+03	8.256E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.091E+03	7.874E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.092E+03	4.451E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.093E+03	7.042E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.094E+03	8.177E-06	2	2.052E-01	7.948E-01	8.273E+02
1.095E+03	6.119E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.096E+03	5.277E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.097E+03	7.528E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.098E+03	7.514E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.099E+03	4.186E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02

1.100E+03	6.253E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.101E+03	7.530E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.102E+03	6.052E-06	2	2.051E-01	7.949E-01	8.273E+02
1.103E+03	4.565E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.104E+03	6.850E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.105E+03	7.110E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.106E+03	4.163E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.107E+03	5.509E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.108E+03	6.904E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.109E+03	5.919E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.110E+03	3.988E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.111E+03	6.199E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.112E+03	6.679E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.113E+03	4.245E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.114E+03	4.816E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.115E+03	6.310E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.116E+03	5.740E-06	2	2.050E-01	7.950E-01	8.273E+02
1.117E+03	3.548E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.118E+03	5.584E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.119E+03	6.231E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.120E+03	4.300E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.121E+03	4.181E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.122E+03	5.751E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.123E+03	5.517E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.124E+03	3.239E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.125E+03	5.001E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.126E+03	5.772E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.127E+03	4.306E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.128E+03	3.603E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.129E+03	5.237E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.130E+03	5.260E-06	2	2.049E-01	7.951E-01	8.273E+02
1.131E+03	3.037E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.132E+03	4.445E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.133E+03	5.316E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.134E+03	4.263E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.135E+03	3.105E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.136E+03	4.760E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.137E+03	4.974E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.138E+03	2.983E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.139E+03	3.922E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.140E+03	4.875E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02

1.141E+03	4.173E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.142E+03	2.703E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.143E+03	4.303E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.144E+03	4.669E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.145E+03	3.011E-06	2	2.048E-01	7.952E-01	8.272E+02
1.146E+03	3.437E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.147E+03	4.458E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.148E+03	4.047E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.149E+03	2.399E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.150E+03	3.871E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.151E+03	4.353E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.152E+03	3.034E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.153E+03	2.991E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.154E+03	4.066E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.155E+03	3.891E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.156E+03	2.193E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.157E+03	3.462E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.158E+03	4.029E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.159E+03	3.031E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.160E+03	2.588E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.161E+03	3.706E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.162E+03	3.710E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.163E+03	2.068E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.164E+03	3.071E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.165E+03	3.708E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.166E+03	2.995E-06	2	2.047E-01	7.953E-01	8.272E+02
1.167E+03	2.239E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.168E+03	3.370E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.169E+03	3.509E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.170E+03	2.066E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.171E+03	2.704E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.172E+03	3.398E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.173E+03	2.927E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.174E+03	1.957E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.175E+03	3.048E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.176E+03	3.294E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.177E+03	2.107E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.178E+03	2.362E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.179E+03	3.105E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.180E+03	2.837E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.181E+03	1.744E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02

1.182E+03	2.744E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.183E+03	3.071E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.184E+03	2.132E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.185E+03	2.049E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.186E+03	2.829E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.187E+03	2.724E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.188E+03	1.595E-06	2	2.046E-01	7.954E-01	8.272E+02
1.189E+03	2.456E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.190E+03	2.843E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.191E+03	2.133E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.192E+03	1.765E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.193E+03	2.576E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.194E+03	2.595E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.195E+03	1.500E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.196E+03	2.181E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.197E+03	2.617E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.198E+03	2.110E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.199E+03	1.521E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.200E+03	2.340E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.201E+03	2.452E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.202E+03	1.479E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.203E+03	1.923E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.204E+03	2.399E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.205E+03	2.064E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.206E+03	1.325E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.207E+03	2.114E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.208E+03	2.301E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.209E+03	1.494E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.210E+03	1.684E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.211E+03	2.193E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.212E+03	2.000E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.213E+03	1.179E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.214E+03	1.901E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.215E+03	2.144E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.216E+03	1.504E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.217E+03	1.464E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.218E+03	1.999E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.219E+03	1.921E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.220E+03	1.080E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.221E+03	1.699E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.222E+03	1.982E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02

1.223E+03	1.501E-06	2	2.045E-01	7.955E-01	8.272E+02
1.224E+03	1.266E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.225E+03	1.822E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.226E+03	1.831E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.227E+03	1.022E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.228E+03	1.506E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.229E+03	1.824E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.230E+03	1.482E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.231E+03	1.096E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.232E+03	1.656E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.233E+03	1.730E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.234E+03	1.025E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.235E+03	1.325E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.236E+03	1.671E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.237E+03	1.447E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.238E+03	9.593E-07	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.239E+03	1.497E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.240E+03	1.623E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.241E+03	1.046E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.242E+03	1.156E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.243E+03	1.526E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.244E+03	1.401E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.245E+03	8.571E-07	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.246E+03	1.347E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.247E+03	1.512E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.248E+03	1.057E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.249E+03	1.002E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.250E+03	1.390E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.251E+03	1.344E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.252E+03	9.461E-05	1	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.253E+03	1.205E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.254E+03	1.398E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.255E+03	1.059E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.256E+03	8.612E-07	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.257E+03	1.265E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.258E+03	1.280E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.259E+03	9.371E-05	1	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.260E+03	1.067E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.261E+03	1.286E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.262E+03	1.048E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.263E+03	7.416E-07	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02

