



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CAMPUS I - CAMPINA GRANDE
PRÓ-REITORIA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA AMBIENTAL
CURSO DE DOUTORADO EM ENGENHARIA AMBIENTAL**

ANDRÉ LUIZ DA SILVA

**DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE PARA O ESTUDO DA
DISPERSÃO TRIDIMENSIONAL TRANSIENTE DE POLUENTES EM
AQUÍFEROS UTILIZANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

**CAMPINA GRANDE - PB
2024**

ANDRÉ LUIZ DA SILVA

**DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE PARA O ESTUDO DA
DISPERSÃO TRIDIMENSIONAL TRANSIENTE DE POLUENTES EM
AQUÍFEROS UTILIZANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)**

Tese apresentada em cumprimento às exigências do Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia (PPGCTA) da Universidade Estadual da Paraíba como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

Área de concentração: Tratamento de Águas Residuárias e Resíduos Sólidos.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira

**CAMPINA GRANDE - PB
2024**

É expressamente proibido 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 do trabalho.

S586d Silva, André Luiz da.

Desenvolvimento de um software para o estudo da dispersão tridimensional transiente de poluentes em aquíferos utilizando fluidodinâmica computacional (CFD) [manuscrito] / André Luiz da Silva. - 2024.

166 p. : il. colorido.

Digitado. Tese (Doutorado em Engenharia Ambiental) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2024. "Orientação : Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira, Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental - CCT. "

1. Dispersão de poluentes. 2. Volumes finitos. 3. Modelagem matemática. 4. Simulação numérica. 5. Interface gráfica. I. Título

21. ed. CDD 628

ANDRÉ LUIZ DA SILVA

DESENVOLVIMENTO DE UM SOFTWARE PARA O ESTUDO DA
DISPERSÃO TRIDIMENSIONAL TRANSIENTE DE POLUENTES EM
AQUÍFEROS UTILIZANDO FLUIDODINÂMICA COMPUTACIONAL (CFD)

Tese apresentada em cumprimento às exigências ao Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia (PPGCTA) da Universidade Estadual da Paraíba como requisito parcial à obtenção do título de Doutor em Engenharia Ambiental.

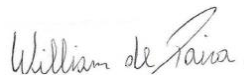
Área de concentração: Tratamento de Águas Residuárias e Resíduos Sólidos.

Aprovado em: 29/08/2024.

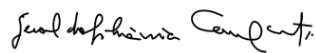
BANCA EXAMINADORA



Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira (Orientador)
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. William de Paiva
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Profa. Dra. Geralda Gilvânia Cavalcante
Universidade Estadual da Paraíba (UEPB)



Prof. Dr. José Luís Gomes Marinho
Universidade Federal de Alagoas (UFAL)



Prof. Dr. Severino Rodrigues Farias Neto
Universidade Federal de Campina Grande (UFCG)

AGRADECIMENTOS

Um agradecimento especial à minha mãe, cujo amor, força e encorajamento foram a base do meu progresso. Sua presença constante e apoio incondicional foram minha maior fonte de inspiração.

Um agradecimento à minha família pelo constante apoio cuja presença e suporte foram essenciais em cada passo desta jornada. Agradeço a paciência e compreensão durante minhas ausências devido ao doutorado.

Ao Professor Fernando, minha gratidão é profunda. A sua dedicação e paixão pela ciência servem como um farol para todos que têm o privilégio de aprender sob sua orientação. Sua sabedoria, paciência e apoio constante foram cruciais para a conclusão desta tese. Mais do que um orientador, se tornou um verdadeiro amigo, e sei que nossa amizade continuará além desta jornada acadêmica.

Meus agradecimentos a todos os professores do doutorado pela dedicação e conhecimento compartilhado.

Agradeço ao meu amigo e irmão, Márcio Rennan, pela amizade inestimável durante toda a vida. Seu apoio fez toda a diferença.

Agradeço às Marias, Ana e Esther, pela amizade sincera ao longo de toda a jornada.

Aos amigos Dayvison Rodrigues e Gustavo Correia, meu sincero agradecimento pelo apoio.

Agradeço aos gestores do IFPB Campus Santa Rita, Sabiniano Araújo, Inakã Barreto e Dayvison Rodrigues, pela concessão da licença para cursar o doutorado. Estendo minha saudação a todos os colegas do Instituto Federal da Paraíba pelo apoio e incentivo.

RESUMO

A crescente preocupação com a contaminação das águas subterrâneas devido a atividades humanas exige o desenvolvimento de modelos capazes de prever a dispersão de poluentes nesses ambientes. Este trabalho aborda a modelagem matemática e a simulação numérica da propagação tridimensional e transiente de poluentes em aquíferos, focando nos mecanismos de transporte e transformação dos contaminantes. Foi implementado um modelo matemático utilizando o método dos volumes finitos para a discretização das equações de conservação e foi desenvolvido um modelo computacional com interface gráfica. A pesquisa incluiu análise de convergência da malha e sensibilidade do modelo para avaliar a estabilidade e precisão, comparando os resultados com a literatura existente. Cenários realísticos de vazamento de benzeno e xileno em aquíferos arenosos e sedimentares foram simulados sob diferentes condições de contorno, refletindo situações de vazamento de tanques de combustível. Os resultados indicaram que o benzeno apresenta maior mobilidade em comparação com o xileno em todas as situações analisadas. Além disso, a pluma de poluentes atinge um alcance maior em aquíferos arenosos, enquanto em aquíferos sedimentares a propagação é mais limitada e sujeita a variações devido às heterogeneidades litológicas. A interface gráfica desenvolvida facilitou a inserção de dados e visualização dos resultados, tornando o modelo acessível a uma ampla gama de usuários, incluindo não-especialistas. Este estudo culmina em uma ferramenta científica robusta, capaz de simular cenários realistas de contaminação por hidrocarbonetos em diferentes tipos de aquíferos, proporcionando uma análise detalhada dos processos envolvidos e contribuindo para o avanço das ciências ambientais.

Palavras-Chave: dispersão de poluentes; volumes finitos; modelagem matemática; simulação numérica; interface gráfica

ABSTRACT

The growing concern about groundwater contamination due to human activities requires the development of models capable of predicting the dispersion of pollutants in these environments. This work addresses the mathematical modeling and numerical simulation of the three-dimensional and transient propagation of pollutants in aquifers, focusing on the mechanisms of transport and transformation of contaminants. A mathematical model was implemented using the finite volume method for the discretization of the conservation equations and a computational model with a graphical interface was developed. The research included mesh convergence analysis and model sensitivity to assess stability and accuracy, comparing the results with the existing literature. Realistic scenarios of benzene and xylene leakage in sandy and sedimentary aquifers were simulated under different boundary conditions, reflecting situations of fuel tank leakage. The results indicated that benzene presents greater mobility compared to xylene in all situations analyzed. Furthermore, the pollutant plume reaches a greater range in sandy aquifers, while in sedimentary aquifers the propagation is more limited and subject to variations due to lithological heterogeneities. The graphical interface developed facilitated data entry and visualization of results, making the model accessible to a wide range of users, including non-specialists. This study culminates in a robust scientific tool capable of simulating realistic scenarios of hydrocarbon contamination in different types of aquifers, providing a detailed analysis of the processes involved and contributing to the advancement of environmental sciences.

Keywords: pollutant dispersion; finite volumes; mathematical modeling; numerical simulation; graphical interface

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

Figura 3.1 – Diagrama conceitual dos principais tipos de aquíferos e a relação de suas elevações da superfície até o lençol freático	22
Figura 3.2 – Ilustração do Transporte de poluentes em meios porosos.....	24
Figura 3.3 – Mecanismos do transporte e transformação de contaminantes utilizados na modelagem.....	26
Figura 3.4 – Gráfico representativo do transporte advectivo	28
Figura 3.5 – Ilustração esquemática dos processos de Sorção.....	31
Figura 3.6 – Discretização do domínio tridimensional MVF.....	35
Figura 3.7 – Formulações de interpolação no tempo.....	37
Figura 4.1 – Representação da geometria tridimensional da discretização espacial com as condições de contorno.	45
Figura 4.2 – Domínio tridimensional com 27 tipos de volumes de controle.....	48
Figura 4.3 – Volume de controle do Canto Superior Esquerdo da Frente	54
Figura 4.4 – Injeção do Poluente para o Fluxo Prescrito	68
Figura 4.5 – Diagrama do programa para cálculo das concentrações por Volumes Finitos.....	71
Figura 5.1 – Concentração de Poluente ao Longo do Perfil Vertical para Diferentes Malhas e Extrapolação	90
Figura 5.2 – Gráfico de Efeito Principal da Análise de Sensibilidade	95
Figura 5.3 – Diagrama de Pareto com interações das variáveis	98
Figura 5.4 – Distribuição da CMEDIA em Função da Velocidade: Análise com Variação da Reação Química [A] e do Tempo [B].....	97
Figura 5.5 – Plumas da concentração de benzeno em um aquífero arenoso ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias.	102
Figura 5.6 – Distribuição das Concentrações: A) Coordenada (0,0, z); B) Coordenada (10,10, z); C) Coordenada (20,20, z); D) Coordenada (30,30, z). Perfis longitudinais: E) Coordenada (x,10,10); F) Coordenada (x,10,20); G) Coordenada (x,10,30); H) Coordenada (x,10,40)	105

Figura 5.7 – Perfis de concentração do benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis verticais específicos. Perfil [A]: Coordenada (0,0, z), concentração na origem. Perfil [B]: Coordenada (10,10, z), concentração a 10 metros da origem. Perfil [C]: Coordenada (20,20, z), concentração a 20 metros da origem. Perfil [D]: Coordenada (30,30, z), concentração a 30 metros.106

Figura 5.8 – Perfis de concentração de benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis longitudinais em diferentes profundidades: Perfil [A]: Coordenada (x,10,10), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=10. Perfil [B]: Coordenada (x,10,20), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=20. Perfil [C]: Coordenada (x,10,30), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=30. Perfil [D]: Coordenada (x,10,40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40.....107

Figura 5.9 – Plumas da concentração de benzeno em um aquífero sedimentar ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias.....111

Figura 5.10 – Plumas da concentração do xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias114

Figura 5.11 – Plumas da concentração do xileno em um aquífero sedimentar ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias117

Figura 5.12 – Perfis de concentração de benzeno em diferentes tipos de aquífero ao longo do tempo: Perfil [A]: Coordenada (0, 0, z), concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. Perfil [B]: Coordenada (0, 0, z), concentração ao longo da profundidade,

comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias. Perfil [C]: Coordenada $(x, 10, 30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. Perfil [D]: Coordenada $(x, 10, 30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias.120

Figura 5.13 – Perfis de concentração de xileno em diferentes tipos de aquífero ao longo do tempo: Perfil [A]: Coordenada $(0, 0, z)$, concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. Perfil [B]: Coordenada $(0, 0, z)$, concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias. Perfil [C]: Coordenada $(x, 10, 30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. Perfil [D]: Coordenada $(x, 10, 30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias..... 121

Figura 5.14 – Perfis de concentração de benzeno e xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo: Perfil [A]: Coordenada $(30, 30, z)$, concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. Perfil [B]: Coordenada $(30, 30, z)$, concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias. Perfil [C]: Coordenada $(x, 10, 40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. Perfil [D]: Coordenada $(x, 10, 40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias.....123

Figura 5.15 – Plumas concentração de benzeno em um aquífero arenoso ao longo do tempo sob condição de fluxo prescrito: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias125

Figura 5.16 – Perfis de concentração do benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis verticais específicos. Perfil [A]: Coordenada $(0,0, z)$, concentração na origem. Perfil [B]: Coordenada $(10,10, z)$, concentração a 10 metros da origem. Perfil [C]:

Coordenada (20,20, z), concentração a 20 metros da origem. Perfil [D]:
Coordenada (30,30, z), concentração a 30 metros da origem.....128

Figura 5.17 – Perfis de concentração de benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis longitudinais em diferentes profundidades: Perfil [A]: Coordenada (x,10,30), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=30. Perfil [B]: Coordenada (x,10,40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40. Perfil [C]: Coordenada (x,10,50), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=50. Perfil [D]: Coordenada (x,10,60), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=60.....129

Figura 5.18 – Plumas concentração do xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo sob condição de fluxo prescrito: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias.....133

Figura 5.19 – Perfis de concentração do xileno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis verticais específicos. Perfil [A]: Coordenada (0,0, z), concentração na origem. Perfil [B]: Coordenada (10,10, z), concentração a 10 metros da origem. Perfil [C]: Coordenada (20,20, z), concentração a 20 metros da origem. Perfil [D]: Coordenada (30,30, z), concentração a 30 metros da origem.....135

Figura 5.20 – Perfis de concentração de xileno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis longitudinais em diferentes profundidades: Perfil [A]: Coordenada (x,10,30), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=30. Perfil [B]: Coordenada (x,10,40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40. Perfil [C]: Coordenada (x,10,50), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=50. Perfil [D]: Coordenada (x,10,60), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=60.....136

Figura 5.21 – Perfis de concentração de benzeno e xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo (fluxo prescrito): Perfil [A]: Coordenada (30, 30, z), concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. Perfil [B]: Coordenada (30, 30, z), concentração ao longo da

profundidade, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias. Perfil [C]: Coordenada $(x, 10, 40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. Perfil [D]: Coordenada $(x, 10, 40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias.138

Figura 5.22 – Tela de Configuração da Simulação na Interface Gráfica.....143

LISTA DE TABELAS

Tabela 4.1 – Classificação dos Volumes de Controle.....	49
Tabela 4.2 – Malhas utilizadas na análise de convergência.....	76
Tabela 4.3 – Parâmetros e seus respectivos níveis no planejamento fatorial..	76
Tabela 4.4 – Variáveis, níveis e condições utilizadas no planejamento experimental simulado.	77
Tabela 4.5 – Estimativas da Porosidade Efetiva.....	79
Tabela 4.6 – Valores usuais para a densidade de aquíferos.....	80
Tabela 4.7 – Coeficientes de Partição Carbono-Água Típicos	80
Tabela 4.8 – Valores para a Fração de Carbono Orgânico em Solos.....	81
Tabela 4.9 – Valores Típicos para a Meia-Vida dos Contaminantes.....	81
Tabela 4.10 – Características dos Cenários de Simulação de Dispersão de Poluentes em Diferentes Condições.	83
Tabela 5.1 – Valores de Concentração (mg/L) Coletados Verticalmente.....	88
Tabela 5.2 – Resultados da Análise de Convergência e Índice de Convergência de Malha (ICM).....	89
Tabela 5.3 – Valores de Concentração (mg/L) Coletados Longitudinalmente..	91
Tabela 5.4 – Estatísticas dos Parâmetros de Convergência.....	92
Tabela 5.5 – Fluxos mássicos ($kg/m^2.dia$) coletados verticalmente.....	93
Tabela 5.6 – Estatísticas dos Parâmetros de Convergência Condição de Contorno Tipo II.....	94
Tabela 5.7 – Análise de Variância (ANOVA) dos Efeitos sobre a (CMEDIA). ..	96
Tabela 5.8 – Cenário 1 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional	101
Tabela 5.9 – Cenário 2 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional	110
Tabela 5.10 – Cenário 3 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional.	113
Tabela 5.11 – Cenário 4 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional	116
Tabela 5.12 – Cenário 1 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional	124
Tabela 5.13 – Cenário 2 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional	132

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABAS – Associação Brasileira de Águas Subterrâneas

ASME – American Society of Mechanical Engineers

ANOVA – Análise de Variância

BTEX – Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e Xileno

CC – Condição de Contorno

CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo

CFD – *Computational Fluid Dynamics* (Dinâmica dos Fluidos Computacional)

CMEDIA - Concentração Média (mg/L)

DNAPL – *Dense Non-Aqueous Phase Liquid* (Líquido de Fase Não Aquosa Densa)

EDP – Equação Diferencial Parcial

GUI - *Graphical User Interface* (Interface Gráfica do Usuário)

ICM - Índice de Convergência de Malha

MVF – Método dos Volumes Finitos

MDF – Método das Diferenças Finitas

MEF – Método dos Elementos Finitos

VC – Volume de Controle

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Matemáticos

∂	Derivada parcial	-
Δt	Intervalo de tempo	s
$\Delta x \Delta y \Delta z$	Intervalos espaciais nas direções de x, y e z	m
\int	Integral	-
∇	Operador gradiente	-

Propriedades e Parâmetros Físicos

ε	Porosidade efetiva do solo	-
ρ	Densidade do solo	g/cm^3
ρ_b	Densidade de matriz sólida	g/cm^3
V_x	Velocidade intersticial do fluido	m/dia
μ	Viscosidade cinemática	m^2/s
ω	Coefficiente de tortuosidade	-

Coefficientes e Constantes

D_o	Coefficiente de difusão	m^2/dia
$D_{hx} / D_{hy} / D_{hz}$	Dispersão hidrodinâmica tridimensional	m^2/dia
u, v, w	Componentes vetoriais tridimensionais	m/dia
k_d	Coefficiente de distribuição da sorção linear	cm^3/g
K_{oc}	Coefficiente de partição orgânico-carbono	cm^3/g
F_{oc}	Fração de matéria orgânica do solo	-
R	Coefficiente de retardo	-
k	Constante de reação	dia^{-1}
K	Condutividade hidráulica	m/dia

Concentrações

C_0	Concentração inicial	mg/L
C/C_0	Concentração normalizada	mg/L
\bar{C}	Concentração sorvida	mg/mg
C_p	Concentração em um determinado ponto P	mg/L
C_p^o	Concentração no intervalo de tempo anterior	mg/L

Números Adimensionais

R_e	Número de Reynolds	-
P_e	Número de Peclet	-

Coordenadas e Dimensões

L	Dimensões do domínio	m
N	Número de elementos na malha do modelo	-

Coefficientes Associados

e, w, n, s, f, b	Faces topológicas tridimensionais	-
A_p	Coefficiente associado ao ponto central	-
A_e	Coefficiente associado a face leste (<i>east</i>)	-
A_w	Coefficiente associado a face oeste (<i>west</i>)	-
A_n	Coefficiente associado a face norte (<i>north</i>)	-
A_s	Coefficiente associado a face sul (<i>south</i>)	-
A_f	Coefficiente associado a face frontal (<i>front</i>)	-
A_b	Coefficiente associado a face traseira (<i>back</i>)	-
B	Termo Fonte	-

LISTA DE QUADROS

Quadro 1 - Pseudocódigo do cálculo da ordem aparente.....	74
Quadro 2 - Pseudocódigo para simulação das fases de vazamento do fluxo prescrito.....	85

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	19
2	OBJETIVOS	20
2.1	Objetivo Geral	20
2.2	Objetivos Específicos	20
3	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	21
3.1	Águas Subterrâneas e Aquíferos	21
3.2	Poluição de Aquíferos	23
3.3	Mecanismos de Transporte e Transformação dos Poluentes	25
3.3.1	Advecção	26
3.3.2	Dispersão Hidrodinâmica	28
3.3.3	Sorção e Retardamento	31
3.3.4	Reações Químicas e Biológicas	33
3.4	Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)	34
3.4.1	Método dos Volumes Finitos	34
3.4.2	Formulação no tempo	36
3.4.3	Condições de Contorno	38
3.4.4	Condições Iniciais	39
3.5	Estado da Arte	40
4	METODOLOGIA	43
4.1	Modelagem do Domínio	43
4.2	Discretização da Equação Geral	46
4.2.1	Modelagem do Transporte Tridimensional de Poluentes	46
4.2.2	Solução numérica tridimensional em coordenadas cartesianas	48
4.2.3	Aplicação do Método dos Volumes Finitos	49
4.3	Função de Interpolação para Termos Advectivos	50

