



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
MESTRADO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA AMBIENTAL**

ANDRÉ LUIZ DA SILVA

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE
POLUENTES EM MEIOS POROSOS COM REAÇÕES QUÍMICAS**

CAMPINA GRANDE

2016

**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
MESTRADO EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA AMBIENTAL**

ANDRÉ LUIZ DA SILVA

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE
POLUENTES EM MEIOS POROSOS COM REAÇÕES QUÍMICAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental da Universidade Estadual da Paraíba, em cumprimento as exigências para obtenção do título de Mestre em Ciência e Tecnologia Ambiental.

ORIENTADOR: Prof. Dr. FERNANDO FERNANDES VIEIRA

CO-ORIENTADORA: Prof. Dra. GERALDA GILVÂNIA CAVALCANTE

CAMPINA GRANDE - PB

2016

É expressamente proibida a comercialização deste documento, tanto na forma impressa como eletrônica. Sua reprodução total ou parcial é permitida exclusivamente para fins acadêmicos e científicos, desde que na reprodução figure a identificação do autor, título, instituição e ano da dissertação.

S586m Silva, André Luiz da
Modelagem e simulação numérica do transporte de poluentes em meios porosos com reações químicas [manuscrito] / André Luiz da Silva. - 2016.
91 p.

Digitado.
Dissertação (Mestrado Ciência e Tecnologia Ambiental) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2016.

Orientação: Prof. Drº Fernando Fernandes Vieira, Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental - DESA.

1. Modelagem Matemática. 2. Dispersão de Poluentes. 3. Contaminação do Solo. 4. Meios Porosos. I. Título.

21. ed. CDD 631.4

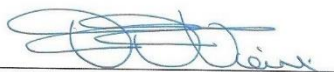
ANDRÉ LUIZ DA SILVA

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE POLUENTES
EM MEIOS POROSOS COM REAÇÕES QUÍMICAS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental da Universidade Estadual da Paraíba, em cumprimento às exigências para obtenção do título de mestre em Ciência e Tecnologia Ambiental.

DISSERTAÇÃO APROVADA EM 28 DE ABRIL DE 2016

Banca examinadora:



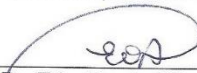
Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira
(Orientador)



Prof. Dra. Geralda Gilvânia Cavalcante
(Co-orientadora)



Prof. Dr. Severino Rodrigues Farias Neto
(Examinador Externo)



Prof. Dr. Edvaldo de Oliveira Alves
(Examinador Interno)

CAMPINA GRANDE-PB

2016

DEDICATÓRIA

Dedico à minha querida e incansável Mãe, Maria Auxiliadora Gomes da Silva, por toda resiliência diante das dificuldades, sempre cuidando e acreditando no filho e em dias melhores...

AGRADECIMENTOS

Agradeço à toda minha família, em especial ao tio Luiz Gomes e família, tio Miro e família e Tio Tonho e família pelos ensinamentos e oportunidades oferecidas.

Minha querida e amada Tatiana Pontes, o maior presente do mestrado, pelo companheirismo, amor, confiança, dedicação e muita paciência, já que esteve presente em toda a realização deste trabalho.

Agradeço em especial ao professor Fernando Fernandes e Família, que diante de tantas turbulências nunca se ausentou, obrigado professor por toda orientação, paciência, atenção, ensinamentos, confiança e dedicação.

Aos colegas e professores do MCTA que direta ou indiretamente contribuíram para a realização deste trabalho.

Ao amigo, Professor Márcio Rennan pela irmandade em tantas jornadas.

Aos irmãos André Falcão e Bruno Falcão que mesmo de longe sempre estiveram transmitindo fraternidade e força.

A Joniéilton Marques e Professor Paulo da Hora pelas vibrações sinceras e positivas.

A Danúbio Leonardo e Cristino Miranda pelo companheirismo profissional e pessoal.

A todos os colegas servidores do IFPB que me deram força e confiança.

Ao Instituto Federal da Paraíba pelo apoio na realização deste trabalho.

RESUMO

Palavras-chave: Modelagem Matemática, Simulação Numérica, Transporte de Contaminantes, Meio Porosos, Volumes Finitos

Atualmente existe uma grande preocupação com a contaminação das águas subterrâneas devido a poluição ambiental. Devido a necessidade de se lidar com problemas desta natureza, se faz necessário o desenvolvimento de pesquisas que possibilitem o entendimento da propagação de poluentes em meios porosos motivando a necessidade do desenvolvimento de modelos matemáticos e códigos computacionais para simularem o transporte reativo de múltiplas espécies poluentes. Este trabalho teve como objetivo propor um modelo matemático para a simulação numérica da propagação de poluentes na região saturada do solo, contemplando os mecanismos de advecção, difusão, sorção e reação química. O modelo matemático obtido foi discretizado utilizando o método dos Volumes Finitos. Os resultados obtidos demonstram que o método dos Volumes Finitos, apresentou um desempenho bastante satisfatório na Discretização das equações de conservação do problema do transporte bidimensional reativo de poluentes em águas subterrâneas, o método numérico foi comparado para um meio semi-infinito obtendo bons resultados, o planejamento experimental simulado norteou os resultados do trabalho. Ficou evidenciado também a boa performance da linguagem computacional como ferramenta de apoio para a avaliação de impactos ambientais causados por fontes poluidoras, sendo possível visualizar a extensão e o comportamento de uma pluma de contaminação e realizar inúmeras operações em curto período de tempo, a baixo custo e produzindo resultados bem próximos da realidade.

ABSTRACT

Keywords: Mathematical Modeling, Numerical Simulation, Contaminant Transport, Environment Porous, Finite Volume

Currently there is a great concern for groundwater contamination due to environmental pollution. Because of the need to deal with problems of this nature, it is necessary to develop research to enable understanding of the spread of pollutants in porous media motivating the need to develop mathematical models and computer codes to simulate reactive transport multispecies pollutants. This work aimed to propose a mathematical model for the numerical simulation of the spread of pollutants in the saturated region of the soil, considering the advection mechanisms, diffusion, sorption and chemical reaction. The mathematical model obtained was discretized using the method of finite volume. The results show that the method of Finite Volume, presented a very satisfactory performance in the discretization of pollutant reactive two-dimensional transport problem of the conservation equations in groundwater, the numerical method was compared to a semi-infinite medium getting good results, simulated experimental design guided the work results. It also highlighted the good performance of the computer language as a support tool for the evaluation of environmental impacts caused by pollution sources, and you can view the extent and behavior of a plume of contamination and carry out numerous transactions in short time at low cost and producing results very close to reality.

LISTA DE ABREVIATURAS E SIMBOLOS

C	concentração de soluto no fluido intersticial;
C _s	massa do poluente na fase sólida por unidade de massa da fase sólida;
C _i	concentração inicial;
C _T	capacidade de sorção, coeficiente de capacidade de adsorção
D _o	difusão molecular em água pura;
D *	coeficiente de difusão molecular em um meio poroso
D _{HL}	dispersão hidrodinâmica longitudinal;
D _{HT}	dispersão hidrodinâmica transversal;
K _d	coeficiente distribuição;
K _s	parâmetro relacionado à velocidade de sorção
K _a	parâmetro relacionado à velocidade de desorção.
K _d	coeficiente distribuição;
K _{eq}	denominado constante de equilíbrio químico;
K _{oc}	coeficiente de partição entre o carbono orgânico e a água;
M	massa de soluto;
M _s	massa de sólidos;
R	fator de retardamento;
S	Sorção;
V _x	velocidade média intersticial na direção x;
V _y	velocidade média intersticial na direção y;
d	distância entre os pontos onde a diferença de pressão foi medida
i	gradiente hidráulico;
n	porosidade do solo;
t	tempo (T);
v	velocidade de Darcy;
Δh	diferença das pressões hidráulicas
ρ	constante que depende das características do material poroso

k	Constante de Reação Química
ω	Coefficiente de Tortuosidade
α_L, α_T	Dispersividades longitudinal e transversal
u, v	Componentes da velocidade intersticial, nas direções x e y respectivamente

Subscritos

P	Ponto central de um volume qualquer
e, w, n, s,	Denota a interface de um volume P qualquer, nas direções leste, oeste, norte, sul, respectivamente
E, W, N, S	Pontos centrais dos volumes adjacentes ao volume P, que são leste, oeste, norte e sul, respectivamente

Superscritos

o	Indica que a propriedade é avaliada no passo temporal anterior
k	Número inteiro que indica o nível iterativo

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1- Processos do Transporte de Espécies Químicas.....	5
Figura 2.2- Espalhamento da pluma de contaminação	9
Figura 2.3- Domínio contínuo e malha do domínio discretizado	13
Figura 2.4-Balanco diferencial em um volume de controle bidimensional	14
Figura 3.1-Balanco diferencial em um volume de controle bidimensional	27
Figura 3.2-Método de interpolação UpWind	28
Figura 3.3-Volumes internos da malha de cálculo.....	31
Figura 3.4-Representação esquemática das condições iniciais e de contorno.....	31
Figura 3.5-Volume de controle situado no contorno inferior esquerdo	32
Figura 3.6-Volume de controle situado no contorno da lateral esquerda	32
Figura 3.7-Volume de controle situado no contorno do canto superior esquerdo .	33
Figura 3.8-Volume de controle situado no contorno da superfície superior.....	34
Figura 3.9-Volume de controle situado no canto superior direito	36
Figura 3.10-Volume de controle situado no contorno da lateral direita	37
Figura 3.11-Volume de controle situado no canto inferior direito	38
Figura 3.12-Volume de controle situado no contorno da superfície inferior	39
Figura 4.1-Critério utilizado na escolha da malha.....	41
Figura4.2-Soluções analíticas e numéricas para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de u	43
Figura4.3-Comparação entre as soluções analítica e numéricas para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de k.....	44
Figura4.4-Comparação entre as soluções analítica e numéricas para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de alfa.....	45
Figura 4.5-Coleta dos pontos de interessa na malha para análise de convergência	46
Figura 4.6- Posicionamento dos planos	47
Figura 4.7 - Influência do retardo na concentração longitudinal	50
Figura 4.8 - Influência do retardo na concentração transversal.....	51
Figura 4.9 - Influência do coeficiente de retardo sobre a pluma de contaminação	52
Figura 4.10 -Influência da taxa de Reação Química na concentração longitudinal	50
Figura 4.11-Influência da taxa de Reação Química na concentração transversal .	50

Figura4.12-Influência da taxa de Reação Química sobre pluma de contaminação	50
Figura 4.13-Influência do coeficiente de Velocidade na seção longitudinal.....	58
Figura 4.14-Influência do coeficiente de Velocidade na seção transversal	59
Figura 4.15-Efeito do Coeficiente de velocidade sobre a pluma de contaminação.	60
Figura 4.16-Influência do coeficiente de dispersidade na seção longitudinal	62
Figura 4.17- Influência do coeficiente de dispersidade no perfil transversal	63
Figura4.18-Efeito do Coeficiente dispersividade sobre a pluma de contaminação	64
Figura 4.19- Influência do coeficiente de dispersão no perfil longitudinal	67
Figura 4.20- Influência do coeficiente de dispersão no perfil transversal.....	68
Figura 4.21-Efeito da dispersão sobre a pluma de contaminação.....	69

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1 - Designação comuns das diversas condições de contorno.....	17
Tabela 4.1 - Dados de Entrada na primeira simulação.....	42
Tabela 4.2 - Dados de Entrada na segunda simulação.....	43
Tabela 4.3 - Dados de Entrada na terceira simulação.....	44
Tabela 4.4 - Análise de Convergência do Método	46
Tabela 4.5 - Dados da análise paramétrica	48

SUMÁRIO

1. INTRODUÇÃO.....	1
2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	3
2.1. ÁGUAS SUBTERRÂNEAS.....	3
2.2 PROCESSOS FÍSICOS	5
3.2.1 Advecção.....	6
3.2.2 Dispersão	6
2.3 PROCESSOS QUÍMICOS.....	8
2.3.1 Efeitos da Sorção	9
2.3.2 Modelo de Degradação Reativa	10
2.4 FORMULAÇÃO NUMÉRICA	11
2.4.1 Método dos Volumes Finitos	12
2.4.2 Discretização	13
3.4.3 Condições Iniciais e de Contorno.....	15
2.5 SOLUÇÃO DE UM SISTEMA LINEAR.....	17
2.5.1 Método de Jacobi	18
2.5.2 Método de Gauss-Seidel	19
2.6 ESTADO DA ARTE	19
2.6.1 Modelagem matemática como ferramenta em sistemas ambientais	19
3. MODELAGEM MATEMÁTICA	24
3.1 DOMÍNIO ESTUDADO.....	24
3.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....	25
4.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE	27
4.4 MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE UM SISTEMA LINEAR.....	40
4.5 MÉTODO COMPUTACIONAL	40
4. RESULTADOS E DISCUSSÕES.....	41
4.1 VALIDAÇÃO NUMÉRICA DO MÉTODO.....	41
4.2 CONVERGÊNCIA E ESTABILIDADE DO MÉTODO NUMÉRICO	45
4.3 - ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DOS PARÂMETROS.	47
4.3.1 - Influência Do Fator De Retardo.....	48
4.3.2 - Influência da taxa de Reação Química.....	53
.....	54
4.3.3 - Influência do coeficiente de velocidade (u)	57
4.3.4 - Influência do coeficiente de Dispersividade (alfa)	61

4.3.5 - Efeito do coeficiente de Dispersão	65
5. CONCLUSÕES.....	70
6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	72

1. INTRODUÇÃO

As duas maiores fontes de água para a agricultura, as indústrias e o consumo humano são as chamadas águas de superfície e as subterrâneas. As águas subterrâneas são muito importantes, e em múltiplos casos essenciais, para o fornecimento de água potável de muitas áreas urbanas e rurais de diversas regiões da terra. Contudo, na maioria dos casos a prevenção da poluição das fontes de águas subterrâneas e a proteção do conjunto de aquíferos têm recebido pouca atenção.

Devido a necessidade de se lidar com problemas de poluição do solo e das águas subterrâneas e de superfície, se faz necessário o desenvolvimento de pesquisas que possibilitem o entendimento do transporte de espécies químicas poluentes em meios porosos. Estas pesquisas envolvem a determinação das propriedades físicas, químicas e biológicas destes compostos e do ambiente onde os mesmos se encontram.

Como por exemplo, pode-se citar o vazamento de gasolina a partir dos tanques subterrâneos de postos de abastecimento. Em contato com a água subterrânea, a gasolina se dissolve parcialmente, liberando compostos tais como benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos, denominados conjuntamente de BTEX, que são os constituintes aromáticos da gasolina que tem maior solubilidade em água. Por isto estes contaminantes são os primeiros que irão alcançar o lençol freático. Tais contaminantes são considerados substâncias perigosas por serem depressoras do sistema nervoso central e podem causar leucemia em exposições crônicas (CORSEUIL, 1997)

Wiedemeier et al. (1995) apresentaram um protocolo técnico para a documentação dos dados de monitoramento em escala de campo, mostrando a atenuação natural como uma forma de limpeza alternativa para a remediação da poluição por hidrocarbonetos na zona saturada. Este protocolo enfatiza o uso dos modelos matemáticos para avaliar o potencial da atenuação natural das plumas de hidrocarbonetos derivados de petróleo. Estes modelos matemáticos podem ser usados para responder as seguintes questões que invariavelmente surgem durante o estudo de remediação. Quais são os potenciais receptores a serem impactados pelos poluentes? Quais são os níveis de concentrações esperadas e qual o risco associado? Quanto tempo deverá levar para a completa degradação da pluma do poluente?

Para responder tais questões, necessita-se de uma descrição adequada dos vários processos intrínsecos de remediação natural que ocorrem no local. Para realizar tal descrição, deve-se desenvolver um modelo matemático robusto, capaz de prever simultaneamente o comportamento do transporte reativo, de poluentes, no interior do meio poroso.

Devido ao interesse recente dos pesquisadores na avaliação das taxas de propagação de poluentes ambientais no solo e na remediação natural, se estabeleceu a necessidade do desenvolvimento de modelos matemáticos e códigos computacionais para simularem o transporte reativo de múltiplas espécies poluentes.

Essencialmente os modelos matemáticos são uma excelente ferramenta para a construção de conhecimento. Os modelos também são úteis para a formulação de hipóteses e para a incorporação de novas ideias que podem ser verificadas ou descartadas no sistema real. Um modelo matemático pode nos auxiliar a prever o comportamento de um sistema submetido a diferentes condições e também possibilita investigar o comportamento de um sistema, procurando minimizar o esforço depreendido com a realização de trabalhos experimentais

O objetivo do trabalho é propor um modelo matemático para a simulação numérica da propagação de poluentes na região saturada do solo, considerando os mecanismos de advecção, difusão, sorção e reações químicas, o modelo será discretizado utilizando o método dos volumes finitos como referência, em seguida será implementado um código computacional a partir da resolução do modelo matemático e validado posteriormente. Será estudado o efeito da variação das propriedades dos meios porosos sobre a propagação de espécies químicas poluentes, utilizando um planejamento experimental simulado.

2. REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

Quando a água se infiltra no solo, avança verticalmente pela força de gravidade, através dos poros (espaços vazios) existentes entre os grãos até chegar ao reservatório subterrâneo. A camada situada sobre o reservatório subterrâneo é a zona não saturada. Nesta zona, os poros contêm água e ar, existem também, no reservatório subterrâneo, regiões onde todos os poros estão cheios de água, é a zona saturada (FERREIRA, 1996).

As águas subterrâneas constituem cerca de 95% da água doce de nosso planeta. Apenas 5% formam todos os rios, lagos e outros (CARVALHO, 1997).

Dados estatísticos das agências de proteção ambiental vêm demonstrando que principalmente as águas subterrâneas têm sido poluídas devido aos problemas decorrentes da inexistência de rede coletora de esgotos domésticos, a disposição final de efluentes líquidos industriais e às práticas atuais de cultivo agrícola. O crescente incremento das concentrações de nitratos nas águas subterrâneas e os frequentes episódios de penetração na sub-superfície de hidrocarbonetos halogenados voláteis, constituem um sério perigo para a qualidade da água potável (BRATBERG e HOPKINS, 1995).

No Brasil, em 03 de abril de 2008, o Conselho Nacional do Meio Ambiente (CONAMA) publicou a Resolução número 396, que dispõe sobre a classificação e diretrizes ambientais para o enquadramento, prevenção e controle da poluição das águas subterrâneas. Nesta resolução são apresentados os valores máximos de concentração permitidos para os parâmetros de qualidade da água com maior probabilidade de ocorrência para cada um dos usos considerados preponderantes. Segundo essa Resolução, quaisquer tipos de disposição de resíduos ou efluentes nos solos não poderão conferir as águas subterrâneas características em desacordo com o seu enquadramento.

Embora cruciais, a aplicação das leis por órgãos gestores do meio ambiente esbarra em dificuldades logísticas, financeiras e operacionais: coletas e análises de água são caras, além de requererem material e pessoal especializado.

Desta forma a modelagem matemática torna-se uma ferramenta científica empregada para otimização de experimentos e minimização de investimentos. Isso ocorre pois com a simulação matemática é possível determinar a interação dos diversos fatores intervenientes no processo, determinando quais são os mais importantes. A partir desta avaliação de parâmetros é que ocorre o planejamento da análise experimental, reduzindo o tempo gasto em laboratório e seus respectivos custos (TUCCI, 1998).

Estudos desenvolvidos por Borden et al. (1995), Wiedemeier et al. (1996) e Chapelle et al. (1996), baseados em dados geoquímicos de áreas poluídas, mostraram que a biodegradação de hidrocarbonetos derivados de petróleo pode ocorrer por meio de condições anaeróbias e aeróbias. Baseando-se nestes estudos de campo, podemos observar a importância de se compreender o processo de destruição natural dos poluentes dos aquíferos, antes de se implementar uma ação de limpeza ou um programa de monitoramento de longo prazo.

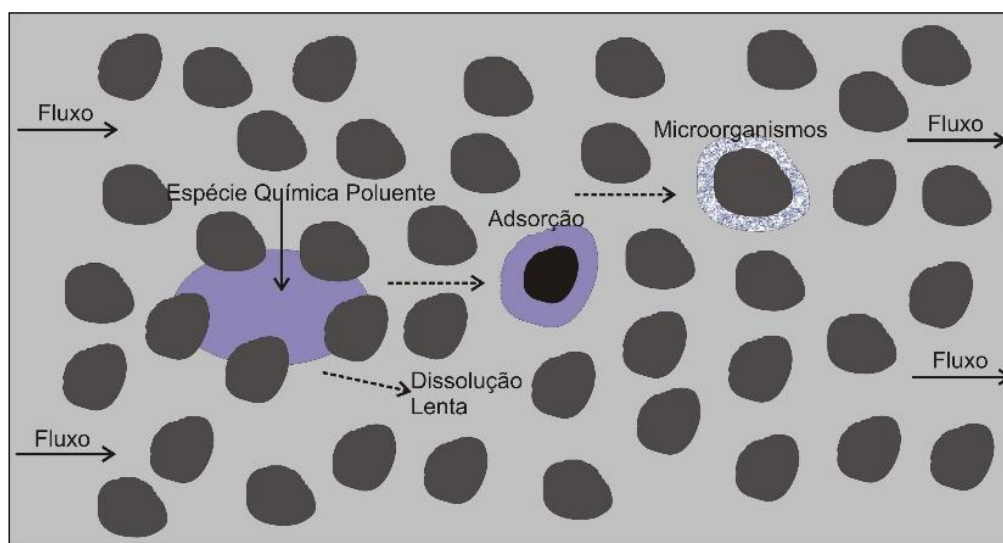
Em decorrência disso, tornam-se cada vez mais frequentes a utilização e aperfeiçoamento de modelos matemáticos, dos quais são formulados a partir de equações, sendo capazes de facilitar o monitoramento e a avaliação de impacto ambiental, bem como a minimização da poluição dos recursos hídricos e ambientais. Em problemas que envolvem a previsão dos impactos de uma área de disposição de resíduos, faz-se necessário o conhecimento dos mecanismos e parâmetros de transporte de contaminantes envolvidos. A migração de contaminantes em meios porosos é governada por diversos processos. Os processos físicos envolvem os fenômenos da advecção, difusão e dispersão hidrodinâmica, enquanto os processos químicos englobam as diversas reações químicas que podem ocorrer entre a solução contaminada e o solo (NOBRE, 1987).

Os processos de contaminação em aquíferos ocorrem lentamente e, frequentemente, sem consequências trágicas imediatas, porém em longo prazo, podem ter efeitos sérios e possivelmente irreversíveis.

A Figura 2.1 ilustra um modelo conceitual no qual se pode visualizar os diversos processos que ocorrem dentro de um aquífero poluído (CLEMENT et al., 2004).

O estudo macroscópico de um meio poroso é complexo dado a forma complicada dos poros e pequenos canais por onde deve circular o fluido. Desse modo, pode-se estabelecer leis de caráter macroscópico que tratam o meio como contínuo com propriedades médias bem definidas; estas leis se baseiam na consideração de três parâmetros fundamentais: permeabilidade, porosidade e coeficiente de armazenamento (CUSTÓDIO e LLAMAS, 1976).

Figura 2.1 - Processos do Transporte de Espécies Químicas



Fonte: CLEMENTE et al. (2004)

São inúmeros os fenômenos que controlam o transporte de contaminantes em meios porosos, onde o contaminante considerado é a massa de alguma substância dissolvida, movendo-se no meio fluido, ou com este (água) nos vazios do meio poroso (solo) seja ele saturado ou não (NOBRE, 1987).

A seguir, são discutidos os aspectos gerais dos mecanismos físicos e químicos de transporte e retenção de contaminantes em meios porosos saturados, bem como as equações governantes desses processos.