1.264E+03	1.147E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.265E+03	1.209E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.266E+03	9.777E-05	1	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.267E+03	9.375E-07	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.268E+03	1.177E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.269E+03	1.025E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.270E+03	8.024E-05	1	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.271E+03	1.035E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.272E+03	1.133E-06	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.273E+03	7.497E-07	2	2.044E-01	7.956E-01	8.272E+02
1.274E+03	8.173E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.275E+03	1.074E-06	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.276E+03	9.930E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.277E+03	6.849E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.278E+03	9.275E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.279E+03	1.054E-06	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.280E+03	7.567E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.281E+03	7.067E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.282E+03	9.784E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.283E+03	9.535E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.284E+03	6.499E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.285E+03	8.248E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.286E+03	9.724E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.287E+03	7.555E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.288E+03	9.466E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.289E+03	8.906E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.290E+03	9.072E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.291E+03	6.801E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.292E+03	7.264E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.293E+03	8.924E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.294E+03	7.454E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.295E+03	7.418E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.296E+03	8.060E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.297E+03	8.554E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.298E+03	7.414E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.299E+03	6.337E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.300E+03	8.153E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.301E+03	7.276E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.302E+03	5.841E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.303E+03	7.253E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.304E+03	8.002E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02

1.305E+03	8.238E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.306E+03	8.960E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.307E+03	7.420E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.308E+03	7.031E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.309E+03	5.015E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.310E+03	6.483E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.311E+03	7.423E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.312E+03	8.943E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.313E+03	7.146E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.314E+03	6.742E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.315E+03	6.730E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.272E+02
1.316E+03	4.832E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.317E+03	5.740E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.318E+03	6.833E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.319E+03	9.447E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.320E+03	5.566E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.321E+03	6.113E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.322E+03	6.381E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.323E+03	5.044E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.324E+03	9.403E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.325E+03	6.253E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.326E+03	9.766E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.327E+03	4.350E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.328E+03	5.506E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.329E+03	5.995E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.330E+03	5.435E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.331E+03	7.790E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.332E+03	5.699E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.333E+03	9.907E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.334E+03	3.643E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.335E+03	9.589E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.336E+03	5.581E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.337E+03	5.966E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.338E+03	6.307E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.339E+03	5.179E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.340E+03	9.883E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.341E+03	3.447E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.342E+03	8.182E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.343E+03	5.143E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.344E+03	6.444E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.345E+03	4.962E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02

1.346E+03	4.703E-07	2	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.347E+03	9.706E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.348E+03	3.662E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.349E+03	6.849E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.350E+03	9.939E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.351E+03	6.790E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.352E+03	3.797E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.353E+03	8.942E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.354E+03	9.387E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.355E+03	4.127E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.356E+03	5.589E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.357E+03	9.094E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.358E+03	6.999E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.359E+03	2.965E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.360E+03	7.748E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.361E+03	8.964E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.362E+03	4.679E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.363E+03	4.441E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.364E+03	8.204E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.365E+03	7.045E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.366E+03	2.671E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.367E+03	6.609E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.368E+03	8.442E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.369E+03	5.095E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.370E+03	3.422E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.371E+03	7.295E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.372E+03	6.955E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.373E+03	2.741E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.374E+03	5.547E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.375E+03	7.843E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.376E+03	5.372E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.377E+03	2.603E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.378E+03	6.400E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.379E+03	6.753E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.380E+03	2.965E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.381E+03	4.567E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.382E+03	7.188E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.383E+03	5.519E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.384E+03	2.100E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.385E+03	5.524E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.386E+03	6.454E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02

1.387E+03	3.291E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.388E+03	3.677E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.389E+03	6.498E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.390E+03	5.550E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.391E+03	1.945E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.392E+03	4.694E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.393E+03	6.076E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.394E+03	3.599E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.395E+03	2.875E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.396E+03	5.794E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.397E+03	5.478E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.398E+03	2.059E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.399E+03	3.915E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.400E+03	5.641E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.401E+03	3.815E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.402E+03	2.192E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.403E+03	5.099E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.404E+03	5.316E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.405E+03	2.312E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.406E+03	3.200E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.407E+03	5.165E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.408E+03	3.937E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.409E+03	1.701E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.410E+03	4.421E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.411E+03	5.082E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.412E+03	2.620E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.413E+03	2.549E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.414E+03	4.663E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.415E+03	3.971E-05	1	2.043E-01	7.957E-01	8.271E+02
1.416E+03	1.513E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.417E+03	3.777E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.418E+03	4.791E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.419E+03	2.860E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.420E+03	1.968E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.421E+03	4.150E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.422E+03	3.927E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.423E+03	1.540E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.424E+03	3.175E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.425E+03	4.454E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.426E+03	3.022E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.427E+03	1.496E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02