4.3.1	<i>Funções de Interpolação para termos Difusivos</i>	51
4.4	Equação para o volume do canto superior direita da frente.	56
4.4.1	<i>Equação para o VC do canto inferior direito da frente.</i>	56
4.4.2	<i>Equação para o VC do canto inferior esquerdo da frente.</i>	57
4.4.3	<i>Equação para o VC do canto inferior direito da trás.</i>	57
4.4.4	<i>Equação para o VC do canto superior direito de trás.</i>	58
4.4.5	<i>Equação para o VC do canto superior esquerdo de trás.</i>	58
4.4.6	<i>Equação para o VC inferior esquerdo de trás.</i>	59
4.4.7	<i>Equação para o VC na face norte</i>	59
4.4.8	<i>Equação para o VC na face leste</i>	60
4.4.9	<i>Equação para o VC na face oeste</i>	60
4.4.10	<i>Equação para o VC na face sul</i>	61
4.4.11	<i>Equação para o VC na face atrás</i>	61
4.4.12	<i>Equação para o VC na aresta superior da frente</i>	62
4.4.13	<i>Equação para o VC na aresta inferior da frente</i>	62
4.4.14	<i>Equação para o VC na aresta superior da direita</i>	63
4.4.15	<i>Equação para o VC na aresta inferior da direita</i>	63
4.4.16	<i>Equação para o VC na aresta superior da esquerda</i>	64
4.4.17	<i>Equação para o VC na aresta inferior da esquerda</i>	64
4.4.18	<i>Equação para o VC na aresta superior de trás</i>	65
4.4.19	<i>Equação para o VC na aresta inferior de trás</i>	65
4.4.20	<i>Equação para o VC na aresta vertical direita da frente</i>	66
4.4.21	<i>Equação para o VC na aresta vertical esquerda da frente</i>	66
4.4.22	<i>Equação para o VC na aresta vertical esquerda de trás</i>	67
4.4.23	<i>Equação para o VC na aresta vertical esquerda de frente</i>	67
4.5	Discretização para o Fluxo Prescrito (CC de Segundo Tipo)	68
4.6	Método de Solução do Sistema de Equações Discretizadas	70

4.7	Análise de Convergência da Malha	72
4.8	Planejamento da Análise de Sensibilidade Multifatorial	76
4.9	Definição dos Parâmetros na Dinâmica de Contaminantes.....	78
4.9.1	<i>Porosidade – ϵ</i>	79
4.9.2	<i>Fator de Retardo – R</i>	79
4.9.3	<i>Gradiente Hidráulico</i>	81
4.9.4	<i>Tempo de Meia Vida do Solute Dissolvido – $t_{1/2}$</i>	81
4.10	<i>Simulações Realísticas de Litologia com Compostos Orgânicos.</i> ..	82
4.10.1	<i>Cenários das Simulações Realísticas para Fluxo Prescrito.</i>	84
4.11	<i>Metodologia para Construção da Interface Gráfica</i>	86
4.11.1	<i>Etapas de Desenvolvimento da Interface Gráfica:</i>	86
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	88
5.1	Análise de Convergência da Malha	88
5.2	Resultados da Análise de Sensibilidade	95
5.3	Cenários de Dispersão – Condição de Contorno Tipo I.....	101
5.3.1	<i>Cenário 1 – Benzeno em Aquífero Arenoso</i>	101
5.3.2	<i>Cenário 2 – Benzeno em Aquífero Sedimentar</i>	110
5.3.3	<i>Cenário 3 – Xileno em Aquífero Arenoso</i>	113
5.3.4	<i>Cenário 4 – Xileno em Aquífero Sedimentar</i>	116
5.4	Comparações dos Cenários	119
5.4.1	<i>Comparação por Tipo de Aquífero</i>	119
5.4.2	<i>Comparação por Tipo de Contaminante</i>	122
5.5	Cenário de dispersão – Condição de Contorno Tipo II.....	124
5.5.1	<i>Cenário 1 – Benzeno em Aquífero Arenoso (Fluxo Prescrito)</i>	124
5.5.2	<i>Cenário 1 – Xileno em Aquífero Arenoso (Fluxo Prescrito)</i>	132
5.6	Implementação da Interface Gráfica	140
5.6.1	<i>Estrutura da Interface Gráfica</i>	140

5.6.2 Inserir os Parâmetros da Litologia	140
5.6.3 Inserir a Reação Química	140
5.6.4 Inserção da Dispersividade	140
5.6.5 Geometria do Modelo	141
5.6.6 Malha do Modelo	141
5.6.7 Escolha da Condições de Contorno	141
5.7 Resultados da GUI	141
6 CONCLUSÃO	144
REFERÊNCIAS	146
APÊNDICE A: ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS CENÁRIOS	153
APÊNDICE B: CONVERGÊNCIA DA CC TIPO I E II	155
APÊNDICE C: DADOS CENÁRIOS DA CC TIPO I	156
APÊNDICE D: DADOS CENÁRIOS DA CC TIPO II	157
APÊNDICE E: GUIA DO USUÁRIO PARA A GUI	158
APÊNDICE F: PARÂMETRO DA POROSIDADE NA GUI	159
APÊNDICE G: INSERÇÃO DO PARÂMETRO FOC NA GUI	160
APÊNDICE H: CÁLCULO DA VELOCIDADE NA GUI	161
APÊNDICE I: INSERÇÃO DO TEMPO DE MEIA VIDA NA GUI	162
APÊNDICE J: CÁLCULO DA DISPERSIVIDADE NA GUI	163
APÊNDICE K: INSERÇÃO DA GEOMETRIA DO MODELO	164
APÊNDICE L: INSERÇÃO DA MALHA NO MODELO	165
APÊNDICE M: REGISTRO DO PROGRAMA DE COMPUTADOR	166

1 INTRODUÇÃO

Com a crescente dependência dos recursos hídricos para atender às necessidades domésticas, agrícolas e industriais, o acesso à água subterrânea limpa é um tema de preocupação em todo o mundo devido às atividades antropogênicas liberarem uma variedade de poluentes que eventualmente encontram seu caminho para os aquíferos e contaminam as águas subterrâneas.

Notadamente com a pressão na disponibilidade hídrica superficial e o uso acentuado das captações subterrâneas para abastecimento, cresce o risco de contaminação das unidades aquíferas, desta forma, se faz necessário integrar as intervenções antrópicas com os atributos naturais para avaliar o potencial de contaminação (COSTA *et al.*, 2022).

Exemplos de fontes poluidoras de águas subterrâneas incluem lixiviação de aterros não controlados contendo resíduos industriais e domésticos, infiltração de pesticidas e fertilizantes de áreas agrícolas, e vazamento de diversos contaminantes orgânicos. É possível mencionar ainda o vazamento ou derrame de hidrocarbonetos derivados do petróleo, também responsável por contaminações de aquíferos em todo mundo (FETTER *et al.*, 2017).

A necessidade de avaliar a propagação de poluentes e a remediação natural levou ao desenvolvimento de modelos matemáticos e computacionais para simular o transporte reativo de múltiplas espécies. Esses modelos, amplamente utilizados hoje, baseiam-se na conservação de massa, momento e energia, e requerem a solução de equações diferenciais parciais com condições de contorno bem definidas, conforme observado por (SHARMA *et al.*, 2020).

A aplicação de métodos numéricos no estudo da dispersão de poluentes em águas subterrâneas é fundamental para entender as complexas dinâmicas desses sistemas. A dispersão envolve várias variáveis, como as propriedades do poluente, características do aquífero, interação entre poluente e água subterrânea, e fatores climáticos.

Nesse contexto, este trabalho propõe a implementação de um modelo matemático e o desenvolvimento computacional tridimensional com interface gráfica para a simulação numérica da propagação transiente de poluentes na zona saturada do solo.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

Desenvolver um código computacional com interface gráfica utilizando a linguagem de programação Python para simular e analisar o comportamento da dispersão tridimensional transiente de poluentes em aquíferos, modelando as variáveis envolvidas para a avaliação de cenários de contaminação e previsão do comportamento de diferentes poluentes e tipos de aquíferos.

2.2 Objetivos Específicos

1. Desenvolver um modelo matemático baseado nas equações de conservação e transporte para determinar os perfis de concentração em um aquífero;
2. Discretizar as equações do modelo matemático utilizando o Método dos Volumes Finitos e Implementar a metodologia de resolução na linguagem de programação Python;
3. Analisar a convergência da malha no modelo numérico para garantir a precisão e a estabilidade das simulações;
4. Estudar a influência dos parâmetros físicos e químicos no processo de transporte e transformação em aquíferos;
5. Comparar os resultados obtidos nas simulações com dados da literatura, avaliando a sensibilidade dos fenômenos físicos e a consistência dos parâmetros utilizados.

3 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

3.1 Águas Subterrâneas e Aquíferos

Água subterrânea é toda a água que ocorre abaixo da superfície da Terra, preenchendo os poros ou vazios intergranulares das rochas sedimentares, ou as fraturas, falhas e fissuras das rochas compactas, e que sendo submetida a duas forças (de adesão e de gravidade) desempenha um papel essencial na manutenção da umidade do solo, do fluxo dos rios, lagos e brejos. As águas subterrâneas cumprem uma fase do ciclo hidrológico, uma vez que constituem uma parcela da água precipitada (ABAS, 2022).

Segundo BEAR & CHENG (2010), o solo abaixo da superfície pode ser dividido verticalmente em várias zonas essencialmente horizontais, de acordo com a proporção do espaço vazio que é preenchido com água, compreendemos duas zonas principais:

- I. Zona não saturada (também referido como zona de aeração, ou zona vadosa), onde apenas parte do espaço vazio é ocupado por água, sendo o restante ocupado por uma fase gasosa.
- II. Zona saturada, em que todo o espaço vazio é ocupado por água.

Um aquífero foi definido pelo U.S. Geological Survey como uma formação, grupo de formações, ou parte de uma formação geológica que contém suficiente saturação material permeável para fornecer quantidades significativas de água subterrânea (MALIVA, 2016).

Uma definição clássica e conceitual de Todd (1959), apresenta os aquíferos como uma formação geológica porosa que (1) contém água em plena saturação (ou seja, todo o espaço vazio interconectado é preenchido com água) e (2) permite que a água se mova através dos poros em condições normais. Isso significa que a designação de uma formação geológica como aquífero depende de sua capacidade de armazenar e transmitir água para formações vizinhas.

Formações são consideradas aquíferos quando possuem porosidade e permeabilidade suficientes para permitir a movimentação de água subterrânea em volumes economicamente viáveis. Outra explicação, apresentada por ABAS (2022), corrobora as formulações anteriores, definindo um aquífero como um material geológico capaz de armazenar e transmitir a água armazenada. Assim,

uma litologia só será aquífera se, além de ter seus poros saturados (cheios) de água, permitir a transmissão da água armazenada.

Os aquíferos também diferem em seu grau de confinamento e sua relação com o lençol freático, essencialmente existem três tipologias mais aceitas (MIDÕES *et al.*, 2001; MALIVA, 2016).

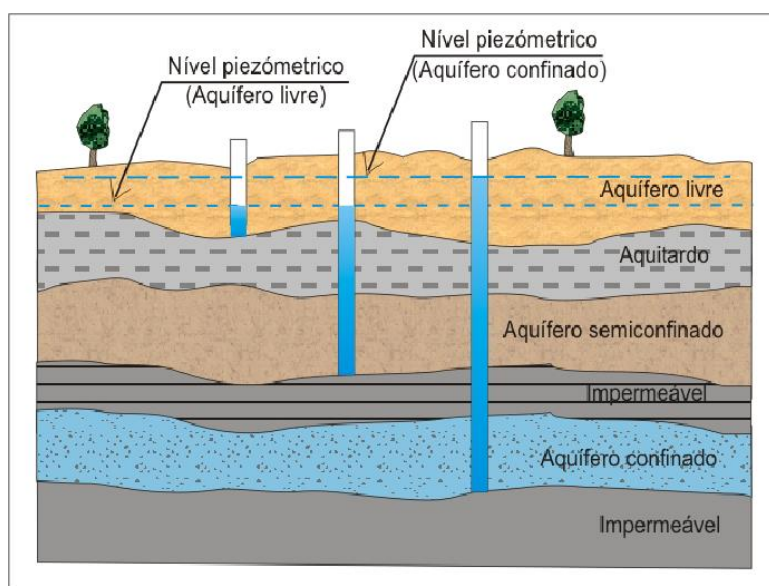
(1) Aquíferos Livres ou Não Confinados, com formação geológica permeável e parcialmente saturado por água, limita-se na base por uma camada impermeável e a superfície superior da zona saturada está em equilíbrio com a pressão atmosférica, a qual se comunica livremente.

(2) Aquíferos Semiconfinados, a maioria dos aquíferos não confinados se enquadra no tipo “semiconfinados” autores clássicos como Kruseman e Ridder (1970) afirmam que a principal característica que difere é o grau natural de variação nas propriedades do sedimento que cria uma disparidade no fluxo de água entre o compartimento vertical e horizontal, caracterizando o semiconfinamento.

(3) Aquíferos Confinados são de formação geológica permeável e completamente saturado de água, é limitado no topo e na base por camadas impermeáveis e a pressão no aquífero é superior à pressão atmosférica.

A Figura 3.1, ilustra conceitualmente os diferentes compartimentos dos aquíferos mencionados até o momento.

Figura 3.1 - Diagrama conceitual dos principais tipos de aquíferos e a relação de suas elevações da superfície até o lençol freático



Fonte: Adaptado de MALIVA, 2016.

3.2 Poluição de Aquíferos

A poluição de aquíferos começou a ser estudada há algumas décadas e, atualmente, é considerada um dos mais sérios problemas ambientais a serem enfrentados. A baixa velocidade de deslocamento da água subterrânea faz com que o efeito da diluição dos poluentes seja mais discreto do que nas águas superficiais, tomando o problema mais difícil de analisar (COTA, 2000).

Atualmente, há um grande crescimento na utilização das águas subterrâneas, devido às águas superficiais se encontrarem contaminadas em grande parte dos municípios (DENIZMAN, 2018), principalmente nos países subdesenvolvidos, que encontram nas reservas subterrâneas um meio barato e viável para suprir sua demanda de abastecimento (TEIXEIRA *et al.*, 2007; CETESB, 2015).

O potencial de poluição da água subterrânea depende das características, da quantidade e da forma de lançamento do poluente e da vulnerabilidade intrínseca do aquífero. Segundo Guiguer & Kohnke (2002), a ASTM (*American Society for Testing Materials*), agência reguladora norte-americana, definiu vulnerabilidade nas águas subterrâneas como a facilidade com a qual um dado contaminante pode migrar para as águas subterrâneas ou para um aquífero de interesse em determinadas situações de uso do solo, características do contaminante e condições da área.

Outra definição de vulnerabilidade dos aquíferos pode ser entendida como o conjunto de características que determinam o quanto ele poderá ser afetado pela carga de poluentes. São considerados aspectos fundamentais da vulnerabilidade: o tipo de aquífero (livre a confinado), a profundidade do nível d'água, e as características dos estratos acima da zona saturada, em termos de grau de consolidação e litologia (argila a cascalho) (CETESB, 2022).

Um exemplo clássico de poluição de aquíferos com grande preocupação em todo o mundo é o derramamento de hidrocarbonetos de petróleo, especificamente o movimento dos coloides Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno e Xileno denominados (BTEX) no sistema subterrâneo. (Adaptado de VALSALA *et al.* 2018). A compreensão da dispersão desses compostos é essencial para o desenvolvimento de estratégias eficazes de monitoramento e mitigação da contaminação em aquíferos.

Uma outra vertente de verificação é a identificação de fontes de nitrato e os processos que controlam o transporte e transformação das espécies nitrogenadas em aquíferos situados em áreas urbanas e periurbanas (Adaptado de VARNIER, 2021).

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. 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).

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 Figura 3.2 ilustra um modelo conceitual no qual se pode visualizar os diversos processos que ocorrem dentro de um aquífero poluído.

Figura 3.2 – Ilustração do Transporte de poluentes em meios porosos.



Fonte: Sun e Sun (2014)

A investigação dos processos físico-químicos e biológicos que controlam a migração dos poluentes é vital para a remediação dos aquíferos afetados. Uma vez poluídas ou contaminadas, as águas subterrâneas demandam um elevado gasto de recursos financeiros e humanos para sua remediação

Portanto, é essencial compreender os principais processos físicos, químicos e biológicos que governam os mecanismos de transporte e transformação dos poluentes na região saturada do solo. Essa compreensão é crucial para determinar o destino das espécies poluentes nos aquíferos, que são os principais focos desta pesquisa. A análise detalhada desses processos corrobora com o desenvolvimento de estratégias mais eficazes para monitorar, prever e mitigar a contaminação dos recursos hídricos subterrâneos.

3.3 Mecanismos de Transporte e Transformação dos Poluentes.

Um contaminante em meio subterrâneo, ao se dissolver no aquífero, passa a se submeter a diferentes processos que causam seu transporte e sua transformação. Seu espalhamento é governado por processos hidrodinâmicos, que são resultado do movimento das águas subterrâneas, os quais não causam redução da massa do contaminante.

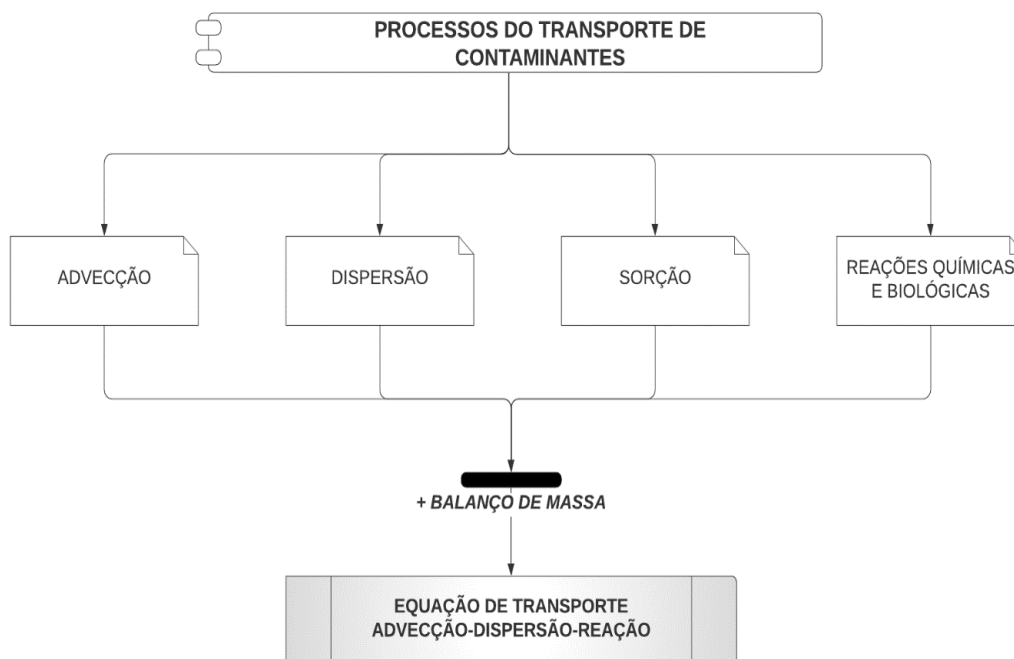
Processos hidrodinâmicos incluem a advecção e a dispersão hidrodinâmica, e essa última inclui os processos de difusão e dispersão mecânica (SIMÃO, 2020).

Os fenômenos abióticos incluem as reações químicas, o decaimento radiativo, hidrólise e dissolução, sorção e volatilização. Os fenômenos biológicos referem-se ao processo de degradação e transformação dos contaminantes mediado por microrganismos e/ou plantas, também reconhecido como biodegradação.

Os processos mais relevantes envolvem a advecção, dispersão hidrodinâmica, sorção e reações químicas e biológicas, os quais serão debatidos no decorrer desta seção.

A Figura 3.3 ilustra os principais mecanismos governantes do transporte de poluentes na zona saturada do solo no compartimento ambiental subterrâneo, denominado de aquífero.

Figura 3.3 - Mecanismos do transporte e transformação de contaminantes utilizados na modelagem.



Fonte: Adaptado de SHARMA *et al.*, 2020.

Todos os aquíferos são heterogêneos em algum grau, visando simular plumas de poluentes, é preciso conhecer os mecanismos que influenciam o transporte e transformações de solutos neste meio. Um bom modelo de fluxo de água subterrânea forma a base para a modelagem de transporte de soluto, porque a saída do modelo de fluxo de água subterrânea é usada no código do transporte.

A formulação bem-sucedida de qualquer modelo de água subterrânea exige uma compreensão completa dos processos de transporte de contaminantes no sistema de água subterrânea. A seguir, serão apresentados os principais mecanismos utilizados nesta pesquisa.

3.3.1 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 (Fetter, 1993).

A advecção é a quantidade de contaminante que está sendo transportada em função da concentração de solutos dissolvidos e da quantidade de fluxo do solvente. O fluxo advectivo é definido como o produto da velocidade da água pela concentração do soluto. A concentração do soluto em um ponto de amostragem é igual à do ponto de lançamento do contaminante (Holzbecher, 2012).

O transporte advectivo unidimensional é expresso pela Equação (3.1)

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -V_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.1)$$

onde

$$V_x = \frac{k}{n} * i \quad (3.2)$$

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.