2.2 PROCESSOS FÍSICOS

Henry Darcy, engenheiro francês, investigou o fluxo de água através de camadas de areia, publicando o resultado de suas pesquisas em 1856. Mostrou que o escoamento da água através de uma coluna de areia saturada é proporcional à diferença de pressão hidráulica nos extremos da coluna e inversamente proporcional ao comprimento da coluna.

Isso é conhecido como Lei de Darcy, ainda hoje utilizada como princípio básico do fluxo da água subterrânea, expressa matematicamente pela fórmula:

$$v = \rho \frac{\Delta h}{\Delta x d} \quad , \quad (2.1)$$

onde v é a velocidade de escoamento; Δh é a diferença das pressões hidráulicas, d é a distância entre os pontos onde a diferença de pressão foi medida e ρ é uma constante que depende das características do material poroso atravessado pela água (ROCHA e CRUZ, 2001).

3.2.1 Advecção

A advecção é o mecanismo de transporte responsável pela migração do soluto devido ao fluxo do fluido intersticial no qual ele está dissolvido, sem que haja movimento relativo entre as partículas do soluto e da solução aquosa. A quantidade de contaminante que está sendo transportada é função da concentração de solutos dissolvidos e da quantidade de fluxo do solvente. O fluxo advectivo é simplesmente a velocidade da água vezes a concentração do soluto. A concentração de soluto em um ponto de amostragem é a mesma do ponto de lançamento do contaminante (FETTER, 1993).

O transporte advectivo unidimensional é dado por;

$$\frac{\partial C}{\partial t} = V_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad , \quad (2.2)$$

$$V_x = \frac{k}{n} * i \quad , \quad (2.3)$$

Em que C é a concentração da massa do soluto na solução, V_x a velocidade intersticial do fluido, t o tempo, k o coeficiente de permeabilidade, n a Porosidade e i o gradiente hidráulico

3.2.2 Dispersão

Devido ao gradiente de concentração existente em um fluido, ocorre o transporte de contaminantes por difusão molecular ou simplesmente difusão, ou seja, o soluto dissolvido em 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. Este fenômeno ocorre independente da velocidade do fluido, mas é acentuado

pela turbulência resultante dos mecanismos de mistura mecânica. A difusão do soluto é proporcional ao gradiente de concentração, a qual pode ser expressa pela primeira lei de Fick (ELBACHÁ, 1989).

$$F = -D_o \frac{\partial C}{\partial x} \quad , \quad (2.4)$$

onde F é o fluxo difusivo de massa, D_o é o coeficiente de difusão e $\partial C / \partial x$ é o gradiente de concentração.

O sinal negativo indica que o movimento ocorre das áreas de maior concentração para as de menor concentração. Para sistemas onde a concentração varia com o tempo, aplica-se a segunda lei de Fick;

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_o \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad , \quad (2.5)$$

Em um meio poroso, especialmente de granulometria fina, a difusão é consideravelmente menor do que em uma solução livre. Isso se deve a tortuosidade das trajetórias de fluxo, pequeno volume de fluido para o fluxo e a retenção de íons e moléculas nas superfícies das partículas (MITCHELL, 1991). Sendo assim, deve-se usar um coeficiente de difusão efetiva, D^* , dado a seguir:

$$D^* = \omega \cdot D_o \quad , \quad (2.6)$$

onde ω é coeficiente de tortuosidade - adimensional (BEAR, 1972).

A mistura mecânica é decorrente da dispersão em canais individuais, do desenvolvimento de velocidades médias diferentes em canais diferentes, devidas à variação das dimensões dos poros ao longo das linhas de fluxo e do desvio da trajetória das partículas em decorrência da tortuosidade, reentrâncias e interligações entre os canais (BEAR, 1972).

A dispersão que ocorre na direção do fluxo é chamada dispersão longitudinal e a que ocorre na direção perpendicular ao fluxo é chamada dispersão transversal. Assumindo que a dispersão pode ser descrita pela lei de Fick para difusão (Eq. 2.4 e 2.5) e que a quantidade de mistura mecânica é função da velocidade linear média, pode-se introduzir um coeficiente de dispersão mecânica, conforme apresentado a seguir (ELBACHÁ, 1989);

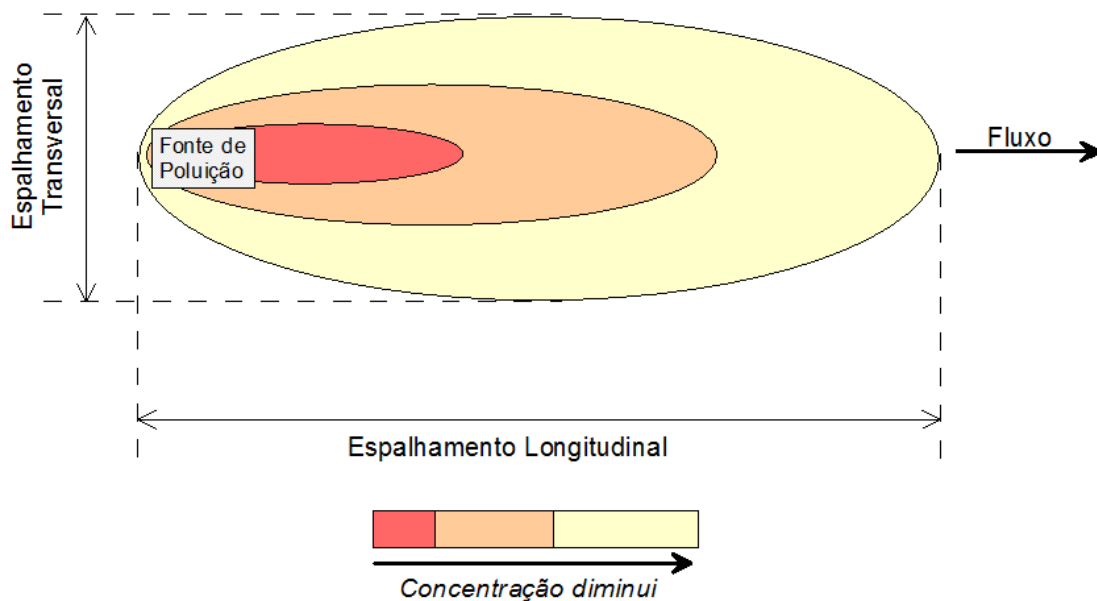
$$\text{Coeficiente de dispersão mecânica longitudinal} = \alpha_L V_x \quad (2.7)$$

$$\text{Coeficiente de dispersão mecânica transversal} = \alpha_T V_x \quad (2.8)$$

onde α_L é coeficiente de dispersividade longitudinal ; α_T é coeficiente de dispersividade transversal.

O processo de difusão molecular não pode ser separado da dispersão mecânica no fluxo de líquidos em meios porosos. Esses dois processos são combinados para definir um parâmetro chamado coeficiente de dispersão hidrodinâmica, D , o qual é representado a seguir (ELBACHÁ, 1989):

Figura 2.2: Espalhamento da pluma de contaminação



Fonte: ELIS. (2003)

$$D_{HL} = \alpha_L V_x + D^* , \quad (2.9)$$

$$D_{HT} = \alpha_T V_y + D^* , \quad (2.10)$$

onde D_{HL} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal e D_{HT} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal conforme Figura 2.2.

2.3 PROCESSOS QUÍMICOS

Diversos processos químicos podem ocorrer a depender do solo e da solução contaminada, em cada situação. Geralmente essas reações causam um retardamento do fenômeno de transporte de poluentes em solos. Os processos de adsorção-

desorção e precipitação-dissolução podem causar uma transferência real de poluente da fase líquida para a fase sólida. Os outros processos, tais como oxidação-redução, complexação e quelação, podem atuar de duas formas: seja afetando a disponibilidade dos poluentes para os processos de transferência ou alterando a forma do poluente, aumentando ou diminuindo seus efeitos de contaminação. Em geral, transferências para a fase sólida não são permanentes e alterações do ambiente químico do solo podem resultar num aumento da mobilidade de poluentes transferidos para a fase sólida (NOBRE, 1987).

Os efeitos dos processos químicos que podem ocorrer entre a zona saturada e a solução contaminada durante a migração de solutos em um meio poroso é de grande importância, pois, de uma maneira geral, causam um retardamento no fenômeno do transporte. A composição mineralógica do solo, a superfície específica dos sólidos, a concentração propriamente dita do poluente na solução contaminada, o tipo de substância poluente, o pH e a temperatura, exercem forte influência nessas reações químicas (VASCONCELOS, 2008).

Portanto, um melhor entendimento dos processos químicos e suas interações com os processos físicos são necessários para avaliar os problemas de contaminação da água subterrânea.

2.3.1 Efeitos da Sorção

Os processos de sorção podem ser divididos em adsorção/desorção e absorção. O primeiro refere-se ao acúmulo de contaminante na superfície do sólido (solo), enquanto a absorção implica na maior ou menor penetração no sólido pelo contaminante.

A sorção é determinada experimentalmente pela medida da distribuição do contaminante em um sedimento particular, solo ou rochas. Os diversos modelos aplicados em sistemas ambientais relatam a quantidade de soluto, S , retardada por unidade de fase sólida. Os resultados são plotados em um gráfico, originando expressões avaliadas em um sistema fixo de temperatura, conhecido como “isoterma de sorção”. A isoterma de Freundlich é o modelo não linear mais largamente utilizado (WEBER Jr et al., 1991), e é representado por;

$$S = K_d C^b \quad , \quad (2.11)$$

Onde o processo de adsorção geralmente é quantificado pelo coeficiente de distribuição K_d (FREEZE e CHERRY, 1979; SHEPARD e CHERRY, 1980), que é essencialmente uma medida da afinidade de um poluente em relação a um solo específico e b é um coeficiente obtido experimentalmente

Cada contaminante tem seu K_d para cada tipo de solo.

$$K_d = \frac{C_s}{C} \quad , \quad (2.12)$$

Onde;

K_d = coeficiente de distribuição

C_s = massa do poluente na fase sólida por unidade de massa da fase sólida

C = concentração do poluente na solução em equilíbrio com o solo

Outro modelo de isoterma de sorção é apresentado segundo Yong et al. (1992), o modelo de Langmuir;

Modelo de Langmuir (1915):

$$C_s = \frac{K_{eq} \cdot C_T \cdot C}{1 + K_{eq} \cdot C} \quad , \quad (2.13)$$

Sendo,

C e C_s = concentração na solução e no sólido e respectivamente;

$K_{eq} = K_s/K_a$ é denominado constante de equilíbrio químico;

K_s = parâmetro relacionado à velocidade de sorção;

K_a = parâmetro relacionado à velocidade de desorção;

C_T = capacidade de sorção, coeficiente de capacidade de adsorção;

2.3.2 Modelo de Degradação Reativa

Expressões cinéticas tem sido desenvolvidas para estimar a transformação de contaminantes orgânicos. Uma alternativa simples para determinar a razão de

degradação envolve o uso de uma *equação de primeira ordem* (BEDIENT *et al.*, 1994), do tipo;

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -kC , \quad (2.14)$$

onde C é a concentração degradada e k é o coeficiente de decaimento de primeira ordem, que é um valor importante quando se deseja determinar a meia-vida do constituinte, dado por;

$$k = \frac{0.693}{t_{1/2}} , \quad (2.15)$$

onde $t_{1/2}$ é a meia-vida do constituinte. Na literatura encontra-se um grande número de estudos para a determinação da meia-vida de muitos compostos orgânicos encontrados em águas subterrâneas.

2.4 FORMULAÇÃO NUMÉRICA

O uso de técnicas numéricas para a solução de problemas complexos da engenharia e da física é hoje uma realidade graças ao desenvolvimento de computadores de alta velocidade e de grande capacidade de armazenamento. Em função dessa disponibilidade computacional, que cresce exponencialmente, o desenvolvimento de algoritmos para a solução dos mais diversos problemas tem recebido enorme atenção dos analistas numéricos. A ampla aceitação dos modelos numéricos pela comunidade interessada na solução desses problemas explica-se pela grande versatilidade e relativa simplicidade de aplicação destas técnicas (MALISKA, 1995).

A dinâmica dos fluidos computacional (DFC), ou Computacional Fluid Dynamics (CFD), como é mais conhecida, é uma área que utiliza técnicas computacionais para simulações de problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos (FORTUNA, 2000; VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

Para resolver as equações diferenciais resultantes da modelagem matemática do processo de propagação de poluentes em meios porosos, podem ser aplicadas técnicas analíticas e/ou numéricas.

Considerando que os fenômenos relacionados a escoamentos têm sua modelagem matemática representada por equações diferenciais parciais (EDP`s), as

soluções analíticas são conhecidas somente para poucos casos especiais (FERZIGER e PÈRIC, 1999).

Sendo que, na maioria das vezes, a solução analítica só é encontrada após uma série de simplificações do fenômeno físico, o que acaba afastando o resultado obtido do fenômeno real. A característica principal deste método analítico é a sua pouca abrangência, obtendo, porém, nos casos onde é viável, a solução exata do problema (MALISKA, 2004).

Outra forma de resolver as EDP's é pelo método numérico, para conseguir estas soluções, os métodos numéricos mais utilizados são, o método de volumes finitos (MVF), o de elementos finitos (MEF) e o de diferenças finitas (MDF). Historicamente, o MDF foi sempre empregado na área de mecânica dos fluidos, enquanto, enquanto MEF foi para a área estrutural na solução de problemas de elasticidade, porém, tanto o MDF como o MEF não são conservativos em nível discreto, enquanto o MVF realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume elementar para obter a correspondente equação aproximada (MALISKA, 2004).

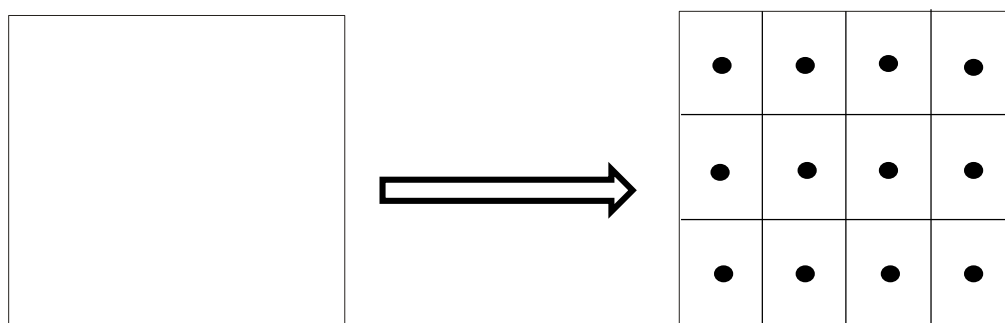
Sobre o método dos volumes finitos uma das principais referências foi publicada por Patankar (1980), com abordagens simples e diretas traz os principais conceitos do método, e mesmo focando a utilização do método nos problemas de transferência de calor, não deixa de dedicar alguns capítulos aos problemas de mecânica dos fluidos e suas principais características não lineares. Ainda na linha mais conceitual do Método dos Volumes Finitos, Maliska (2004), apresenta uma boa abordagem computacional dos problemas que envolvem o desenvolvimento de programas computacionais para *CFD (Computational Fluid Dynamic)*, ou o estudo da dinâmica dos fluidos computacional, ele supre praticamente todos os aspectos básicos para aqueles que querem desenvolver seus primeiros modelos utilizando o método.

2.4.1 Método dos Volumes Finitos

Segundo Maliska (2004), qualquer método que obtenha as equações aproximadas levando em consideração, e satisfazendo, a conservação das propriedades em nível de volumes elementares, é um método de volumes finitos.

A solução integral do modelo matemático, na forma diferencial, descreve um *continuum* dentro das fronteiras do domínio de cálculo como se vê na Figura 2.3. A obtenção de todos os valores que a função pode assumir exigiria a avaliação de um número infinito de pontos. Para se evitar este tipo de inconveniente, o domínio de cálculo pode ser dividido em um número de pontos finitos. Este tipo de procedimento torna um domínio contínuo em um domínio discreto (MALISKA, 2004).

Figura 3.3 - Domínio contínuo e malha do domínio discretizado



Fonte: O autor (2016)

A unidade fundamental do domínio é o Volume de Controle (VC), mostrado na Figura 2.3, e a sua geometria é dependente do tipo de malha utilizada. Como o domínio possui um número finito de regiões, o número de VC gerados, logicamente, deverá também ser finito (MALISKA, 2004).

Pode-se obter as equações discretizadas de duas formas aplicando o método dos volumes finitos. A primeira por um balanço da propriedade no volume elementar. A segunda é a discretização, por meio de integração, sobre o volume de controle (CV), no espaço e no tempo, das equações na forma conservativa. Utilizando a integração sobre o volume elementar (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

2.4.2 Discretização

A discretização matemática para o MVF segundo (FERZIGER e PERIC, 2001) consiste na integração das equações diferenciais que compõe o modelo matemático sobre os volumes de controle e posterior aproximação numérica dos termos resultantes e suas condições de contorno e iniciais, formando o conjunto de equações discretizadas denominado sistema de equações algébricas.

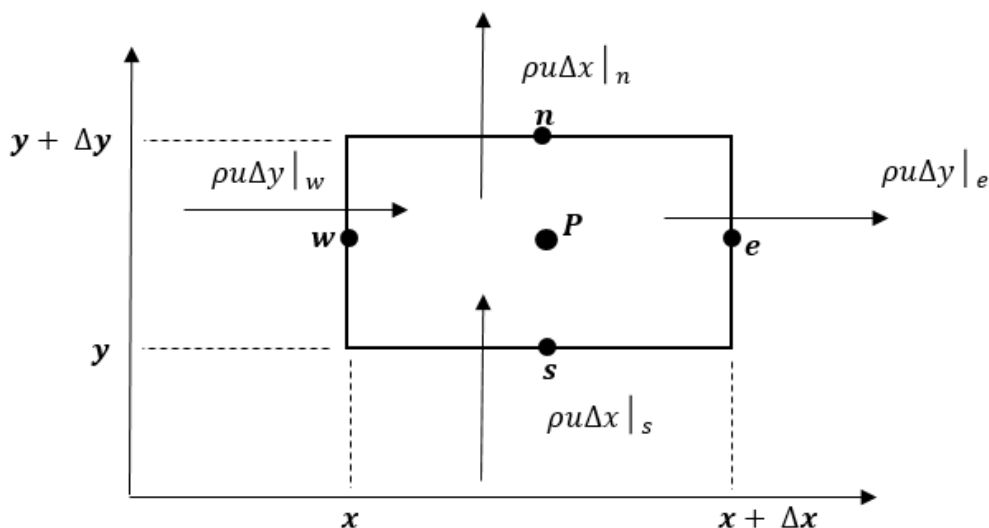
A divisão da região, ou discretização, gera uma malha de pontos/volumes de controle. Os pontos, ou nós, que são os locais onde serão definidas as variáveis de

interesse, por isto é importante que seja feita uma análise pormenorizada na geração da malha.

A integração das equações no volume de controle em combinação com o teorema da divergência de Gauss (KREYSZIG, 1999) resulta em integrais de superfície envolvendo as variáveis de interesse. Funções de interpolação são usadas para escrever os balanços das propriedades no contorno em função das propriedades armazenadas nos centros dos volumes, ou seja, no MVF existem duas formas das equações aproximadas serem obtidas: a) realizando balanços da propriedade no VC; ou b) integrando a equação diferencial em sua forma conservativa no tempo e no espaço. Ambas representam balanços de tudo que atravessa as fronteiras e é gerado ou consumido no VC e, fundamentalmente, são a mesma coisa. O processo de obtenção das equações aproximadas é o processo de discretização do modelo.

A Figura 2.4 ilustra, em detalhes, uma pequena região do domínio numérico, contendo um volume elementar de dimensões Δx e Δy , que estão orientados pelo sistema cartesiano, sobre os quais será realizada a discretização das equações do movimento. O volume principal está representado pela letra P , tendo como vizinhos os volumes E (*leste*), W (*oeste*), N (*norte*) e S (*sul*). Este padrão de representação é clássico na metodologia dos Volumes Finitos.

Figura 2.4 - Balanço diferencial em um volume de controle bidimensional



Fonte: Adaptado (Maliska 2004)

$$\rho u \Delta y|_e - \rho u \Delta y|_w + \rho u \Delta x|_n - \rho u \Delta x|_s = 0 \quad , \quad (3.16)$$

Dividindo-se a Eq. (2.16) por $\Delta y \Delta x$ e aplicando o limite chegamos a equação diferencial escrita na forma conservativa:

$$\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) = 0 \quad , \quad (2.17)$$

Integrando-se a Eq. (2.17) somente no espaço (o regime é estacionário, independente do tempo), tem-se;

$$\int_w^e \int_s^n \left(\frac{\partial}{\partial x}(\rho u) + \frac{\partial}{\partial y}(\rho v) \right) dy dx = 0 \quad , \quad (2.18)$$

Obtendo-se

$$\int_w^e (\rho v |_n - \rho v |_w) dx + \int_s^n (\rho u |_e - \rho u |_w) dy = 0 \quad , \quad (2.19)$$

O fluxo é avaliado no meio da face do VC e representa a média da variação da propriedade na face, assim, pode-se escrever:

$$\rho u \Delta y |_e - \rho u \Delta y |_w + \rho v \Delta x |_n - \rho v \Delta x |_s = 0 \quad , \quad (2.20)$$

Ambas as formulações, tanto pela equação de balanço, como pela equação diferencial, obtêm a mesma resposta, a Eq. (2.16) é a própria Eq. (2.20).

Entretanto, a obtenção das equações aproximadas a partir das equações diferenciais na forma conservativa é aconselhada, pois nem sempre é fácil de se deduzir equações de balanço.

3.4.3 Condições Iniciais e de Contorno

A solução de qualquer equação diferencial requer a especificação de condições na fronteira do sistema estudado (condições de contorno) e as condições de início do processo físico (condições iniciais). A definição precisa das condições de contorno e iniciais é a parte mais importante para o processo de modelamento do transporte de soluto e escoamento de águas subterrâneas (WIEDEMEIER et al., 1995).

As condições iniciais para o transporte de um determinado poluente são usadas para especificar a concentração do poluente presente no sistema, no momento em que a simulação numérica inicia. Este tipo de situação depende unicamente das condições de fronteira. As condições de contorno são expressões matemáticas que especificam o valor da variável dependente (velocidade ou concentração do poluente) ou fluxo (derivada da velocidade ou da concentração) nos contornos do domínio físico.

As condições iniciais para o transporte de soluto são usadas para especificar a concentração do soluto, C , no sistema no instante que o modelo de simulação inicia, isto é, em $t = 0$, e são dadas por;

$$C(x, y, 0) = 0, \quad (2.21)$$

ou

$$C(x, y, 0) = C_0(x, y), \quad (2.22)$$

Onde $C_0(x, y)$ é a concentração inicial do contaminante. A Eq. (2.21) é usada como condição inicial para sistemas ainda não contaminados, enquanto que a Eq. (2.22) representa aqueles que já possuem alguma contaminação dissolvida.

As condições de contorno são usadas para incluir os efeitos do sistema hidro geológico externo da área modelada no sistema modelado. Três tipos de condições de contorno geralmente são utilizados para descrever o escoamento de água subterrânea e transporte de soluto.

A Tabela 2.1 apresenta as designações comuns das diversas condições de contorno. Na Tabela 2.1, V é a velocidade intersticial, C é a concentração do contaminante, n a direção perpendicular ao contorno e c é uma constante.

Tabela 2.1 - Designação comuns das diversas condições de contorno.