1.428E+03	3.645E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.429E+03	3.818E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.430E+03	1.659E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.431E+03	2.619E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.432E+03	4.086E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.433E+03	3.111E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.434E+03	1.198E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.435E+03	3.150E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.436E+03	3.653E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.437E+03	1.840E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.438E+03	2.113E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.439E+03	3.697E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.440E+03	3.134E-05	1	2.042E-01	7.958E-01	8.271E+02
1.441E+03	1.204E-06	4	9.589E-02	9.041E-01	8.081E+02
1.442E+03	8.389E-05	3	2.276E-01	7.724E-01	8.314E+02
1.443E+03	8.826E-07	4	7.554E-02	9.245E-01	8.046E+02
1.444E+03	8.341E-05	3	1.340E-01	8.660E-01	8.147E+02
1.445E+03	6.229E-05	3	-8.029E-02	1.080E+00	7.790E+02
1.446E+03	4.622E-05	3	1.506E-01	8.494E-01	8.176E+02
1.447E+03	3.505E-05	3	4.964E-01	5.036E-01	8.832E+02
1.448E+03	4.554E-05	3	4.360E-01	5.640E-01	8.710E+02
1.449E+03	2.772E-05	3	2.207E-01	7.793E-01	8.301E+02
1.450E+03	3.263E-05	3	2.061E-01	7.939E-01	8.275E+02
1.451E+03	3.319E-05	3	3.672E-01	6.328E-01	8.575E+02
1.452E+03	2.470E-05	3	7.143E-01	2.857E-01	9.302E+02
1.453E+03	3.848E-05	3	9.062E-01	9.377E-02	9.760E+02
1.454E+03	3.045E-05	3	7.810E-01	2.190E-01	9.456E+02
1.455E+03	2.386E-05	3	7.762E-01	2.238E-01	9.445E+02
1.456E+03	2.736E-05	3	9.186E-01	8.142E-02	9.791E+02
1.457E+03	3.449E-05	3	9.098E-01	9.021E-02	9.769E+02
1.458E+03	6.158E-05	3	8.116E-01	1.884E-01	9.528E+02
1.459E+03	3.713E-05	3	7.988E-01	2.012E-01	9.498E+02
1.460E+03	3.190E-05	3	7.486E-01	2.514E-01	9.381E+02
1.461E+03	3.099E-05	3	7.168E-01	2.832E-01	9.308E+02
1.462E+03	3.711E-05	3	7.406E-01	2.594E-01	9.362E+02
1.463E+03	2.537E-05	3	7.632E-01	2.368E-01	9.415E+02
1.464E+03	1.507E-05	3	7.733E-01	2.267E-01	9.438E+02
1.465E+03	1.930E-05	3	7.750E-01	2.250E-01	9.442E+02
1.466E+03	2.968E-05	3	7.901E-01	2.099E-01	9.477E+02
1.467E+03	2.857E-05	3	7.876E-01	2.124E-01	9.472E+02
1.468E+03	1.885E-05	3	7.825E-01	2.175E-01	9.460E+02

1.469E+03	2.435E-05	3	7.673E-01	2.327E-01	9.424E+02
1.470E+03	3.627E-05	3	7.584E-01	2.416E-01	9.403E+02
1.471E+03	2.028E-05	3	7.712E-01	2.288E-01	9.433E+02
1.472E+03	2.086E-05	3	7.918E-01	2.082E-01	9.481E+02
1.473E+03	3.603E-05	3	8.362E-01	1.638E-01	9.588E+02
1.474E+03	4.752E-05	3	8.540E-01	1.460E-01	9.631E+02
1.475E+03	3.183E-05	3	8.929E-01	1.071E-01	9.726E+02
1.476E+03	3.901E-05	3	9.008E-01	9.921E-02	9.746E+02
1.477E+03	4.805E-05	3	8.878E-01	1.122E-01	9.714E+02
1.478E+03	3.673E-05	3	8.899E-01	1.101E-01	9.719E+02
1.479E+03	4.005E-05	3	8.801E-01	1.199E-01	9.695E+02
1.480E+03	6.249E-05	3	8.729E-01	1.271E-01	9.677E+02
1.481E+03	6.469E-05	3	8.529E-01	1.471E-01	9.628E+02
1.482E+03	5.072E-05	3	8.653E-01	1.347E-01	9.658E+02
1.483E+03	6.863E-05	3	8.745E-01	1.255E-01	9.681E+02
1.484E+03	8.275E-05	3	8.605E-01	1.395E-01	9.647E+02
1.485E+03	6.730E-05	3	8.911E-01	1.089E-01	9.722E+02
1.486E+03	6.913E-05	3	9.060E-01	9.395E-02	9.759E+02
1.487E+03	8.876E-05	3	9.041E-01	9.592E-02	9.754E+02
1.488E+03	7.635E-05	3	9.212E-01	7.876E-02	9.797E+02
1.489E+03	8.383E-05	3	9.306E-01	6.939E-02	9.821E+02
1.490E+03	9.843E-05	3	9.228E-01	7.717E-02	9.801E+02
1.491E+03	8.871E-05	3	9.293E-01	7.067E-02	9.818E+02
1.492E+03	9.532E-05	3	9.349E-01	6.507E-02	9.832E+02
1.493E+03	1.548E-06	4	9.252E-01	7.483E-02	9.807E+02
1.494E+03	1.486E-06	4	9.296E-01	7.036E-02	9.819E+02
1.495E+03	9.869E-05	3	9.376E-01	6.237E-02	9.839E+02
1.496E+03	1.627E-06	4	9.321E-01	6.785E-02	9.825E+02
1.497E+03	1.693E-06	4	9.376E-01	6.241E-02	9.839E+02
1.498E+03	9.627E-05	3	9.479E-01	5.210E-02	9.865E+02
1.499E+03	1.531E-06	4	9.461E-01	5.390E-02	9.860E+02
1.500E+03	1.891E-06	4	9.506E-01	4.937E-02	9.872E+02
1.501E+03	9.496E-05	3	9.598E-01	4.016E-02	9.896E+02
1.502E+03	1.333E-06	4	9.588E-01	4.123E-02	9.893E+02
1.503E+03	2.112E-06	4	9.620E-01	3.796E-02	9.901E+02
1.504E+03	9.852E-05	3	9.680E-01	3.201E-02	9.917E+02
1.505E+03	9.138E-05	3	9.672E-01	3.275E-02	9.915E+02
1.506E+03	2.145E-06	4	9.712E-01	2.880E-02	9.925E+02
1.507E+03	9.180E-05	3	9.730E-01	2.702E-02	9.930E+02
1.508E+03	6.836E-05	3	9.741E-01	2.587E-02	9.933E+02
1.509E+03	9.374E-05	3	9.790E-01	2.100E-02	9.945E+02