Fazendo um balanço advectivo do volume infinitesimal tridimensional de massa em um meio poroso, em um determinado intervalo de tempo, se obtém a seguinte equação:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial (u * C(x,t))}{\partial x} + \frac{\partial (v * C(x,t))}{\partial y} + \frac{\partial (w * C(x,t))}{\partial z} \quad (3.3)$$

Em que:

u = componente vetorial da velocidade real do fluxo na direção de x

v = componente vetorial da velocidade real do fluxo na direção de y

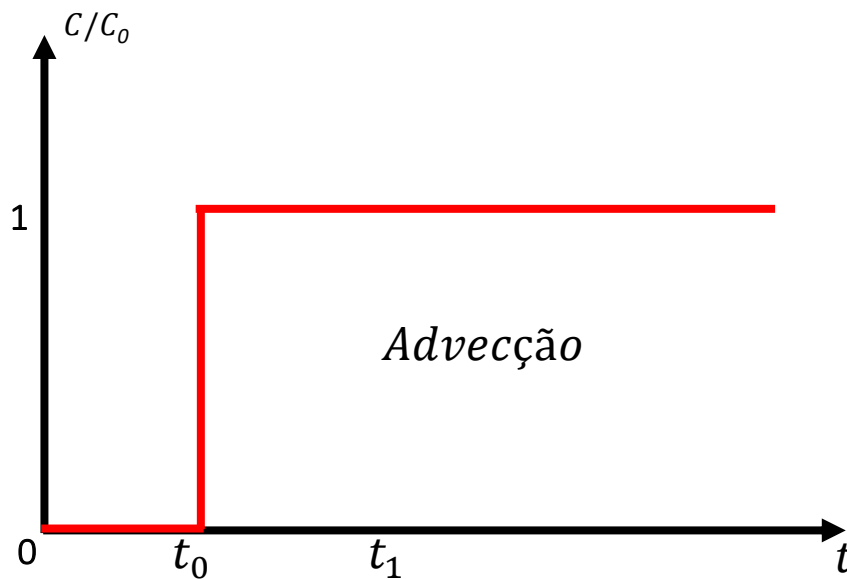
w = componente vetorial da velocidade real do fluxo na direção de w

$C(x,t)$ = concentração da massa do contaminante na água subterrânea

t = é o tempo

Na advecção, a concentração do soluto em um ponto de amostragem é igual à da fonte de contaminação, conforme ilustrado na Figura 3.4.

Figura 3.4. Gráfico representativo do transporte advectivo.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A velocidade é influenciada por diversos fatores, como a viscosidade do fluido, as condições de contorno e a geometria do meio por onde o fluido se move.

Simulações que incluem a advecção são importantes em diversas áreas, como na previsão da qualidade da água em corpos hídricos, na análise da dispersão de poluentes na atmosfera e no estudo do transporte de poluentes em meios porosos.

A compreensão da advecção é fundamental para o entendimento de diversos fenômenos naturais e pode contribuir para a tomada de decisões importantes em diferentes processos hidrodinâmicos.

3.3.2 Dispersão Hidrodinâmica

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 (Dagan, 2012).

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).

$$F = -D_o \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3.4)$$

onde F é o fluxo difusivo de massa, D_o é o coeficiente de difusão e $\frac{\partial C}{\partial x}$ 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;

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_o \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (3.5)$$

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:

$$D^* = \omega . D_o \quad (3.6)$$

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 (Equação 3.4 e 3.5) 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);

Coeficiente de dispersão mecânica na direção de $x = \alpha_x \cdot u$

Coeficiente de dispersão mecânica na direção de $y = \alpha_y \cdot v$

Coeficiente de dispersão mecânica na direção de $z = \alpha_z \cdot w$

onde α é o coeficiente de dispersividade nas três direções.

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 conforme descrito por ZHENG (2010).

$$D_{hx} = \alpha_x V_x + D^* \quad (3.7)$$

$$D_{hy} = \alpha_y V_y + D^* \quad (3.8)$$

$$D_{hz} = \alpha_z V_z + D^* \quad (3.9)$$

onde D_{hx} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção de x , D_{hy} é o coeficiente de dispersão na direção de y e D_{hz} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção de z .

Nas Equações 3.7, 3.8 e 3.9, os componentes do tensor do coeficiente de dispersão são definidos em termos da velocidade de infiltração da água subterrânea.

Quando a porosidade varia espacialmente, é mais conveniente definir um tensor de dispersividade aparente como:

$$\hat{D}_{ij} = \varepsilon D_{ij} \quad (3.10)$$

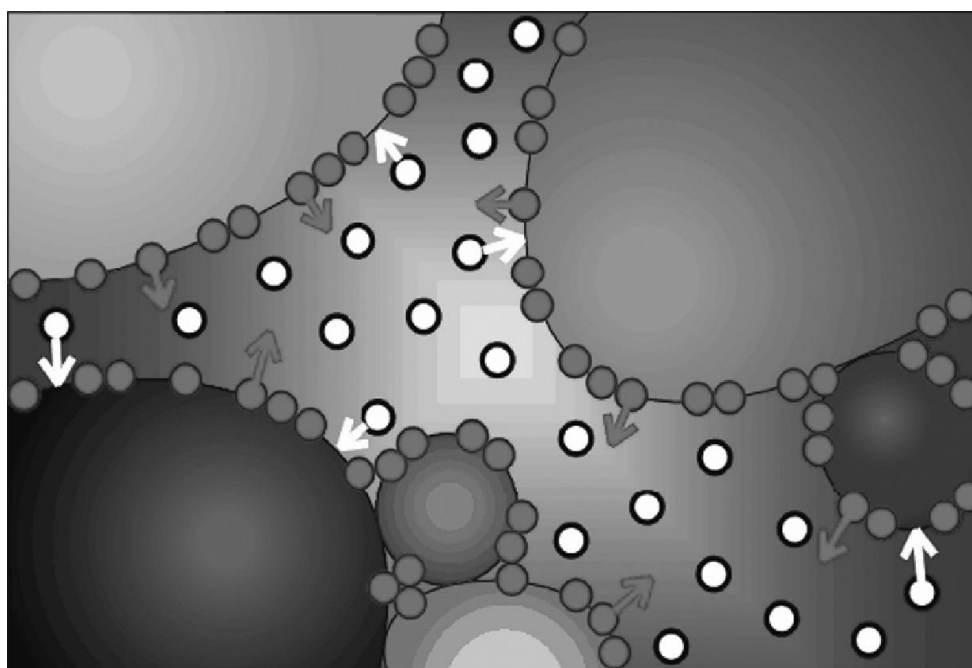
ε = porosidade aparente do meio subterrâneo, adimensional

3.3.3 Sorção e Retardamento

Além da advecção e dispersão, que podem ser formuladas separadamente para as fases sólida e fluida, a interação entre essas fases é um processo relevante em muitos sistemas ambientais. Sob certas condições, as partículas no espaço poroso são atraídas pela superfície do meio, onde processos químicos tendem a ligá-las de várias maneiras. Processos como atração e repulsão elétrica, complexação ou reação química podem ser agrupados sob o termo geral de sorção (Holzbecher, 2012).

Uma visão esquemática da Sorção no espaço poroso é ilustrada na Fig. 3.5, trata-se de uma configuração multifásica, que caracteriza o conceito padrão para modelos ambientais relativos a águas subterrâneas, águas de infiltração e água dos poros em sedimentos aquáticos, objetos de estudo neste trabalho.

Figura 3.5 - Ilustração esquemática dos processos de sorção



Fonte: Holzbecher (2012).

Portanto, a sorção refere-se ao processo de transferência de massa entre os contaminantes dissolvidos na água subterrânea (fase aquosa) e os contaminantes sorvidos no meio poroso (fase sólida), (Chen 1979).

A relação funcional entre o dissolvido e sorvido sob concentrações a uma temperatura constante é chamada de isoterma de sorção. Isotermas de sorção são controladas por equilíbrio e geralmente incorporadas em um modelo de

transporte através do uso do fator de retardo.

As três principais isotermas de sorção controladas por equilíbrio são a Linear, a Freundlich e a Langmuir (Freundlich, 1909; Langmuir, 1918; Ghosh e Yuan, 1987).

1. A isoterma de sorção linear assume que a concentração sorvida (\bar{C}) é diretamente proporcional à concentração dissolvida (C):

$$\bar{C} = k_d C \quad (3.11)$$

Onde k_d = coeficiente de distribuição da sorção ($L^3 M^{-1}$).

O fator de retardo linear pode ser modelado da seguinte forma, (Chen 1979):

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} k_d \quad (3.12)$$

Onde

R – Coeficiente de Retardo (adimensional);

ρ_b – Densidade de matriz sólida (ML^{-3});

ε = porosidade do meio subterrâneo, adimensional

2. A isoterma de Freundlich é uma isoterma não linear que pode ser expressa da seguinte forma, (Chen 1979):

$$\bar{C} = k_f C^\alpha \quad (3.13)$$

Onde k_f = Constante de Freundlich ($L^3 M^{-1}$) $^\alpha$ e

α = Expoente de Freundlich (adimensional)

Ambos, k_f e α são coeficientes empíricos. Quando o expoente α é igual a unidade, a isoterma de Freundlich é equivalente à isoterma linear. Desta forma, o fator de retardo para a isoterma de Freundlich pode ser modelado da seguinte forma, (Chen 1979):

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \alpha k_f C^{\alpha-1} \quad (3.14)$$

3. Outra isoterma de sorção não linear é a isoterma de Langmuir, que é descrita pela equação:

$$\bar{C} = \frac{k_l \bar{S} C}{1 + k_l C} \quad (3.15)$$

Onde k_l = Constante de Langmuir ($L^3 M^{-1}$) e \bar{S} = concentração total nos locais de sorção disponíveis, (MM^{-1}). O fator de retardo definido para a isoterma de Langmuir pode ser modelado da seguinte forma:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \frac{\partial \bar{C}}{\partial C} = 1 + \frac{\rho_b}{\varepsilon} \left[\frac{k_l \bar{S}}{(1 + k_l C)^2} \right] \quad (3.16)$$

3.3.4 Reações Químicas e Biológicas

Uma série de reações químicas e biológicas ocorrem no sistema de água subterrânea, como reações redox, hidrólise, halogenação, decaimento radioativo e degradação microbiana que degradam os contaminantes ou produzem novos.

Devido a reações potencialmente perigosas, os componentes podem ser gradualmente degradados, resultando em concentrações que ultrapassam os limites estabelecidos pelas regulamentações ambientais. Outro cenário importante é o surgimento de espécies químicas potencialmente nocivas como produtos de reações ao longo do caminho de fluxo dentro de um compartimento (Holzbecher, 2012).

Para fins de modelagem, são geralmente considerados modelos lineares que seguem uma cinética de primeira ordem ou ordem zero (Sharma *et al.*, 2020):

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \pm k_0 \quad (3.17)$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \pm \lambda C \quad (3.18)$$

Onde $\partial C / \partial t$ é a taxa de reação do contaminante, k_0 e λC constantes de ordem zero e primeira ordem, respectivamente.

3.4 Dinâmica dos Fluidos Computacional (CFD)

Muitos modelos numéricos foram desenvolvidos para simular o fluxo de água subterrânea em aquíferos, é possível citar alguns dos primeiros desenvolvidos por Tyson e Weber (1964), Freeze e Witherspoon (1966), Sauerwein (1967), Pinder e Cooper (1970), Freeze (1971), Lee e Cheng (1974) e Segol *et al.* (1975).

Com o avanço das técnicas numéricas e o desenvolvimento de computadores de alta velocidade e grande capacidade de armazenamento, o uso de técnicas para resolver problemas complexos de engenharia tornou-se uma realidade.

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.

A dinâmica dos fluidos computacional ou Computational Fluid Dynamics (CFD), como é mais conhecida, é uma área que utiliza técnicas computacionais para simular problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos (Fortuna, 2000; Versteeg & Malalasekera, 1995).

Uma parte crucial dessas simulações envolve a resolução de equações diferenciais parciais (EDPs), que descrevem os fenômenos físicos subjacentes. Uma forma eficaz de resolver essas EDPs é utilizando métodos numéricos, que permitem a obtenção de soluções aproximadas para problemas complexos que seriam intratáveis analiticamente.

Os métodos mais utilizados para obter essas soluções, destacam-se o Método dos Volumes Finitos (MVF), o Método dos Elementos Finitos (MEF) e o Método das Diferenças Finitas (MDF), (MALISKA, 1995).

3.4.1 Método dos Volumes Finitos

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.

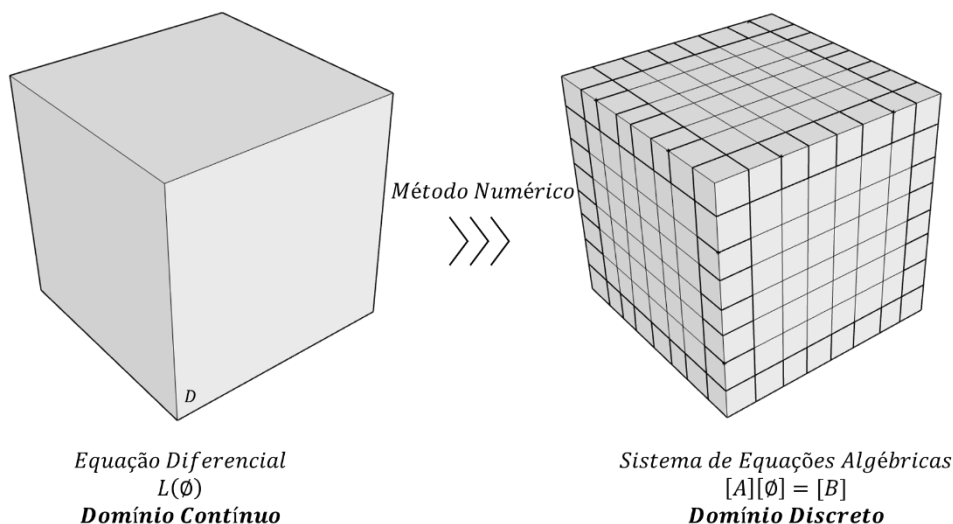
Segundo Maliska (2004), MVF apresenta uma boa abordagem computacional dos problemas que envolvem o desenvolvimento de programas computacionais para CFD, suprindo praticamente todos os aspectos básicos para aqueles que querem desenvolver seus modelos.

Conceitualmente, 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 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. A unidade fundamental do domínio é o Volume de Controle (VC), 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).

A solução numérica de uma equação diferencial parcial consiste em encontrar a valores da variável dependente ϕ em pontos especificados a partir dos quais sua distribuição sobre o domínio de interesse pode ser construída. Os pontos são chamados de elementos de malha, ou nós e resultam da discretização da geometria original em um conjunto de elementos discretos não sobrepostos, um processo de aplicação de uma malha. O conceito foca em substituir a solução exata contínua da equação diferencial parcial por valores discretos, de domínio algébrico, conforme ilustrado na Figura 3.6.

Figura 3.6 – Discretização do domínio tridimensional MVF.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Discretização usando 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 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 expressar os balanços das propriedades no contorno em função das propriedades armazenadas nos centros dos volumes.

3.4.2 Formulação no tempo

Para a resolução numérica da equação diferencial transiente, é crucial definir a formulação temporal do método numérico utilizado. A discretização temporal envolve a aproximação das derivadas de funções em relação ao tempo, que determina como a variável de interesse, ϕ , evolui ao longo do tempo.

O instante de tempo no qual o cálculo de tais derivadas espaciais é feito define a formulação do método numérico utilizado. O método numérico é caracterizado pela forma como essa interpolação temporal é realizada. Segundo Maliska (2004), a interpolação no tempo pode ser expressa por:

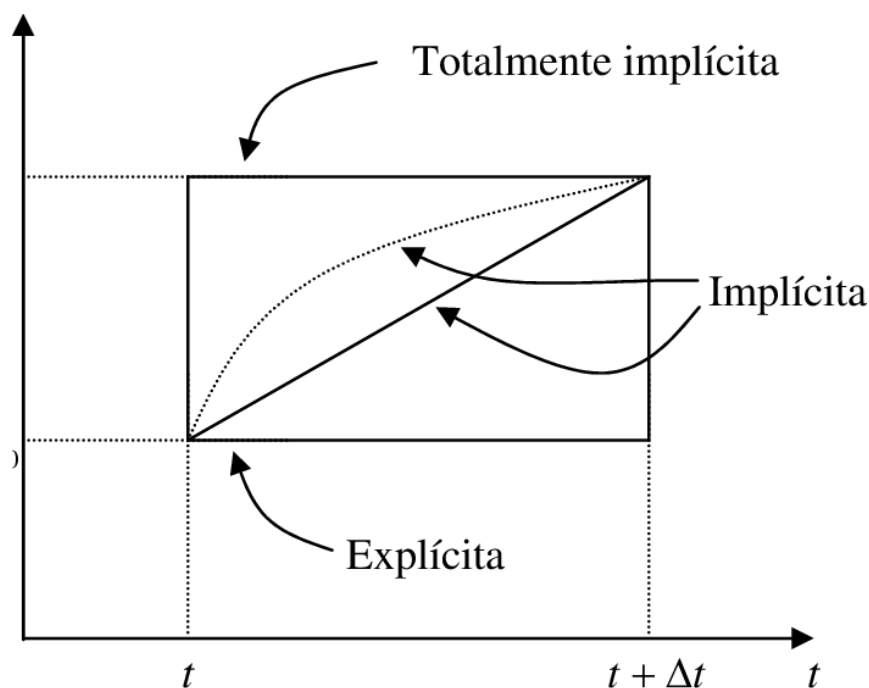
$$\phi_p^0 = \theta\phi_p + (1 - \theta)\phi_p^0 \quad (3.24)$$

Em que $\theta\phi$ representa o valor de ϕ , no instante θ , que será utilizado no cálculo das derivadas espaciais.

Na mesma expressão, ϕ^1 , denota o valor da variável no estepe de tempo atual (final do intervalo de tempo) e ϕ^0 corresponde ao valor de Φ no início do intervalo de tempo.

A Figura 3.7 ilustra as possibilidades de interpolação utilizadas na discretização transiente.

Figura 3.7 - Formulações de interpolação no tempo



Fonte: Adaptado (Maliska, 2004)

Verifica-se que, para $0 < \theta < 1$, tem-se a formulação implícita, no qual os valores de utilizados nos cálculos das derivadas espaciais são tomados como uma média ponderada entre seus valores no início e no final do intervalo de tempo. Maliska (2004), ressalta que o método mais conhecido com essa formulação é o de Crank-Nicolson, no qual Φ é tomado como a média aritmética de seus valores no início e no fim do intervalo de tempo.

Fazendo-se $\theta = 1$, obtém-se a formulação totalmente implícita. Neste caso, os valores de ϕ , usados no cálculo das derivadas espaciais, são aqueles do final do intervalo de tempo e, portanto, não são conhecidos.

Tem-se, ao final do processo de discretização, para o método dos volumes finitos, um sistema de equações algébricas, no qual cada equação provém de um volume de controle e se encontram acopladas (MALISKA, 2004).

A principal característica desta formulação consiste no fato dela ser incondicionalmente estável para qualquer intervalo de tempo estipulado. Deste modo, pode-se atingir o regime permanente dando um único salto no nível de tempo, atribuindo ao intervalo de tempo um valor suficientemente grande (SILVA, 2012).

3.4.3 Condições 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 de contorno são usadas para incluir os efeitos do sistema hidrogeológico 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, são elas:

- (a) Concentração conhecida ao longo de um limite (Condição de Dirichlet),
- (b) Gradiente de concentração conhecido através de um limite (Condição de Neumann);
- (c) Uma combinação de (a) e (b) (Condição de Cauchy).

Para a condição de contorno de Dirichlet, a concentração é especificada ao longo do limite durante toda a duração da simulação (Chen 1979);

$$C(x, y, z, t) = c(x, y, z, t) \quad \text{sobre } \Gamma_1, \quad t \geq 0 \quad (3.25)$$

onde Γ_1 denota o limite de concentração especificado, e $c(x, y, z, t)$ é a concentração especificada ao longo de Γ_1 . A concentração especificada pode ser ajustada para variar com o tempo.

Em um modelo de fluxo, a condição de contorno de Dirichlet é um limite especificado que atua como uma fonte ou sumidouro de água entrando ou saindo do domínio do modelo.

Da mesma forma, um limite de concentração especificada em um modelo de transporte atua como uma fonte, fornecendo massa de soluto para o domínio do modelo, ou como um ponto de remoção, retirando massa de soluto do domínio do modelo.

Para a condição de contorno de Neumann, o gradiente de concentração é especificado através do limite:

$$\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} = f_i(x, y, z, t) \text{ sobre } \Gamma_2, \quad t \geq 0 \quad (3.26)$$

onde $f_i(x, y, z, t)$ é uma função conhecida que representa o fluxo dispersivo ao contorno Γ_2 . Um caso clássico é um fluxo de massa não dispersivo onde $f_i(x, y, z, t) = 0$, (ZHENG *et al* 1999).