Condições de Contorno	Tipo do contorno	Nome Formal	Descrição matemática Geral	
			Escoamento de águas subterrâneas	Transporte de contaminantes
Velocidades ou concentrações especificadas	Tipo um	Dirichlet	$V = f(x, y, t)$	$C = f(x, y, t)$
Fluxo especificado	Tipo dois	Neuman	$\frac{\partial V}{\partial n} = f(x, y, t)$	$\frac{\partial C}{\partial n} = f(x, y, t)$
Velocidade ou concentração dependente do fluxo	Tipo três	Cauchy	$\frac{\partial V}{\partial n} + cV = f(x, y, t)$	$\frac{\partial C}{\partial n} + cC = f(x, y, t)$

Fonte: WIEDEMEIER et al., 1995

Com a discretização das equações diferenciais de conservação, há o surgimento de um sistema linear de equações, desta forma, as variáveis dependentes podem ser encontradas resolvendo o sistema de equações por um dos diferentes métodos existentes.

2.5 SOLUÇÃO DE UM SISTEMA LINEAR

Existem vários métodos para solução de sistemas lineares, desta forma, as variáveis dependentes podem ser encontradas resolvendo o sistema de equações por um dos diferentes métodos existentes. Estes métodos, por sua vez, são separados em duas categorias: métodos diretos e métodos indiretos:

Os métodos diretos trabalham com a matriz completa e necessitam de uma forma ou de outra de processos equivalentes à inversão da matriz completa. Um método fundamental nesta classe é a eliminação de Gauss, este método é adequado para matrizes cheias e não estruturadas, que não são encontradas em aplicações de

CFD (*Computational Fluid Dynamics*). Outro método muito utilizado pertencente a esta classe é a decomposição LU, decomposição das matrizes LU, que é uma variação do método pela eliminação de Gauss.

Os métodos indiretos ou iterativos necessitam de uma estimativa inicial para dar prosseguimento à solução. Como na mecânica de fluidos computacional as matrizes são esparsas e com elementos nulos em grande parte da matriz, os métodos iterativos são os mais indicados, e levam vantagem também no tratamento das não linearidades e dos transientes distorcidos. Esses métodos podem ser ponto a ponto, linha a linha ou ainda *Multigrid*.

Para as soluções de sistemas lineares, alguns exemplos de métodos indiretos e iterativos são citados a seguir;

2.5.1 Método de Jacobi

É um método ponto a ponto. Atua em cada equação, iterativamente, usando os valores das variáveis no nível anterior métodos como este possuem convergência lenta,, tem a característica de possuir matrizes com elevado número de elementos

O algoritmo desse método é o seguinte;

- Estimar o campo inicial da variável
- Iterar em um contador k
- Calcular ϕ usando a equação 3.23 para todos os pontos
- Verificar a convergência
- Retornar se não estiver satisfeito

$$A_p \phi_p^{k+1} = \sum A_{nb} \phi_{NB}^{k+1} + B, \quad (2.23)$$

Sendo A_p, A_{nb} os coeficientes do sistema, com A_p representando o coeficiente do volume sob estudo e A_{nb} os coeficientes dos volumes vizinhos, e B o termo fonte constante. A variável genérica ϕ é utilizada para representar uma variável qualquer e que possa ser representada por um campo, tal como a concentração.

2.5.2 Método de Gauss-Seidel

É um método parecido com o método de Jacobi, com a diferença de fazer uso de variáveis calculadas no mesmo ciclo iterativo, acelerando a convergência para a solução.

- Estimar o campo inicial da variável
- Iterar em um contador k
- Calcular ϕ usando a equação 2.24 para todos os pontos
- Checar a convergência
- Retornar se não estiver satisfeito

$$A_p \phi_P^{k+1} = \sum A_{nb} \phi_{NB}^{k+1} + A_e \phi_E^k + A_n \phi_N^k + A_t \phi_T^k + B \quad , \quad (2.24)$$

Sendo A_p, A_{nb} e A_i são os coeficientes do sistema e B o termo fonte constante. A variável genérica ϕ é utilizada para representar uma variável qualquer e que possa ser representada por um campo, tal como a concentração.

2.6 ESTADO DA ARTE

2.6.1 Modelagem matemática como ferramenta em sistemas ambientais

A modelagem é uma ferramenta muito importante que pode ser usada em sistemas ambientais, seus objetivos são interpretar e analisar o comportamento de um sistema, otimizar ou propor modificações, testar hipóteses e fazer precisões da resposta em diferentes condições operacionais. Pode-se dizer que o modelo matemático é uma simplificação da realidade, ou seja, ele aborda os parâmetros mais importantes a serem estudados.

Para Smith e Smith (2007) modelar é aplicar matemática a solução de problemas, e transformar um problema prático em um modelo matemático, buscando solução que possa ser aplicada na situação original. O objetivo de todo modelo é explicar o funcionamento de um determinado sistema. Nesse sentido a modelagem matemática pode simular cenários futuros, sendo essa uma das suas principais vantagens.

Bastos (2010) diz que mesmo com as inúmeras aplicações, a modelagem matemática de ecossistemas vem sendo inserida aos poucos se tornando mais reconhecida, já que a necessidade crescente de respostas imediatas diante de problemas globais exige uma ferramenta holística, que seja hábil para o trabalho com fenômenos ambientais complexos.

Chen et al. (1992) propõem um modelo unidimensional para a simulação da biodegradação e transporte de benzeno e tolueno na subsuperfície. Os processos modelados incluem troca de massa entre as fases constituintes (sólido, líquido, gás e biomassa), transporte advectivo e difusivo, e biotransformação, bem como a produção de biomassa microbiana.

Cordazzo (2000) propõe um modelo com a respectiva solução numérica bidimensional para o problema do derramamento de contaminante na região saturada do solo, conhecida como lençol freático, em volumes finitos, com modelo de biodegradação de 1ª ordem, adaptado para a situação da gasolina brasileira, isto é, considerando a influência do etanol na biodegradação dos constituintes BTEX (benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno) da gasolina e no fenômeno de cosolvência do etanol na gasolina, assumindo que a solubilidade dos compostos hidrofóbicos na água aumenta loglinearmente. O efeito de sorção (retardo da pluma) da gasolina também é considerado no modelo, supondo uma sorção linear. A equação de transporte resolvida numericamente leva em consideração a dispersão, advecção, sorção e a biodegradação dos compostos BTEX, bem como do etanol. Também é resolvido numericamente o campo de velocidades da água subterrânea, pelas equações de Darcy, possibilitando que regiões com diferentes permeabilidades sejam levadas em consideração.

Lopes (2005), desenvolveu três modelos matemáticos para estudar o transporte de contaminantes em meios porosos, utilizando a técnica da transformada integral generalizada GITT, os modelos apresentaram boa situação de convergência de dados, onde as séries foram truncadas em no máximo 140 termos. Além de terem boa concordância com os dados existentes na literatura. Já para o modelo C (biosorção em circuito fechado), devido a não obtenção de artigos referentes ao tema, o estudo foi comparado aos dados obtidos pelo método das diferenças finitas

Vasconcelos (2008), apresenta uma revisão conceitual dos principais mecanismos e processos associados ao fluxo, difusão, dispersão e retenção de contaminantes em meios porosos saturados e não saturados. Com apoio substancial dos módulos Seep e Ctran, do programa comercial GeoStudio 2007, foi possível desenvolver um estudo paramétrico do transporte de contaminante em meios porosos saturados e não saturados. As análises realizadas no estudo do vazamento de gasolina incluíram parâmetros obtidos de ensaios geotécnicos de laboratório e de campo, bem como de análises químicas dos parâmetros BTEX e COT (Carbono Orgânico Total) das amostras de solo e água subterrânea coletadas. Apesar de não ter sido possível identificar a data exata do início do vazamento, os estudos e simulações numéricas sugeriram que os processos reativos foram relativamente menores em campo do que aqueles quantificados pelos ensaios de campos e laboratório. Ficou evidenciado também a boa performance do sistema computacional como ferramenta de apoio para a avaliação de impactos ambientais causados por fontes poluidoras.

Favero et al. (2007) discutem uma análise teórico-experimental da dispersão de poluentes líquidos em solos, desenvolvendo um código computacional, a partir de um modelo matemático baseado nos princípios de conservação de massa e transporte de poluentes em meios porosos, concluindo que os resultados obtidos em simulações e comparados com experimentos realizados em pequena escala, apresentando uma boa concordância.

Telles (2009) apresenta um estudo sobre os parâmetros advectivos e dispersivos do transporte de plumas de contaminantes no rio Macaé, região essa de grande interesse devido a sua importância local e regional. Com o intuito de viabilizar o estudo foi realizado um trabalho de campo nas proximidades da Usina Termoeletrica (UTE) Mário Lago a partir do lançamento de uma descarga de cloreto de sódio no local de interesse. Foram realizadas comparações entre os resultados experimentais com aqueles obtidos numericamente pelo de um modelo matemático. Devido à geometria da área de estudos, optou-se por uma abordagem horizontal bidimensional. Este modelo foi resolvido empregando o método de volumes finitos com formulação totalmente implícita, sendo usado o algoritmo de Thomas (TDMA) para a solução do sistema de equações.

Crêspo (2006), apresenta um trabalho do método difusional para solução de problemas bidimensionais convectivo-difusivos transientes acoplado à técnica de volumes finitos. O algoritmo numérico teve por base a adaptação de um esquema existente na literatura para a solução de problemas puramente difusivos o CONDUCT desenvolvido por Patankar (1991). Foram feitos testes com dois problemas benchmark, com objetivo de testar a performance do esquema proposto. Também se aplicou a técnica para resolver um problema real e a solução obtida foi comparada com os resultados da literatura. Os resultados obtidos mostram que o método difusional é uma ferramenta eficiente para solução de problemas convectivo-difusivos bidimensionais transientes e é uma técnica de fácil implementação.

Lange et al. (2002), estudam o transporte de contaminantes em meios porosos aplicado a aterros de disposição de resíduos sólidos urbanos, o trabalho apresenta os resultados de um programa experimental que teve por objetivo a determinação em laboratório dos parâmetros de transporte de contaminantes (metais pesados) em amostras de solos da área do Aterro de Disposição de Resíduos Sólidos Urbanos do Município de Catas Altas, MG.

Bai et al. (2015), utilizou para as soluções gerais do transporte de contaminantes em um meio poroso saturado, para um meio semi-infinito a transformada de Laplace e a transformada de Fourier, sob as condições de fluxo de escoamento unidimensional e o efeito dispersivo tridimensional. Os resultados mostram que uma fonte de contaminante exponencialmente degenerado, migra gradualmente para a profundidade e a largura do meio poroso, devido ao fluxo de água por convecção e difusão induzida pelo movimento molecular e mecânica, juntamente com a deposição de contaminante sobre a superfície de matriz sólida e que o efeito de dispersão hidrodinâmica acelera os processos de migração do contaminante na direção vertical, bem como a difusão na direção horizontal, o que resulta num aumento da concentração de contaminantes num curto período de tempo.

Russo et al. (2010) apresenta experiências de deslocamento miscível realizadas para caracterizar a longo prazo, a baixa concentração de eluição de rejeito associado com processos de sorção / dessorção. Foi empregado o tricloroetileno (TCE) como o composto orgânico modelo. O rejeito de eluição foi mais extensa para a mídia com maior teor orgânico-carbono e fatores de retardamento associados. No entanto, quando normalizada pelo retardo, as extensões da cauda não se

correlacionam diretamente ao conteúdo orgânico-carbono. Estes últimos resultados sugerem que as diferenças na natureza geoquímica de carbono orgânico (por exemplo, composição, estrutura) entre os vários meios influenciou o comportamento observado. Um modelo matemático incorporando não-linear, a taxa limitada sorção / dessorção foi descrito por uma função de distribuição contínua e foi utilizado com sucesso para simular o transporte do tricloroetileno.

Sabahi et al. (2014), utilizou a solução analítico finito prático (PFA) aplicado à solução da equação de advecção unidimensional com a equação de dispersão dependente de escala (ASDE) para o transporte de soluto em meios porosos sobre (alta Número Peclet) condições dominadas por advecção. A PFA explícita triangular (EPFA) com três diferentes abordagens (EPFA 1, 2 e 3) e a Crank-Nicolson (CN) centrado e técnicas barlavento foi desenvolvido para resolver o ASDE com uma dispersividade, com dependência linear na distância do transporte. Em EPFA 1, obteve-se resultados mais precisos para a ASDE, o método existente PFA foi desenvolvido e combinado com o método FD. Em EPFA 2 foi empregado o método PFA original para verificar a sua precisão para modelar o ASDE sem qualquer modificação. Finalmente, em EPFA 3, com base na solução de corrente PFA, novas formulações são propostas para avaliar a precisão desta abordagem. Para todas as condições, EPFA 3 tem o melhor comportamento em comparação com outras técnicas numéricas para diferentes funções lineares para dependência de distância de dispersividade.

Porta et al (2015), comparou a capacidade de vários modelos em escala contínua de reproduzir as principais características de um transporte de contaminante associado com uma reação biomolecular na fase de fluido e simulou numericamente o nível da escala de poros em um meio poroso tortuoso, considerando uma formulação de escala contínua o que resulta no escalonamento formal deste processo de transporte por meio de média do volume. Os resultados mostraram que as melhores estimativas dos parâmetros destes modelos dependem fortemente do tipo de dados utilizados para o modelo com calibração e que o conteúdo de informação associado com características geométricas e da velocidade do fluido, traz rendimentos melhores de interpretação tipicamente de observações do transporte disponíveis em escalas contínuas.

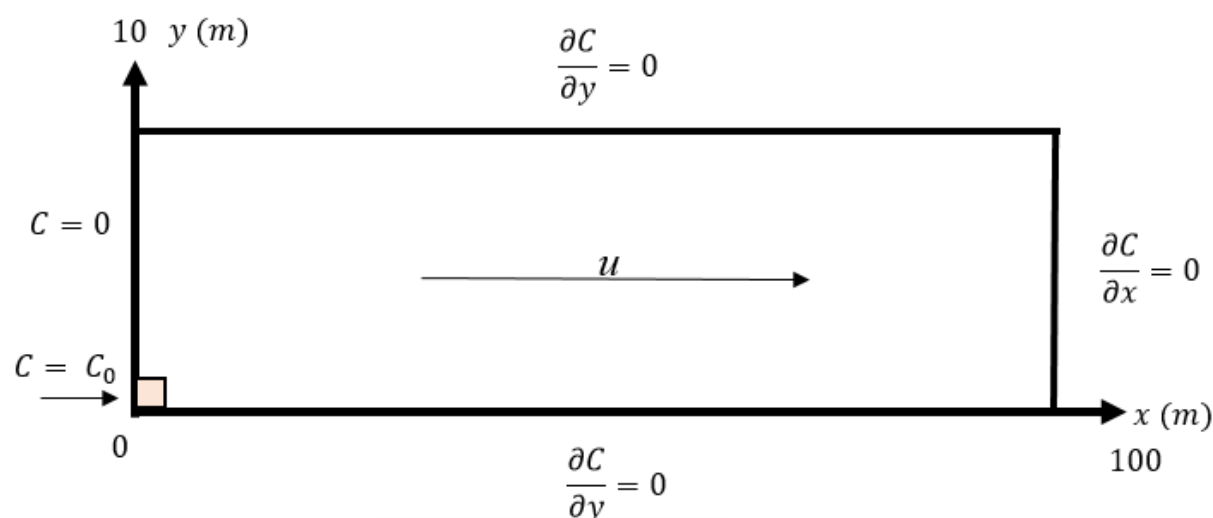
3. MODELAGEM MATEMÁTICA

3.1 DOMÍNIO ESTUDADO

O problema a ser resolvido é a solução numérica, bidimensional, com decaimento de 1a. ordem, com velocidade constante e horizontal, e com retardo.

O domínio estudado corresponde a um terreno com 10 m de largura e 100 m profundidade, conforme a Figura 3.1 que demonstra uma representação esquemática das condições iniciais e de contorno utilizadas no trabalho.

Figura 3.1 - Representação esquemática das condições iniciais e de contorno.



Na impossibilidade de resolver-se analiticamente o modelo que rege o problema aqui descrito, buscou-se uma solução numérica, ou seja, deixa-se de trabalhar com o domínio infinitesimal como no método analítico para se trabalhar com o domínio discreto, gerando assim, um sistema de equações que são resolvidos através de métodos numéricos.

A metodologia numérica adotada neste trabalho para a Discretização das equações é a dos volumes finitos. Justifica-se a escolha porque se trata de uma técnica numérica largamente empregada em problemas de escoamentos de fluidos, conforme demonstrado no capítulo anterior.

Tal metodologia, além de permitir considerar as heterogeneidades no modelo, trata a fonte de contaminação como física. Na solução de problemas físicos, os mesmos devem-se adequar aos modelos matemáticos para que se possa

resolvê-los com tempos de computação não proibitivos e para que os fenômenos físicos em questão sejam adequadamente representados.

3.2 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

O ponto inicial no desenvolvimento do modelo matemático, é a obtenção das equações diferenciais que descrevem o transporte de poluentes em um meio poroso. Isto é feito mediante a aplicação dos princípios da conservação de massa em um volume de controle diferencial fixo no domínio do escoamento (BIRD, 2004).

De forma literal esta Equação é dada por:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fluxo mássico} \\ \text{entrando no} \\ \text{volume} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Fluxo mássico} \\ \text{saindo do} \\ \text{volume} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{c} \text{Perda ou Ganho} \\ \text{de Massa devido} \\ \text{a reações} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{de massa no} \\ \text{volume} \end{array} \right] \quad (3.1)$$

O transporte de poluentes reativos em águas subterrâneas, supondo as interações químicas suficientemente rápidas e reversíveis, considerando o fluxo bidimensional e na direção x , pode ser simulado pela Equação da Advecção-Difusão-Reação (Freeze e Cherry, 1979):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_{HL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{HT} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - V_x \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\rho_d}{n} \left(\frac{\partial C_s}{\partial t} \right) \quad (3.2)$$

O termo $\frac{\rho_d}{n} \left(\frac{\partial C_s}{\partial t} \right)$ representa a variação da concentração no fluido intersticial causada pela adsorção ou desorção, sendo ρ_d a massa específica seca do solo, n a porosidade do solo e C_s a concentração de soluto na parte sólida do solo, D_{HL} a dispersão hidrodinâmica longitudinal, D_{HT} Dispersão Hidrodinâmica Transversal e V_x a velocidade intersticial do fluxo.

Como a concentração do soluto nas partículas sólidas (C_s) é função da concentração do soluto na solução (C), tem-se,

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial C_s}{\partial C} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3.3)$$

$$\frac{\rho_d}{n} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\rho_d}{n} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial C} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3.4)$$

Substituindo a Eq. (3.4) na Eq. (3.2) tem-se;

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_d}{n} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial t} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = D_{HL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{HT} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - V_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.5)$$

Rearranjando o termo de acúmulo;

$$\left[1 + \frac{\rho_d}{n} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial t} \right] \cdot \frac{\partial C}{\partial t} = D_{HL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{HT} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - V_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.6)$$

Onde o termo que concebe o fator de retardo é representado por R , e o coeficiente de distribuição por K_d conforme a Eq. (3.7);

$$\left[1 + \frac{\rho_d}{n} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial t} \right] = R \quad e \quad \frac{\partial C_s}{\partial t} = K_d \quad (3.7)$$

Desta forma;

$$\frac{\partial C}{\partial t} \cdot R + V_x \frac{\partial C}{\partial x} = D_{HL} \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_{HT} \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} \quad (3.8)$$

Portanto ao acrescentar o coeficiente de reação química (k) e posicionar o fator de retardo (R), a principal equação diferencial do transporte reativo bidimensional de poluentes em meios porosos, é representada pela Eq. (3.9):

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (uC) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - kCR \quad (3.9)$$

Em que:

D_{HL} = Dispersão hidrodinâmica longitudinal (m)

D_{HT} = Dispersão hidrodinâmica transversal (m)

R = Fator de Retardamento (adimensional)

k = Constante de Reação Química (dia^{-1})

u = Velocidade de Escoamento na direção de x ($\text{m} \cdot \text{dia}^{-1}$)

C = Concentração ($\text{mg} \cdot \text{L}^{-1}$)

ρ_b = Densidade do aquífero (g / cm^3)

K_d = Coeficiente de distribuição (cm^3 / g)

η = Porosidade (adimensional)

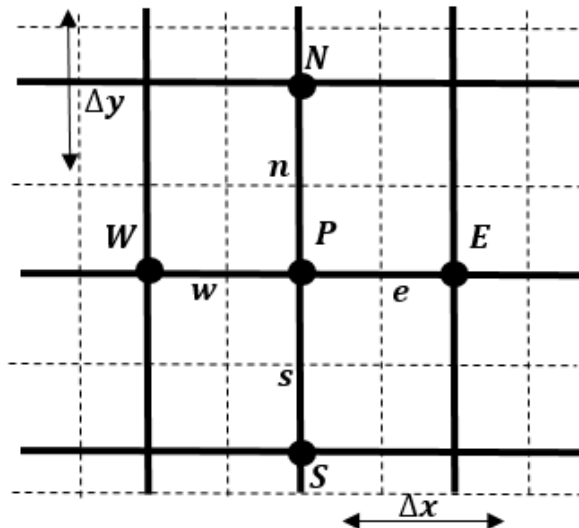
4.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

Conforme apresentado anteriormente, a Eq. (3.9) é a equação diferencial de transporte para o problema bidimensional transiente estudado neste trabalho, e é reproduzida novamente aqui;

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - kRC \quad (3.10)$$

É prática dos volumes finitos obter a aproximação numérica da equação diferencial a partir de sua integração no volume de controle elementar apresentado na Figura 3.2.

Figura 3.2- Balanço diferencial em um volume de controle bidimensional



A obtenção das equações aproximadas pelo método dos volumes finitos se dá através da integração da equação na forma conservativa, sobre o volume elementar, no espaço e no tempo. Assim a Eq. (3.10) pode ser reescrita na forma;

$$\begin{aligned} \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial x}(uC) dx dy dt \\ = \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] dx dy dt - \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R(kC) dx dy dt \end{aligned} \quad (3.11)$$

Integrando o termo transiente da Eq. (3.11) no tempo e no espaço, resulta em:

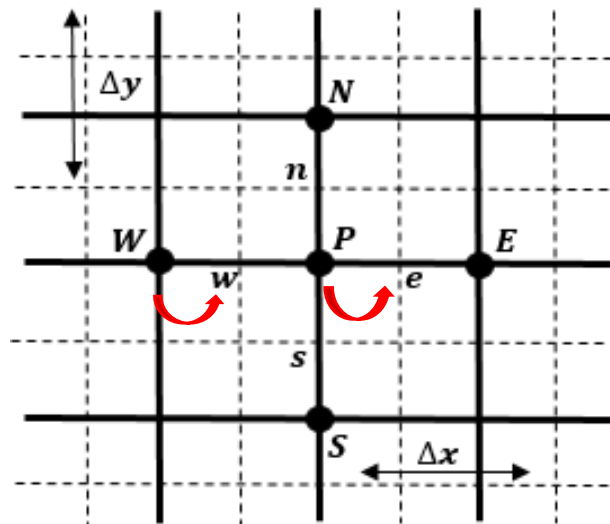
$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dt \Rightarrow R \Delta x \Delta y (C_P - C_P^o) \quad (3.12)$$

Onde C_p^0 denota a concentração avaliada no ponto P no volume de controle e no tempo inicial t .

O segundo termo da Eq. (3.11) é relativo a componente da advecção, na literatura, existem diversas formas de interpolação para a aproximação das derivadas do termo advectivo.

Nesta dissertação, optou-se pela utilização do método Upwind. No esquema Upwind o valor da função na interface do volume de controle é substituído pelos valores do termo situado a montante. Esse volume de controle por sua vez, muda de acordo com o sentido da velocidade do escoamento conforme a Figura 3.3.