1.510E+03	7.796E-05	3	9.786E-01	2.135E-02	9.944E+02
1.511E+03	6.436E-05	3	9.812E-01	1.883E-02	9.951E+02
1.512E+03	7.706E-05	3	9.852E-01	1.480E-02	9.961E+02
1.513E+03	8.156E-05	3	9.851E-01	1.491E-02	9.961E+02
1.514E+03	8.632E-05	3	9.876E-01	1.245E-02	9.967E+02
1.515E+03	8.036E-05	3	9.898E-01	1.021E-02	9.973E+02
1.516E+03	9.734E-05	3	9.906E-01	9.383E-03	9.975E+02
1.517E+03	2.137E-06	4	9.922E-01	7.819E-03	9.980E+02
1.518E+03	8.513E-05	3	9.924E-01	7.591E-03	9.980E+02
1.519E+03	1.987E-06	4	9.943E-01	5.715E-03	9.985E+02
1.520E+03	2.224E-06	4	9.945E-01	5.494E-03	9.986E+02
1.521E+03	1.751E-06	4	9.941E-01	5.947E-03	9.984E+02
1.522E+03	2.218E-06	4	9.960E-01	4.016E-03	9.989E+02
1.523E+03	2.251E-06	4	9.955E-01	4.479E-03	9.988E+02
1.524E+03	2.721E-06	4	9.950E-01	4.963E-03	9.987E+02
1.525E+03	2.699E-06	4	9.960E-01	3.989E-03	9.990E+02
1.526E+03	2.255E-06	4	9.960E-01	4.034E-03	9.989E+02
1.527E+03	3.380E-06	4	9.955E-01	4.486E-03	9.988E+02
1.528E+03	3.242E-06	4	9.958E-01	4.207E-03	9.989E+02
1.529E+03	2.479E-06	4	9.954E-01	4.573E-03	9.988E+02
1.530E+03	3.106E-06	4	9.957E-01	4.338E-03	9.989E+02
1.531E+03	2.908E-06	4	9.955E-01	4.499E-03	9.988E+02
1.532E+03	3.045E-06	4	9.949E-01	5.081E-03	9.987E+02
1.533E+03	3.254E-06	4	9.952E-01	4.817E-03	9.987E+02
1.534E+03	2.898E-06	4	9.956E-01	4.427E-03	9.988E+02
1.535E+03	4.010E-06	4	9.944E-01	5.567E-03	9.985E+02
1.536E+03	3.615E-06	4	9.948E-01	5.230E-03	9.986E+02
1.537E+03	3.005E-06	4	9.952E-01	4.776E-03	9.987E+02
1.538E+03	3.735E-06	4	9.948E-01	5.181E-03	9.986E+02
1.539E+03	3.436E-06	4	9.954E-01	4.639E-03	9.988E+02
1.540E+03	3.246E-06	4	9.953E-01	4.689E-03	9.988E+02
1.541E+03	3.461E-06	4	9.956E-01	4.374E-03	9.989E+02
1.542E+03	3.571E-06	4	9.962E-01	3.769E-03	9.990E+02
1.543E+03	4.348E-06	4	9.957E-01	4.258E-03	9.989E+02
1.544E+03	3.876E-06	4	9.961E-01	3.915E-03	9.990E+02
1.545E+03	3.292E-06	4	9.966E-01	3.407E-03	9.991E+02
1.546E+03	4.058E-06	4	9.966E-01	3.419E-03	9.991E+02
1.547E+03	3.802E-06	4	9.968E-01	3.210E-03	9.992E+02
1.548E+03	3.557E-06	4	9.969E-01	3.113E-03	9.992E+02
1.549E+03	3.729E-06	4	9.973E-01	2.726E-03	9.993E+02
1.550E+03	3.649E-06	4	9.976E-01	2.436E-03	9.994E+02