Para a condição de contorno de Cauchy, tanto o valor da concentração quanto o gradiente de concentração são especificados, ou seja:

$$\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C = g_i(x, y, z, t) \text{ sobre } \Gamma_3, \quad t \geq 0 \quad (3.27)$$

onde $g_i(x, y, z, t)$ é uma função conhecida que representa o fluxo total (dispersivo e advectivo) ao contorno Γ_3 .

Para uma fronteira impermeável, ambos os fluxos dispersivos e advectivos são iguais a zero de modo que $g_i(x, y, z, t) = 0$

Costuma-se supor que o fluxo advectivo seja dominante sobre o fluxo dispersivo de modo que a equação acima pode ser simplificada como:

$$-q_i = g_i(x, y, z, t) \quad (3.28)$$

A Equação 3.28 pode ser tratada prontamente no modelo de transporte.

3.4.4 Condições Iniciais

As condições iniciais indicam a carga hidráulica pelo aquífero quando o tempo for igual a zero na simulação. Isto implica em um fluxo inicial com carga hidráulica (h) diferente para cada arranjo no espaço x , y e z , (ZHENG *et al* 1999). É possível representar conceitualmente conforme a equação:

$$h = c(x, y, z, 0), \text{ no instante } t = 0 \quad (3.29)$$

Contudo, essa informação é geralmente desconhecida, obrigando a utilização de uma carga inicial e constante média (C_0).

Para lidar com a falta de dados precisos sobre a carga hidráulica inicial, a simulação geralmente começa com uma carga hidráulica constante (C_0). Essa simplificação permite iniciar a simulação de forma controlada, com a expectativa de que o modelo ajuste a carga hidráulica ao longo do tempo para refletir o comportamento real do fluxo subterrâneo.

3.5 Estado da Arte

AMEUR *et al.* (2021) abordaram a aplicação do Índice de Suscetibilidade (SI) para avaliar o impacto das atividades agrícolas na qualidade da água do aquífero Sminja, na Tunísia. Utilizando cinco parâmetros — profundidade da água (D), recarga líquida (R), meio aquífero (A), topografia (T) e uso do solo (LU), eles empregaram um modelo de transporte modular tridimensional multiespécies para avaliar, simular e prever o transporte de poluição por nitrato. Após a calibração, os resultados do modelo de transporte MT3DMS mostraram uma boa correlação entre as concentrações de nitrato medidas e simuladas. Os cenários de previsão indicam que o nitrato se propaga por todo o aquífero, desde a área irrigada até a área não irrigada.

CHEN *et al.* (2021) apontaram que a maioria dos modelos analíticos ou semi-analíticos usados atualmente para simular o transporte multiespécies assume um equilíbrio instantâneo entre as fases dissolvida e adsorvida do contaminante. No entanto, a pesquisa demonstrou que o processo de sorção com taxa limitada pode ter um efeito profundo sobre o transporte de soluto no ambiente subterrâneo. Este estudo apresentou um novo modelo semi-analítico para simular a migração de plumas de contaminantes degradáveis sujeitos à sorção com taxa limitada. O modelo de sorção controlado por equilíbrio concorda bem com o modelo de sorção de taxa limitada quando a proporção do número de Damköhler para o produto do coeficiente de distribuição e densidade aparente é maior do que 2 ou 3 ordens de magnitude.

OSTAD-ALI-ASKARI *et al.* (2021) estudaram as mudanças nos níveis de qualidade das águas subterrâneas no aquífero Isfahan-Borkhar, localizado no Irã, utilizando a concentração de Sólidos Dissolvidos Totais (SDT) como parâmetro. Para a modelagem das águas subterrâneas, eles utilizaram um modelo tridimensional MODFLOW emparelhado com o MT3D para caracterizar o aquífero. Os resultados da calibração mostraram que o erro entre os níveis calculados e observados estava dentro de um nível ótimo. A simulação indicou que a concentração de SDT é significativamente maior nas áreas ao redor do lago, localizadas nas partes centrais, devido à evaporação no aquífero Borkhar-Isfahan e à estrutura geológica da região. Cenários de previsão do modelo de

transporte mostram que a concentração de SDT aumentaria se a situação atual persistir.

Nyende et al. (2022) apresentaram uma simulação numérica de um problema de transporte de poluentes em águas subterrâneas em duas dimensões, utilizando equações estacionárias incompressíveis de Navier-Stokes e equações de convecção-difusão. O objetivo foi prever o movimento e a concentração do poluente em regiões ocupadas por meios porosos em diferentes posições e tempos. A motivação para este trabalho surge de um problema industrial que reduz a qualidade da água subterrânea. Os resultados mostraram que, ao diminuir o coeficiente de difusão D , aumentou-se o número de poluentes transportados por convecção e diminuiu-se o número de poluentes que se difundem a partir da entrada do poluente.

KUMAR *et al.* (2022) apresentaram uma análise detalhada do transporte de contaminantes em águas subterrâneas e da solução numérica da difusão em aquíferos saturados. Os autores utilizaram o método de diferenças finitas (MDF) para resolver a equação de difusão bidimensional em um sistema finito, obtendo a solução numérica por meio do software MATLAB. O estudo também apresentou uma solução analítica para o transporte de solutos em um aquífero com condições de contorno de Dirichlet e Neumann, aplicável a problemas mais complexos de transporte de solutos. Os resultados mostraram que a difusão é um processo crucial na solução de problemas de transporte de solutos em sistemas aquíferos predominantemente compostos por areia e silte. Além disso, os autores destacaram a importância da modelagem numérica na gestão e proteção das águas subterrâneas, bem como no planejamento e na tomada de decisões relacionadas ao uso desses recursos hídricos.

USOH *et al.* (2023), exibem uma técnica de modelagem matemática e simulação numérica para o transporte de metais pesados em um aterro sanitário de resíduos sólidos municipais. A pesquisa foi realizada no município de Uyo, no estado de Akwa Ibom, na Nigéria, com o objetivo de investigar a profundidade e a quantidade de lixiviado presente no solo do aterro. Foram selecionados quatro metais pesados (cádmio, chumbo, cobre e zinco) para serem monitorados em seis poços instalados em diferentes profundidades do solo do aterro. Os dados foram coletados por meio da execução de ensaios de infiltração em cada poço e

analisados por meio da técnica de regressão linear e do modelo numérico baseado em elementos finitos COMSOL. Os resultados mostraram que o modelo matemático e a simulação numérica foram capazes de prever com precisão a concentração dos metais pesados selecionados, com um valor R^2 superior a 95%. Além disso, os resultados identificaram os níveis em profundidade do lixiviado e sua quantidade em diferentes camadas do solo do aterro.

FENG *et al.* (2024) apresentam uma análise numérica do transporte de solutos em águas subterrâneas na área de captação de água em Jingquan, uma importante região de abastecimento de água potável na China. Utilizando o modelo MODFLOW, os autores conduziram uma simulação para traçar o caminho de migração de partículas no fluxo de águas subterrâneas e realizaram uma análise numérica do transporte de solutos. O estudo aplicou métodos de otimização para ajustar a condutividade hidráulica e as fontes de poluição, demonstrando que o modelo pode localizar com precisão as fontes de contaminantes em problemas reais de engenharia. Os resultados mostraram uma alta correlação entre os níveis de água modelados e observados, indicando a eficácia do modelo na previsão do comportamento dos poluentes em condições hidrogeológicas complexas.

O conhecimento e compreensão destas múltiplas abordagens e trabalhos existentes no estado da arte é essencial para qualquer esforço de pesquisa subsequente.

Com base na análise detalhada das pesquisas contemporâneas existentes, é evidente que, apesar do progresso significativo, ainda há desafios significativos a serem superados. As lacunas identificadas no estado da arte atual são uma indicação das oportunidades para pesquisa futura.

Essas lacunas incluem a necessidade de modelos que possam lidar com a complexidade das condições hidrogeológicas variadas e a integração de técnicas de otimização mais avançadas para melhorar a precisão das simulações. Além disso, há uma necessidade de modelos conservativos que ofereçam interações intuitivas com públicos não especialistas, tornando as informações mais acessíveis e compreensíveis.

4 METODOLOGIA

Este capítulo descreve a metodologia utilizada para modelar numericamente o transporte reativo tridimensional de poluentes em aquíferos. Inicialmente, aborda-se o domínio do problema e a formulação matemática envolvida no transporte e transformação de contaminantes. Em seguida, detalha-se a discretização das equações que compõem essa formulação.

Este capítulo conclui com a seleção de algoritmos específicos usados nas simulações, fornecendo uma análise detalhada de sua eficiência e aplicabilidade. Essa análise destaca a importância dos algoritmos na precisão das simulações e na compreensão da dispersão e transformação dos contaminantes no aquífero estudado.

4.1 Modelagem do Domínio

O modelo deste trabalho é delineado para a resolução de um problema de transporte tridimensional transiente, caracterizado pela dinâmica difusivo-advectiva na zona saturada do solo, incluindo efeitos de retardo e reações químicas.

O domínio de estudo compreende uma região espacial definida por uma geometria cúbica customizável nas três dimensões. Permitindo um nível de flexibilidade computacional ideal para uma ampla variedade de cenários e aplicações, oferecendo múltiplas opções de configurações.

A geometria cúbica do problema em análise buscou semelhança em uma configuração de um aquífero confinado devido às características das suas condições de contorno, que pressupõem a ausência de fluxo nos limites definidos pelos eixos x , y e z .

A zona de recarga do aquífero é um elemento fundamental na dinâmica do problema, pois é nela que ocorre a introdução do poluente no sistema. Em termos de modelagem do domínio, esta área específica foi o ponto de injeção do poluente, permitindo simular e analisar como a contaminação se dispersa e se transforma dentro do aquífero.

A escolha de um aquífero com estas características como cenário para este estudo deve-se à sua relevância na hidrogeologia e gestão de recursos hídricos.

Este tipo de aquífero é de interesse particular, pois sua dinâmica é influenciada por uma combinação de processos de transporte advectivo e difusivo, que são determinantes para a disseminação de poluentes.

A Figura 4.1 ilustra a discretização espacial da geometria do problema em estudo. É possível visualizar neste esquema a distribuição tridimensional de linhas (i), colunas (j) e camadas (k).

A representação da geometria se traduz em uma estrutura de malha regular tridimensional. É possível visualizar na Figura 4.1 a orientação espacial das linhas, colunas e camadas, que servem como indicadores para o estabelecimento das condições de contorno do problema.

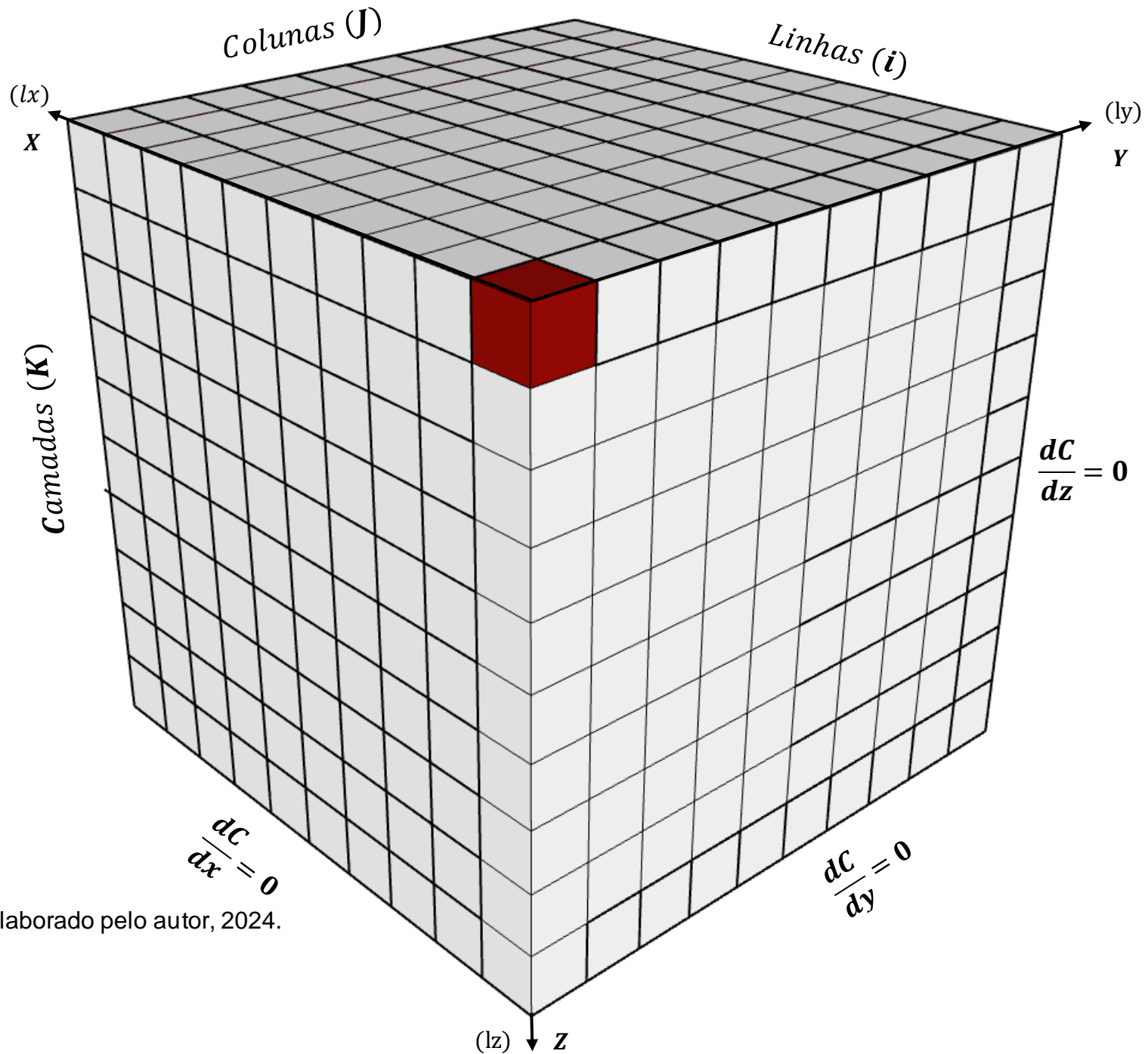
A condição de derivadas nulas em cada direção estabelece uma analogia de simetria do aquífero, o que reforça o conceito de um aquífero confinado na análise nas zonas sem fluxo.

A malha determinada para o problema foi de grade igualmente espaçada. A amplitude de cada direção (x , y e z) influencia diretamente a representação do problema, assim como os processos de transporte que ocorrem no sistema.

A discretização espacial ilustrada na Figura 4.1 serve como base para a resolução numérica do problema, mas também é crucial para a interpretação dos resultados.

A partir da discretização do domínio, é possível inferir como o poluente se propaga no aquífero, bem como identificar zonas de maior ou menor concentração. Isso fornece informações importantes para a análise do comportamento do poluente no sistema e para a proposição de estratégias de gestão eficientes.

Figura 4.1 – Representação da geometria tridimensional da discretização espacial com as condições de contorno.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

4.2 Discretização da Equação Geral

A discretização numérica, processo fundamental na resolução de equações diferenciais parciais, foi abordada nesta seção.

4.2.1 Modelagem do Transporte Tridimensional de Poluentes

O ponto inicial no desenvolvimento do modelo matemático, é a obtenção das equações diferenciais que descrevem o transporte de poluentes, neste trabalho a premissa preconizada considera a aplicação dos princípios da conservação de massa em um volume de controle diferencial fixo no domínio do escoamento.

O transporte de poluentes reativos em águas subterrâneas, supondo as interações químicas suficientemente rápidas e reversíveis, considerando o fluxo tridimensional, pode ser simulado pela Equação da Advecção-Difusão-Reação Bear e Cheng (2010), que apresenta o seguinte desenvolvimento das equações:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (q_x C) - \frac{\partial}{\partial y} (q_y C) - \frac{\partial}{\partial z} (q_z C) - \frac{\rho_d}{\varepsilon} \frac{\partial C_s}{\partial t} \quad (4.1)$$

O termo $\frac{\rho_d}{\varepsilon} \left(\frac{\partial C_s}{\partial t} \right)$ representa a variação da concentração no fluido intersticial causada pela adsorção ou desorção, sendo ρ_d a massa específica seca do solo, ε a porosidade do solo e C_s a concentração de soluto na parte sólida do solo e os termos q representam as velocidades nas três direções.

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

$$\frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\partial C_s}{\partial C} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.2)$$

$$\frac{\rho_d}{\varepsilon} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial t} = \frac{\rho_d}{\varepsilon} \cdot \frac{\partial C_s}{\partial C} \cdot \frac{\partial C}{\partial t} \quad (4.3)$$

Onde o termo que concebe o fator de retardo é representado por R , e o coeficiente de distribuição por K_d conforme a Equação (4.4);

$$(4.4)$$

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

Substituindo a Equação (4.4) na Equação (4.1) tem-se;

$$\begin{aligned} \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\rho_d}{\varepsilon} K_d \frac{\partial C}{\partial t} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (q_x C) - \frac{\partial}{\partial y} (q_y C) \\ - \frac{\partial}{\partial z} (q_z C) \end{aligned} \quad (4.5)$$

Rearranjando o termo de acúmulo:

$$\begin{aligned} \left(1 + \frac{\rho_d}{\varepsilon} K_d\right) \frac{\partial C}{\partial t} \\ = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (q_x C) - \frac{\partial}{\partial y} (q_y C) \\ - \frac{\partial}{\partial z} (q_z C) \end{aligned} \quad (4.6)$$

Organizando os termos para melhor acomodação na equação obtém-se:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) \quad (4.7)$$

Adicionando o termo de reação química linear com coeficiente k , a equação geral conservativa tridimensional converte-se em:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - kRC \quad (4.8)$$

Onde;

$$\frac{\partial C}{\partial t} = \text{Termo de Acúmulo (transiente)} \left(\frac{g}{m^3 \cdot dia} \right)$$

$$\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} = \text{Termos Difusivos Tridimensionais} \left(\frac{g}{m^2 \cdot dia} \right)$$

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

R = Fator de Retardo (-);

q = Velocidade (m/dia)

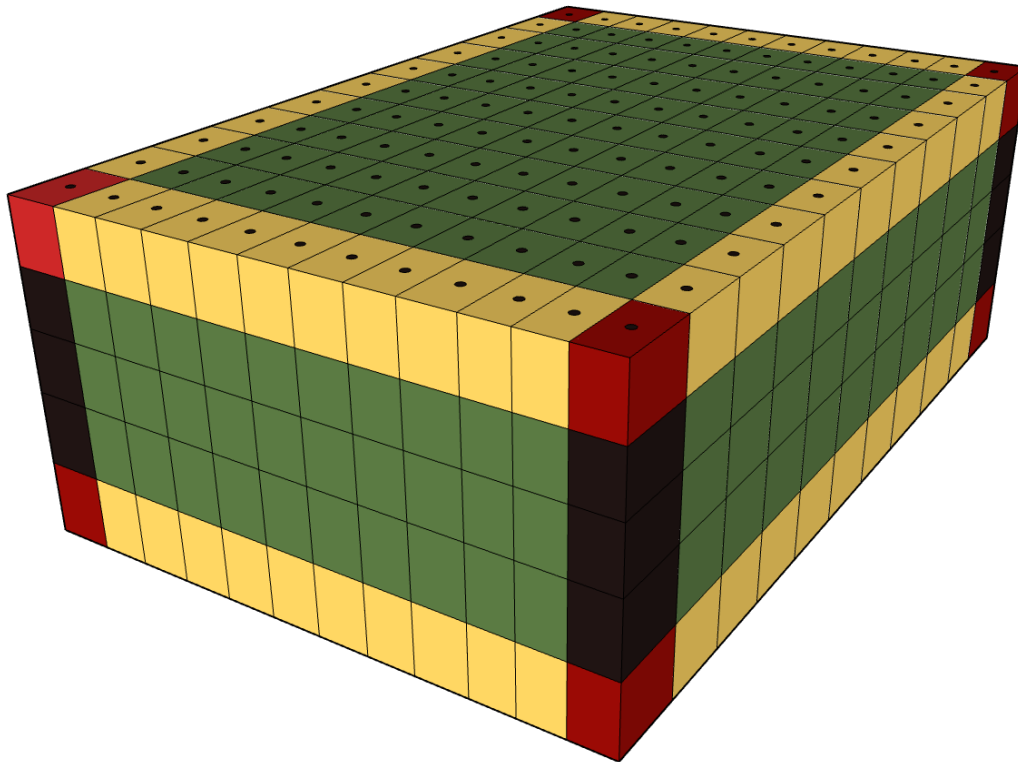
$$\frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) = \text{Componentes Advectivos Tridimensionais } \left(\frac{g}{m^3 \cdot dia} \right);$$

$$\text{Sendo, } \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i C) = \frac{\partial}{\partial x} (q_u C) + \frac{\partial}{\partial y} (q_v C) + \frac{\partial}{\partial z} (q_w C) \quad (4.9)$$

4.2.2 Solução numérica tridimensional em coordenadas cartesianas

Para solução da Equação (4.8), é necessário definir os volumes de controle, partindo do domínio contínuo para obter o domínio discreto dividido numa malha com vinte e sete tipos distintos de volumes de controle, quanto à localização, conforme se observa na Figura 4.2.