Figura 3.3 - Método de interpolação UpWind



Integrando o termo advectivo da Eq. (3.11) no tempo e no espaço tem-se:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial x} (uC) dx dy dt \Rightarrow (uC|_e - uC|_w) \Delta y \Delta t \quad (3.13)$$

Avaliando o termo Advectivo utilizando a técnica Up Wind temos;

Para $u > 0$

$$C_w = C_w \quad (3.14)$$

$$C_e = C_p \quad (3.15)$$

Integrando o termo dispersivo na direção longitudinal e transversal partindo da Eq. (4.11) no tempo e no espaço tem-se:

$$(3.16)$$

$$\int_t^{\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] dx dy dt$$

$$\Rightarrow \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta t + \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta t$$

Fazendo a aproximação das derivadas do termo difusivo nas faces por diferenças centrais, teremos;

$$\left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta t = D_{HL} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - C_W}{\Delta x} \right) \Delta y \Delta t \quad (3.17)$$

$$\left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta t = D_{HT} \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta t \quad (3.18)$$

Integrando o termo da constante responsável pelas reações químicas, no tempo e no espaço tem-se;

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R(kC) dx dy dt \Rightarrow RkC_P \Delta x \Delta y \Delta t \quad (3.19)$$

Agrupando todos os termos avaliados teremos;

$$R \Delta x \Delta y (C_P - C_P^o) + u \Delta y (C_P - C_W) \Delta t$$

$$= D_{HL} \frac{\Delta y \Delta t}{\Delta x} (C_e - 2C_P + C_w) + D_{HT} \frac{\Delta x \Delta t}{\Delta y} (C_N - 2C_P + C_S)$$

$$- kRC_P \Delta x \Delta y \Delta t \quad (3.20)$$

Dividindo a Eq. (3.20) por Δt ;

$$\frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (C_P - C_W)$$

$$= D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} (C_e - 2C_P + C_w) + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} (C_N - 2C_P + C_S) - kR \Delta x \Delta y C_P \quad (3.21)$$

Expandindo a Eq. (3.21) obtemos;

$$\frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P + u \Delta y C_P + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_P + 2D_{HT} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_P$$

$$= u \Delta y C_w + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_w + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S + \frac{\Delta x \Delta y R}{\Delta t} C_P^o$$

$$- kR \Delta x \Delta y C_P \quad (3.22)$$

Logo;

$$\begin{aligned}
& C_P \left[\frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} + u\Delta y + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR\Delta x\Delta y \right] \\
& = C_W \left[u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} \right] + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S \\
& + \frac{\Delta x\Delta y R}{\Delta t} C_P^o
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Logo, a Equação geral para as concentrações é dada por;

$$A_P C_P = A_E C_E + A_W C_W + A_N C_N + A_S C_S + B + Sp \tag{3.24}$$

Onde;

$$A_P = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} + u\Delta y + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR\Delta x\Delta y \quad S_p = kR\Delta x\Delta y$$

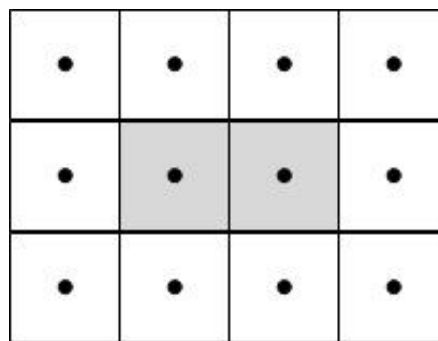
$$A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad A_W = u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} \quad A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$B = \frac{\Delta x\Delta y R}{\Delta t} C_P^o$$

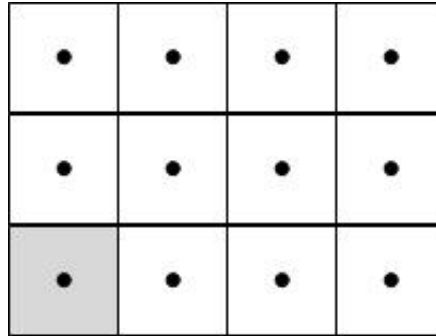
A Eq. (3.24) é válida para todos os volumes internos utilizados na discretização do domínio como ilustrado na Figura 3.4.

Figura 3.4 - Volumes internos da malha de cálculo.



Dessa forma partindo da Eq. (3.11) aplicada ao canto inferior do contorno esquerdo representada pela Figura 3.5, se reduz a:

Figura 3.5-Volume de controle situado no contorno inferior esquerdo



$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (uC|_e - uC|_w) \\ = D_{HL} \Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned}$$

As derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (C_P - C_o) \\ = D_{HL} \Delta y \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - C_o}{\Delta x} \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} \right) - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.26)$$

Reagrupando;

$$\begin{aligned} \frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P - \frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o + u \Delta y C_P - u \Delta y C_o \\ = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} [C_E - C_P] - 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} [C_P - C_o] + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} [C_N - C_P] - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.27)$$

Desta forma;

$$\begin{aligned} C_P \left[\frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} + u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR \Delta x \Delta y \right] \\ = \frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o + u \Delta y C_o + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_o + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N \end{aligned} \quad (3.28)$$

Logo reescrevendo a Equação tem-se;

$$A_P C_P = A_E C_E + A_N C_N + B + Sp \quad (3.29)$$

$$A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad S_p = kR\Delta x\Delta y$$

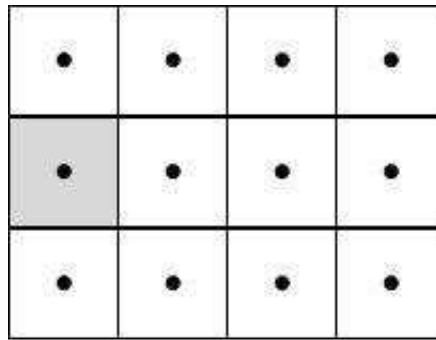
$$A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$A_P = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} + u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$B = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_o + u\Delta y C_o$$

Para os volumes situados entre as extremidades da lateral esquerda conforme ilustrado na Figura 3.6, a Eq. (3.11) se reduz a Eq. (3.30);

Figura 3.6 - Volume de controle situado no contorno da lateral esquerda



$$\begin{aligned} \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u\Delta y (uC|_e - uC|_w) \\ = D_{HL}\Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT}\Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) - kR\Delta x\Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.30)$$

As derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u\Delta y (C_P - 0) \\ = D_{HL}\Delta y \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - 0}{2\Delta x} \right) + D_{HT}\Delta x \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) - Rk\Delta x\Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.31)$$

Agrupando os termos semelhantes;

$$C_P \left[\frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} + u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR\Delta x\Delta y \right] \quad (3.32)$$

$$= D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S + \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

Logo,

$$A_P C_P = A_E C_E + A_N C_N + A_S C_S + B + S_p \quad (3.33)$$

$$A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$B = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

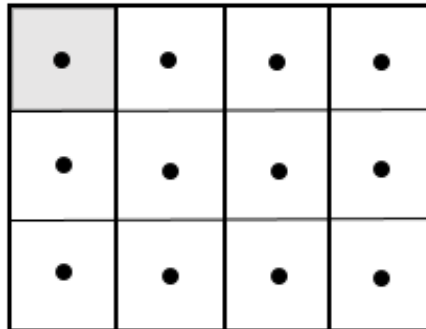
$$A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$S_p = kR\Delta x\Delta y$$

$$A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

O volume de controle localizado no contorno do canto superior esquerdo, conforme ilustra a Figura 3.7, apresenta a seguinte formulação oriunda da Eq. (3.11);

Figura 3.7 - Volume de controle situado no contorno do canto superior esquerdo



$$\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u\Delta y (uC|_e - uC|_w) \quad (3.34)$$

$$= D_{HL}\Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT}\Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right)$$

$$- kR\Delta x\Delta y C_P$$

As derivadas são expressas por:

$$\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u\Delta y (C_P - 0) \quad (3.35)$$

$$= D_{HL}\Delta y \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - 0}{2\Delta x} \right) + D_{HT}\Delta x \left(0 - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) - kR\Delta x\Delta y C_P$$

Agrupando;

$$C_p \left[\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + u \Delta y + 3D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR \Delta x \Delta y \right] \quad (3.36)$$

$$= D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S + \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

Logo a Eq. (3.36) que descreve o volume de controle localizado no canto superior esquerdo pode ser reescrita da seguinte forma:

$$A_p C_p = A_E C_E + A_S C_S + B + S_p \quad (3.37)$$

Onde:

$$A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

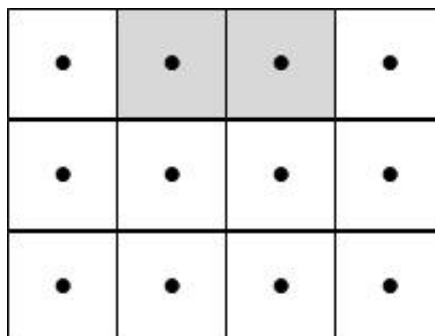
$$A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$B = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

$$S_p = kR \Delta x \Delta y$$

O contorno na superfície superior conforme ilustrado na Figura 3.8, apresenta a seguinte formulação oriunda da Eq. (3.11);

Figura 3.8 -Volume de controle situado no contorno da superfície superior



$$\frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_p - C_p^o) + u \Delta y (u C|_e - u C|_w) \quad (3.38)$$

$$= D_{HL} \Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) - kR \Delta x \Delta y C_p$$

As derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t}(C_P - C_P^o) + u\Delta y(C_P - C_W) \\ = D_{HL}\Delta y \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - C_W}{\Delta x} \right) + D_{HT}\Delta x \left(0 - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) - kR\Delta x\Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.39)$$

Agrupando os termos semelhantes;

$$\begin{aligned} C_P \left[\frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} + u\Delta y + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR\Delta x\Delta y \right] \\ = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o + u\Delta y C_W + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_W + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S \end{aligned} \quad (3.40)$$

Logo a Equação geral é reescrita da seguinte forma;

$$A_P C_P = A_W C_W + A_E C_E + A_S C_S + B + S_p \quad (3.41)$$

$$A_W = u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

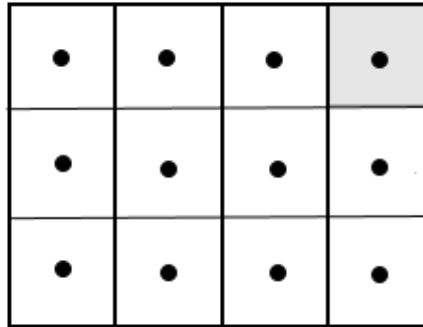
$$A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$B = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

$$S_p = kR\Delta x\Delta y$$

O volume de controle localizado no contorno do canto superior direito, conforme ilustrado a Figura 3.9, apresenta a seguinte formulação proveniente da Eq. (3.11);

Figura 3.9 - Volume de controle situado no canto superior direito



$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (uC|_e - uC|_w) \\ = D_{HL} \Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.42)$$

As derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (C_P - C_W) \\ = D_{HL} \Delta y \left(0 - \frac{C_P - C_W}{\Delta x} \right) + D_{HT} \Delta x \left(0 - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.43)$$

Logo;

$$\begin{aligned} C_P \left[\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR \Delta x \Delta y \right] \\ = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o + u \Delta y C_W + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_W + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S \end{aligned} \quad (3.44)$$

Desta forma a Eq. 3.44 pode ser rescrita:

$$A_P C_P = A_W C_W + A_S C_S + B + S_p \quad (3.45)$$

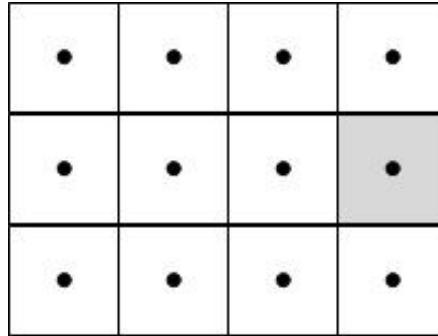
Onde:

$$A_W = u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} \quad B = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

$$S_p = kR \Delta x \Delta y$$

A superfície direita é representada pela Figura 3.10;

Figura 3.10 - Volume de controle situado no contorno da lateral direita



As aproximações das derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t}(C_P - C_P^o) + u\Delta y(C_P - C_W) \\ = D_{HL}\Delta y \left(0 - \frac{C_P - C_W}{\Delta x}\right) + D_{HT}\Delta x \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y}\right) - kR\Delta x\Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.46)$$

Logo:

$$\begin{aligned} C_P \left[\frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} + u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR\Delta x\Delta y \right] \\ = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o + u\Delta y C_W + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_W + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_S \end{aligned} \quad (3.47)$$

Reescrevendo a Equação:

$$A_P C_P = A_W C_W + A_N C_N + A_S C_S + B + S_p \quad (3.48)$$

$$A_W = u\Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

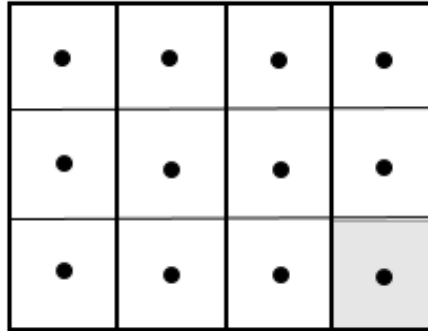
$$B = \frac{R\Delta x\Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

$$A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$S_p = kR\Delta x\Delta y$$

No canto inferior direito ilustrado pela Figura 3.11, a Eq. (3.11) se reduz a:

Figura 3.11 - Volume de controle situado no canto inferior direito



$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (uC|_e - uC|_w) \\ = D_{HL} \Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.49)$$

As derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + u \Delta y (C_P - C_W) \\ = D_{HL} \Delta y \left(0 - \frac{C_P - C_W}{\Delta x} \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} - 0 \right) - kR \Delta x \Delta y C_P \end{aligned} \quad (3.50)$$

Logo;

$$\begin{aligned} C_P \left[\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR \Delta x \Delta y \right] \\ = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o + u \Delta y C_W + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_W + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N \end{aligned} \quad (3.51)$$

Desta forma;

$$A_P C_P = A_W C_W + A_N C_N + B + S_p \quad (3.52)$$

$$A_W = u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

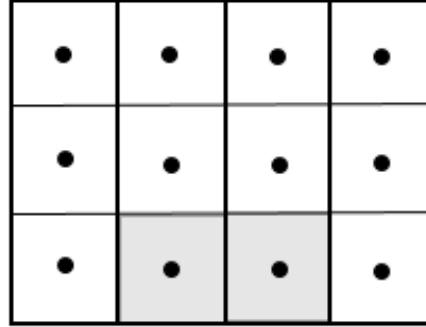
$$A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$B = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_P^o$$

$$S_p = kR \Delta x \Delta y$$

O volume de controle localizado na superfície inferior, conforme demonstra a Figura 3.12, apresenta a seguinte formulação oriunda da Eq.3.11;

Figura 3.12 - Volume de controle situado no contorno da superfície inferior



$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_p - C_p^o) + u \Delta y (uC|_e - uC|_w) \\ = D_{HL} \Delta y \left(\frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \end{aligned} \quad (3.53)$$

As derivadas são expressas por:

$$\begin{aligned} \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} (C_p - C_p^o) + u \Delta y (C_p - C_w) \\ = D_{HL} \Delta y \left(\frac{C_E - C_p}{\Delta x} - \frac{C_p - C_w}{\Delta x} \right) + D_{HT} \Delta x \left(\frac{C_N - C_p}{\Delta y} - 0 \right) - kR \Delta x \Delta y C_p \end{aligned} \quad (3.54)$$

Logo teremos;

$$\begin{aligned} C_p \left[\frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} + u \Delta y + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR \Delta x \Delta y \right] \\ = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_p^o + u \Delta y C_w + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_E + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} C_w + D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} C_N \end{aligned} \quad (3.55)$$

Desta forma a Equação que define a superfície inferior do meio é;

$$A_p C_p = A_E C_E + A_w C_w + A_N C_N + B + S_p \quad (3.56)$$

$$A_w = u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} \quad A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}$$

$$A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}$$

$$B = \frac{\Delta x \Delta y}{\Delta t} C_p^o$$

$$S_p = kR \Delta x \Delta y$$

4.4 MÉTODOS DE SOLUÇÃO DE UM SISTEMA LINEAR

O método adotado neste trabalho na solução do sistema linear do problema proposto foi o de Gauss-Seidel.

O algoritmo deste método, é o seguinte:

$$A_P \phi_P^{k+1} = \sum A_{nb} \phi_{NB}^{k+1} + A_e \phi_E^k + A_n \phi_N^k + A_t \phi_T^k + B \quad (4.57)$$

- Estimar o campo inicial da variável;
- Para calcular Φ_P a varredura é feita de baixo para cima, do Sul para o norte e de oeste para leste. Os valores da propriedade Φ_W , ϕ_S e ϕ_B podem ser consideradas conhecidas para a mesma varredura;
- Checar se houve convergência;
- Caso o critério não tenha sido satisfeito, retornar.

Esse método é de convergência relativamente lenta e requer uma matriz com dominância diagonal. Em contrapartida é de fácil implementação e é totalmente vetorizável, justificando sua escolha para implementação no trabalho.

4.5 MÉTODO COMPUTACIONAL

Neste trabalho, a parte que se relaciona com a linguagem e codificação se valeu da utilização da linguagem Fortran 90.

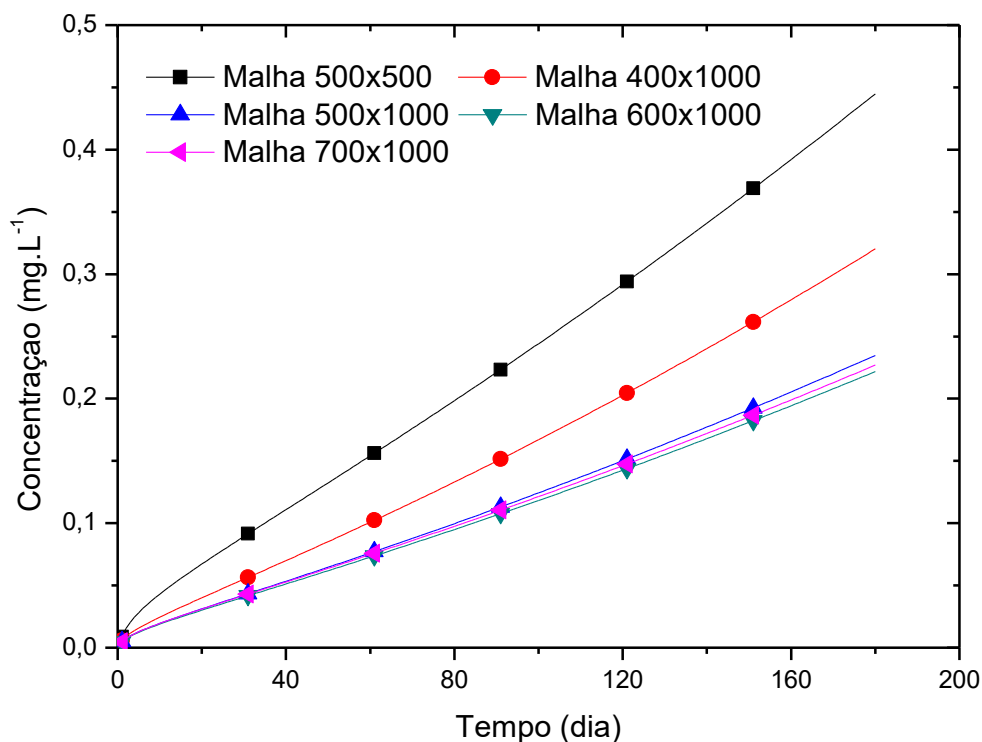
Esta escolha não foi aleatória, a linguagem Fortran, criada durante as primeiras décadas da ciência computacional, é reconhecida por sua velocidade de processamento e por suas ótimas características no tratamento de equações e processos numéricos, elementos que estão diretamente relacionados com a criação da linguagem e o sucesso da pesquisa.

4. RESULTADOS E DISCUSSÕES

Neste capítulo são apresentados e discutidos os resultados obtidos pelas simulações computacionais.

A malha igualmente espaçada de cálculo cartesiana escolhida para o trabalho foi a de 500 x 1000 nós ou volumes de controle. Esta escolha deve-se a uma análise do perfil das concentrações médias do poluente em função do tempo de simulação em diferentes malhas testadas, conforme ilustrado na figura 4.1, a malha de 500x1000 apresenta estabilidade diante de malhas superiores, justificando sua escolha no decorrer do trabalho.

Figura 4.1 – Critério utilizado na escolha da malha



4.1 VALIDAÇÃO NUMÉRICA DO MÉTODO

A validação numérica é o processo que determina se o método numérico resolve com exatidão as equações diferenciais, ou seja, se os resultados obtidos conferem com o que se observa a respeito do fenômeno de interesse. Nessa seção ainda foi verificada a influência das interações dos mecanismos físico-químicos sobre a validação, utilizando a solução analítica apresentada por Beer (1979) como referência.

A Equação diferencial a ser resolvida neste problema é a seguinte;

$$\frac{\partial C}{\partial t} + u \frac{\partial C}{\partial x} = \alpha_L v \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - kC \quad (4.1)$$

A Eq. (4.1) é unidimensional, foi reduzida a partir da Eq. (3.10) que se trata de uma equação bidimensional, o propósito desta modificação é comparar a solução numérica e unidimensional encontrada, à solução analítica, que tem como característica, um meio semi-infinito.

De acordo com Beer (1979), a solução analítica para problemas unidimensionais de transporte reativo é a seguinte;

$$C(x, t) = \left(\frac{C_o}{2}\right) \exp\left\{\frac{x}{2\alpha_L} \left[1 - \left(1 + \frac{4k\alpha_L}{v}\right)^{1/2}\right]\right\} \operatorname{erfc}\left\{\frac{\left[x - vt \cdot \left(1 + \frac{4k\alpha_L}{v}\right)^{1/2}\right]}{2(\alpha_L vt)^{1/2}}\right\} \quad (4.2)$$

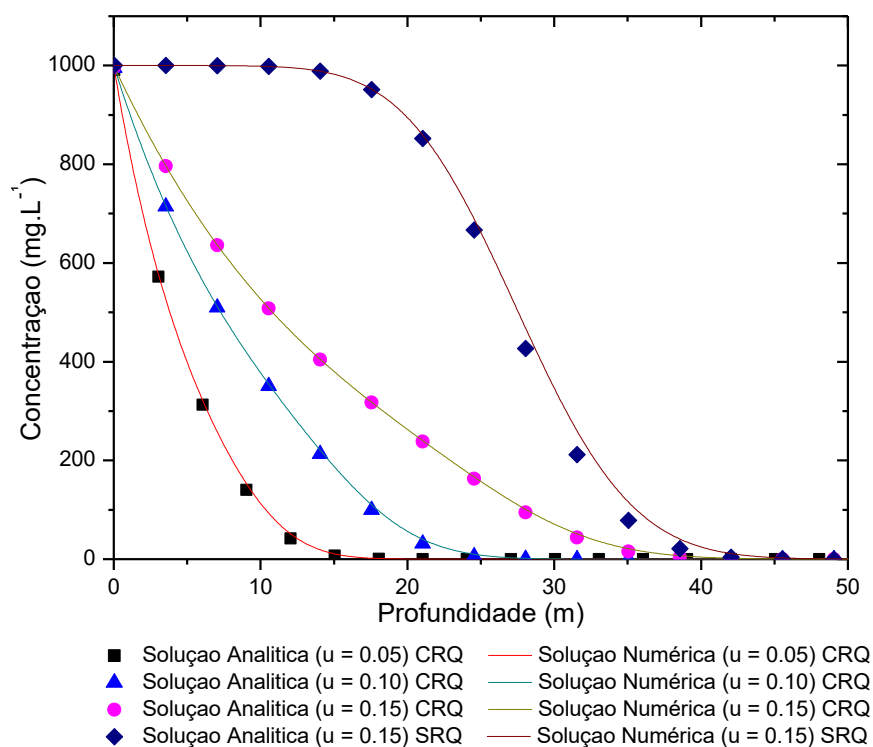
O problema unidimensional de transporte reativo, supondo decaimento de 1ª ordem, sem retardo, foi resolvido numericamente, utilizando dados dos principais parâmetros dos mecanismos de transporte de poluentes e comparado com a resolução da solução analítica nas mesmas condições. A condição inicial é $C(x,0) = 0$ e as condições de contorno são $C(0,t) = 1000 \text{ mg.L}^{-1}$ e derivada nula à jusante.