1.551E+03	4.622E-06	4	9.972E-01	2.817E-03	9.993E+02
1.552E+03	4.241E-06	4	9.973E-01	2.681E-03	9.993E+02
1.553E+03	3.458E-06	4	9.977E-01	2.261E-03	9.994E+02
1.554E+03	3.970E-06	4	9.976E-01	2.383E-03	9.994E+02
1.555E+03	4.016E-06	4	9.977E-01	2.305E-03	9.994E+02
1.556E+03	3.973E-06	4	9.977E-01	2.286E-03	9.994E+02
1.557E+03	4.050E-06	4	9.978E-01	2.152E-03	9.994E+02
1.558E+03	3.430E-06	4	9.982E-01	1.778E-03	9.995E+02
1.559E+03	4.763E-06	4	9.978E-01	2.237E-03	9.994E+02
1.560E+03	4.654E-06	4	9.978E-01	2.169E-03	9.994E+02
1.561E+03	3.621E-06	4	9.981E-01	1.902E-03	9.995E+02
1.562E+03	4.158E-06	4	9.980E-01	1.999E-03	9.995E+02
1.563E+03	3.875E-06	4	9.981E-01	1.868E-03	9.995E+02
1.564E+03	4.316E-06	4	9.980E-01	1.995E-03	9.995E+02
1.565E+03	4.208E-06	4	9.980E-01	2.013E-03	9.995E+02
1.566E+03	3.706E-06	4	9.985E-01	1.530E-03	9.996E+02
1.567E+03	5.070E-06	4	9.980E-01	1.960E-03	9.995E+02
1.568E+03	4.926E-06	4	9.981E-01	1.867E-03	9.995E+02
1.569E+03	3.563E-06	4	9.983E-01	1.697E-03	9.996E+02
1.570E+03	4.318E-06	4	9.983E-01	1.714E-03	9.996E+02
1.571E+03	4.407E-06	4	9.985E-01	1.478E-03	9.996E+02
1.572E+03	4.823E-06	4	9.983E-01	1.689E-03	9.996E+02
1.573E+03	4.448E-06	4	9.983E-01	1.734E-03	9.995E+02
1.574E+03	3.859E-06	4	9.987E-01	1.257E-03	9.997E+02
1.575E+03	5.087E-06	4	9.985E-01	1.520E-03	9.996E+02
1.576E+03	4.739E-06	4	9.986E-01	1.448E-03	9.996E+02
1.577E+03	4.196E-06	4	9.987E-01	1.339E-03	9.996E+02
1.578E+03	4.359E-06	4	9.987E-01	1.316E-03	9.997E+02
1.579E+03	4.065E-06	4	9.990E-01	1.038E-03	9.997E+02
1.580E+03	5.251E-06	4	9.987E-01	1.291E-03	9.997E+02
1.581E+03	5.019E-06	4	9.987E-01	1.265E-03	9.997E+02
1.582E+03	3.986E-06	4	9.990E-01	1.024E-03	9.997E+02
1.583E+03	4.445E-06	4	9.989E-01	1.119E-03	9.997E+02
1.584E+03	4.198E-06	4	9.990E-01	9.948E-04	9.997E+02
1.585E+03	4.651E-06	4	9.990E-01	1.048E-03	9.997E+02
1.586E+03	4.447E-06	4	9.989E-01	1.091E-03	9.997E+02
1.587E+03	4.073E-06	4	9.992E-01	7.502E-04	9.998E+02
1.588E+03	5.573E-06	4	9.990E-01	1.006E-03	9.997E+02
1.589E+03	5.178E-06	4	9.990E-01	9.643E-04	9.997E+02
1.590E+03	3.878E-06	4	9.992E-01	8.398E-04	9.998E+02
1.591E+03	4.292E-06	4	9.991E-01	8.849E-04	9.998E+02

1.592E+03	4.886E-06	4	9.993E-01	7.058E-04	9.998E+02
1.593E+03	5.241E-06	4	9.991E-01	8.633E-04	9.998E+02
1.594E+03	4.833E-06	4	9.991E-01	9.076E-04	9.998E+02
1.595E+03	3.986E-06	4	9.994E-01	6.318E-04	9.998E+02
1.596E+03	4.722E-06	4	9.992E-01	7.943E-04	9.998E+02
1.597E+03	4.805E-06	4	9.993E-01	7.271E-04	9.998E+02
1.598E+03	4.566E-06	4	9.993E-01	7.001E-04	9.998E+02
1.599E+03	4.646E-06	4	9.993E-01	7.397E-04	9.998E+02
1.600E+03	3.834E-06	4	9.995E-01	5.177E-04	9.999E+02
1.601E+03	5.246E-06	4	9.993E-01	6.977E-04	9.998E+02
1.602E+03	5.371E-06	4	9.993E-01	6.724E-04	9.998E+02
1.603E+03	3.971E-06	4	9.994E-01	5.556E-04	9.999E+02
1.604E+03	4.784E-06	4	9.994E-01	6.137E-04	9.998E+02
1.605E+03	4.538E-06	4	9.995E-01	4.981E-04	9.999E+02
1.606E+03	5.052E-06	4	9.994E-01	5.743E-04	9.998E+02
1.607E+03	4.641E-06	4	9.994E-01	6.223E-04	9.998E+02
1.608E+03	4.113E-06	4	9.996E-01	3.994E-04	9.999E+02
1.609E+03	5.451E-06	4	9.995E-01	5.405E-04	9.999E+02
1.610E+03	5.107E-06	4	9.995E-01	5.041E-04	9.999E+02
1.611E+03	4.474E-06	4	9.995E-01	4.543E-04	9.999E+02
1.612E+03	4.605E-06	4	9.995E-01	4.880E-04	9.999E+02
1.613E+03	4.237E-06	4	9.997E-01	3.468E-04	9.999E+02
1.614E+03	5.455E-06	4	9.995E-01	4.627E-04	9.999E+02
1.615E+03	5.273E-06	4	9.995E-01	4.582E-04	9.999E+02
1.616E+03	4.175E-06	4	9.996E-01	3.519E-04	9.999E+02
1.617E+03	4.796E-06	4	9.996E-01	4.147E-04	9.999E+02
1.618E+03	4.341E-06	4	9.997E-01	3.412E-04	9.999E+02
1.619E+03	4.898E-06	4	9.996E-01	3.737E-04	9.999E+02
1.620E+03	4.553E-06	4	9.996E-01	4.134E-04	9.999E+02
1.621E+03	4.264E-06	4	9.997E-01	2.559E-04	9.999E+02
1.622E+03	5.803E-06	4	9.996E-01	3.644E-04	9.999E+02
1.623E+03	5.277E-06	4	9.997E-01	3.425E-04	9.999E+02
1.624E+03	4.292E-06	4	9.997E-01	2.948E-04	9.999E+02
1.625E+03	4.452E-06	4	9.997E-01	3.272E-04	9.999E+02
1.626E+03	4.787E-06	4	9.998E-01	2.349E-04	9.999E+02
1.627E+03	5.544E-06	4	9.997E-01	3.079E-04	9.999E+02
1.628E+03	5.156E-06	4	9.997E-01	3.173E-04	9.999E+02
1.629E+03	4.218E-06	4	9.998E-01	2.239E-04	9.999E+02
1.630E+03	4.571E-06	4	9.997E-01	2.832E-04	9.999E+02
1.631E+03	4.506E-06	4	9.998E-01	2.374E-04	9.999E+02
1.632E+03	4.795E-06	4	9.998E-01	2.455E-04	9.999E+02