Figura 4.2 - Domínio tridimensional com 27 tipos de volumes de controle.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Os volumes de controle são classificados de acordo com a sua localização e a sua relação com as fronteiras do sistema. Os volumes periféricos são aqueles que possuem pelo menos uma face em contato com o ambiente externo. Os volumes internos são aqueles que estão completamente cercados por outros volumes de controle, como é ilustrado na Tabela 4.1.

Tabela 4.1 - Classificação dos Volumes de Controle.

Volumes	Tonalidades	Quantidades	Interações externas
Cantos	Vermelho	08 (oito)	03 (três)
Faces	Verde	06 (seis)	01 (um)
Arestas	Amarela/Cinza	12 (doze)	02 (dois)

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

4.2.3 Aplicação do Método dos Volumes Finitos

O método empregado na discretização das equações foi o dos Volumes Finitos, a equação diferencial foi integrada sobre o volume de controle, no espaço e no tempo e o resultado é a equação discretizada contendo o valor de interesse.

A escolha da variável de interesse nos pontos nodais de cada volume de controle se justifica por ser uma técnica numérica amplamente empregada em problemas de escoamento de fluidos, conforme demonstrado no capítulo anterior.

Tal metodologia, além de permitir considerar as heterogeneidades no modelo, trata a fonte de contaminação como física, respeitando a conservação da massa.

Na solução de problemas físicos, eles 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.

A formulação utilizada foi a totalmente implícita. A razão da escolha desta formulação é que a solução se torna incondicionalmente estável para qualquer intervalo de tempo.

A seguir, são apresentadas as discretizações para o transporte difusivo/advectivo/reativo nas vinte e sete condições detalhadas anteriormente, com a particularidade de que a injeção do poluente foi selecionada no canto superior esquerdo da face da frente.

A obtenção das equações aproximadas pelo método dos Volumes Finitos se dá pela da integração da equação na forma conservativa, sobre o volume elementar, no tempo e no espaço, portanto aplicando na Equação 4.8 obtém-se.

$$\begin{aligned}
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e R \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz dt \\
& + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} (q_u C) dx dy dz dt \\
& + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} (q_v C) dx dy dz dt + \\
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} (q_w C) dx dy dz dt \\
& = \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \right) dx dy dz dt \\
& + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial y} \right) dx dy dz dt + \\
& \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial z} \right) dx dy dz dt - \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e R(kC) dx dy dz dt \quad (4.10)
\end{aligned}$$

Integrando o termo transiente no tempo e no espaço, resulta em:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e R \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz dt \Rightarrow R \Delta x \Delta y \Delta z (C_p - C_p^o) \quad (4.11)$$

A interpolação no tempo adotada, considera $\theta = 1$.

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

Dividindo por Δt obtém-se a Equação (4.12).

$$\frac{R \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} (C_p - C_p^o) \quad (4.12)$$

4.3 Função de Interpolação para Termos Advectivos

Na metodologia, adotou-se a técnica UpWind para resolver as equações diferenciais parciais. Esta técnica considera a direção do fluxo ao calcular os

valores nas interfaces, utilizando os valores do volume de controle a montante para definir as condições na interface. A velocidade foi considerada constante.

Tem-se, então, para as faces do volume de controle as seguintes combinações:

$$C_w = C_W ; \quad C_e = C_P ; \quad u > 0$$

$$C_w = C_P ; \quad C_e = C_E ; \quad u < 0$$

$$C_s = C_S ; \quad C_n = C_P ; \quad v > 0$$

$$C_s = C_P ; \quad C_n = C_N ; \quad v < 0$$

$$C_b = C_B ; \quad C_f = C_P ; \quad w > 0$$

$$C_b = C_P ; \quad C_f = C_F ; \quad w < 0$$

Função de interpolação espacial para os termos advectivos – *UpWind*, considerando-se fluxo positivo neste trabalho.

Onde a aproximação das Derivadas com *UpWind* resulta em:

$$\Rightarrow (q_u C|_e - q_u C|_w) \Delta y \Delta z + (q_v C|_n - q_v C|_s) \Delta x \Delta z + (q_w C|_f - q_w C|_b) \Delta x \Delta y \quad (4.13)$$

$$C_e = C_P \mid C_w = C_W \mid C_n = C_P \mid C_s = C_S \mid C_f = C_P \mid C_b = C_B$$

4.3.1 Funções de Interpolação para termos Difusivos

Integrando os termos difusivos tridimensional no tempo e no espaço tem-se;

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial x} \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \right) dx dy dz dt \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial y} \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial y} \right) dx dy dz dt \\ & + \int_t^{t+\Delta t} \int_b^f \int_s^n \int_w^e \frac{\partial}{\partial z} \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial z} \right) dx dy dz dt \end{aligned} \quad (4.14)$$

Aproximação das Derivadas conforme Equação (4.14).

$$\begin{aligned} \Rightarrow & \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta z + \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta z \\ & + \left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_f - \widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_b \right) \Delta x \Delta y \end{aligned} \quad (4.15)$$

Ao aproximar as derivadas dos termos difusivos nas faces utilizando a técnica das diferenças centrais, obtêm-se as seguintes equações:

$$\left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - \widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta z = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - C_W}{\Delta x} \right) \Delta y \Delta z \quad (4.16)$$

$$\left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - \widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta z = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta z \quad (4.17)$$

$$\left(\widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_f - \widehat{D}_{ij} \frac{\partial C}{\partial z} \Big|_b \right) \Delta x \Delta y = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_F - C_P}{\Delta z} - \frac{C_P - C_B}{\Delta z} \right) \Delta x \Delta y \quad (4.18)$$

Integrando o termo da constante responsável pelas reações químicas e retardo:

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

Reorganizando todos os termos das equações e dividindo por Δt :

$$\begin{aligned} \frac{R \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + (q_u C_e - q_u C_w) \Delta y \Delta z + (q_v C_n - q_v C_s) \Delta x \Delta z \\ + (q_w C_f - q_w C_b) \Delta x \Delta y \\ = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x_e} - \frac{C_P - C_W}{\Delta x_w} \right) \Delta y \Delta z + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y_n} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y_s} \right) \Delta x \Delta z \\ + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_F - C_P}{\Delta z_f} - \frac{C_P - C_B}{\Delta z_b} \right) \Delta x \Delta y - RkC_P \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (4.19)$$

Substituindo os fluxos advectivos utilizando *UpWind* com $(u, v, w > 0)$, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{R \Delta x \Delta y \Delta z}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + (q_u C_P - q_u C_W) \Delta y \Delta z + (q_v C_P - q_v C_S) \Delta x \Delta z \\ + (q_w C_P - q_w C_B) \Delta x \Delta y \\ = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x_e} - \frac{C_P - C_W}{\Delta x_w} \right) \Delta y \Delta z + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y_n} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y_s} \right) \Delta x \Delta z \\ + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_F - C_P}{\Delta z_f} - \frac{C_P - C_B}{\Delta z_b} \right) \Delta x \Delta y - RkC_P \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (4.20)$$

Expandindo a Equação 4.20 obtém-se a Equação 4.21:

$$\begin{aligned}
C_P \left[\frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right. \\
+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \left. \right] \\
+ kR\Delta x\Delta y\Delta z \\
= \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o + q_u\Delta y\Delta z C_W + q_v\Delta x\Delta z C_S + q_w\Delta x\Delta y C_B \\
+ \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right) C_E + \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) C_W + \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right) C_N \\
+ \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) C_S + \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right) C_F + \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) C_B
\end{aligned} \tag{4.21}$$

A notação utilizada na técnica dos volumes finitos suscita uma equação geral para as concentrações expressa pela Equação 4.22, onde B é o termo fonte.

$$A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_n C_N + A_s C_S + A_f C_F + A_b C_B + B \tag{4.22}$$

Nos quais;

$$\begin{aligned}
A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \\
+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \\
+ kR\Delta x\Delta y\Delta z
\end{aligned}$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

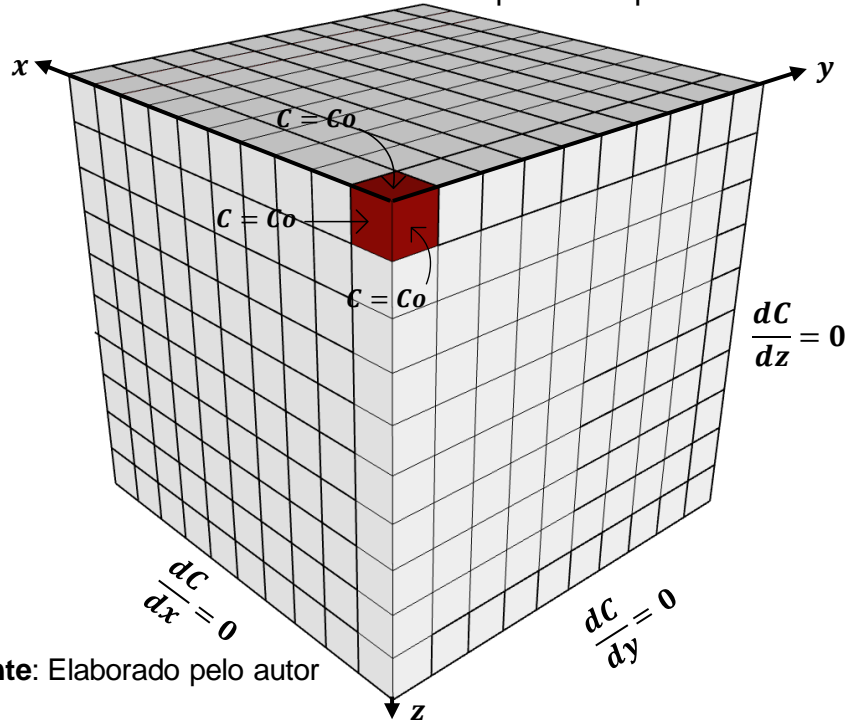
$$B = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o$$

4.4 Discretização da Condição de Contorno tipo I.

A discretização da Condição de Contorno tipo I é apresentada neste tópico, abordando as técnicas aplicadas anteriormente.

No volume de controle situado no canto superior esquerdo da frente (Figura 4.3), a condição de contorno com concentração prescrita requer atenção especial, pois é o local onde o poluente é introduzido do domínio tridimensional.

Figura 4.3: Volume de controle do Canto Superior Esquerdo da Frente



Partindo da Equação 4.10 aplicada ao canto superior esquerdo da frente do contorno representada pela Figura 4.3, obtém-se a Equação 4.23:

$$\begin{aligned}
 & \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + (q_u C_P - q_u C_o)\Delta y\Delta z + (q_v C_P - q_v C_s)\Delta x\Delta z \\
 & \quad + (q_w C_P - q_w C_b)\Delta x\Delta y \\
 & = \hat{D}_{ij} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x_e} - \frac{C_P - C_o}{\Delta x_w} \right) \Delta y\Delta z + \hat{D}_{ij} \left(\frac{C_o - C_P}{\Delta y_n} - \frac{C_P - C_s}{\Delta y_s} \right) \Delta x\Delta z \\
 & \quad + \hat{D}_{ij} \left(\frac{C_o - C_P}{\Delta z_f} - \frac{C_P - C_b}{\Delta z_b} \right) \Delta x\Delta y - RkC_P\Delta x\Delta y\Delta z
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

Agrupando os termos semelhantes chega-se:

$$\begin{aligned}
 & C_P \left[\frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \hat{D}_{ij} \frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right. \\
 & \quad + \hat{D}_{ij} \frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \hat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \hat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \hat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \hat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \\
 & \quad \left. + kR\Delta x\Delta y\Delta z \right] \\
 & = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o + q_u\Delta y\Delta z C_o + q_w\Delta x\Delta y C_b + q_v\Delta x\Delta z C_s \\
 & \quad + \hat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right) C_E + \hat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} \right) C_o + \hat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} \right) C_o \\
 & \quad + \hat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \right) C_o + \hat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} \right) C_s + \hat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right) C_B
 \end{aligned} \tag{4.24}$$

Desta forma a Equação 4.24 pode ser reescrita:

$$A_p C_p = A_e C_e + A_s C_s + A_b C_b + B \quad (4.25)$$

Onde;

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \\ + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \\ + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_s = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_b = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

$$B = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t}C_p^o + q_u\Delta y\Delta zC_o + \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right)C_o + \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)C_o \\ + \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)C_o$$

Considerando as condições de contorno de não fluxo, onde as derivadas são nulas, procede-se com a discretização tridimensional dos vinte e sete tipos de volumes de controle. Esses volumes de controle são distintamente posicionados na malha tridimensional.

Para fins didáticos, as discretizações foram delineadas de forma direta e clara, garantindo que o processo seja compreensível e replicável. Todas as discretizações seguem um procedimento construtivo análogo ao apresentado anteriormente, o que assegura a consistência e a uniformidade na abordagem. Esse procedimento envolve a subdivisão sistemática do domínio tridimensional em volumes de controle menores, respeitando as condições de contorno estabelecidas.

Dessa forma, a metodologia adotada permite uma melhor visualização e compreensão dos fenômenos envolvidos, mas também facilita a aplicação prática do modelo em diversas situações de interesse na engenharia ambiental.

4.4 Equação para o volume do canto superior direita da frente.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_w C_w + A_s C_s + A_b C_B + B \quad (4.26)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

Coeficientes da equação discretizada

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.1 Equação para o VC do canto inferior direito da frente.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_w C_w + A_n C_N + A_b C_B + B \quad (4.27)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

Coeficientes da equação discretizada

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.2 Equação para o VC do canto inferior esquerdo da frente.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_n C_N + A_b C_B + B \quad (4.28)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$\text{Coeficientes da equação discretizada} \quad A_e = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right)$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} \right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.3 Equação para o VC no canto inferior direito da trás.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_w C_W + A_n C_N + A_f C_F + B \quad (4.29)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$\text{Coeficientes da equação discretizada} \quad A_w = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} \right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} \right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \right)$$

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

4.4.4 Equação para o VC do canto superior direito de trás.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_w C_W + A_s C_S + A_f C_F + B \quad (4.30)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

Coeficientes da equação discretizada

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.5 Equação para o VC do canto superior esquerdo de trás.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_s C_S + A_f C_F + B \quad (4.31)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

Coeficientes da equação discretizada

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.6 Equação para o VC do canto inferior esquerdo de trás.

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_n C_N + A_f C_F + B \quad (4.32)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

Coeficientes da equação discretizada

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.7 Equação para o VC na face norte

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_s C_s + A_f C_F + A_b C_B + B \quad (4.33)$$

$$A_p = \left[\frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right] + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

Coeficientes da equação discretizada

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.8 Equação para o VC na face leste

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_w C_w + A_n C_N + A_s C_S + A_f C_F + A_b C_B + B \quad (4.34)$$

Coeficientes da equação discretizada

$$\begin{aligned} A_p &= \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} \\ &\quad + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \\ &\quad + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z \\ A_w &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z \\ A_n &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right) \\ A_s &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z \\ A_f &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right) \\ A_b &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y \\ B &= \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o \end{aligned}$$

4.4.9 Equação para o VC na face oeste

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_n C_N + A_s C_S + A_f C_F + A_b C_B + B \quad (4.35)$$

Coeficientes da equação discretizada

$$\begin{aligned} A_p &= \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \\ &\quad + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \\ &\quad + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z \\ A_e &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right) \\ A_n &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right) \\ A_s &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z \\ A_f &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right) \\ A_b &= \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y \\ B &= \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o \end{aligned}$$

4.4.10 Equação para o VC na face sul

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_n C_N + A_f C_F + A_b C_B + B$ (4.36)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \left[\frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right] + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.11 Equação para o VC na face atrás

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_n C_N + A_s C_S + A_f C_F + B$ (4.37)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \left[\frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right] + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.12 Equação para o VC na aresta superior da frente

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_s C_S + A_b C_B + B$ (4.38)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.13 Equação para o VC na aresta inferior da frente

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_n C_N + A_b C_B + B$ (4.39)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.14 Equação para o VC na aresta superior da direita

Equação discretizada $A_p C_P = A_w C_w + A_s C_s + A_f C_f + A_b C_B + B$ (4.40)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}$$

$$+ kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.15 Equação para o VC na aresta inferior da direita

Equação discretizada $A_p C_P = A_w C_w + A_n C_N + A_f C_f + A_b C_B + B$ (4.41)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.16 Equação para o VC na aresta superior da esquerda

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_s C_S + A_f C_F + A_b C_B + B \quad (4.42)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}$$

$$+ kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

Coeficientes
da equação
discretizada

4.4.17 Equação para o VC na aresta inferior da esquerda

$$\text{Equação discretizada} \quad A_p C_P = A_e C_E + A_n C_N + A_f C_F + A_b C_B + B \quad (4.43)$$

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}$$

$$+ \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

Coeficientes
da equação
discretizada

4.4.18 Equação para o VC na aresta superior de trás

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_s C_S + A_f C_F + B$ (4.44)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.19 Equação para o VC na aresta inferior de trás

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_w C_w + A_n C_N + A_f C_F + B$ (4.45)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.20 Equação para o VC na aresta vertical direita da frente

Equação discretizada $A_p C_P = A_w C_w + A_n C_N + A_s C_S + A_b C_B + B$ (4.46)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y$$

$$+ \hat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}$$

$$+ \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_w = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w}\right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_n = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_f = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f}\right)$$

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

4.4.21 Equação para o VC na aresta vertical esquerda da frente

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_n C_N + A_s C_S + A_b C_B + B$ (4.47)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y$$

$$+ \hat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}$$

$$+ \hat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e}\right)$$

$$A_s = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}\right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_n = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n}\right)$$

$$A_b = \hat{D}_{ij}\left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b}\right) + q_w\Delta x\Delta y$$

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

4.4.22 Equação para o VC na aresta vertical esquerda de trás

Equação discretizada $A_p C_P = A_e C_E + A_n C_N + A_s C_S + A_f C_F + B$ (4.48)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y$$

$$+ \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}$$

$$+ \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} \right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} \right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \right)$$

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

4.4.23 Equação para o VC na aresta vertical esquerda de frente

Equação discretizada $A_p C_P = A_w C_w + A_n C_N + A_s C_S + A_f C_F + B$ (4.49)

Coeficientes da equação discretizada

$$A_p = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y$$

$$+ \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s}$$

$$+ \widehat{D}_{ij} \frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + kR\Delta x\Delta y\Delta z$$

$$A_w = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} \right) + q_u\Delta y\Delta z$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} \right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_n = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} \right)$$

$$A_f = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \right)$$

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

4.5 Discretização para o Fluxo Prescrito (CC de Segundo Tipo)

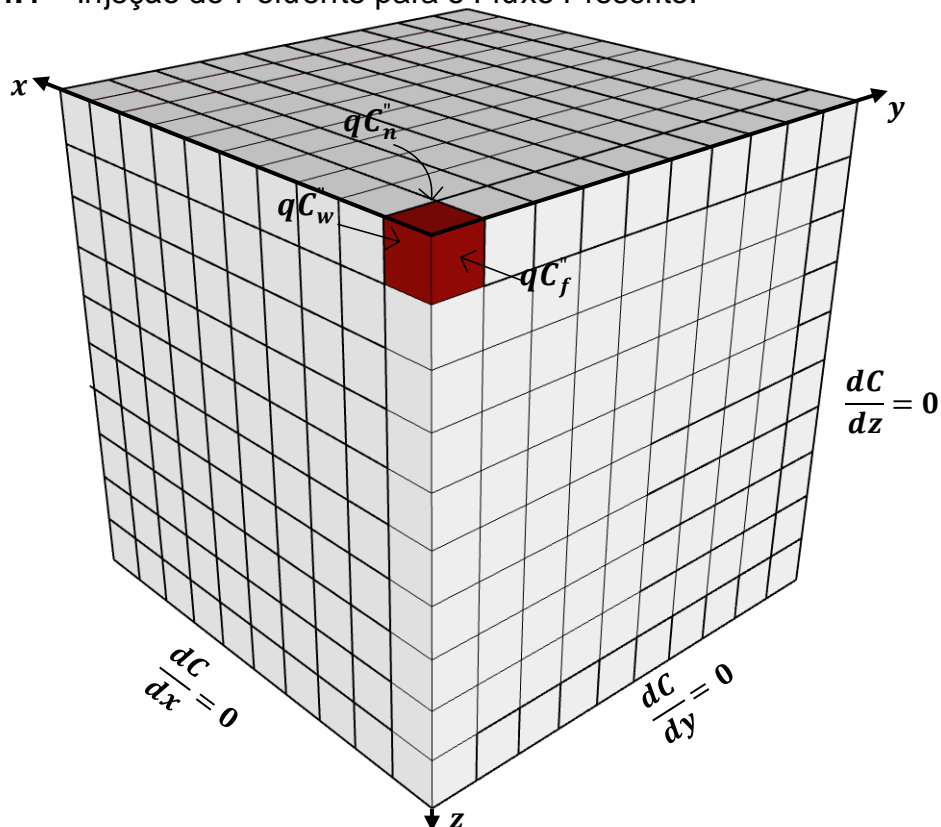
Após a exposição da metodologia de discretização para a concentração prescrita, o método avança para a apresentação da discretização do fluxo prescrito, uma condição de segundo tipo fundamental na simulação de fluxos que são influenciados por forças externas ou configurações específicas.