Na primeira simulação afim de validar o método, foi verificada a influência da velocidade de escoamento (u), foram considerados três valores para u ; 0,05 (m.dia^{-1}), 0,10 (m.dia^{-1}) e 0,15 (m.dia^{-1}), no transporte do contaminante, levando em consideração duas hipóteses, a primeira incluindo a taxa de reação química e a segunda sem reação química, deixando todos os outros parâmetros constantes conforme a Tabela 5.1, exceto o termo de reação química na última simulação.

Tabela 4.1 - Dados de Entrada na primeira simulação

$n_x = 1000$	Número de volumes (x)
$l_x = 100$	Distância (m)
$c_{ini} = 1000$	Concentração inicial do poluente (mg.L^{-1})
$k = 0,01$	Constante de reação (dia^{-1})
$a = 0,60$	Dispersividade (m)
tempo = 180	Tempo da Simulação (dia)

Figura 4.2- Soluções analíticas e numéricas para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de u



A solução numérica obtida é apresentada na Figura 4.2. Neste Figura pode ser observado que os resultados numéricos concordam bem com a solução analítica.

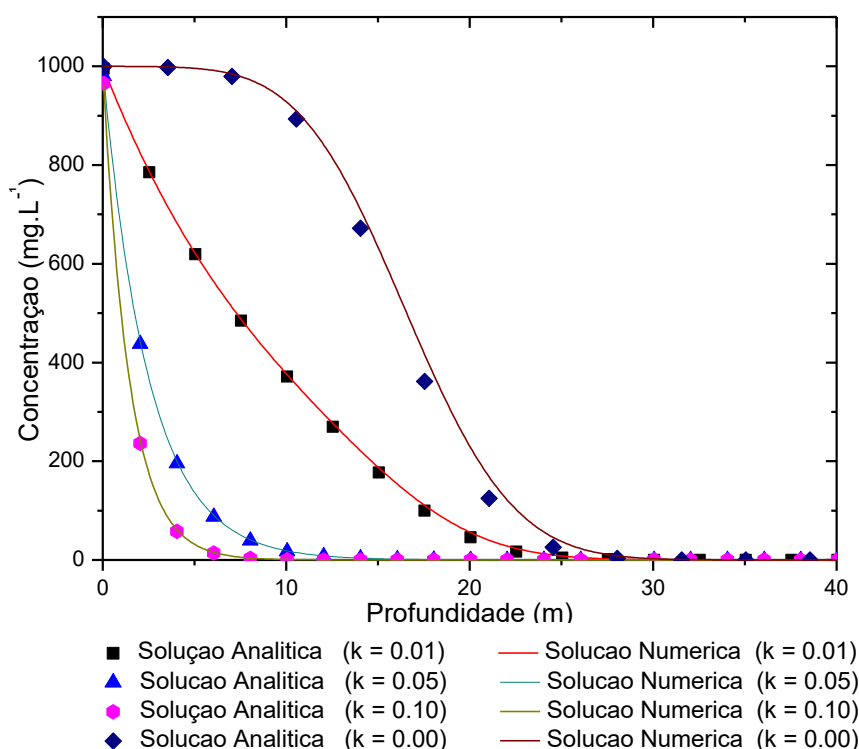
Na segunda simulação, para de validação o método, foi analisada a influência da reação química no transporte da pluma de contaminação na zona saturada do solo. Para esta análise foram atribuídos diferentes valores ao coeficiente de reação química (k): 0,01 (dia^{-1}), 0,05 (dia^{-1}), 0,10 (dia^{-1}). Os outros parâmetros, relativos aos mecanismos de transporte, ficaram constantes, conforme a Tabela 4.2.

Tabela 4.2 - Dados de Entrada na segunda simulação

$n_x = 1000$	Número de volumes (x)
$l_x = 100$	Distância (m)
$c_{ini} = 1000$	Concentração inicial do poluente (mg.L^{-1})
$u = 0.10$	Velocidade da água (m.dia^{-1})
$\alpha = 0.60$	Dispersividade (m)
tempo = 180	Tempo da Simulação (dia)

Como demonstrado na figura 4.3, conclui-se que os resultados numéricos aqui obtidos podem ser considerados muito bons, corroborando com a solução analítica para um meio semi-infinito proposta por Beer (1979).

Figura 4.3 - Comparação entre as soluções analítica e numéricas para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de k .

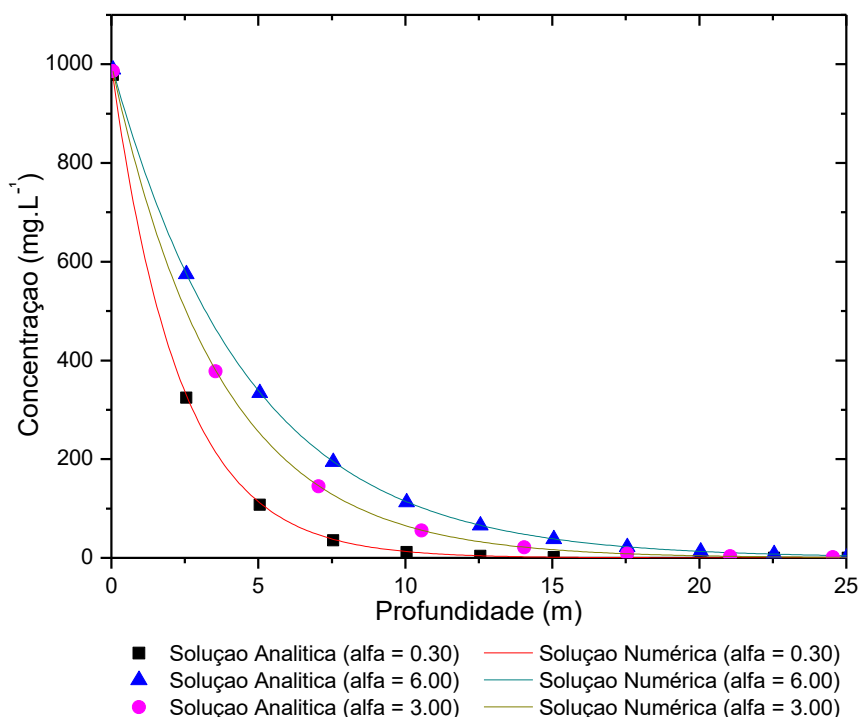


Para consolidar a validação do método, a terceira simulação computacional teve o objetivo de verificar a acurácia da solução numérica em relação a solução analítica, utilizando a importância da dispersividade na migração de solutos em meios porosos saturados, o α foi variado da seguinte forma: 0.30 m, 3.00 m, 6.00 m,. Os outros parâmetros foram mantidos constantes conforme a Tabela 4.3.

Tabela 4.3 - Dados de Entrada na terceira simulação

$n_x = 1000$	Número de volumes (x)
$l_x = 100$	Distância (m)
$c_{ini} = 1000$	Concentração inicial do poluente (mg.L ⁻¹)
$u = 0.10$	Velocidade da água (m.dia ⁻¹)
$k = 0.05$	Constante da reação (dia ⁻¹)
tempo = 180	Tempo da Simulação (dia)

Figura 4.4 - Comparação entre as soluções analíticas e numéricas para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de alfa.



Observou-se conforme a Figura 4.4, que o modelo numérico e analítico se assemelham, legitimando a comparação da solução numérica.

4.2 CONVERGÊNCIA E ESTABILIDADE DO MÉTODO NUMÉRICO

A convergência de um método numérico significa a garantia que na realização de um número de iterações, as aproximações obtidas acabam cada vez mais perto o verdadeiro valor procurado.

Afim de verificar a convergência e estabilidade do método proposto, foram coletados pontos de interesse em regiões favoráveis a visualização do comportamento do poluente em determinadas coordenadas na malha de 500/1000, pontos correspondentes aos números de volumes de controle em cada iteração, as coordenadas (linha x coluna), foram as seguintes: Ponto 1 (1,1), Ponto 2 (1,5), Ponto 3 (1,10), Ponto 4 (5,1), Ponto 5 (5,5), Ponto 6 (5,10), Ponto 7 (10,1), Ponto 8 (10,5), Ponto 9 (10,10), conforme ilustrado na Figura 4.5 e as simulações numéricas foram realizadas com diferentes valores de tolerância, objetivando avaliar a consistência dos dados obtidos, em diferentes ciclos de iteração.

Figura 4.5 - Coleta dos pontos de interesse na malha para análise de convergência

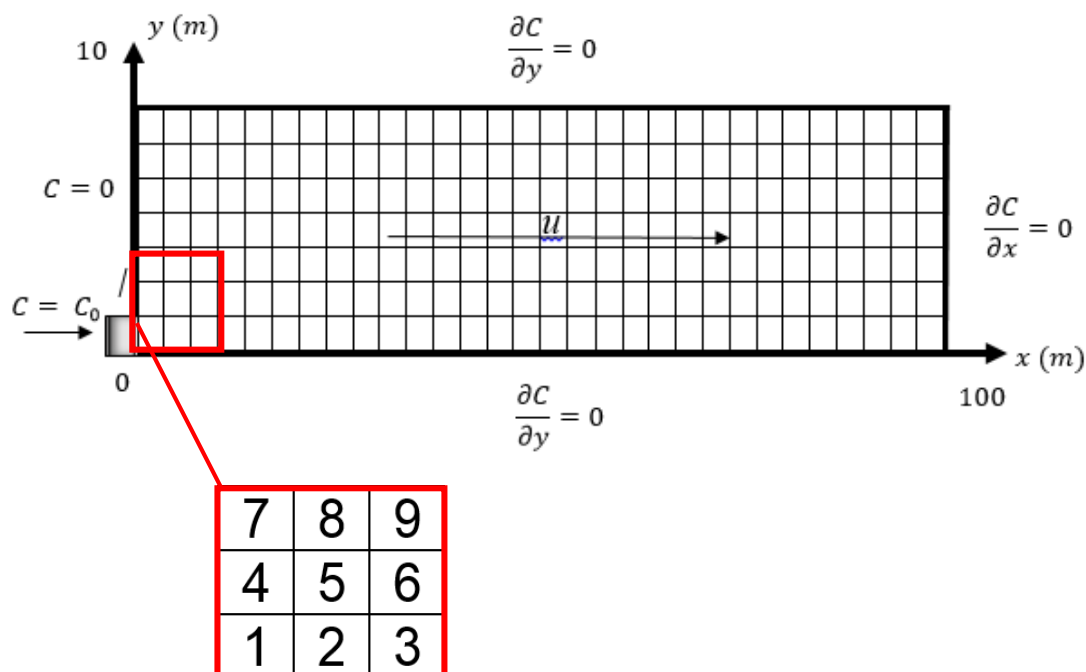


Tabela 4.4 - Análise de Convergência do Método

MALHA	500/1000				
	1×10^{-4}	1×10^{-6}	1×10^{-8}	1×10^{-10}	1×10^{-12}
PONTO 1	377,7306	378,1355	378,1399	378,1399	378,1399
PONTO 2	130,0215	130,4272	130,4316	130,4317	130,4317
PONTO 3	46,7986	47,2016	47,2060	47,2061	47,2061
PONTO 4	133,8335	137,6985	137,7406	137,7411	137,7411
PONTO 5	111,6092	115,4843	115,5267	115,5271	115,5271
PONTO 6	64,7000	68,5474	68,5898	68,5902	68,5902
PONTO 7	87,9046	95,8799	95,9681	95,9691	95,9691
PONTO 8	82,0213	89,9855	90,0738	90,0748	90,0748
PONTO 9	62,2475	70,1469	70,2352	70,2362	70,2362
TEMPO	3mim25s	8mim25s	16mim25s	24mim48s	30mim16s

Os resultados obtidos são demonstrados na Tabela 4.4, é notório afirmar que diante dos pontos de interesse coletados na malha utilizada na pesquisa, a convergência e estabilidade do método é alcançada, atingindo a consistência nas

simulações numéricas a partir da Tolerância de 1×10^{-10} , tornando-se esta, a tolerância utilizada no trabalho devido a estabilidade e convergência, aliada ao custo computacional não proibitivo.

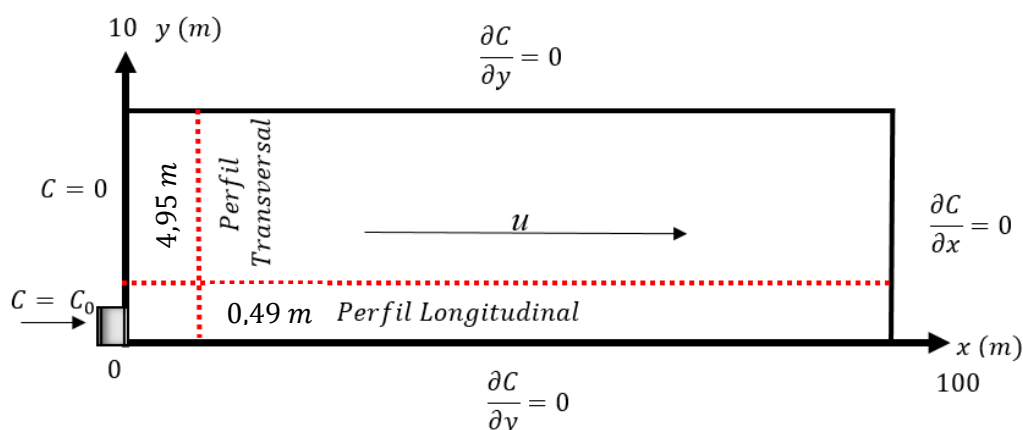
4.3 - ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DOS PARÂMETROS.

Com o objetivo de verificar a influência dos parâmetros empregados na simulação numérica representada pela equação geral do transporte reativo de contaminantes, foram realizadas análises paramétricas.

No estudo paramétrico, considerou-se uma seção hipotética vertical e horizontal da zona saturada. A fonte de contaminação representa um rejeito lançado na superfície do terreno, conforme ilustrado na Figura 4.5. O transporte de contaminantes em meios porosos com decaimento de 1ª ordem, foi simulado para todos os casos no estudo paramétrico, utilizando seis tempos distintos: 15, 30, 60, 90, 120 e 150 dias e passo temporal, t , igual a 1 dia.

Os resultados foram representados por gráficos na sessão longitudinal, ou seja, na profundidade do aquífero e na seção transversal que corresponde ao comprimento do mesmo, assim como gráficos de contorno que demonstram de maneira qualitativa o comportamento da pluma de contaminação na zona saturada, o posicionamento dos planos foram representados conforme a Figura 4.6.

Figura 4.6 - Posicionamento dos perfis



Os perfis observados nos resultados das simulações, tanto na seção longitudinal quanto na seção transversal, foram escolhidos e analisados em uma

região favorável para a visualização do comportamento do poluente durante o lançamento e transporte do mesmo no meio poroso.

Houveram diversos perfis gerados, porém o plano longitudinal foi representado a uma distância de 0,49 metros após a zona de lançamento e no perfil transversal na posição de 4,95 metros após da origem da poluição, conforme a Figura 4.6. Desta forma foi possível verificar o comportamento gradativo do poluente em função dos mecanismos de transporte na zona saturada do solo.

Foi analisado a influência e relevância de cada parâmetro em relação aos demais e no transporte do contaminante no meio poroso. Os parâmetros analisados foram os seguintes: Coeficiente de Retardo da Pluma (R), Taxa de reação Química (k), Velocidade do Fluxo da água (u), Dispersividade (α), Dispersão Hidrodinâmica.

Para estudar o efeito da variação das propriedades supracitadas nos meios porosos, utilizando um planejamento experimental simulado, foram simulados valores representativos para cada parâmetro conforme os dados da Tabela 4.5.

Tabela 4.5 - Dados da análise paramétrica

EXP	RETARDO	K	VELOCIDADE	ALFA	DHT=%DHL
1	1,00	0,000	0,05	1,00	10,00
2	2,00	0,000	0,05	1,00	10,00
3	1,00	0,010	0,05	1,00	10,00
4	1,00	0,000	0,10	1,00	10,00
5	1,00	0,000	0,05	2,00	10,00
6	1,00	0,000	0,05	1,00	5,00

4.3.1 - Influência Do Fator De Retardo

Nesta seção foi analisado o efeito do fator de retardo da pluma, a partir das simulações considerando isotermas de sorção linear com valores assumidos conforme descrito nos Experimentos 1 e 2 da Tabela 4.5, demonstrando o comportamento da

pluma de contaminação nas seções longitudinal e transversal e no contorno do aquífero poluído.

Observou-se que tanto na seção longitudinal, ilustrado na Figura 4.7, quanto na seção transversal na Figura 4.8, existe uma notória tendência da pluma de contaminação ficar mais próxima da fonte poluidora com o aumento do fator de retardo, atribuído ao aumento da capacidade do solo em adsorver o contaminante, ou seja, quanto maior o fator de retardo menor a profundidade alcançada pelo contaminante e menor a concentração do poluente no corpo hídrico subterrâneo.

Em seguida foram representados campos de concentração do contaminante, ilustrados na Figura 4.9, o comportamento qualitativo da pluma de contaminação de forma gradativa em relação ao tempo e a influência do fator de retardo na zona saturada do solo. Nota-se que os resultados se assemelham aos encontrados nas outras seções.