1.633E+03	4.639E-06	4	9.997E-01	2.757E-04	9.999E+02
1.634E+03	4.218E-06	4	9.998E-01	1.694E-04	1.000E+03
1.635E+03	5.787E-06	4	9.998E-01	2.464E-04	9.999E+02
1.636E+03	5.419E-06	4	9.998E-01	2.325E-04	9.999E+02
1.637E+03	4.070E-06	4	9.998E-01	1.924E-04	9.999E+02
1.638E+03	4.407E-06	4	9.998E-01	2.210E-04	9.999E+02
1.639E+03	5.071E-06	4	9.998E-01	1.601E-04	1.000E+03
1.640E+03	5.471E-06	4	9.998E-01	2.040E-04	9.999E+02
1.641E+03	5.006E-06	4	9.998E-01	2.190E-04	9.999E+02
1.642E+03	4.146E-06	4	9.999E-01	1.419E-04	1.000E+03
1.643E+03	4.681E-06	4	9.998E-01	1.920E-04	9.999E+02
1.644E+03	4.803E-06	4	9.998E-01	1.644E-04	1.000E+03
1.645E+03	4.733E-06	4	9.998E-01	1.605E-04	1.000E+03
1.646E+03	4.728E-06	4	9.998E-01	1.831E-04	1.000E+03
1.647E+03	4.014E-06	4	9.999E-01	1.130E-04	1.000E+03
1.648E+03	5.529E-06	4	9.998E-01	1.653E-04	1.000E+03
1.649E+03	5.471E-06	4	9.998E-01	1.573E-04	1.000E+03
1.650E+03	3.991E-06	4	9.999E-01	1.252E-04	1.000E+03
1.651E+03	4.634E-06	4	9.999E-01	1.494E-04	1.000E+03
1.652E+03	4.943E-06	4	9.999E-01	1.092E-04	1.000E+03
1.653E+03	5.298E-06	4	9.999E-01	1.347E-04	1.000E+03
1.654E+03	4.845E-06	4	9.998E-01	1.502E-04	1.000E+03
1.655E+03	4.094E-06	4	9.999E-01	9.041E-05	1.000E+03
1.656E+03	5.067E-06	4	9.999E-01	1.301E-04	1.000E+03
1.657E+03	5.053E-06	4	9.999E-01	1.138E-04	1.000E+03
1.658E+03	4.673E-06	4	9.999E-01	1.052E-04	1.000E+03
1.659E+03	4.751E-06	4	9.999E-01	1.222E-04	1.000E+03
1.660E+03	3.961E-06	4	9.999E-01	7.610E-05	1.000E+03
1.661E+03	5.340E-06	4	9.999E-01	1.109E-04	1.000E+03
1.662E+03	5.465E-06	4	9.999E-01	1.072E-04	1.000E+03
1.663E+03	4.078E-06	4	9.999E-01	8.163E-05	1.000E+03
1.664E+03	4.884E-06	4	9.999E-01	1.014E-04	1.000E+03
1.665E+03	4.635E-06	4	9.999E-01	7.501E-05	1.000E+03
1.666E+03	5.149E-06	4	9.999E-01	8.899E-05	1.000E+03
1.667E+03	4.714E-06	4	9.999E-01	1.022E-04	1.000E+03
1.668E+03	4.155E-06	4	9.999E-01	5.834E-05	1.000E+03
1.669E+03	5.481E-06	4	9.999E-01	8.814E-05	1.000E+03
1.670E+03	5.197E-06	4	9.999E-01	7.850E-05	1.000E+03
1.671E+03	4.578E-06	4	9.999E-01	6.907E-05	1.000E+03
1.672E+03	4.694E-06	4	9.999E-01	8.192E-05	1.000E+03
1.673E+03	4.211E-06	4	9.999E-01	5.156E-05	1.000E+03