Esta técnica é aplicada para modelar a injeção ou extração de fluxos nas fronteiras designadas da malha computacional. Tal abordagem é crucial para o estudo do comportamento dinâmico do sistema sob condições controladas, permitindo uma análise precisa dos impactos dessas intervenções no fluxo geral e nas respostas do sistema.

Inicia-se a discretização focando na condição de fluxo prescrito $q\phi''$ no volume de controle específico, que serve como ponto de injeção do poluente na malha computacional.

Os termos qC_w'' , qC_n'' , qC_f'' representam os fluxos de massa do poluente entrando no sistema, conforme ilustrado na Figura 4.4.

Figura 4.4 – Injeção do Poluente para o Fluxo Prescrito.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Partindo da Equação 4.10, é possível realizar a discretização da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
& \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} (C_P - C_P^o) + (q_u C_P - q_u C_w'')\Delta y\Delta z + (q_v C_P - q_v C_s)\Delta x\Delta z \\
& \quad + (q_w C_P - q_w C_B)\Delta x\Delta y \\
& = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x_e} - \frac{C_P - C_w''}{\Delta x_w} \right) \Delta y\Delta z + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_n'' - C_P}{\Delta y_n} - \frac{C_P - C_s}{\Delta y_s} \right) \Delta x\Delta z \\
& \quad + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{C_f'' - C_P}{\Delta z_f} - \frac{C_P - C_B}{\Delta z_b} \right) \Delta x\Delta y - RkC_P\Delta x\Delta y\Delta z \quad (4.50)
\end{aligned}$$

Agrupando os termos semelhantes tem-se:

$$\begin{aligned}
C_P & \left[\frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right. \\
& \quad \left. + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right] \\
& \quad + kR\Delta x\Delta y\Delta z \\
& = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o + q_u\Delta y\Delta z C_w'' + q_w\Delta x\Delta y C_B + q_v\Delta x\Delta z C_s \\
& \quad + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right) C_E + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} \right) C_w'' + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} \right) C_n'' \\
& \quad + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} \right) C_f'' + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} \right) C_s + \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right) C_B \quad (4.51)
\end{aligned}$$

Desta forma a Equação 4.51 pode ser reescrita:

$$A_p C_P = A_e C_e + A_s C_s + A_b C_B + B \quad (4.52)$$

Onde;

$$\begin{aligned}
A_p & = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} + q_u\Delta y\Delta z + q_v\Delta x\Delta z + q_w\Delta x\Delta y + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \\
& \quad + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_w} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_n} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_f} + \widehat{D}_{ij}\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \\
& \quad + kR\Delta x\Delta y\Delta z
\end{aligned}$$

$$A_e = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta y\Delta z}{\Delta x_e} \right)$$

$$A_s = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta z}{\Delta y_s} \right) + q_v\Delta x\Delta z$$

$$A_b = \widehat{D}_{ij} \left(\frac{\Delta x\Delta y}{\Delta z_b} \right) + q_w\Delta x\Delta y$$

$$B = \frac{R\Delta x\Delta y\Delta z}{\Delta t} C_P^o + qC_w'' dydz + qC_n'' dx dz + qC_f'' dx dy$$

4.6 Método de Solução do Sistema de Equações Discretizadas

Com base nas equações que representam os volumes de controle do domínio, foi possível organizá-las em um sistema de equações lineares.

Em razão da natureza transiente do problema em questão, é necessário resolver o referido sistema para cada instante de tempo, o que demanda um volume significativo de cálculos.

Para lidar com essa complexidade, foram utilizados métodos específicos de resolução que permitiram a solução eficiente do sistema a cada instante de tempo.

Os métodos de resolução de sistemas são classificados em diretos e iterativos. Os métodos iterativos refinam uma aproximação inicial da solução por meio de sucessivas iterações, sem a necessidade de trabalhar com matrizes completas. São ideais para sistemas de grande dimensão ou esparsos.

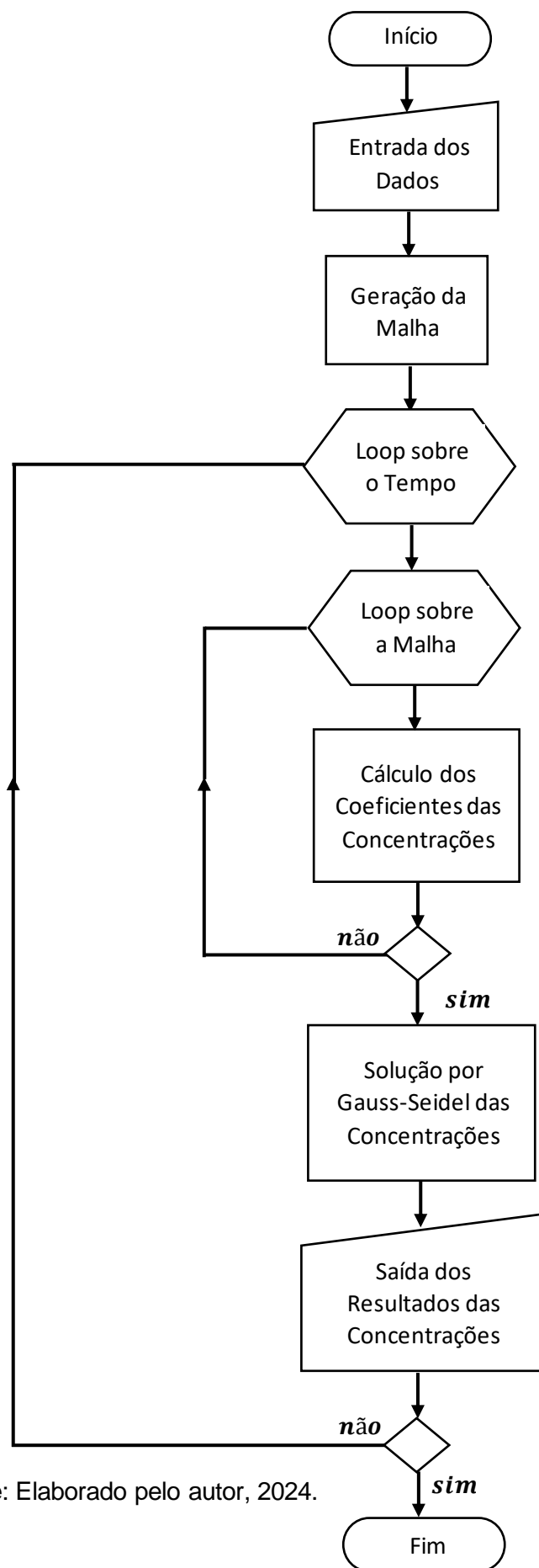
Neste trabalho foi adotado o método de Gauss-Seidel que fica representado pela equação 4.50.

$$A_P C_P^{k+1} = \frac{1}{A_P} (A_e C_E^k + A_w C_W^{k+1} + A_n C_N^k + A_s C_S^{k+1} + A_f C_F^k + A_b C_B^{k+1} + B_p^k) \quad (4.53)$$

Onde, A_P , A_e , A_w , A_n , A_s , A_f e A_b são os coeficientes da equação discretizada, C_E^k , C_N^k e C_F^k são as concentrações calculadas na iteração anterior e C_P^{k+1} , C_W^{k+1} , C_S^{k+1} e C_B^{k+1} são as concentrações calculadas na iteração atual e k representa a iteração.

O processo iterativo começa estimando o campo inicial das variáveis, em seguida faz a iteração no tempo, calculando C_p usando a Equação 4.53, por último verificar a convergência através de um critério e se não for satisfeito retornar ao processo de iteração.

O esquema do programa é ilustrado na Figura 4.5, que apresenta o diagrama em blocos da rotina adotada. Este diagrama utiliza o método de Gauss-Seidel para a resolução dos sistemas lineares e o método dos Volumes Finitos para a discretização numérica.

Figura 4.5 – Diagrama do programa para calculo das concentrações por Volumes Finitos

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

4.7 Análise de Convergência da Malha

A análise de convergência é fundamental para assegurar que os resultados de um modelo numérico sejam independentes da discretização espacial empregada. Este processo é vital para validar a precisão e a confiabilidade dos resultados obtidos. A metodologia aplicada para a análise de convergência de malha segue um rigoroso procedimento amplamente estabelecido na literatura científica.

Este procedimento garante que as simulações numéricas sejam conduzidas com o máximo de precisão, minimizando erros e incertezas associados à discretização da malha.

A abordagem utilizada neste trabalho está em conformidade com o padrão *Standard for Verification and Validation in Computational Fluid Dynamics and Heat Transfer* da ASME (*American Society of Mechanical Engineers*), reconhecido internacionalmente por sua excelência na padronização de práticas de verificação e validação em dinâmicas de fluidos computacionais e transferência de calor.

Os procedimentos seguiram os seguintes passos:

Passo 1: Definir um tamanho de célula e a malha representativa, h .

Para malhas tridimensionais estruturadas, geometricamente similares (não necessariamente cartesianas), define-se h como:

$$h = (\Delta x_{\max} \Delta y_{\max} \Delta z_{\max})^{1/3} \quad (4.54)$$

Para grades não estruturadas, define-se h como:

$$h = \left(\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \Delta V_i \right)^{1/3} \quad (4.55)$$

Passo 2: Selecionar três conjuntos diferentes de resoluções de malha para executar as simulações, a fim de determinar os valores das variáveis-chave importantes para o objetivo do estudo. Neste trabalho, a concentração (mg/L) foi utilizada como a principal variável de interesse.

Passo 3: Calcular a ordem aparente (ou observada) p do método.

Considerando que $h_1 < h_2 < h_3$ e que os fatores de refinamento r_{21} e r_{32} sejam definidos como:

$$r_{21} = \frac{h_2}{h_1} \quad (4.56)$$

$$r_{32} = \frac{h_3}{h_2} \quad (4.57)$$

Para calcular a ordem aparente p do método, foi utilizado as seguintes fórmulas:

1. A ordem aparente p foi calculada com:

$$p = \frac{1}{\ln(r_{21})} \left| \ln \left(\frac{\epsilon_{32}}{\epsilon_{21}} \right) + q(p) \right| \quad (4.58)$$

2. Onde $q(p)$ é dado por

$$q(p) = \ln \left(\frac{r_{21}^p - s}{r_{32}^p - s} \right) \quad (4.59)$$

3. O sinal é definido como:

$$s = \text{sign}(\epsilon_{32}/\epsilon_{21}) \quad (4.60)$$

Aqui, ϵ_{32} e ϵ_{21} são as diferenças entre os valores simulados

$$\epsilon_{32} = \varphi_3 - \varphi_2 \quad (4.61)$$

$$\epsilon_{21} = \varphi_2 - \varphi_1 \quad (4.62)$$

Esse conjunto de equações foi resolvido usando o método iterativo de ponto fixo com a suposição inicial igual ao primeiro termo (ou seja, $q = 0$). Para calcular a ordem aparente p do método, foi desenvolvido um algoritmo iterativo utilizando a linguagem de programação Python, que emprega os resultados das simulações com diferentes resoluções de malha.

O pseudocódigo ilustrado no Quadro 1 descreve de forma simplificada os passos do algoritmo, permitindo uma compreensão clara do processo de cálculo da ordem aparente p . A abordagem iterativa assegura que o valor de p seja calculado com concisão.