Figura 4.7 - Influência do retardo na concentração longitudinal

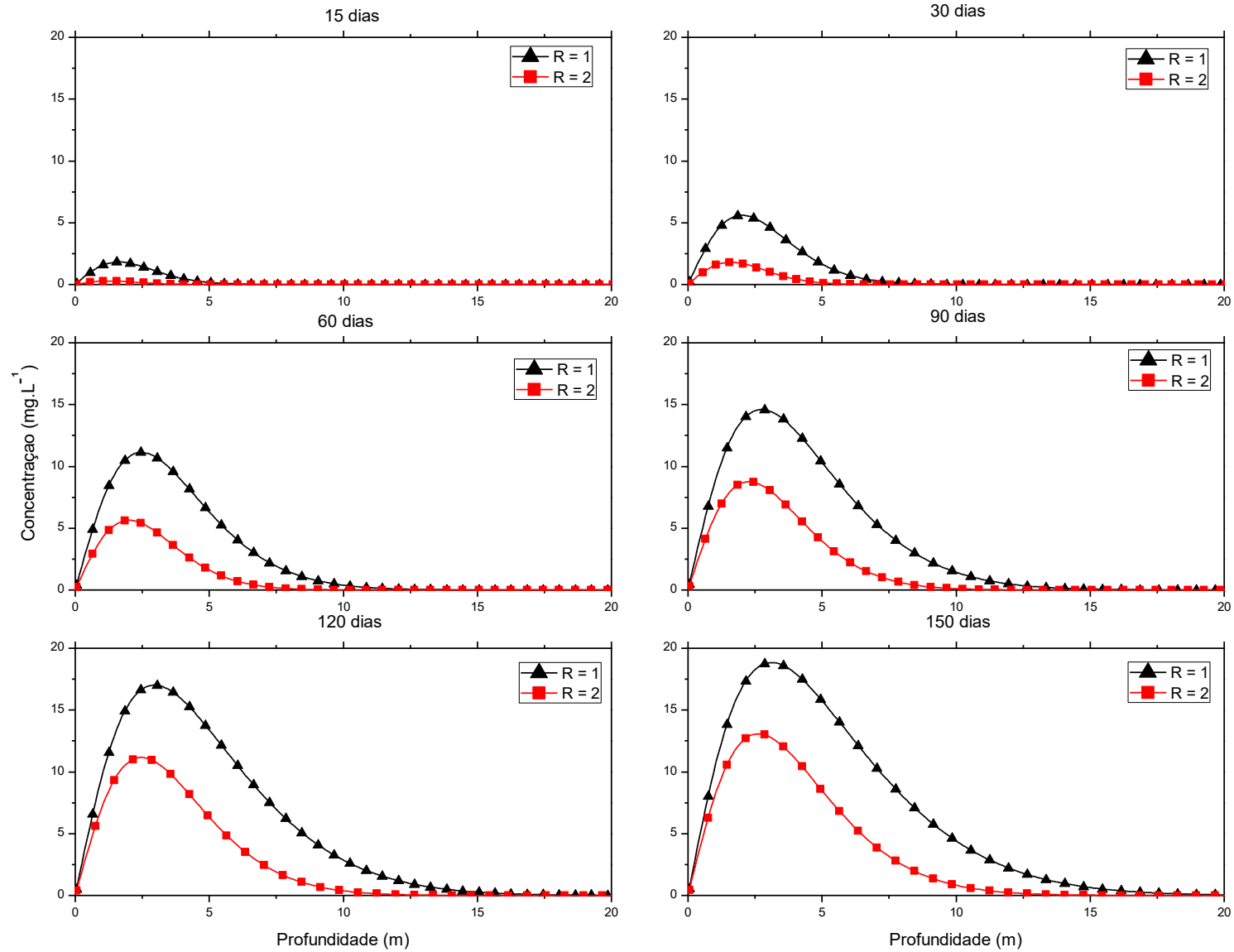


Figura 4.8 - Influência do Retardo na concentração transversal

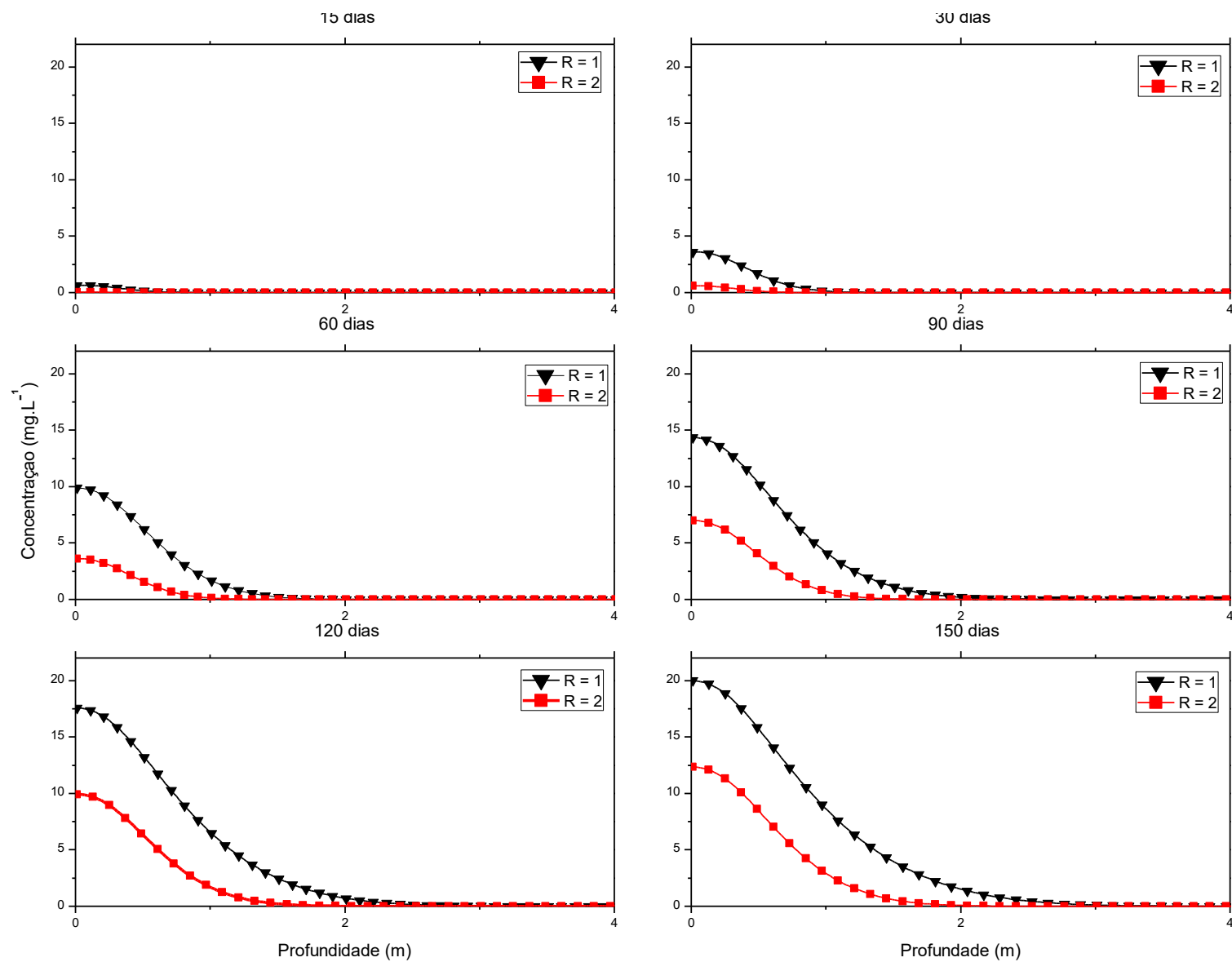
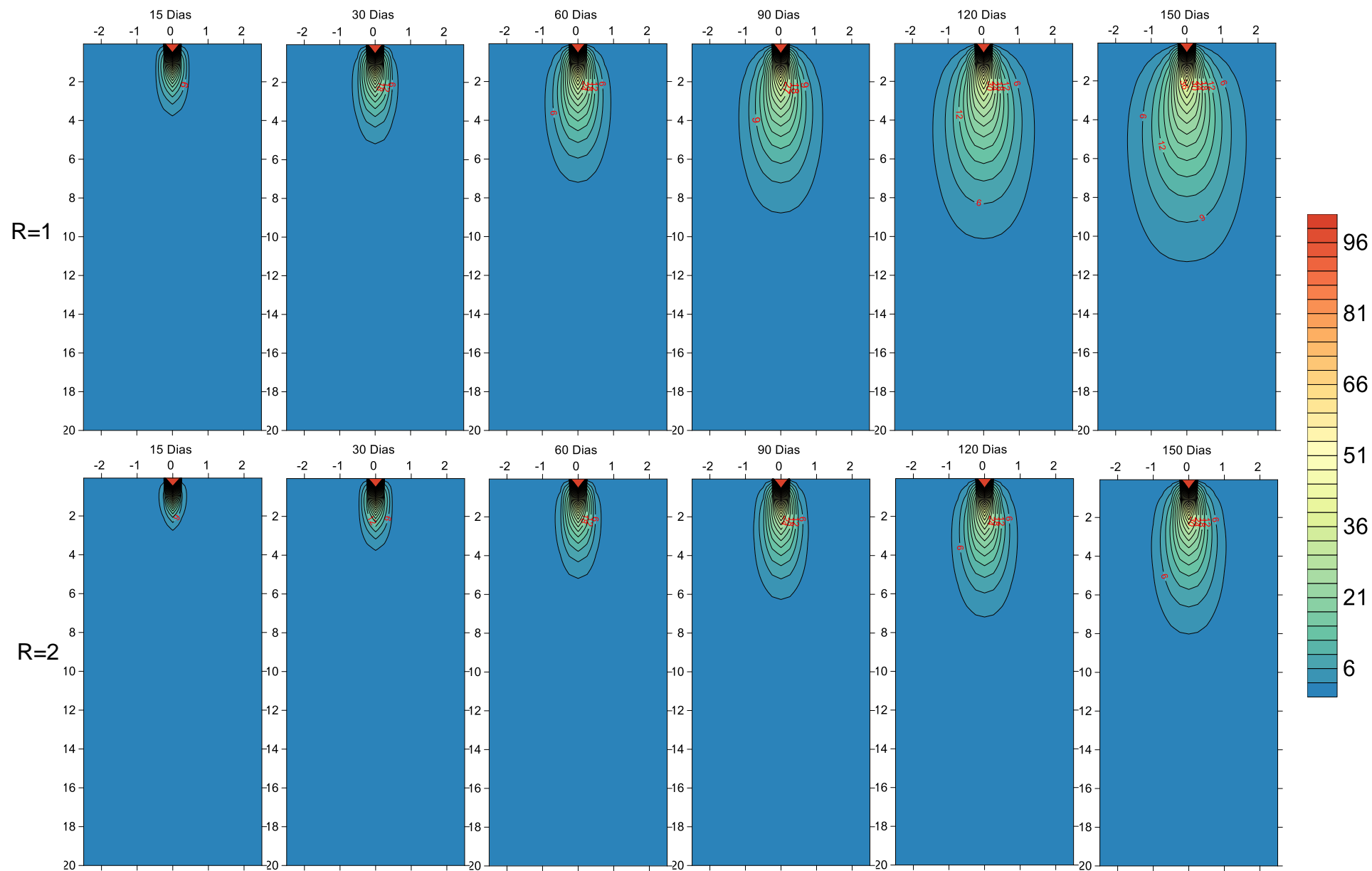


Figura 4.9: Influência do Coeficiente de retardo sobre a pluma de contaminação.

4.3.2 - Influência da taxa de Reação Química

Procurando avaliar o comportamento do contaminante reativo na zona saturada do solo comparou-se duas hipóteses, a primeira foi representada pelo Experimento 3 da Tabela 4.5, com o poluente apresentando uma taxa de reação química (k) de $0.010 \text{ (dia}^{-1}\text{)}$, e a outra simulação, um poluente inerte, conforme Experimento 1, sem taxa de reação química, afim de verificar a diferença do desempenho da pluma nos dois casos. Nesta análise foi admitido que não houve coeficiente de retardo, ou seja, $R = 1$ e outros parâmetros foram mantidos constante, conforme a Tabela 4.5.

Se observou no perfil longitudinal e transversal das Figuras 4.10 e 4.11 respectivamente, que quanto maior o valor do coeficiente de reação química, menor foi a concentração e a profundidade que o poluente atingiu na zona saturada, ou seja, com o aumento do coeficiente de reação química, houve uma tendência, no decorrer dos dias após o lançamento, que a pluma ficasse mais próxima da fonte poluidora e em menores concentrações, em comparação ao poluente inerte.

Na simulação realizada no trabalho, notou-se que os perfis de concentração longitudinal e transversal observados no tempo de 15 dias, apresentaram uma pequena mudança no comportamento das comparações das plumas, provavelmente não havendo tempo suficiente para que as reações químicas atuem, o soluto comportou-se praticamente inerte em ambos os casos.

Por outro lado, para um o tempo de 150 dias após o lançamento do poluente, houve uma mudança significativa na concentração e na profundidade percorrida pela pluma, indicando que o aumento da taxa de reação química, demonstra uma redução brusca na concentração do poluente e este ficou mais próximo a fonte de poluição, na comparação com a espécie inerte.

Em seguida foram representados campos de concentração do contaminante, nota-se a diferença qualitativa das plumas de contaminação na figura 4.12, que ilustra a dinâmica transiente do contaminante no aquífero simulado.

Figura 4.10 - Influência da taxa de Reação Química na concentração longitudinal

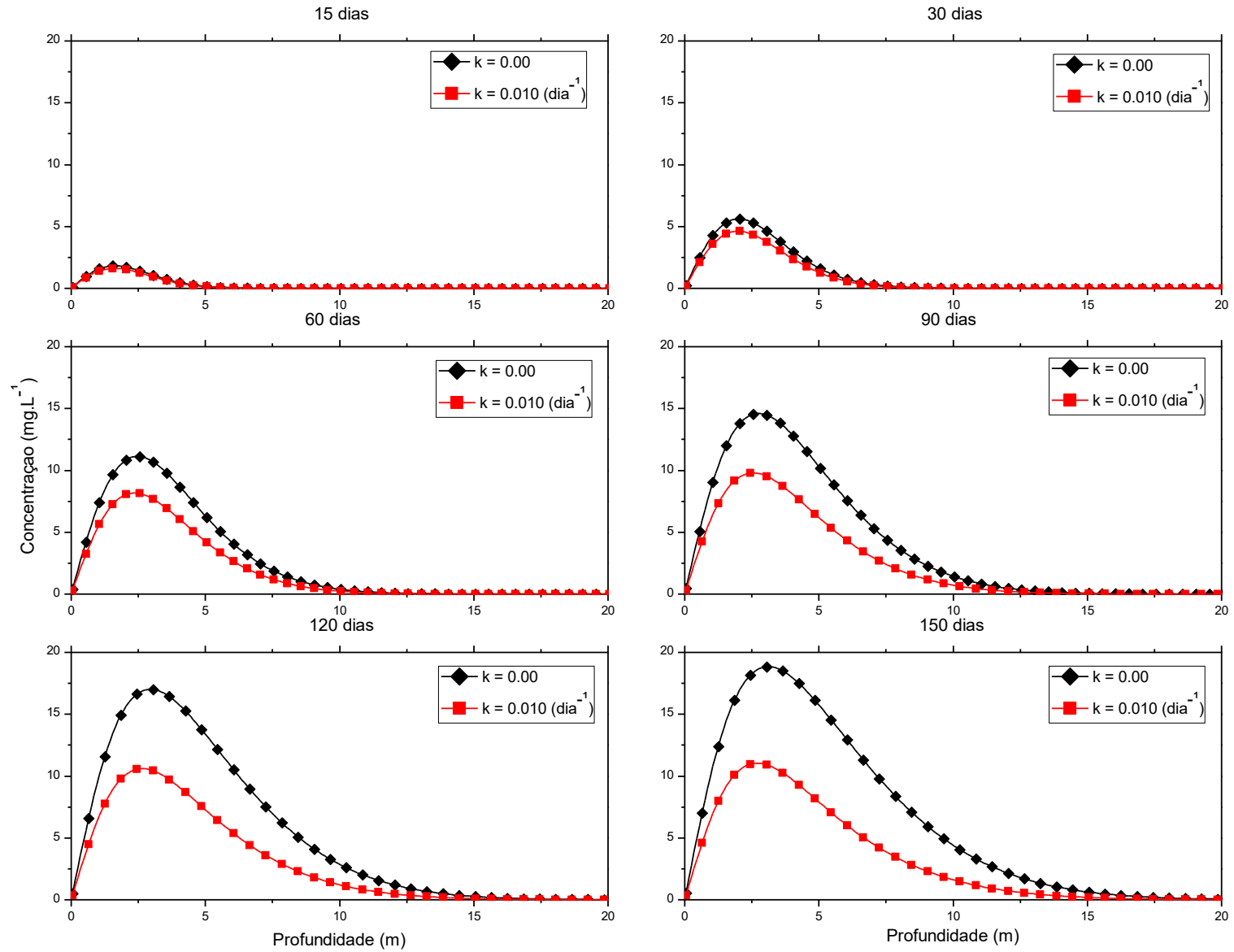


Figura 4.11 - Influência da taxa de Reação Química na concentração transversal

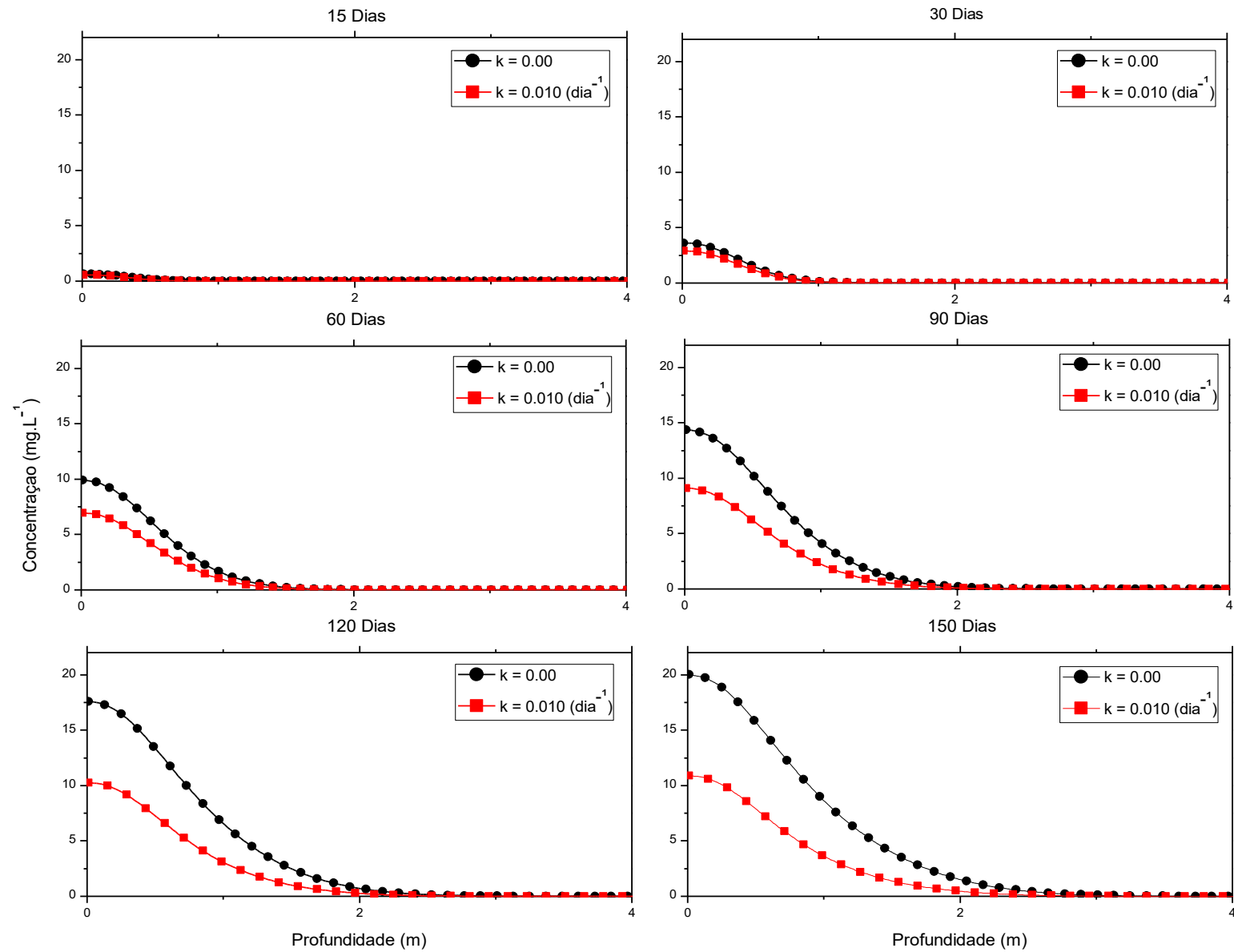
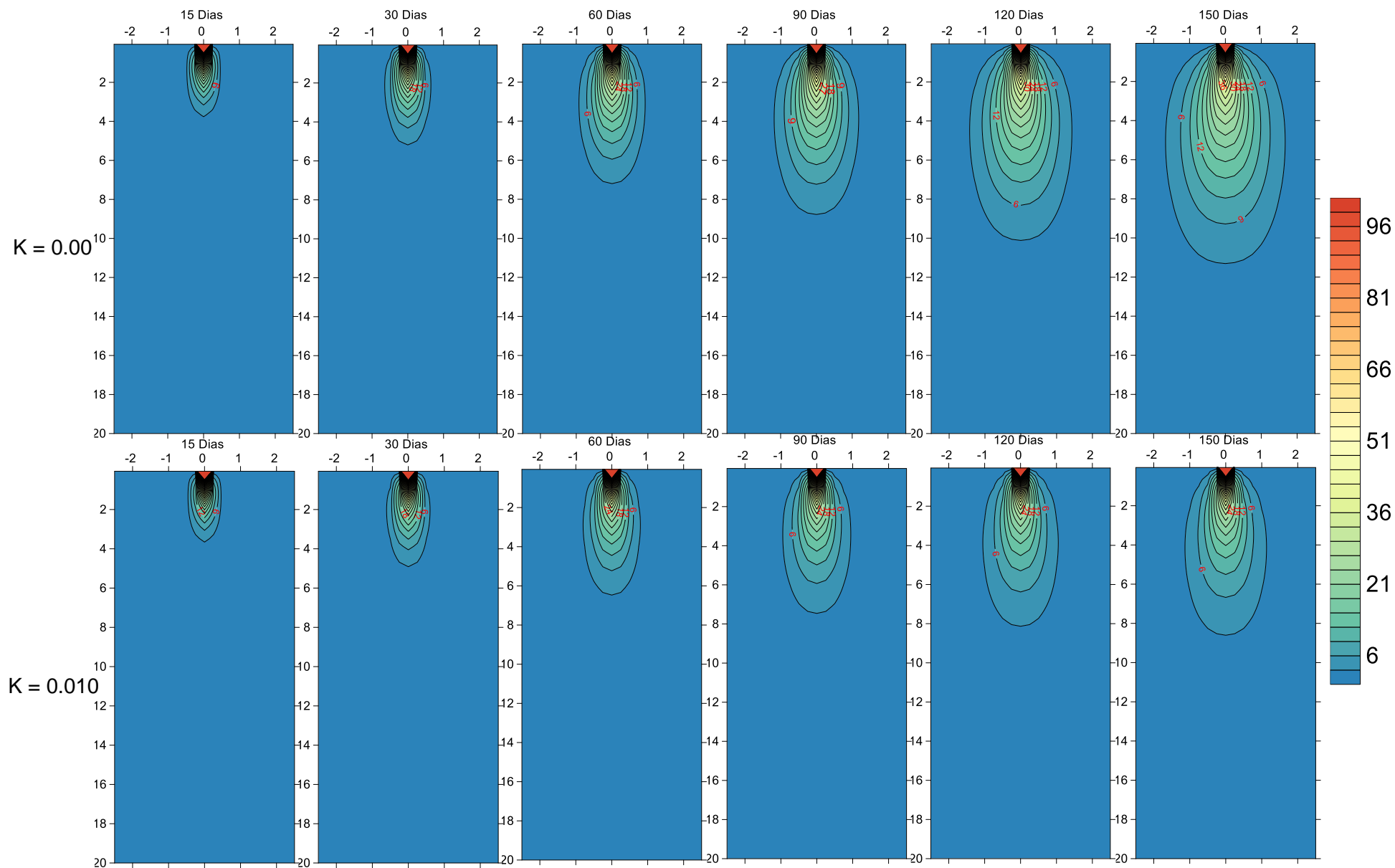


Figura 4.12: Influência da taxa de Reação Química sobre a pluma de contaminação



4.3.3 - Influência do coeficiente de velocidade (u)

Para avaliar a importância da velocidade (u), na migração de solutos em meios porosos saturados, o coeficiente foi modificado de duas formas, verificou-se a velocidade do fluxo de água a $0,05 \text{ (m.dia}^{-1}\text{)}$ conforme o Experimento 1 e no segundo caso à $0,10 \text{ (m.dia}^{-1}\text{)}$ apresentado no Experimento 4, conforme Tabela 4.5, nas duas situações foram investigados o comportamento da pluma de contaminação nas seções longitudinal e transversal e o desempenho qualitativo da pluma do poluente no aquífero simulado. A simulação foi realizada sem taxa de reação química e fator de retardo e os outros parâmetros ficaram constantes conforme os dados disponíveis na Tabela 4.5.

Os perfis de concentração longitudinal, transversal e o comportamento de pluma estão apresentados nas Figuras 4.13, 4.14, e 4.15, respectivamente. Estas Figuras, nota-se claramente que o aumento da velocidade de escoamento da água, acarreta no aumento da distância percorrida pela pluma de contaminação no meio poroso, assim como o aumento significativo na concentração do poluente no aquífero subterrâneo

Observou-se que tanto na seção longitudinal, quanto na transversal, o aumento da velocidade do fluxo de água, ocasionou um maior alcance do contaminante, atingindo maiores profundidades, gerando maiores impactos dentro do aquífero simulado.

A Figura 4.15 demonstra o comportamento qualitativo das plumas em comparação as duas simulações supracitadas, estas simulações numéricas, levam em consideração o tempo estabelecido até 150 dias desde o lançamento do contaminante e o seu desempenho dentro da zona saturada do solo, a Figura 4.15 demonstram claramente, a influência da velocidade (u), no decorrer do tempo de exposição no corpo hídrico subterrâneo e a sua diferença, quando comparado a uma outra simulação com maior velocidade de escoamento.