1.674E+03	5.487E-06	4	9.999E-01	7.421E-05	1.000E+03
1.675E+03	5.379E-06	4	9.999E-01	7.354E-05	1.000E+03
1.676E+03	4.204E-06	4	9.999E-01	5.308E-05	1.000E+03
1.677E+03	4.918E-06	4	9.999E-01	6.892E-05	1.000E+03
1.678E+03	4.450E-06	4	9.999E-01	5.176E-05	1.000E+03
1.679E+03	5.010E-06	4	9.999E-01	5.873E-05	1.000E+03
1.680E+03	4.611E-06	4	9.999E-01	6.903E-05	1.000E+03
1.681E+03	4.273E-06	4	1.000E+00	3.817E-05	1.000E+03
1.682E+03	5.771E-06	4	9.999E-01	5.965E-05	1.000E+03
1.683E+03	5.300E-06	4	9.999E-01	5.391E-05	1.000E+03
1.684E+03	4.448E-06	4	1.000E+00	4.537E-05	1.000E+03
1.685E+03	4.576E-06	4	9.999E-01	5.513E-05	1.000E+03
1.686E+03	4.564E-06	4	1.000E+00	3.512E-05	1.000E+03
1.687E+03	5.590E-06	4	1.000E+00	4.956E-05	1.000E+03
1.688E+03	5.287E-06	4	9.999E-01	5.081E-05	1.000E+03
1.689E+03	4.261E-06	4	1.000E+00	3.437E-05	1.000E+03
1.690E+03	4.747E-06	4	1.000E+00	4.691E-05	1.000E+03
1.691E+03	4.402E-06	4	1.000E+00	3.593E-05	1.000E+03
1.692E+03	4.892E-06	4	1.000E+00	3.876E-05	1.000E+03
1.693E+03	4.611E-06	4	1.000E+00	4.645E-05	1.000E+03
1.694E+03	4.296E-06	4	1.000E+00	2.533E-05	1.000E+03
1.695E+03	5.891E-06	4	1.000E+00	4.035E-05	1.000E+03
1.696E+03	5.393E-06	4	1.000E+00	3.691E-05	1.000E+03
1.697E+03	4.261E-06	4	1.000E+00	2.983E-05	1.000E+03
1.698E+03	4.430E-06	4	1.000E+00	3.726E-05	1.000E+03
1.699E+03	4.938E-06	4	1.000E+00	2.405E-05	1.000E+03
1.700E+03	5.583E-06	4	1.000E+00	3.305E-05	1.000E+03
1.701E+03	5.159E-06	4	1.000E+00	3.529E-05	1.000E+03
1.702E+03	4.240E-06	4	1.000E+00	2.217E-05	1.000E+03
1.703E+03	4.584E-06	4	1.000E+00	3.195E-05	1.000E+03
1.704E+03	4.596E-06	4	1.000E+00	2.507E-05	1.000E+03
1.705E+03	4.807E-06	4	1.000E+00	2.558E-05	1.000E+03
1.706E+03	4.670E-06	4	1.000E+00	3.121E-05	1.000E+03
1.707E+03	4.212E-06	4	1.000E+00	1.702E-05	1.000E+03
1.708E+03	5.783E-06	4	1.000E+00	2.727E-05	1.000E+03
1.709E+03	5.472E-06	4	1.000E+00	2.526E-05	1.000E+03
1.710E+03	4.072E-06	4	1.000E+00	1.962E-05	1.000E+03
1.711E+03	4.438E-06	4	1.000E+00	2.527E-05	1.000E+03
1.712E+03	5.103E-06	4	1.000E+00	1.656E-05	1.000E+03
1.713E+03	5.481E-06	4	1.000E+00	2.201E-05	1.000E+03
1.714E+03	5.016E-06	4	1.000E+00	2.454E-05	1.000E+03

1.715E+03	4.157E-06	4	1.000E+00	1.429E-05	1.000E+03
1.716E+03	4.719E-06	4	1.000E+00	2.175E-05	1.000E+03
1.717E+03	4.839E-06	4	1.000E+00	1.755E-05	1.000E+03
1.718E+03	4.749E-06	4	1.000E+00	1.690E-05	1.000E+03
1.719E+03	4.741E-06	4	1.000E+00	2.099E-05	1.000E+03
1.720E+03	4.023E-06	4	1.000E+00	1.155E-05	1.000E+03
1.721E+03	5.541E-06	4	1.000E+00	1.841E-05	1.000E+03
1.722E+03	5.490E-06	4	1.000E+00	1.733E-05	1.000E+03
1.723E+03	4.006E-06	4	1.000E+00	1.294E-05	1.000E+03
1.724E+03	4.644E-06	4	1.000E+00	1.718E-05	1.000E+03
1.725E+03	4.961E-06	4	1.000E+00	1.147E-05	1.000E+03
1.726E+03	5.317E-06	4	1.000E+00	1.464E-05	1.000E+03
1.727E+03	4.859E-06	4	1.000E+00	1.700E-05	1.000E+03
1.728E+03	4.103E-06	4	1.000E+00	9.256E-06	1.000E+03
1.729E+03	5.065E-06	4	1.000E+00	1.481E-05	1.000E+03
1.730E+03	5.060E-06	4	1.000E+00	1.230E-05	1.000E+03
1.731E+03	4.689E-06	4	1.000E+00	1.117E-05	1.000E+03
1.732E+03	4.763E-06	4	1.000E+00	1.414E-05	1.000E+03
1.733E+03	3.963E-06	4	1.000E+00	7.894E-06	1.000E+03
1.734E+03	5.356E-06	4	1.000E+00	1.241E-05	1.000E+03
1.735E+03	5.482E-06	4	1.000E+00	1.194E-05	1.000E+03
1.736E+03	4.080E-06	4	1.000E+00	8.533E-06	1.000E+03
1.737E+03	4.877E-06	4	1.000E+00	1.171E-05	1.000E+03
1.738E+03	4.663E-06	4	1.000E+00	7.979E-06	1.000E+03
1.739E+03	5.169E-06	4	1.000E+00	9.736E-06	1.000E+03
1.740E+03	4.729E-06	4	1.000E+00	1.170E-05	1.000E+03
1.741E+03	4.148E-06	4	1.000E+00	6.054E-06	1.000E+03
1.742E+03	5.454E-06	4	1.000E+00	1.008E-05	1.000E+03
1.743E+03	5.198E-06	4	1.000E+00	8.601E-06	1.000E+03
1.744E+03	4.594E-06	4	1.000E+00	7.396E-06	1.000E+03
1.745E+03	4.702E-06	4	1.000E+00	9.544E-06	1.000E+03
1.746E+03	4.184E-06	4	1.000E+00	5.428E-06	1.000E+03
1.747E+03	5.481E-06	4	1.000E+00	8.348E-06	1.000E+03
1.748E+03	5.398E-06	4	1.000E+00	8.282E-06	1.000E+03
1.749E+03	4.196E-06	4	1.000E+00	5.614E-06	1.000E+03
1.750E+03	4.934E-06	4	1.000E+00	7.996E-06	1.000E+03
1.751E+03	4.475E-06	4	1.000E+00	5.582E-06	1.000E+03
1.752E+03	5.032E-06	4	1.000E+00	6.471E-06	1.000E+03
1.753E+03	4.616E-06	4	1.000E+00	7.989E-06	1.000E+03
1.754E+03	4.260E-06	4	1.000E+00	4.012E-06	1.000E+03
1.755E+03	5.740E-06	4	1.000E+00	6.852E-06	1.000E+03