Quadro 1 – Pseudocódigo do cálculo da ordem aparente.

```

função calcular_ordem_aparente (phi1, phi2, phi3, r21, r32,
max_iter, tolerancia)
  calcular epsilon32 = phi3 - phi2
  calcular epsilon21 = phi2 - phi1
  inicializar p = 0

  para i de 1 até max_iter
    calcular q_p com base em r21, r32, epsilon32, epsilon21 e p
    atualizar novo_p com base em q_p e a fórmula de iteração
    se diferença entre novo_p e p < tolerancia, então
      sair do loop
    atualizar p = novo_p

retornar p

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Passo 4: Calcular os valores extrapolados

Para calcular os valores extrapolados $\varphi_{21_{\text{ext}}}$ a partir das resoluções da malha, foi utilizado a seguinte fórmula:

$$\varphi_{21_{\text{ext}}} = \frac{r_{21}^p \varphi_1 - \varphi_2}{r_{21}^p - 1} \quad (4.63)$$

Passo 5: Calcular e relatar as estimativas de erro

Nesta etapa, foi calculado e relatado as estimativas de erro associadas à ordem observada p do método. As estimativas de erro podem ser expressas em forma relativa ou absoluta, conforme as seguintes fórmulas:

1. Erro relativo aproximado:

$$e_{a_{21}} = \left| \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{\varphi_1} \right| \quad (4.64)$$

2. Erro absoluto aproximado:

$$e_{a_{21}} = |\varphi_1 - \varphi_2| \quad (4.65)$$

3. Erro relativo extrapolado estimado:

$$e_{21_{\text{ext}}} = \left| \frac{\varphi_{21_{\text{ext}}} - \varphi_1}{\varphi_{21_{\text{ext}}}} \right| \quad (4.66)$$

O Índice de Convergência de Malha (ICM) é uma métrica utilizada para avaliar a precisão e a confiabilidade das malhas que estão sendo avaliadas.

Esse índice quantifica a taxa de convergência das soluções obtidas em malhas sucessivamente refinadas, fornecendo uma estimativa do erro numérico presente nos resultados.

Ao calcular o ICM, foi possível determinar se a malha utilizada é suficientemente refinada para garantir a precisão desejada na simulação. A seguir, apresenta-se a fórmula para o cálculo do ICM para a malha mais refinada:

4. Índice de Convergência de Malha (ICM) para a malha refinada:

$$ICM_{21\text{fina}} = \frac{F_s e_{21\text{ext}}}{r_{21}^p - 1} \quad (4.67)$$

Onde F_s é o Fator de Segurança, com valor adotado de 1.25.

Para verificar a convergência da solução, de acordo com Paudel e Saenger (2017), determina-se o valor da constante C , definida pela Equação 4.65. Assim, se $0 < C < 1$, indica que a convergência é monótona; $C < 0$ indica convergência oscilatória; e $C > 1$ indica divergência da solução.

As soluções extrapoladas são determinadas de acordo com a Equação:

$$C = \frac{\varphi_1 - \varphi_2}{\varphi_2 - \varphi_3} \quad (4.68)$$

No presente trabalho, foram utilizadas diferentes malhas uniformes para analisar a convergência dos resultados sob duas condições de contomo distintas: Tipo I e Tipo II.

A definição das malhas seguiu a necessidade de garantir precisão e eficiência computacional, ajustando a densidade dos elementos para balancear a exatidão dos resultados e o tempo de processamento, conforme apresentado na Tabela 4.2. Esse ajuste permitiu otimizar a capacidade de resolução espacial, especialmente nas regiões de maior interesse para a simulação dos fenômenos de dispersão.

Tabela 4.2 - Malhas utilizadas na análise de convergência.

Condição de Contorno	Malha (m1)	Malha (m2)	Malha (m3)
Tipo I	500x500x500	400x400x400	300x300x300
Tipo II	750x750x750	600x600x600	500x500x500

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

4.8 Planejamento da Análise de Sensibilidade Multifatorial

Este planejamento foi estruturado de forma a permitir uma análise sistemática das respostas do sistema sob variação controlada dos fatores de interesse.

Este método de planejamento fatorial simulado multinível foi empregado com o objetivo de proporcionar uma compreensão mais aprofundada das complexas interações entre os parâmetros e, conseqüentemente, fornecer percepções para aprimorar a precisão e a eficácia da modelagem numérica no estudo da migração de substâncias nocivas em aquíferos.

A Tabela 4.3 ilustra os panoramas de níveis baixos e alto estabelecidos para cada parâmetro considerado no planejamento fatorial.

Estes cenários foram delineados com a intenção de simular as condições que podem ocorrer durante o transporte de poluentes.

Tabela 4.3 – Parâmetros e seus respectivos níveis no planejamento fatorial.

Fator	Nível Baixo	Nível Alto
Velocidade da Água (u)	0.05 $m.dia^{-1}$	0.15 $m.dia^{-1}$
Constante da Reação (k)	0.005 dia^{-1}	0.015 dia^{-1}
Dispersividade (α)	0.5 m	1.5 m
Coeficiente de Retardo (R)	1	1.5
Tempo (t)	30 $dias$	120 $dias$

Fonte: Silva, (2016)

Esses cenários de níveis baixos e alto permitem uma análise comparativa robusta para entender como as variações nos valores dos parâmetros impactam o comportamento do transporte, fornecendo uma base sólida para a análise e interpretação dos resultados obtidos nas simulações numéricas.

No planejamento, inicialmente quatro fatores foram considerados, cada um em diferentes níveis conforme detalhado na Tabela 4.3.

O fator tempo foi avaliado em quatro níveis distintos: 30, 60, 90 e 120 dias, enquanto os demais fatores foram avaliados em dois níveis, conforme especificado no resumo do experimento apresentado na Tabela 4.4.

Tabela 4.4 – Variáveis, níveis e condições utilizadas no planejamento experimental simulado.

Cenário	Velocidade (u) $m.dia^{-1}$	Reações Químicas (k) dia^{-1}	Dispersividade (α) (m)	Retardo (R) -	Tempo ($dias$)
1	0.05	0.005	0.5	1	30;60;90;120
2	0.05	0.005	0.5	1.5	30;60;90;120
3	0.05	0.005	1.5	1	30;60;90;120
4	0.05	0.005	1.5	1.5	30;60;90;120
5	0.05	0.150	0.5	1	30;60;90;120
6	0.05	0.150	0.5	1.5	30;60;90;120
7	0.05	0.150	1.5	1	30;60;90;120
8	0.05	0.150	1.5	1.5	30;60;90;120
9	0.15	0.005	0.5	1	30;60;90;120
10	0.15	0.005	0.5	1.5	30;60;90;120
11	0.15	0.005	1.5	1	30;60;90;120
12	0.15	0.005	1.5	1.5	30;60;90;120
13	0.15	0.150	0.5	1	30;60;90;120
14	0.15	0.150	0.5	1.5	30;60;90;120
15	0.15	0.150	1.5	1	30;60;90;120
16	0.15	0.150	1.5	1.5	30;60;90;120

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A estrutura do planejamento fatorial incluiu um total de 64 ensaios base, sem réplicas, distribuídos em um bloco base.

A partir das simulações conduzidas conforme o planejamento fatorial exposto, foram extraídas três respostas distintas: a concentração máxima, a concentração média e o desvio padrão das concentrações ao longo do domínio estudado.

Essas respostas são cruciais para avaliar o comportamento e a dispersão dos contaminantes sob diferentes condições e configurações paramétricas.

As análises estatísticas foram centradas na resposta da concentração média (CMEDIA), pois esta oferece uma representação mais robusta e

informativa do impacto dos parâmetros sobre o transporte de contaminantes, permitindo uma análise mais precisa e detalhada.

As técnicas estatísticas aplicadas incluíram análise de variância (ANOVA), teste de hipóteses, e análise de regressão, visando identificar as relações significativas entre os fatores estudados sob a resposta da concentração média, bem como entender a magnitude e a direção dessas relações.

Como produto dessas análises, foi produzido um gráfico de Pareto, visando ilustrar as interações significativas entre os fatores, facilitando a interpretação visual das relações entre os parâmetros e a resposta estudada.

4.9 Definição dos Parâmetros na Dinâmica de Contaminantes.

Foram organizados cenários com uma revisão das propriedades físico-químicas de compostos orgânicos, destacando suas características e interações com diferentes matrizes geológicas.

Esta análise é crucial para entender a mobilidade dos contaminantes e como eles reagem sob várias condições de solo e água subterrânea.

Posteriormente, foram abordadas metodologias empregadas nas simulações, incluindo os modelos numéricos e os parâmetros de entrada utilizados para representar as complexas interações entre os contaminantes e a matriz do solo. Com o auxílio de dados provenientes de estudos de campo e literatura especializada, as simulações são ajustadas para refletir condições realísticas de aquíferos.

Este processo permite uma modelagem mais precisa do comportamento dos contaminantes e dos processos de atenuação natural ou induzida. Foram igualmente avaliadas as variações na litologia, como a presença de areia e sedimentos, influenciam a dispersão e a degradação destes compostos.

Os incidentes de vazamento de gasolina comercial no Brasil permitem a simulação dos compostos BTEX. Contudo, optou-se por simular especificamente o benzeno e o xileno para representar os poluentes principais neste contexto. A escolha foi feita com base na diferença de mobilidade entre os dois compostos, que permite uma análise mais detalhada das nuances no comportamento de dispersão e alcance desses poluentes no meio ambiente.

Um dos principais desafios na engenharia, é obter uma compreensão precisa dos parâmetros físico-químicos que são fundamentais para alimentar os modelos matemáticos. Esta dificuldade é crucial, pois a fidelidade e a precisão desses parâmetros impactam diretamente a confiabilidade e a validade dos resultados modelados.

Os parâmetros utilizados nas simulações desta pesquisa foram selecionados com base em dados encontrados na literatura científica, visando assegurar uma melhor correspondência com os dados de campo.

Esses parâmetros incluem características fundamentais para a modelagem, como a porosidade, o coeficiente de dispersão e a velocidade de fluxo, que são essenciais para a calibração dos modelos. A seguir, são apresentados os parâmetros adotados, acompanhados de suas estimativas e intervalos, conforme reportado em estudos prévios

4.9.1 Porosidade – ϵ

A porosidade, representada pela variável ϵ , é definida como a proporção do volume de poros interconectados em relação ao volume total do aquífero. Essa propriedade pode ser determinada por meio de dados de campo ou modelagem física.

A Tabela 4.5 apresenta os intervalos de porosidade utilizados nas simulações, proporcionando uma referência clara dos valores considerados no modelo.

Tabela 4.5 - Estimativas da Porosidade Efetiva

Meio	Porosidade (-)
Areia Grossa	0.31 – 0.46
Areia Fina	0.26 – 0.53
Sedimentos	0.34 – 0.61

Fonte: DOMENICO e SCHWARTZ, (1990)

4.9.2 Fator de Retardo – R

Como mencionado anteriormente, o fator de retardo é estimado pela Equação 4.59:

$$R = 1 + \frac{\rho_b}{\epsilon} k_d \quad (4.59)$$

onde ρ_b é a densidade do aquífero, que, embora, o valor de 1,7 g/cm³ seja usado frequentemente, os valores de densidade utilizados nas simulações foram obtidos da literatura e estão apresentados na Tabela 4.6, de acordo com o tipo de aquífero.

Tabela 4.6 – Valores usuais para a densidade de aquíferos.

Matriz do Aquífero	Densidade (g/cm³)
Areia	1.37 – 1.81
Sedimentos	1.15 – 2.10

Fonte: DOMENICO e SCHWARTZ, (1990)

O k_d , representa o coeficiente de distribuição, que determina a taxa relativa de movimento do contaminante na água subterrânea devido à adsorção a superfície sólida, é expresso por:

$$K_d = K_{oc} + f_{oc} \quad 4.60$$

Na fórmula mencionada, K_{oc} representa o coeficiente de partição carbono-água, cujos valores utilizados estão disponíveis na Tabela (4.7).

O termo f_{oc} refere-se à fração de carbono orgânico nos solos, com valores típicos listados na Tabela (4.8), que serviram de referência metodológica para a definição dos parâmetros de adsorção dos contaminantes nas simulações. Esse parâmetro é fundamental para a estimativa da capacidade de retenção de poluentes nos diferentes tipos de solo

Tabela 4.7 - Coeficientes de Partição Carbono-Água Típicos

Composto Orgânico	K_{oc} (cm³/g)
Benzeno	38 – 83
Xileno	240

Fonte: (ASTM, 1995), (Texas N. R. C. C., 1994), (ZOGORSKI *et al.*, 1996)

Tabela 4.9– Valores para a Fração de Carbono Orgânico em Solos

Meio	f_{oc}
Areia	0.00023 – 0.0012
Sedimentos	0.0011 – 0.029

Fonte: (DOMENICO e SCHWARTZ, 1990)

4.9.3 Gradiente Hidráulico

Os valores típicos para o gradiente hidráulico utilizados nas simulações deste trabalho variam entre 0.0001 e 0.05 m/m, conforme identificado por Newell *et al.* (1996), foram utilizados nas simulações intervalos intermediários da literatura.

4.9.4 Tempo de Meia Vida do Solute Dissolvido – $t_{1/2}$

O tempo de meia-vida é o período necessário para que a concentração de uma pluma dissolvida de contaminante se reduza à metade. A Tabela (4.9) fornece valores típicos para a meia-vida dos compostos BTEX utilizados nos cenários.

Tabela 4.9 - Valores Típicos para a Meia-Vida dos Contaminantes

Elemento	$T_{\frac{1}{2}}$ (anos)
Benzeno	0.02 – 2.0
Xileno	0.038 – 1.0

Fonte: (ASTM, 1995), (HANDBOOK OF ENVIRONMENTAL DEGRADATION RATES, 1991).

O coeficiente de decaimento de primeira ordem foi calculado como 0.693 dividido pela meia-vida do contaminante na água subterrânea. Para a obtenção do coeficiente de decaimento, foi usado a fórmula do decaimento exponencial: $C(t) = C_0 e^{-kt}$. Considerando a meia-vida o tempo para a concentração reduzir pela metade, resultou em $\frac{1}{2} = e^{-kt_{1/2}}$. Aplicando logaritmo natural, obtém-se $\ln(0.5) = -0.693$, portanto $k = \frac{0.693}{t_{1/2}}$.

4.10 Simulações Realísticas de Litologia com Compostos Orgânicos.

Conforme mencionado, foi delineado um modelo detalhado para simular a dinâmica dos compostos orgânicos em diferentes cenários, utilizando uma metodologia que integra variáveis físico-químicas e hidrológicas críticas descritas no subcapítulo anterior. A porosidade e a densidade do solo foram calculadas a partir de médias derivadas de valores mínimos e máximos obtidos da literatura, o que assegura uma representação realista e robusta das características do aquífero, conforme apresentado nas Tabelas 4.6 e 4.7.

A constante de distribuição foi determinada pela combinação do coeficiente de partição carbono-água (K_{oc}) e a fração de carbono orgânico (f_{oc}), parâmetros essenciais para avaliar a mobilidade diferencial do benzeno e do xileno no meio poroso, conforme descrito nas Tabelas 4.8 e 4.9. Essa abordagem permitiu capturar de forma precisa o comportamento dos contaminantes em relação às interações com a matéria orgânica presente no solo.

Além disso, a constante de reação foi ajustada considerando a meia-vida dos compostos, com a conversão de valores anuais para diários, o que possibilitou uma representação acurada da taxa de degradação desses poluentes no ambiente subterrâneo. A Tabela 4.10 foi utilizada como referência para definir esses parâmetros e garantir a consistência dos valores aplicados nas simulações.

Essas simulações fornecem uma base sólida para a implementação de estratégias de remediação e monitoramento dos aquíferos contaminados, permitindo uma avaliação crítica da dispersão e persistência dos compostos no solo e na água subterrânea. A metodologia reforça a importância de uma gestão integrada para mitigar os impactos negativos nos recursos hídricos subterrâneos, assegurando a eficiência das intervenções planejadas.

Por fim, a Tabela 4.10 reúne todos os parâmetros utilizados nos quatro cenários simulados, permitindo uma visão abrangente das variáveis que influenciam diretamente os resultados obtidos nas simulações

Tabela 4.10 - Características dos Cenários de Simulação de Dispersão de Poluentes em Diferentes Condições.

Cenário	Poluente	Tipo de Solo	Densidade (g/cm^3)	Porosidade	Constante de Distribuição (cm^3/g)	Velocidades (u, v, w) (m/dia)	Constante de Reação (dia^{-1})	Fator de Retardo
1	Benzeno	Arenoso	1.59	0.39	0.043	0.49, 0.14, 0.14	0.00187	1.17
2	Benzeno	Sedimentar	1.62	0.47	0.304	0.10, 0.03, 0.03	0.00187	2.04
3	Xileno	Arenoso	1.59	0.39	0.171	0.49, 0.14, 0.14	0.00365	1.69
4	Xileno	Sedimentar	1.62	0.47	0.456	0.10, 0.03, 0.03	0.00365	2.56

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

4.10.1 Cenários das Simulações Realísticas para Fluxo Prescrito.

Este subcapítulo descreve detalhadamente a metodologia empregada para simular o transporte de poluentes em um aquífero, a partir de um cenário fundamentado na condição de contorno de fluxo prescrito.

A finalidade desta modelagem é avaliar a sensibilidade do sistema a diferentes taxas de fluxo de contaminantes, proporcionando uma abordagem realista e aplicável para a gestão de riscos ambientais.

Para criar um cenário realístico que refletisse as condições possíveis de um incidente de vazamento, optou-se por modelar um tanque subterrâneo de combustível.

O tanque foi dimensionado com um volume de 15 metros cúbicos, considerando um diâmetro de 2.5 metros e um comprimento aproximado de 3.0 metros. Esta configuração foi escolhida para representar um típico reservatório de combustível encontrado em postos de serviço ou instalações industriais.

A taxa de vazamento inicial foi estabelecida em 3.5 kg/(m²-dia), correspondente a um cenário onde uma fissura no tanque permite o escape contínuo de combustível.

Neste trabalho, a simulação dos compostos foi realizada com foco no benzeno e no xileno, que são os principais poluentes associados aos vazamentos de gasolina comercial no Brasil. Essa escolha visa representar o contexto mais relevante para o estudo da contaminação do solo e do aquífero por combustíveis.

A escolha dessa taxa de vazamento baseia-se na suposição de que aproximadamente 0.153% da massa total de combustível no tanque seria perdida diariamente, refletindo uma situação de falha real que necessita de ação imediata para mitigação de danos.

O propósito dessa configuração é fornecer um modelo detalhado que permita a análise da dispersão do poluente no ambiente subterrâneo, considerando as interações complexas entre o combustível, o solo e o aquífero. Além disso, a simulação nesta condição de contorno do Tipo II visa identificar os

efeitos das intervenções e a eficácia das medidas de contenção ao longo do tempo. A lógica de variação do fluxo de poluentes ao longo do tempo na simulação é ilustrada pelo seguinte pseudocódigo:

Quadro 2 - Pseudocódigo para simulação das fases de vazamento do fluxo prescrito.

Início:
 Definir tempo total de simulação (ndt) e percentuais para vazamento ativo e decaimento:
 percentual vazamento = 30% do ndt
 percentual_decaimento = 60% do ndt
 fluxo intermediario = 1.5 kg/(m²·dia)

Processo de Simulação:
 Para cada intervalo de tempo (k2) até o fim da simulação:

Fase de Vazamento Ativo:
 Se k2 < dias de vazamento:
 Aplicar fluxo de 3.5 kg/(m²·dia)

Fase de Decaimento:
 Se dias de vazamento ≤ k2 < dias de vazamento + dias_de_decaimento_intermediario:
 Aplicar fluxo intermediário de 1.5 kg/(m²·dia)

Cessaçã do Fluxo:
 Se k2 ≥ dias_de_vazamento + dias_de_decaimento_intermediario:
 Estabelecer fluxo como zero

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

As combinações dos parâmetros dos cenários para a condição de contorno Tipo II seguem de forma análoga à descrição metodológica para a condição de contorno Tipo I, conforme resumido na Tabela 4.11.

A principal diferença reside na variação do fluxo prescrito, que foi detalhadamente descrita no pseudocódigo. Enquanto a condição de contorno Tipo I utiliza injeção da concentração constante, a condição de contorno Tipo II incorpora variações no fluxo ao longo do tempo, refletindo diferentes fases de vazamento e decaimento.

Essas fases são essenciais para simular com precisão as dinâmicas de contaminação no aquífero, garantindo que o modelo capture a complexidade dos processos ambientais envolvidos.

4.11 Metodologia para Construção da Interface Gráfica

Para desenvolver a interface gráfica do software de simulação de transporte de poluentes, optou-se por utilizar a linguagem de programação Python em conjunto com a biblioteca Tkinter, devido à sua portabilidade e capacidade de criar interfaces gráficas de usuário (GUIs) de forma eficiente e com relativa simplicidade. A Tkinter é amplamente utilizada na comunidade de Python por ser leve e estar incluída como padrão na maioria das instalações do Python.

4.11.1 Etapas de Desenvolvimento da Interface Gráfica:

1. Estrutura da Interface: A GUI foi projetada para ser intuitiva, permitindo que usuários tanto com experiência técnica quanto os não especialistas possam operar o software eficazmente.

A interface segue uma abordagem modular, com seções claramente delineadas para entrada de dados, controle de simulação e visualização de resultados.

2. Entrada de Dados: Foram incluídos campos de entrada de texto e controles deslizantes para os parâmetros, permitindo que os usuários definam rapidamente os parâmetros necessários para a simulação.

Valores típicos são exibidos como referência, agilizando o processo de configuração.

3. Responsividade: A interface foi projetada para se ajustar a diferentes resoluções de tela, garantindo que seja acessível em dispositivos variados, desde laptops a monitores de alta resolução.

A disposição dos elementos na interface se adapta dinamicamente para aproveitar o espaço disponível da melhor maneira.