Figura 4.13 - Influência do coeficiente de Velocidade na seção longitudinal

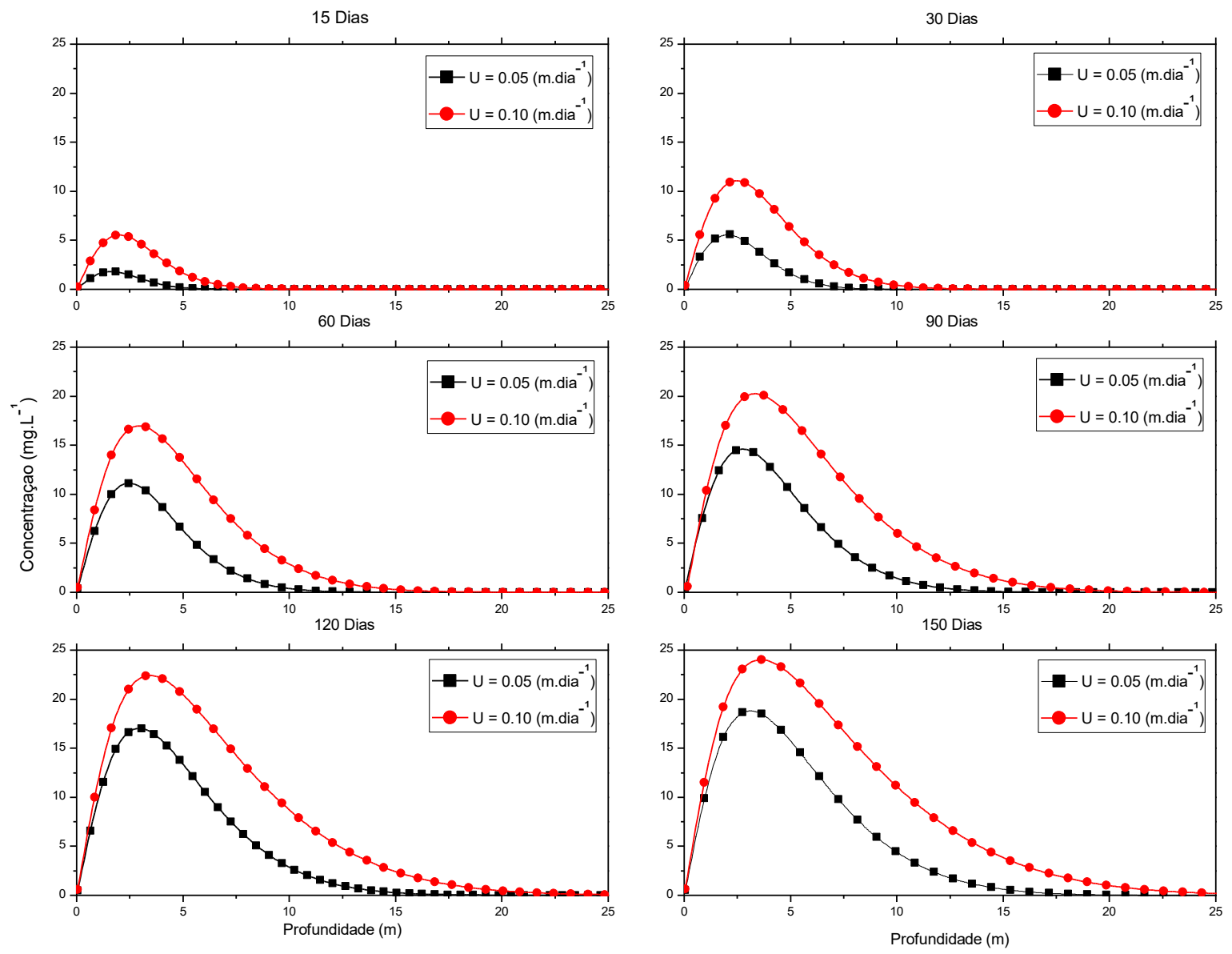


Figura 4.14 - Influência do coeficiente de Velocidade na seção transversal

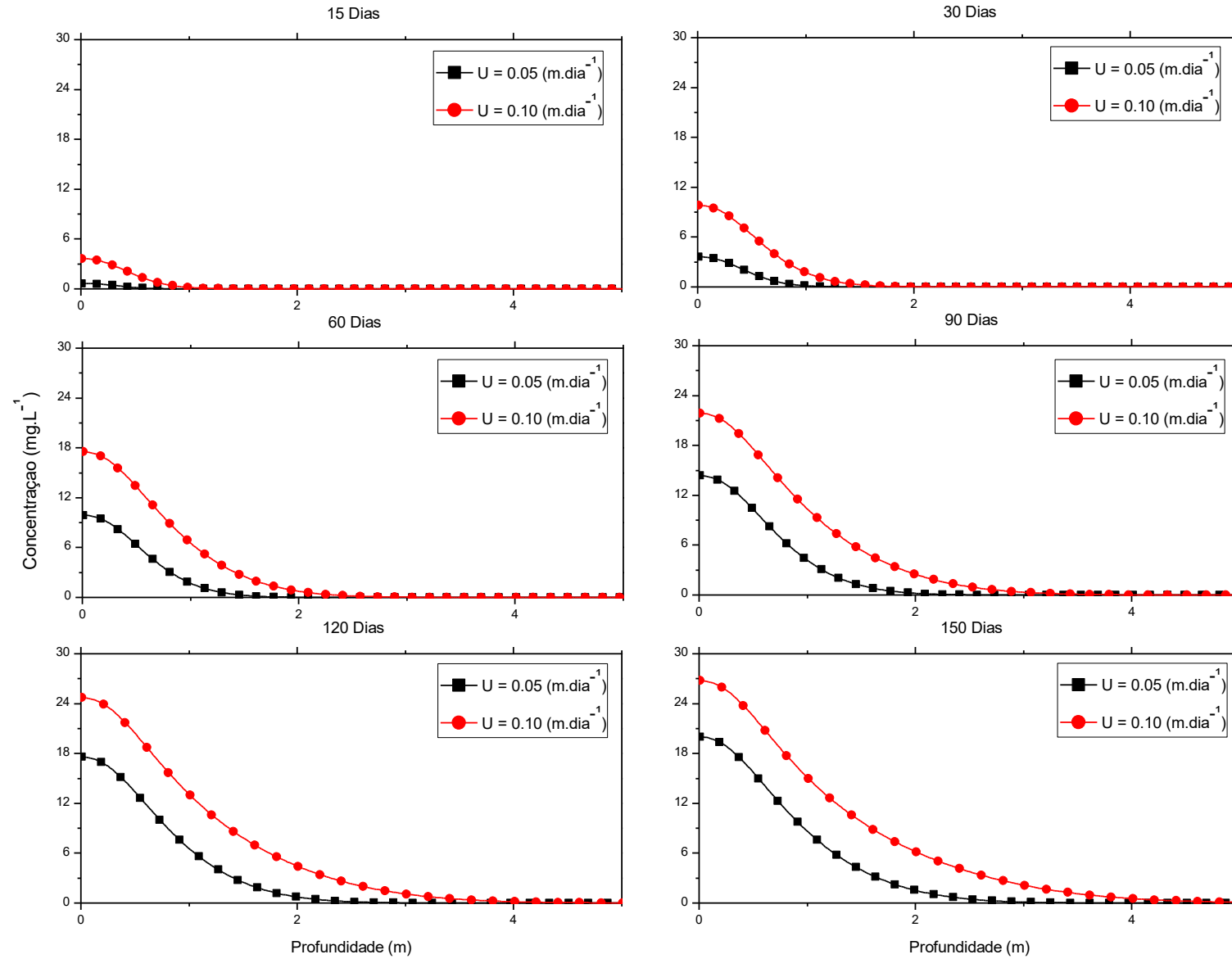
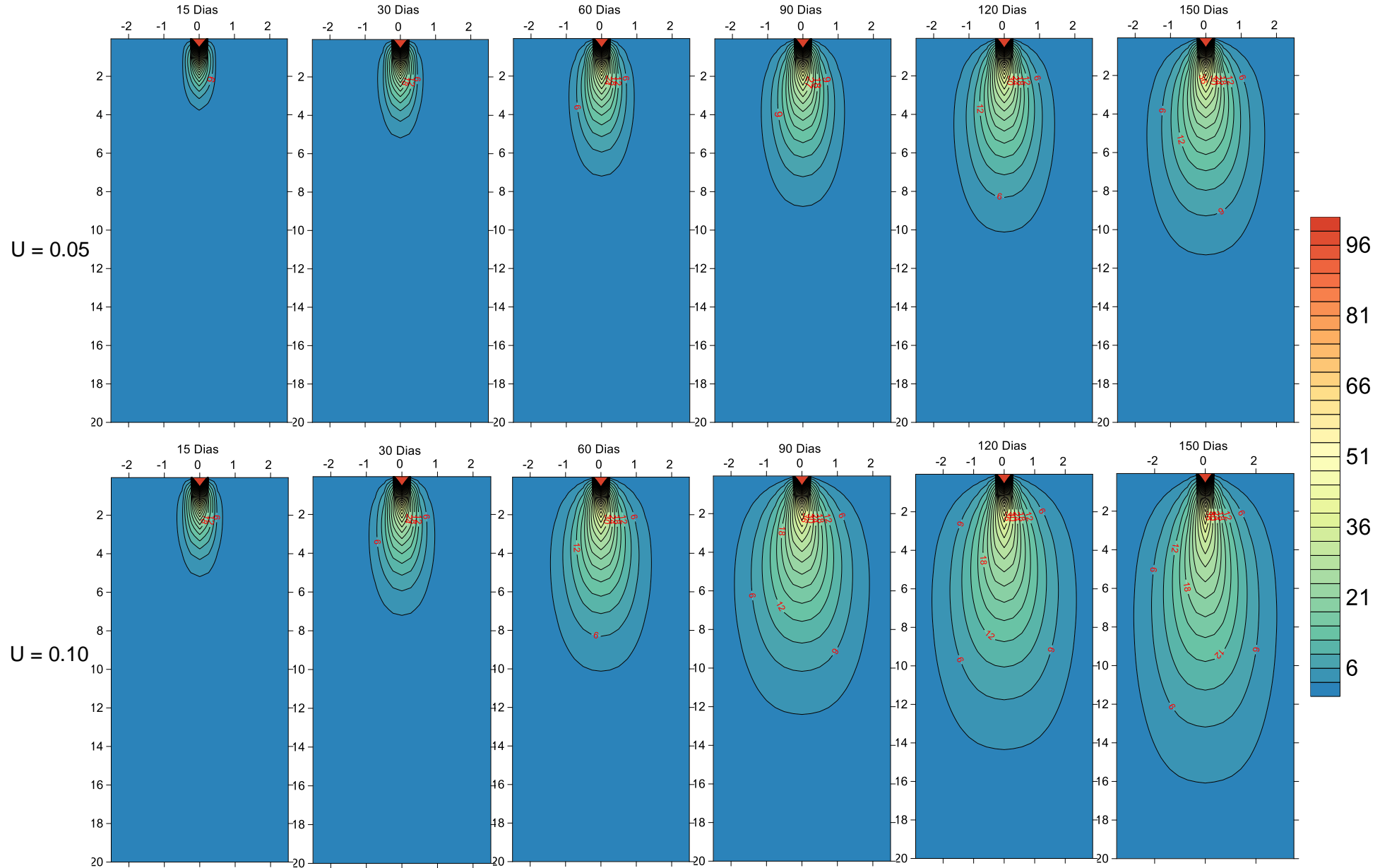


Figura 4.15 : Efeito do Coeficiente de Velocidade sobre pluma de contaminação.



4.3.4 - Influência do coeficiente de Dispersividade (alfa)

Para avaliar a importância da dispersividade na migração de solutos em meios porosos saturados, o parâmetro foi avaliado de duas formas, a primeira está representada pelos valores do Experimento 1 conforme a Tabela 4.5 e a segunda hipótese foi realizada utilizando os dados de entrada do Experimento 5 na Tabela supracitada. Os outros parâmetros foram mantidos constantes afim de verificar a influência da variação da dispersividade no corpo hídrico subterrâneo simulado.

Os perfis de concentração longitudinal, transversal e o comportamento de pluma estão apresentados nas Figuras 4.16, 4.17, e 4.18, respectivamente. Observa-se, tanto no perfil longitudinal, quanto no perfil transversal, na comparação entre as duas simulações, um comportamento dinâmico da pluma de contaminação no decorrer dos dias no meio poroso.

Verifica-se que em ambos os experimentos, existe um aumento gradativo do espalhamento da pluma no transcorrer do tempo dentro do aquífero, ou seja, o aumento da dispersividade favoreceu à ampliação da concentração e o avanço do poluente, atingindo maiores profundidades.

Em regiões mais próxima da origem da contaminação, logo após o lançamento da espécie química, a elevação da dispersividade acarretou no avanço da concentração do contaminante, porém, ao passar do tempo, a partir de 90 dias, é notório que a diminuição da dispersividade atingiu maiores picos de concentração em comparação com simulação do experimento 1, seguindo esta tendência até 180 dias após o soluto adentrar no aquífero.

Figura 4.16 - Influência do coeficiente de dispersividade na seção longitudinal

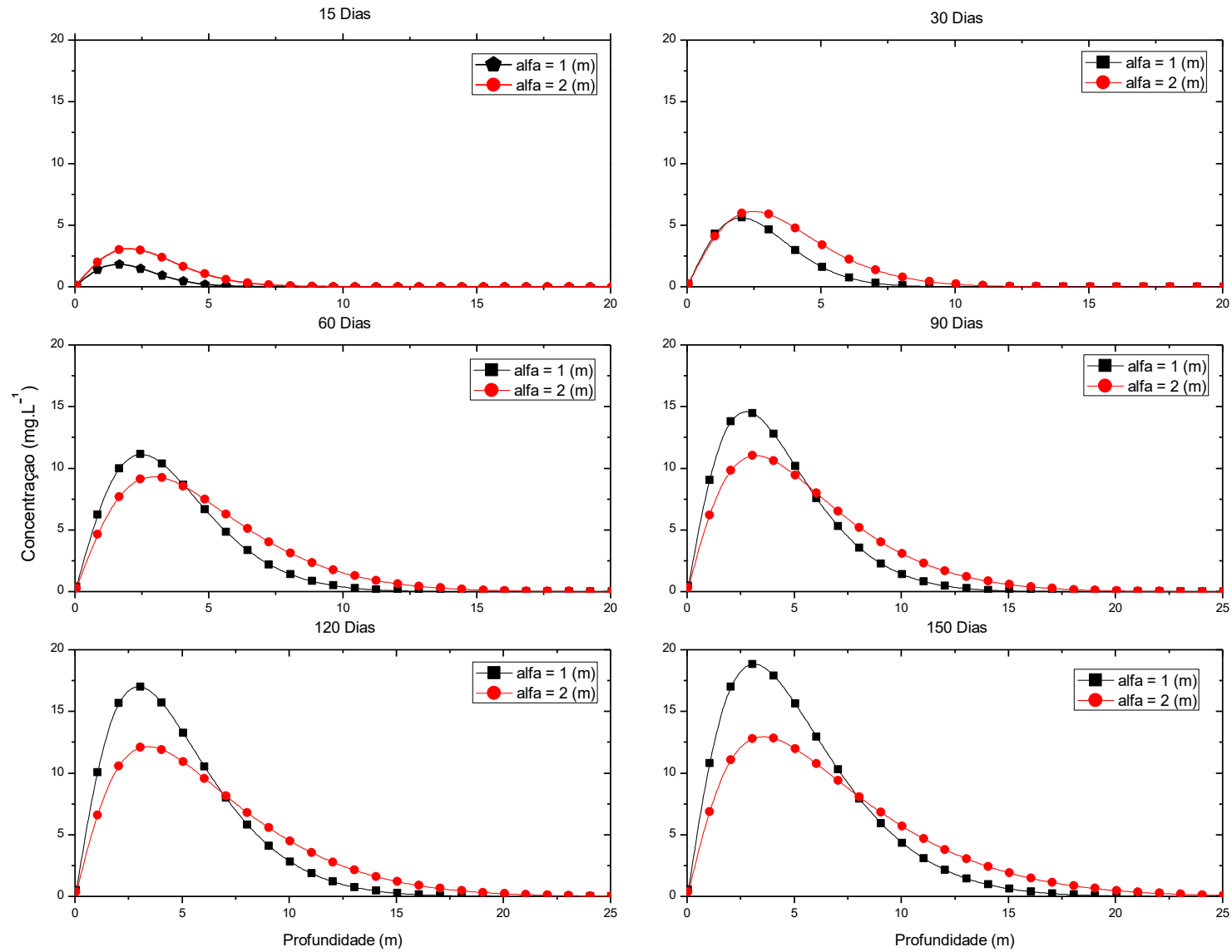


Figura 4.17 - Influência do coeficiente de dispersividade no perfil transversal

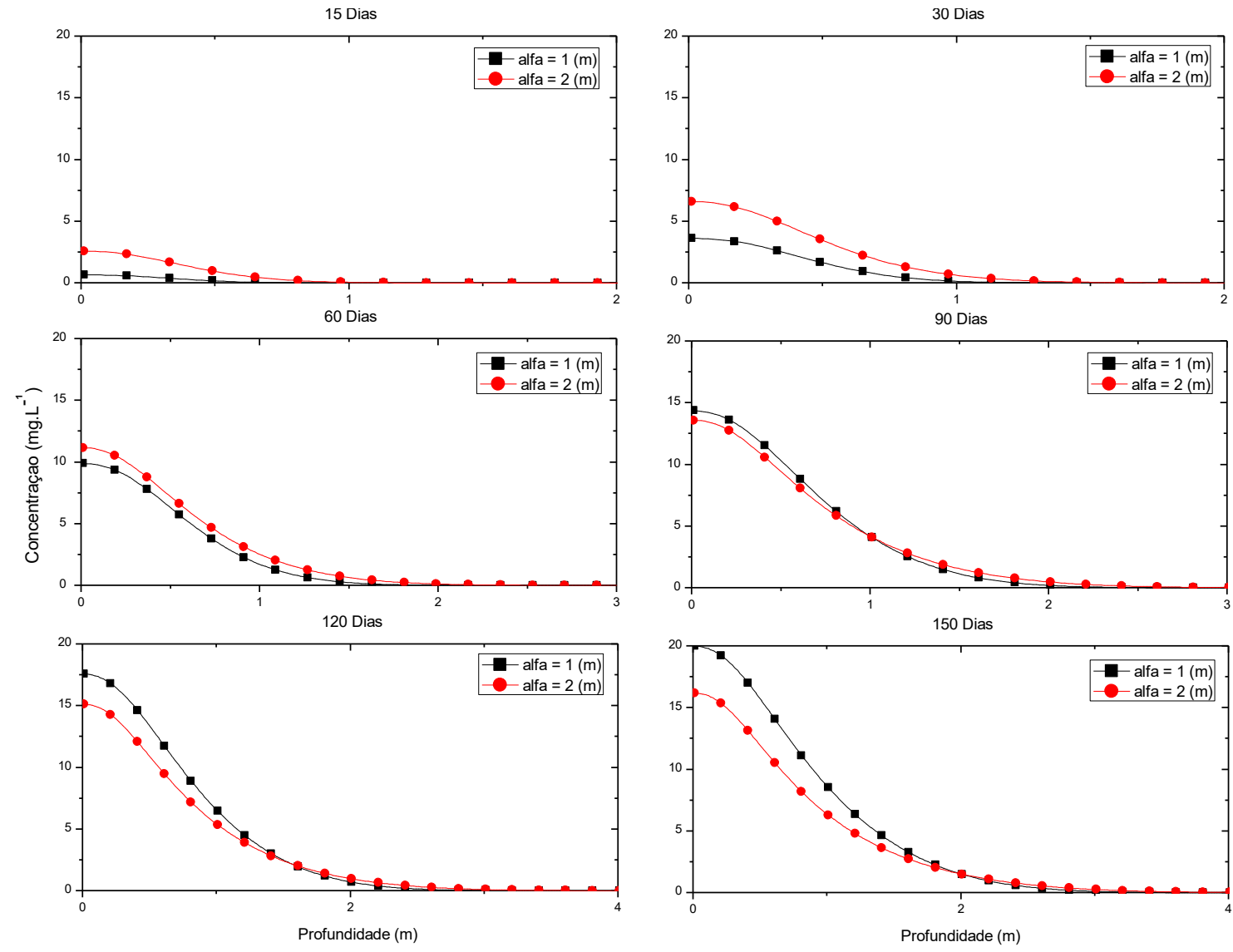
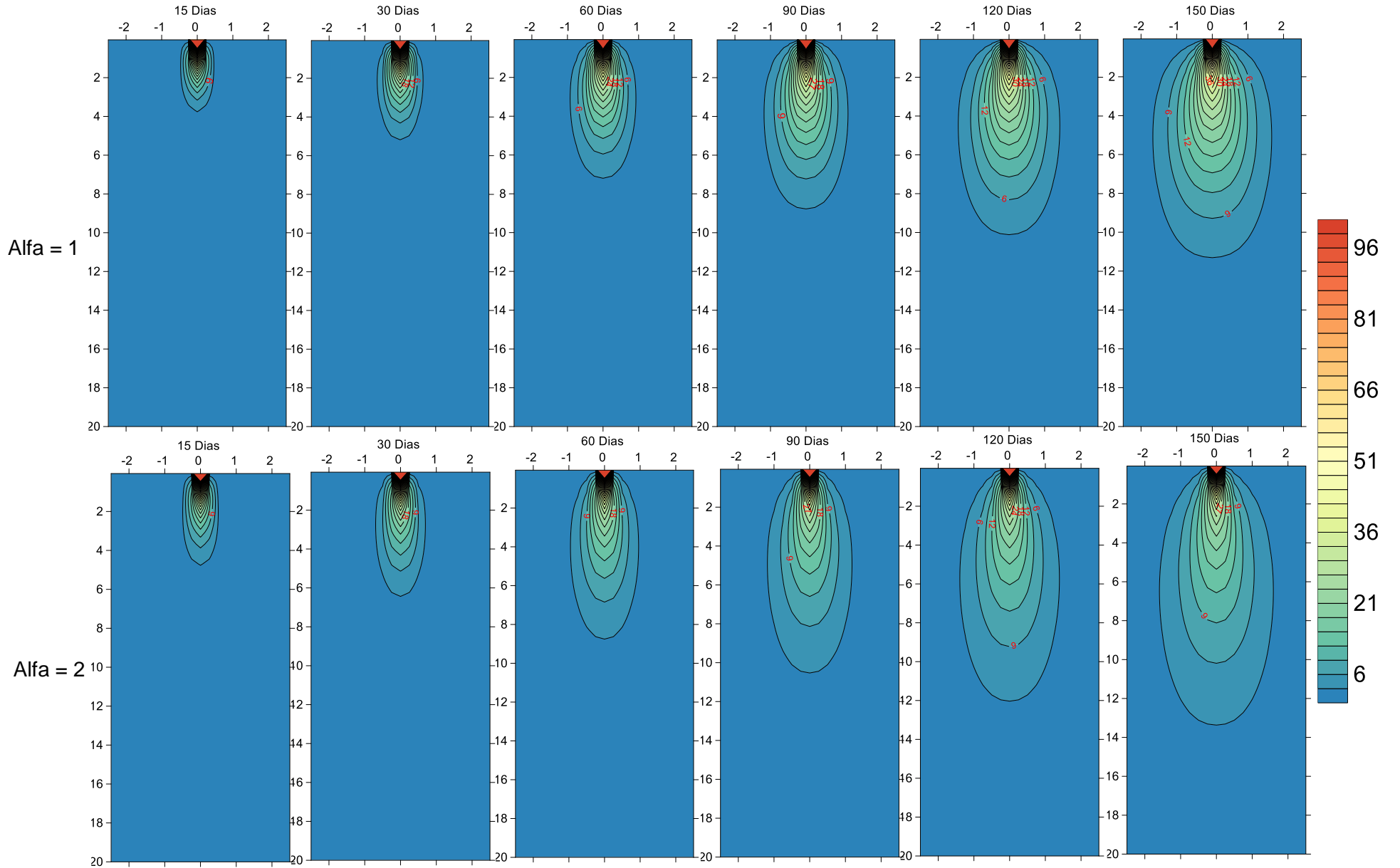


Figura 4.18 - Efeito do Coeficiente de dispersividade sobre pluma de contaminação.



4.3.5 - Efeito do coeficiente de Dispersão

O coeficiente de dispersão sintetiza dois termos: a mecânica de dispersão hidrodinâmica e a difusão molecular:

$$D_{HL} = D^* + \alpha_L V_u \quad (4.1)$$

$$D_{HT} = D^* + \alpha_T V_v \quad (4.2)$$

Onde D_{HL} é a dispersividade longitudinal, D_{HT} a dispersividade transversal, u e v as componentes de V que representa o vetor velocidade intersticial da água no meio poroso, D^* é o coeficiente de difusão molecular, porém a dispersividade é maior na direção do fluxo seguindo a componente longitudinal e a dispersão transversal é usualmente pequena.

As dispersividades transversal e longitudinal são difíceis de serem estimadas, no entanto, encontra-se na literatura valores para a dispersividade transversal (D_{HT}) da ordem de 10% a 33% da dispersividade longitudinal (D_{HL}).

Desta forma, fez-se necessária a seguinte reformulação no coeficiente transversal:

$$D_{HL} = D^* + \alpha_L V_u \quad (4.3)$$

$$D_{HT} = \%D_{HL} \quad (4.4)$$

Para de verificar a influência do coeficiente das dispersividade, adotou-se duas situações, a primeira com $D_{HT} = 5\%D_{HL}$, conforme Experimento 6 e a segunda simulação com $D_{HT} = 10\%D_{HL}$ apresentado no Experimento 1, os outros parâmetros foram mantidos constantes, todos os dados de entrada foram descritos na Tabela 4.5.

Os perfis de concentração longitudinal e transversal, assim como o comportamento qualitativo da pluma estão apresentados nas Figuras 4.19, 4.20, e 4.21, respectivamente.

Verifica-se que em ambos os experimentos, há um aumento gradativo do espalhamento da pluma no decorrer do tempo de exposição no aquífero contaminado.

Nota-se que no perfil longitudinal demonstrado na Figura 4.19, o aumento da dispersividade transversal ocasiona um maior alcance da propagação do poluente, atingindo maiores profundidade em comparação a outra situação e que em regiões mais próximas da fonte de poluição a menor dispersividade transversal ocasiona maiores picos de concentração do contaminante.

Observa-se na Figura 4.21, uma pluma de contaminação mais próxima à fonte poluente na primeira simulação, com o aumento da dispersividade transversal verifica-se um espalhamento da pluma, ou seja, um maior espraiamento do contaminante e, portanto, uma maior contaminação do lençol freático.