1.756E+03	5.297E-06	4	1.000E+00	5.990E-06	1.000E+03
1.757E+03	4.478E-06	4	1.000E+00	4.901E-06	1.000E+03
1.758E+03	4.600E-06	4	1.000E+00	6.462E-06	1.000E+03
1.759E+03	4.513E-06	4	1.000E+00	3.751E-06	1.000E+03
1.760E+03	5.587E-06	4	1.000E+00	5.605E-06	1.000E+03
1.761E+03	5.308E-06	4	1.000E+00	5.779E-06	1.000E+03
1.762E+03	4.268E-06	4	1.000E+00	3.677E-06	1.000E+03
1.763E+03	4.789E-06	4	1.000E+00	5.466E-06	1.000E+03
1.764E+03	4.391E-06	4	1.000E+00	3.926E-06	1.000E+03
1.765E+03	4.911E-06	4	1.000E+00	4.299E-06	1.000E+03
1.766E+03	4.599E-06	4	1.000E+00	5.427E-06	1.000E+03
1.767E+03	4.299E-06	4	1.000E+00	2.696E-06	1.000E+03
1.768E+03	5.889E-06	4	1.000E+00	4.657E-06	1.000E+03
1.769E+03	5.376E-06	4	1.000E+00	4.155E-06	1.000E+03
1.770E+03	4.297E-06	4	1.000E+00	3.249E-06	1.000E+03
1.771E+03	4.456E-06	4	1.000E+00	4.388E-06	1.000E+03
1.772E+03	4.894E-06	4	1.000E+00	2.605E-06	1.000E+03
1.773E+03	5.595E-06	4	1.000E+00	3.757E-06	1.000E+03
1.774E+03	5.177E-06	4	1.000E+00	4.052E-06	1.000E+03
1.775E+03	4.252E-06	4	1.000E+00	2.398E-06	1.000E+03
1.776E+03	4.599E-06	4	1.000E+00	3.739E-06	1.000E+03
1.777E+03	4.557E-06	4	1.000E+00	2.774E-06	1.000E+03
1.778E+03	4.825E-06	4	1.000E+00	2.856E-06	1.000E+03
1.779E+03	4.662E-06	4	1.000E+00	3.677E-06	1.000E+03
1.780E+03	4.238E-06	4	1.000E+00	1.834E-06	1.000E+03
1.781E+03	5.823E-06	4	1.000E+00	3.161E-06	1.000E+03
1.782E+03	5.452E-06	4	1.000E+00	2.877E-06	1.000E+03
1.783E+03	4.105E-06	4	1.000E+00	2.155E-06	1.000E+03
1.784E+03	4.422E-06	4	1.000E+00	2.989E-06	1.000E+03
1.785E+03	5.097E-06	4	1.000E+00	1.817E-06	1.000E+03
1.786E+03	5.510E-06	4	1.000E+00	2.514E-06	1.000E+03
1.787E+03	5.035E-06	4	1.000E+00	2.845E-06	1.000E+03
1.788E+03	4.173E-06	4	1.000E+00	1.561E-06	1.000E+03
1.789E+03	4.676E-06	4	1.000E+00	2.557E-06	1.000E+03
1.790E+03	4.804E-06	4	1.000E+00	1.966E-06	1.000E+03
1.791E+03	4.762E-06	4	1.000E+00	1.898E-06	1.000E+03
1.792E+03	4.743E-06	4	1.000E+00	2.490E-06	1.000E+03
1.793E+03	4.055E-06	4	1.000E+00	1.260E-06	1.000E+03
1.794E+03	5.579E-06	4	1.000E+00	2.143E-06	1.000E+03
1.795E+03	5.496E-06	4	1.000E+00	1.993E-06	1.000E+03
1.796E+03	4.006E-06	4	1.000E+00	1.433E-06	1.000E+03

1.797E+03	4.600E-06	4	1.000E+00	2.040E-06	1.000E+03
1.798E+03	5.008E-06	4	1.000E+00	1.273E-06	1.000E+03
1.799E+03	5.343E-06	4	1.000E+00	1.681E-06	1.000E+03
1.800E+03	4.893E-06	4	1.000E+00	1.991E-06	1.000E+03