Figura 4.19 - Influência do coeficiente de dispersão no perfil longitudinal

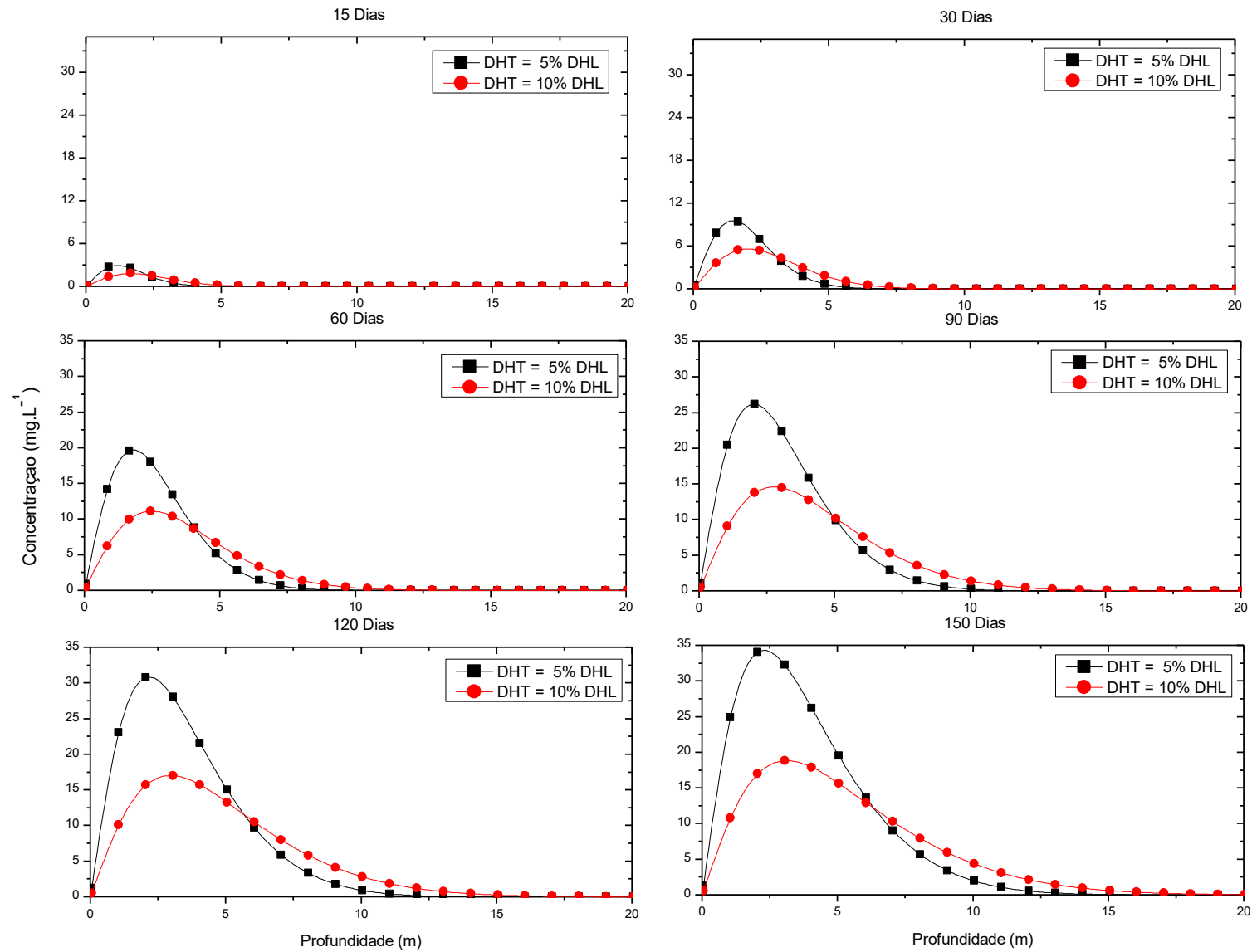


Figura 4.20 - Influência do coeficiente de dispersão no perfil transversal

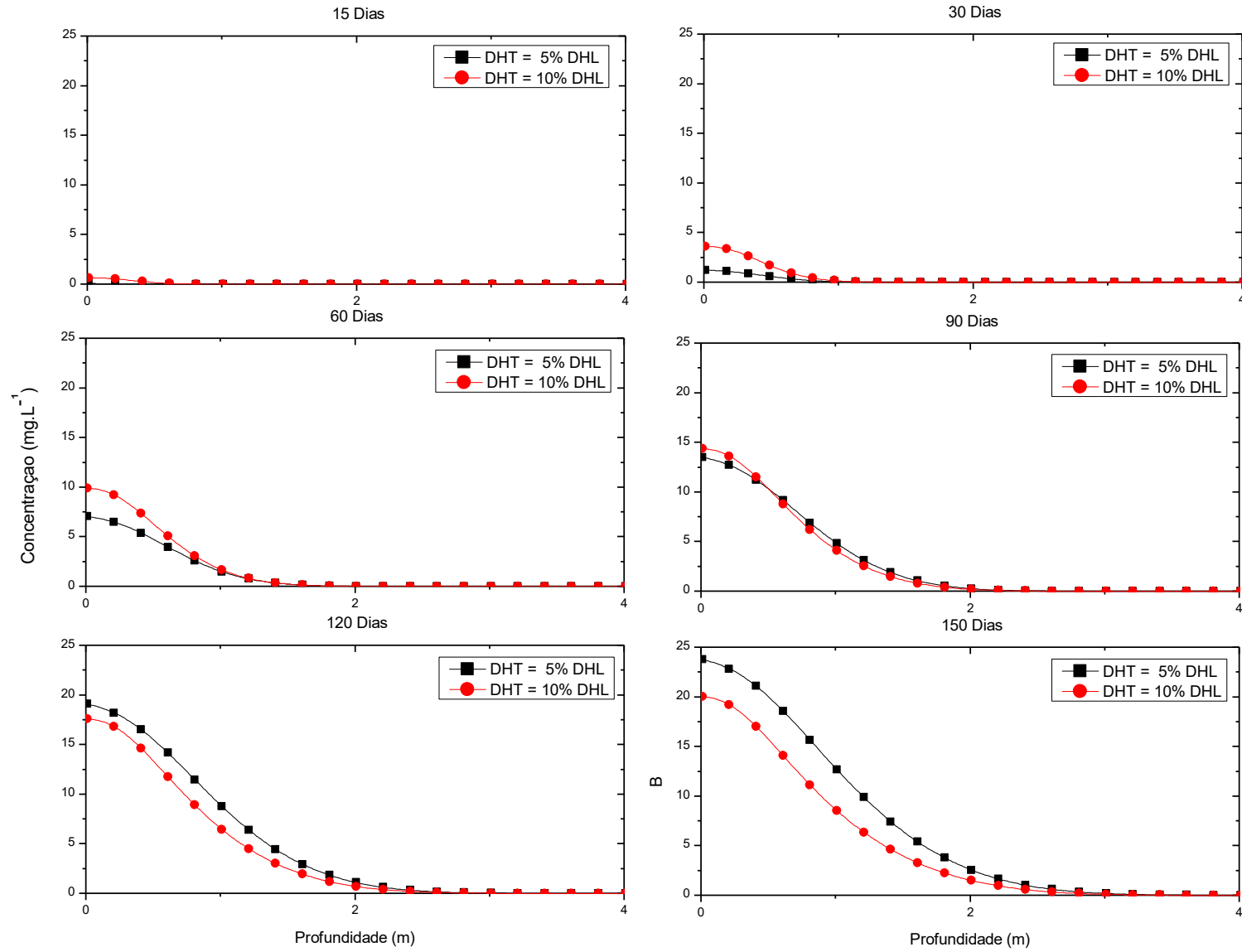
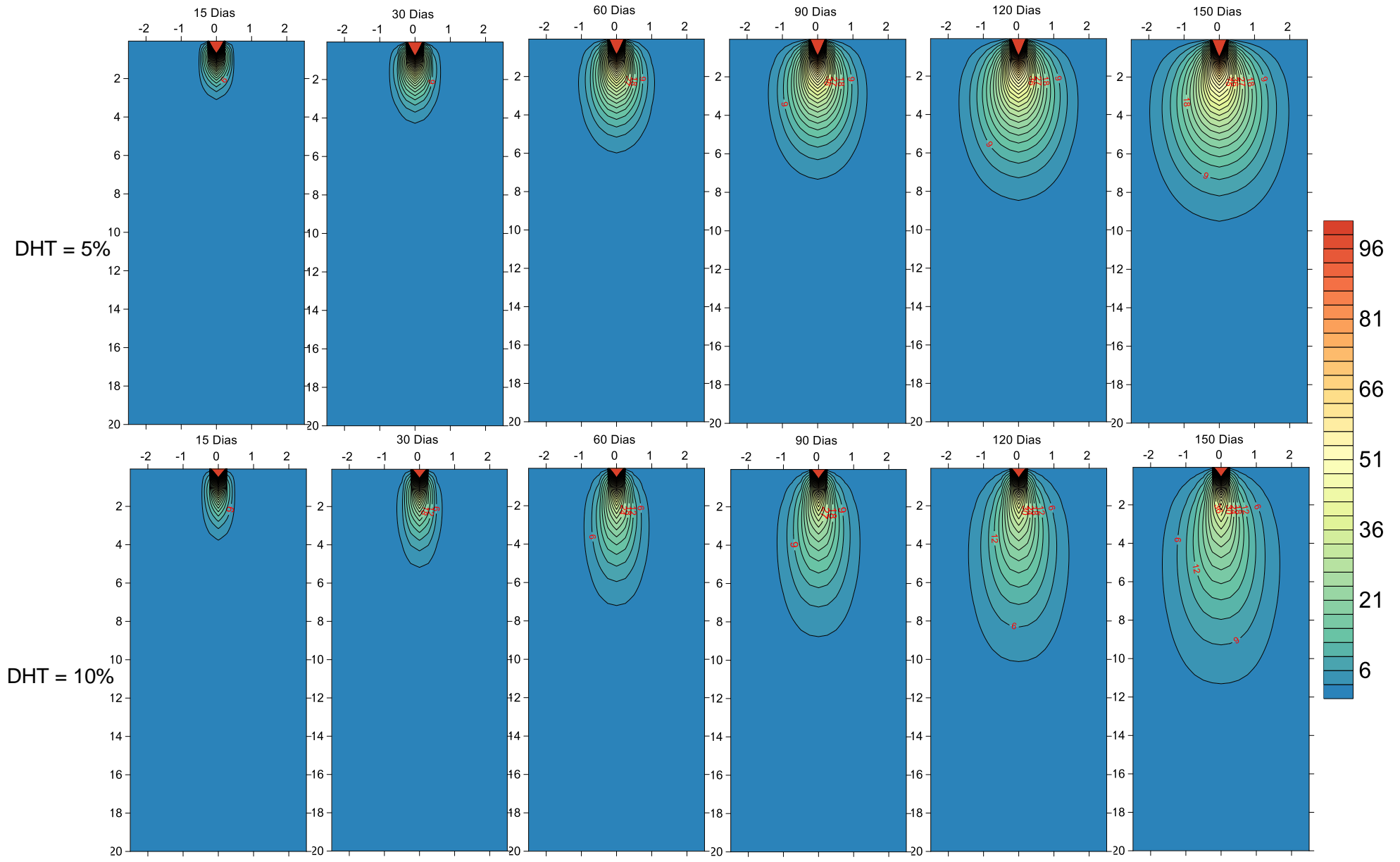


Figura 4.21 - Efeito da dispersão sobre pluma de contaminação.



5. CONCLUSÕES

O trabalho teve por contribuição fundamental fornecer uma ferramenta numérica que apresente resultados confiáveis e rápidos, do ponto de vista da previsibilidade de impactos ambientais do transporte de poluentes em corpos hídricos subterrâneos com reações químicas.

O Método dos Volumes Finitos, apresentou um desempenho bastante satisfatório na discretização do problema do transporte bidimensional reativo de poluentes em águas subterrâneas, o modelo matemático para previsão de contaminantes no lençol freático considerando o mecanismo de advecção, difusão, sorção e reações químicas, pôde ser resolvido com eficiência.

Os resultados apresentados foram comparados numericamente para um meio semi-infinito e apresentaram coerência física, passíveis de comparações numéricas e experimentais.

O fato deste modelo ter sido implementado computacionalmente na linguagem FORTRAN, torna-o facilmente utilizável e com grande portabilidade, sendo reconhecido por sua velocidade de processamento e por suas ótimas características no tratamento de equações. O custo computacional médio utilizado em cada simulação deste trabalho foi de 22 minutos, demonstrando excelentes resultados, visto que a previsibilidade da simulação foi de 180 dias em cada análise, desde o lançamento do poluente no aquífero.

Os estudos realizados mostram uma redução significativa do espalhamento da pluma de contaminação, tanto com o aumento do coeficiente de retardo (R), quanto o aumento do coeficiente de reação química (k) no meio poroso, influenciando diretamente no nível do impacto causado pela propagação de poluentes na zona saturada do solo.

Por outro lado, verificou-se o aumento do espalhamento da pluma do poluente, com o aumento da dispersividade (α), e a relação entre a dispersão hidrodinâmica longitudinal e transversal, conseqüentemente a parcela dispersiva torna-se muito importante no transporte de contaminantes em meios porosos.

As análises citadas anteriormente, podem ser agravadas quando a velocidade de fluxo (u) for elevada, ou seja, quanto maior a velocidade de escoamento no meio, maior a propagação do poluente na zona saturada do solo nos casos estudados, causando maiores impactos e consequências negativas no corpo hídrico subterrâneo.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

BRASIL, Ministério do Meio Ambiente. Conselho Nacional do Meio Ambiente – CONAMA. Resolução n. 396, de 03 de abril de 2008. Diário Oficial da União n. 066. Brasília-DF. 07/04/2008, p. 66-68.

Bai, B., Li, H., Xu, T., & Chen, X. (2015). Analytical solutions for contaminant transport in a semi-infinite porous medium using the source function method. *Computers and Geotechnics*, 69, 114-123.

BASTOS, Argemiro Midonês. Modelagem de Escoamento Ambiental como Subsídio à Gestão de Ecossistemas Aquáticos no Baixo Igarapé da Fortaleza - AP. 2010. 118 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós-graduação em Biodiversidade Tropical, Universidade Federal do Amapá - Unifap,, Macapá-ap, 2010

BEDIENT, P. B., RIFAI, H. S., NEWELL, C. J., 1994. *Ground Water Contamination: Transport and Remediation*. Prentice-Hall PTR, NEW JERSEY.

BEAR, J. *Dynamics of fluids in porous media*. U.S.A: American Elsevier Publishing Company, 764p. 1972.

BEAR, J., 1979. *Hydraulics of Groundwater*, McGraw-Hill, New York, pp. 268-269

BIRD, R. B., STEWART, W. E. AND LIGHTFOOT, E. N., (2004), *Fenômenos de Transporte (2ª Edição)*, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A., Rio de Janeiro – Brasil

BORDEN, R.C., GOMEZ, C. A. and BECKER, M. T., (1995). *Geochemical Indicators of Intrinsic Bioremediation, Groundwater*, v. 33, p. 180-189

BRATBERG, D., HOPKINS, L., (1995). Risk Based Corrective Action and Risk Assessment Procedures in the United States: a 1995 Survey. In: *Proceedings of the 1995 Petroleum Hydrocarbon and Organic Chemicals in Ground Water: Prevention, Detection, and Restoration Conference*, Houston, Texas. Nov. p. 25-31.

CARVALHO, C. A.. Caracterização Hidrogeológica da Bacia Hidrográfica do Campus da UFMG em Belo Horizonte. Dissertação (Mestrado em Engenharia Sanitária) – Escola de Engenharia, Universidade Federal de Minas Gerais, 1997.

CHAPELLE, F. H., (1996). Ground-water Microbiology and Geochemistry, John Wiley & Sons, Inc., New York, NY.

CRESPO, Luiz Claudio Alvarenga. Desenvolvimento e implementação do método difusional bidimensional transiente para solução numérica de problemas convectivos difusivos. 2006.

CHEN, Y. M.; ABRIOLO, L.; ALVAREZ, P.; ANID, P.; VOGEL, T. (1992). Modeling Transport and Bioremediation of Benzene and Toluene in Sandy Aquifer Material: Comparison with Experimental Measurements, Water Resour. Res., 28, n. 7: 1833-1847.

CLEMENT, T. P., GAUTAM, T. R., LEE, K. K., TRUEX, M. J. and DAVIS, G. B. (2004) Modeling of DNAPL-Dissolution, Rate-Limited Sorption and Biodegradation Reactions in Groundwater Systems. Bioremediation Journal. v. 8, p. 47-64

CORSEUIL, H. X., MARTINS, M. D. M., (1997). Contaminação de Águas Subterrâneas por Derramamentos de Gasolina: O Problema é Grave? In: Engenharia Sanitária e Ambiental, Vol. 2, No. 2, Abril/Junho.

CORDAZZO, J. Modelagem e simulação numérica do derramamento de gasolina acrescida de álcool em águas subterrâneas. 2000. 120f. 2000. Dissertação (Mestrado) – Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

CUSTÓDIO, Emílio; LLAMAS, Manuel Ramón. Hidrología Subterránea. Barcelona: Ediciones Omega. 1976. 1157p

ELIS, V. R. Geofísica aplicada ao estudo da poluição de solos e águas subterrâneas. V Escola de Verão de Geofísica-IAG/USP-São Paulo-SP, 2003.

ELBACHÁ, A.T. Estudo da Influência de Alguns Parâmetros no Transporte de Massa em Solos Argilosos. Rio de Janeiro, 1989.178 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Departamento de Engenharia Civil, PUC-RIO.

FAVERO, Jovani Luiz; MUNIZ, André Rodrigues; SANTOS, Ricardo Paupitz Barbosa dos. Análise teórico-experimental da dispersão de poluentes líquidos em solos. Eng. Sanit. Ambient, v. 12, n. 4, p. 410-416, 2007.

FORTUNA, Armando de Oliveira. Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos. 1.Ed. São Paulo: Edusp, 2000.

FERREIRA, J.P.C.L.. A Dispersão de Poluentes em Águas Subterrâneas (Análise Custo-Eficácia de Modelos Matemáticos e Ensaio de Traçadores para Realização de Estudos de Impacto Ambiental), Tese apresentada para concurso de obtenção de grau de especialista do LNEC, Lisboa (1996).

FETTER, C. W. (1993), Contaminant Hydrogeology. Macmillan Publishing Company, New York.

FERZIGER, J.H. ; PERIC, M.. Computacional Methods for Fluid Dynamics. Berlin, Ed.Springer – Verlag, 2a Ed., 2001.

FREEZE, R. A. e CHERRY, J. A. (1979), Groundwater. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, New Jersey.

GELHAR, L. W., WELTY C., REHFELDT K. R., 1992. A Critical Review of Data on Field Scale Dispersion in Aquifers. Water Resources Research, Vol. 28, No. 7, pp. 1955-1974.

KREYISZIG, E.. Advanced Engineering Mathematics, Wiley, 8ed., 1999.

LANGE, L.C.; SIMÕES, G.F.; FERREIRA, C.F.A.; COELHO, H.M.G. Estudo do transporte de contaminantes em meios porosos aplicado a aterros de disposição de resíduos sólidos urbanos. In: CASTILHOS JR. A.B.; LANGE, L.C.; GOMES, L.P.; PESSIN, N. (Org.). Alternativas de Disposição de Resíduos Sólidos Urbanos para Pequenas Comunidades. Rio de Janeiro: RIMa/ABES, 2002, v. 1, p. 85-92

LOPES, David Franco. Transporte De Contaminantes Em Meios Porosos: Aplicação Da Técnica Da Transformada Integral - Belém, 2005. xvii, 116p.; il., Dissertação, (Mestrado) – Departamento de Engenharia Química e de Alimentos – Centro Tecnológico – Universidade Federal do Pará.

MALISKA, Clovis R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional: fundamentos e coordenadas generalizadas. Livros Técnicos e Científicos, 1994.

MALISKA, Clovis R. Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional. ISBN 8521613962. 2ª Edição–2004. LTC, 1995.

MITCHELL, J.K. Conduction phenomena: from theory to geotechnical practice. 31st. [s.l.]: [s.n.], 1991

NOBRE, M.M.M. Estudo experimental do transporte de poluentes em solos argilosos compactados. Rio de Janeiro, 1987. 214p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil), Departamento de Engenharia Civil, PUC-RIO.

OLIVEIRA, Jacqueline Barbosa de Estudo Paramétrico da Contaminação no Entorno de um Aterro Sanitário / Jacqueline Barbosa de Oliveira – Salvador, 2009. 85f.

ROCHA, Rodrigo P. A.; CRUZ, Manuel E. A Hybrid Solution for Simulation of 2-D Contaminant Transport in Heterogeneous Subsurface System. In: 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, 2001, Rio de Janeiro. Anais.[s.n.], 2001.

Russo, A., Johnson, G. R., Schnaar, G., & Brusseau, M. L. (2010). Nonideal transport of contaminants in heterogeneous porous media: 8. Characterizing and modeling asymptotic contaminant-elution tailing for several soils and aquifer sediments. *Chemosphere*, 81(3), 366-371.

SABAHI, M. Salman; MONTAZERI, Hanif; SLEEP, Brent. Practical finite analytic methods for simulation of solute transport with scale-dependent dispersion under advection-dominated conditions. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 83, p. 799-808, 2015.

SMITH, J.; SMITH, P. How to develop a model. Oxford University Press. 125p., 2007.

SHEPARD, T. A. e CHERRY, J. A. (1980), Contaminant Migration in Seepage from Uranium Mill Tailings Impoundments, an Overview, Proceedings of the Third Symposium on Uranium Mill Tailings Management, Colorado State University.

PATANKAR, Suhas. Numerical heat transfer and fluid flow. CRC press, 1980.

PORTA, G. M.; CERIOTTI, G.; THOVERT, J.-F. Comparative assessment of continuum-scale models of bimolecular reactive transport in porous media under pre-asymptotic conditions. *Journal of contaminant hydrology*, v. 185, p. 1-13, 2016.

TELLES, W. R. Simulação do Transporte Bidimensional Horizontal de Substância Conservativa. 2009. Tese de Doutorado. Dissertação de Mestrado, IPRJ-UERJ, 2009. 50.

TUCCI, C. E. M. Modelos hidrológicos. Porto Alegre: ed. Universidade/UFRGS/Associação Brasileira de Recursos Hídricos, 1998

VERSTEEG, H.K ; MALALASEKERA, W. An Introduction to Computational Fluid Dynamics. London: Prentice Hall, 1995.

WEBER Jr, W. J., MCGINLEY, P. M., and LYNN, E. K., 1991. Sorption Phenomena in Subsurface Systems: Concepts, Models and Effects on Contaminant Fate and Transport. *Water Res.*, Vol. 25, No. 5, pp. 499-528.

WIEDEMEIER, T. H., SWANSON, M. A., WILSON, J. T., KAMPBELL, D. H., MILLER, R. N. and HANSEN, J. (1996) Approximation of Degradation Rate Constants for Monoaromatic Hydrocarbons (BTEX) in Groundwater. *Groundwater Monitoring and Remediation*, v. 16, p. 186-194.

WIEDEMEIER, T. H., WILSON, J. T., KAMPBELL, D. H., MILLER, R. N. and HANSEN, J., (1995). Technical Protocol for Implementing Intrinsic Remediation with Long-term Monitoring for Natural Attenuation of Fuel Contamination Dissolved in Groundwater. V 1 e 2, San Antonio, Texas: Air Force Center for Environmental Excellence, Technology Transfer Division, Brooks AFB.

VASCONCELOS, Anelisa. Transporte de contaminantes em meios porosos saturados e não saturados. Estudo de caso: vazamento de gasolina. 2008.

YONG, R. N., MOHAMED, A. M. O. e WARKENTIN, B. P. (1992), *Principles of Contaminant Transport in Soils*. Elsevier, Amsterdam – London – New York-Tokyo.