4. Funcionalidades Intuitivas: Botões claramente marcados para iniciar e parar a simulação, bem como para acessar seções de ajuda e informações técnicas, tornam a operação do software direta.

Um console incorporado exibe mensagens em tempo real sobre o status da simulação, oferecendo feedback instantâneo aos usuários.

5. Arquitetura da Aplicação: A arquitetura de software adotada facilita a manutenção e futuras atualizações.

O código foi organizado em classes e funções que seguem o princípio de responsabilidade única, o que simplifica a detecção de erros e a implementação de novas funcionalidades.

A separação clara entre a lógica de interface gráfica e a lógica de processamento de dados promove uma maior usabilidade do código e facilita a realização de testes automatizados.

6. Acessibilidade e Ajudas Visuais: Foram incluídos recursos de acessibilidade, como a ampliação de fontes e contraste de cores para facilitar a leitura.

O sistema incorpora verificações automáticas de dados que averigam a coerência e a integridade das informações inseridas, garantindo que apenas dados corretos e completos sejam utilizados nas simulações. Cada campo de entrada possui restrições específicas e alertas visuais que notificam o usuário em caso de inconsistências ou erros, permitindo correções imediatas.

Para facilitar a compreensão e o uso das ferramentas, tutoriais interativos e exemplos práticos são disponibilizados, guiando o usuário passo a passo por cada funcionalidade do sistema. Essas instruções abrangem desde a configuração inicial até a interpretação dos resultados, proporcionando um suporte abrangente que atende tanto iniciantes quanto usuários avançados.

As opções de personalização permitem que o usuário ajuste a interface e os parâmetros do modelo de acordo com suas necessidades específicas, aumentando a flexibilidade e a eficiência do processo de simulação.

Ao integrar orientações contextuais e valores de referência diretamente na interface, a aplicação fornece suporte educacional que beneficia usuários com variados níveis de conhecimento e experiência, promovendo uma curva de aprendizado mais suave para novos usuários, enquanto fornece aos usuários avançados as ferramentas necessárias para a análise detalhada e personalização de cenários complexos de vazamento e contaminação.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Análise de Convergência da Malha

Esta seção apresenta inicialmente a análise de convergência para a Condição de Contorno Tipo I, onde a coleta dos perfis foi realizada verticalmente. Para esta condição, foi considerado as dimensões do aquífero de 500 metros em cada direção (comprimento, largura e profundidade). As resoluções de refinamento adotadas foram $r_{21}=1.25$ e $r_{32}=1.33$. Embora a *American Society of Mechanical Engineers* (ASME, 2007) recomende um fator de refinamento de malha desejável maior que 1,3, os fatores de refinamento utilizados neste estudo foram ligeiramente ajustados para acomodar a seleção de malhas que melhor se adequassem ao processo simulado.

Os valores de concentração foram coletados em 20 pontos ao longo de cada malha, com a coleta sendo realizada verticalmente a partir da origem. O objetivo desta coleta foi verificar a convergência dos resultados na zona de lançamento do poluente em direção à profundidade. As coordenadas e os valores de concentração coletados estão apresentados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Valores de Concentração (mg/L) coletados verticalmente.

Ponto	X	Malha1	Malha2	Malha3
1	0.00	878.623	876.553	871.769
2	1.00	688.562	691.591	703.085
3	1.99	534.510	536.570	540.475
4	2.99	375.418	378.642	390.320
5	3.99	242.165	249.786	268.661
6	4.98	149.597	152.919	161.976
7	5.98	92.518	95.792	103.355
8	6.98	47.187	49.448	55.734
9	7.97	25.963	27.088	30.667
10	8.97	12.232	12.987	15.816
11	9.97	5.323	5.643	6.741
12	10.90	2.693	2.836	3.704
13	11.90	0.904	0.997	1.479
14	12.90	0.465	0.483	0.703
15	13.90	0.170	0.189	0.290
16	14.90	0.059	0.063	0.099
17	15.90	0.024	0.027	0.049
18	16.90	0.007	0.007	0.016
19	17.90	0.004	0.004	0.007
20	18.90	0.001	0.002	0.002

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A análise de convergência foi conduzida utilizando os dados coletados para calcular o Índice de Convergência de Malha (ICM). Os resultados da análise de convergência, apresentados na Tabela 5.2, incluem a ordem aparente (p), os erros relativos extrapolados $e_{21_{\text{ext}}}$ e $e_{32_{\text{ext}}}$, os Índices de Convergência de Malha ICM_{21_f} e ICM_{32_g} , e o tipo de convergência observada.

Tabela 5.2 - Resultados da Análise de Convergência e Índice de Convergência de Malha (ICM)

Ponto	p	$e_{21_{\text{ext}}}$	$e_{32_{\text{ext}}}$	ICM_{21_f}	ICM_{32_g}	Conv.
1	2.25	0.4%	0.6%	0.4%	0.7%	Monotônica
2	4.13	0.3%	0.7%	0.4%	0.9%	Monotônica
3	1.49	1%	1.4%	1.2%	1.7%	Monotônica
4	3.96	0.6%	1.5%	0.8%	1.8%	Monotônica
5	2.52	4.3%	7.6%	5.2%	8.9%	Monotônica
6	2.88	2.5%	4.8%	3.1%	5.7%	Monotônica
7	2.25	5.7%	9.5%	6.8%	10.8%	Monotônica
8	2.96	5.4%	10.4%	6.4%	11.8%	Monotônica
9	3.47	3.8%	8.3%	4.6%	9.6%	Monotônica
10	4.09	4.3%	10.8%	5.2%	12.1%	Monotônica
11	3.75	4.8%	11.1%	5.7%	12.5%	Monotônica
12	5.87	2%	7.4%	2.5%	8.6%	Monotônica
13	5.31	4.7%	15.4%	5.6%	16.7%	Monotônica
14	8.51	0.7%	4.5%	0.8%	5.4%	Monotônica
15	5.31	5.3%	17.4%	6.3%	18.5%	Monotônica
16	7.51	1.5%	8.2%	1.9%	9.4%	Monotônica
17	6.82	3.4%	15.8%	4.2%	17%	Monotônica
18	8.93	1.4%	10.1%	1.7%	11.5%	Monotônica
19	7.80	1.7%	10%	2.1%	11.3%	Monotônica
20	6.82	1.9%	8.7%	2.3%	10%	Monotônica

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Os resultados indicaram uma convergência monotônica em todos os pontos analisados. A convergência monotônica é caracterizada pela diminuição contínua dos erros à medida que a malha é refinada. A maioria dos pontos apresentou erros relativos baixos, com valores de ICM adequados para a verificação do modelo. A média do erro relativo extrapolado para $e_{21_{\text{ext}}}$ foi de 2,68% e para $e_{32_{\text{ext}}}$ foi de 7,89%, com desvios padrão de 1,76% e 3,92%, respectivamente. A média do ICM para ICM_{21_f} foi de 3,23% e para ICM_{32_g} foi de 6,53%, com desvios padrão de 1,98% e 3,45%, respectivamente.

Estes resultados demonstram que a diferença entre os erros e os índices de convergência são relativamente baixos, indicando a possibilidade de utilização da malha intermediária devido à relação custo-benefício computacional.

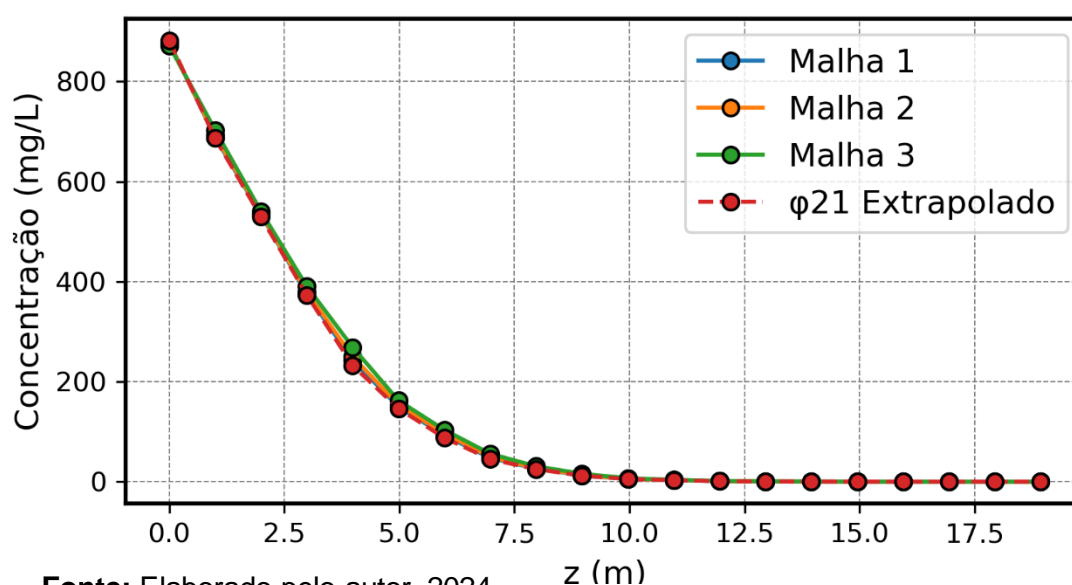
A análise sugere que os resultados obtidos são independentes da malha, indicando que o nível de refinamento alcançado é adequado para garantir a eficácia do processo de simulação e a robustez do modelo empregado.

Para fins de verificação visual, foi elaborado um gráfico da concentração do poluente (mg/L) em função da coordenada x (m) para três malhas diferentes (Malha 1, Malha 2 e Malha 3), bem como a concentração extrapolada ($\phi_{21_{ext}}$).

A Figura 5.1 permite visualizar a convergência dos resultados entre as diferentes malhas e a solução extrapolada. A proximidade das curvas das três malhas com a curva extrapolada sugere uma boa correspondência e valida a precisão dos cálculos de erro extrapolado.

A análise gráfica ilustra esse comportamento, demonstrando que, apesar das diferenças no refinamento das malhas, os resultados convergem de forma consistente, colaborando com a validação do modelo numérico utilizado.

Figura 5.1 - Concentração de Poluente ao Longo do Perfil Vertical para Diferentes Malhas e Extrapolação.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Após a análise de convergência na direção vertical para a Condição de Contorno Tipo I, a próxima etapa envolveu a análise de convergência na direção longitudinal (x).

Esta análise foi fundamental para verificar a precisão dos resultados ao longo da extensão horizontal do domínio, garantindo que a simulação capture adequadamente a dispersão do poluente ao longo desta direção.

Os valores de concentração foram coletados novamente em 20 pontos ao longo de cada malha na direção longitudinal (x), começando da origem. Esta coleta foi realizada para avaliar a convergência dos resultados ao longo do comprimento do domínio simulado. As coordenadas e os valores de concentração coletados são apresentados na Tabela 5.3.

Tabela 5.3 - Valores de Concentração (mg/L) coletados longitudinalmente.

Ponto	X	Malha1	Malha2	Malha3
1	0	878.623	876.553	871.769
2	1.00	470.157	477.140	501.710
3	1.99	241.900	249.644	269.875
4	2.99	122.242	126.460	138.360
5	3.99	57.444	60.745	77.731
6	4.98	25.306	27.403	40.793
7	5.98	12.442	13.431	18.297
8	6.98	5.385	5.965	9.112
9	7.97	2.108	2.398	5.065
10	8.97	0.773	0.874	1.290
11	9.97	0.290	0.300	0.344
12	10.96	0.110	0.122	0.212
13	11.96	0.040	0.043	0.092
14	12.96	0.013	0.013	0.016
15	13.95	0.003	0.004	0.005
16	14.95	9.72E-04	1.04E-03	1.70E-03
17	15.95	3.40E-04	3.68E-04	5.58E-04
18	16.94	9.98E-05	1.06E-04	1.29E-04
19	17.94	9.91E-06	1.03E-05	1.19E-05
20	18.94	5.96E-06	6.16E-06	6.75E-06

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Os valores coletados foram utilizados para calcular o Índice de Convergência de Malha (ICM) por meio dos passos já descritos no capítulo metodológico. Os resultados indicaram uma convergência monotônica em todos os pontos analisados.

Para uma análise mais sintética, a Tabela 5.4 apresenta as médias e os desvios padrão dos principais parâmetros calculados no ICM.

Tabela 5.4 - Estatísticas dos Parâmetros de Convergência.

Parâmetro	Média	Desvio Padrão
Ordem Aparente (p)	5.24	1.82
Erro Relativo Extrapolado ($e_{21_{ext}}$)	3.02%	1.75%
Erro Relativo Extrapolado ($e_{32_{ext}}$)	9.75%	5.26%
Índice de Convergência (ICM_{21_f})	3.63%	2.04%
Índice de Convergência (ICM_{32_g})	9.72%	5.37%

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Tabela 5.4 resume as médias e os desvios padrão dos parâmetros calculados, fornecendo uma visão clara sobre a precisão e a estabilidade dos resultados obtidos.

A média da ordem aparente (p) calculada foi de 5.24, com um desvio padrão de 1.82, indicando variações moderadas na ordem de precisão entre os pontos analisados.

Os erros relativos extrapolados $e_{21_{ext}}$ e $e_{32_{ext}}$ apresentaram médias de 3.02% e 9.75% respectivamente, com desvios padrão de 1.75% e 5.26%. Estes resultados mostram que os erros relativos extrapolados foram maiores para $e_{32_{ext}}$, refletindo uma maior variabilidade na malha mais grosseira.

Os Índices de Convergência de Malha ICM_{21_f} e ICM_{32_g} apresentaram médias de 3.63% e 9.72%, respectivamente, com desvios padrão de 2.04% e 5.37%, indicando que a simulação apresenta uma boa estabilidade e precisão nas malhas refinadas, garantindo a confiabilidade dos resultados obtidos e a eficácia do método numérico aplicado.

Tais resultados reforçam a opção por utilizar a malha intermediária, pois ela oferece um equilíbrio ideal entre a convergência da malha e o custo computacional. A malha intermediária permite alcançar a precisão necessária para a simulação sem incorrer em custos computacionais excessivos, tornando-se uma escolha eficiente e prática para a modelagem numérica.

A análise de convergência para a Condição de Contorno Tipo II foi conduzida utilizando as dimensões de 500 metros em cada direção (comprimento, largura e profundidade). As malhas uniformes adotadas tinham resoluções de 750^3 , 600^3 e 500^3 . O aumento na resolução da malha foi necessário devido às características específicas das condições de contorno do tipo II, que geralmente apresentam maior dificuldade para atingir a tolerância desejada em comparação com outras condições de contorno. Esse ajuste permitiu uma avaliação mais precisa da dispersão do poluente no domínio simulado.

Os valores de concentração foram coletados também em 20 pontos ao longo de cada malha na direção vertical, começando da origem. Esta coleta foi realizada para avaliar a convergência dos resultados ao longo da profundidade do domínio simulado. As coordenadas e os valores de concentração coletados são apresentados na Tabela 5.5.

Tabela 5.5 – Fluxos mássicos ($kg/m^2.dia$) coletados verticalmente

Ponto	X	Malha1	Malha2	Malha3
1	0	31.996	33.285	35.739
2	0.60	341.858	344.186	348.081
3	1.20	783.648	790.089	812.904
4	1.80	1220.407	1225.361	1232.220
5	2.40	1279.673	1286.180	1325.570
6	2.99	1173.188	1188.840	1213.810
7	3.59	922.530	928.300	950.813
8	4.19	584.434	592.882	640.284
9	4.79	409.770	415.563	438.978
10	5.39	186.248	189.098	202.498
11	5.99	117.208	119.946	125.269
12	6.59	59.835	61.625	65.483
13	7.19	23.977	24.896	27.354
14	7.78	8.951	9.402	10.463
15	8.38	3.727	3.801	4.245
16	8.98	1.936	1.997	2.129
17	9.58	0.849	0.864	0.905
18	10.18	0.188	0.199	0.240
19	11.38	0.083	0.087	0.105
20	11.98	0.029	0.030	0.034

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A análise de convergência foi efetuada com base nos dados obtidos, visando calcular o Índice de Convergência de Malha (ICM).

Os resultados desta análise, detalhados na Tabela 5.6, englobam a ordem de precisão (p), os erros relativos extrapolados $e_{21_{\text{ext}}}$ e $e_{32_{\text{ext}}}$, bem como os Índices de Convergência de Malha ICM_{21_f} e ICM_{32_g} , e o tipo de convergência observada.

Tabela 5.6 – Estatísticas dos Parâmetros de Convergência Condição de Contorno Tipo II.

Parâmetro	Média	Desvio Padrão
Ordem Aparente (p)	5.47	2.60
Erro Relativo Extrapolado ($e_{21_{\text{ext}}}$)	2.61%	2.10%
Erro Relativo Extrapolado ($e_{32_{\text{ext}}}$)	5.10%	3.42%
Índice de Convergência (ICM_{21_f})	3.14%	2.46%
Índice de Convergência (ICM_{32_g})	5.94%	3.82%

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Neste método as estimativas de erros relativos e absolutos são fundamentais para avaliar a precisão das simulações. Segundo Roache (1994), erros menores que 1%, são considerados excelentes, erros entre 1% e 5% são aceitáveis, e erros acima de 5% indicam a necessidade de melhorias no modelo, refinamentos de malha ou revisões na formulação matemática e física e o Índice de Convergência de Malha (ICM) segue categorias semelhantes.

Os resultados da análise de convergência para a Condição de Contorno Tipo II indicaram que os erros relativos extrapolados $e_{21_{\text{ext}}}$ e $e_{32_{\text{ext}}}$ apresentaram médias de 2.61% e 5.10%.

Os Índices de Convergência de Malha ICM_{21_f} e ICM_{32_g} apresentaram médias de 3.14% e 5.94%, respectivamente. Esses resultados mostram que a utilização da malha intermediária foi eficaz, equilibrando a necessidade de precisão com o custo computacional. O tempo médio para o Tipo I foi de aproximadamente 42,23 minutos, enquanto para o Tipo II foi de aproximadamente 148,36 minutos (ou cerca de 2 horas e 28 minutos).

5.2 Resultados da Análise de Sensibilidade

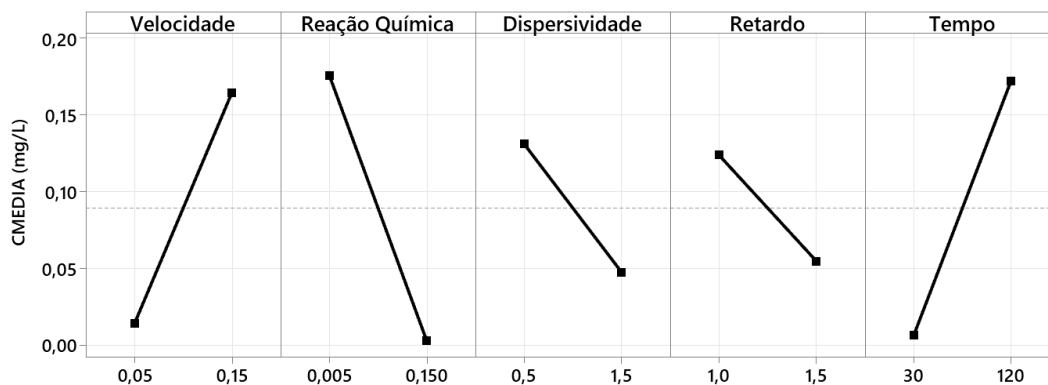
Esta seção dedica-se aos resultados da análise de sensibilidade, onde se investigou o impacto das variações dos parâmetros do modelo no comportamento do transporte de contaminantes.

A partir de um planejamento fatorial simulado, foram avaliadas as influências isoladas e combinadas dos fatores estudados. A metodologia empregada permitiu a identificação das variáveis mais significativas, fornecendo uma compreensão detalhada das dinâmicas envolvidas.

A análise do Efeito Principal, realizada como o passo inicial da avaliação estatística, revelou-se uma ferramenta indispensável na distinção da influência específica de cada fator sobre a variável de interesse. Neste estudo, o foco recai sobre a concentração média do poluente (CMEDIA) no aquífero.

A Figura 5.2 ilustra as influências, permitindo uma interpretação intuitiva do impacto de cada variável independente.

Figura 5.2: Gráfico de Efeito Principal da Análise de Sensibilidade.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A inspeção do Gráfico de Efeito Principal revela variações distintas na CMEDIA devido à alteração simultânea dos níveis dos fatores. Os fatores velocidade (m/dia) e reação química (dia^{-1}) demonstram um impacto notável sobre a CMEDIA.

O efeito da Constante de Reação Química é negativo, indicando que um aumento na constante de reação química resulta em uma diminuição da CMEDIA. Isso sugere que reações químicas mais rápidas promovem a degradação dos contaminantes, reduzindo sua concentração média. Por outro

lado, o efeito da Velocidade é positivo, significando que um aumento na velocidade do fluxo subterrâneo resulta em uma maior CMEDIA, devido ao transporte mais eficiente dos contaminantes. Em contraste, os fatores dispersividade (m) e retardo ($-$) exibem inclinações mais suaves no Gráfico de Efeito Principal, indicando uma influência menos marcante sobre a CMEDIA.

A aplicação da ANOVA é crucial para a investigação, pois revela a influência significativa dos fatores e suas interações na resposta estudada. A Tabela 5.7 detalha o impacto de cada fator e suas interações na variabilidade da CMEDIA.

Tabela 5.7: Análise de Variância (ANOVA) dos Efeitos sobre a (CMEDIA).

Fonte	Efeito	Valor-F	Valor-P
Modelo		12,13	0,000
Linear		18,67	0,000
Velocidade	0,1508	26,53	0,000
Reação Química	-0,1734	35,08	0,000
Dispersividade	-0,0837	8,18	0,006
Retardo	-0,0693	5,60	0,022
Tempo	0,1664	17,95	0,000
Interações de 2 fatores		8,86	0,000
Velocidade; Reação Química	-0,1471	25,24	0,000
Velocidade; Dispersividade	-0,0579	6,96	0,011
Velocidade; Retardo	-0,0579	3,90	0,054
Velocidade; Tempo	0,1409	12,86	0,001
Reação Química; Dispersividade	0,0835	8,13	0,006
Reação Química-Retardo	0,0675	5,31	0,026
Reação Química-Tempo	-0,1662	17,91	0,000
Dispersividade; Retardo	0,0353	1,45	0,234
Dispersividade; Tempo	-0,0858	4,77	0,034
Retardo; Tempo	-0,0564	2,06	0,157
Erro			
Total			

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Os efeitos lineares e de interação entre dois fatores sobre a Concentração Média de Poluentes (CMEDIA) estão delineados na Tabela 5.7. A análise de variância (ANOVA) realizada permite avaliar a significância estatística desses fatores no modelo estudado.

Dentro do modelo, os efeitos lineares individuais de cada fator são expressivamente significativos. A *velocidade*, com um *Valor-F* de 26,53 e um *Valor-P* menor que 0,001, destaca-se como um fator crítico, indicando que variações na velocidade têm um forte impacto na CMEDIA.

Similarmente, a Constante de Reação Química apresenta um *Valor-F* de 35,08, que é consideravelmente alto, indicando sua influência significativa na resposta.

Outros fatores lineares, como Dispersividade, Retardo e Tempo, também mostram significância estatística, embora em menor grau comparados à Velocidade e à Reação Química.

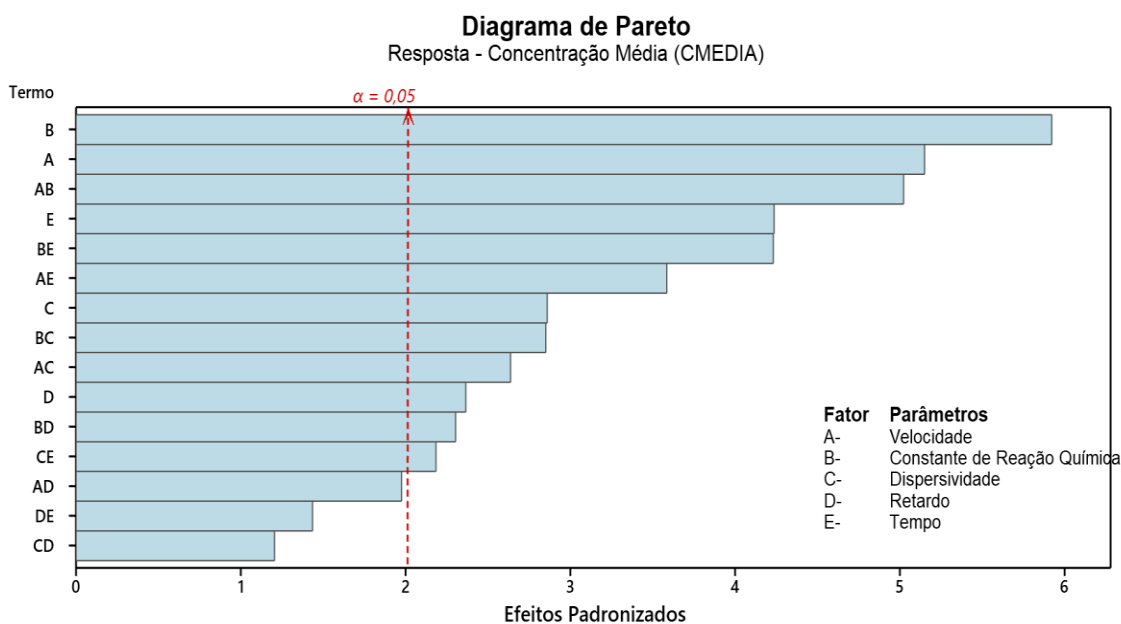
Além disso, as interações entre dois fatores são igualmente importantes no modelo. Entre essas, a interação entre Velocidade e Constante de Reação Química é a mais significativa, com um *Valor F* de 25,24.

Em contrapartida, algumas interações, como Dispersividade_Retardo e Retardo_Tempo, não mostraram significância estatística, com *Valores-P* de 0,234 e 0,157, respectivamente.

Isso sugere que, nesses casos específicos, a interação entre os fatores não exerce um impacto significativo na CMEDIA, devido à natureza dos dados de entrada utilizados.

Com base na Tabela 5.7, as interações entre os fatores e seus impactos na Concentração Média de Poluentes (CMEDIA) podem ser esclarecidos através do Gráfico de Pareto, que destaca as interações significativas e seus respectivos graus de influência.

Este diagrama facilita a interpretação das interações e sua compreensão no contexto do transporte de contaminantes, proporcionando uma plataforma robusta para análises detalhadas e uma compreensão mais aprofundada das complexidades da sensibilidade do sistema investigado.

Figura 5.3: Diagrama de Pareto com interações das variáveis.

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

O Diagrama de Pareto Figura (5.3) ilustra a magnitude e a significância dos efeitos padronizados dos fatores e suas interações na variabilidade da CMEDIA (Concentração Média Efetiva da Dispersão). Cada barra representa um fator ou uma interação entre fatores, com a linha vermelha indicando o nível de significância de 5%.

Os resultados do planejamento fatorial simulado, que indicam que uma maior taxa de reações químicas resulta em uma redução na concentração média de poluentes, estão em concordância com os dados da literatura. Conforme descrito por Freeze e Cherry (1989), reações químicas mais rápidas podem facilitar a retenção ou transformação dos contaminantes, enquanto reações mais lentas permitem que os poluentes penetrem mais profundamente no aquífero. Dessa forma, os achados deste estudo corroboram a teoria estabelecida, reforçando a importância da taxa de reação na mitigação da dispersão de contaminantes.

Vasconcelos (2008) também destaca a importância dos processos químicos entre a zona saturada e a solução contaminada, que causam o retardamento da migração de poluentes em meios porosos. Esse comportamento observado em nossas simulações reflete exatamente o que a

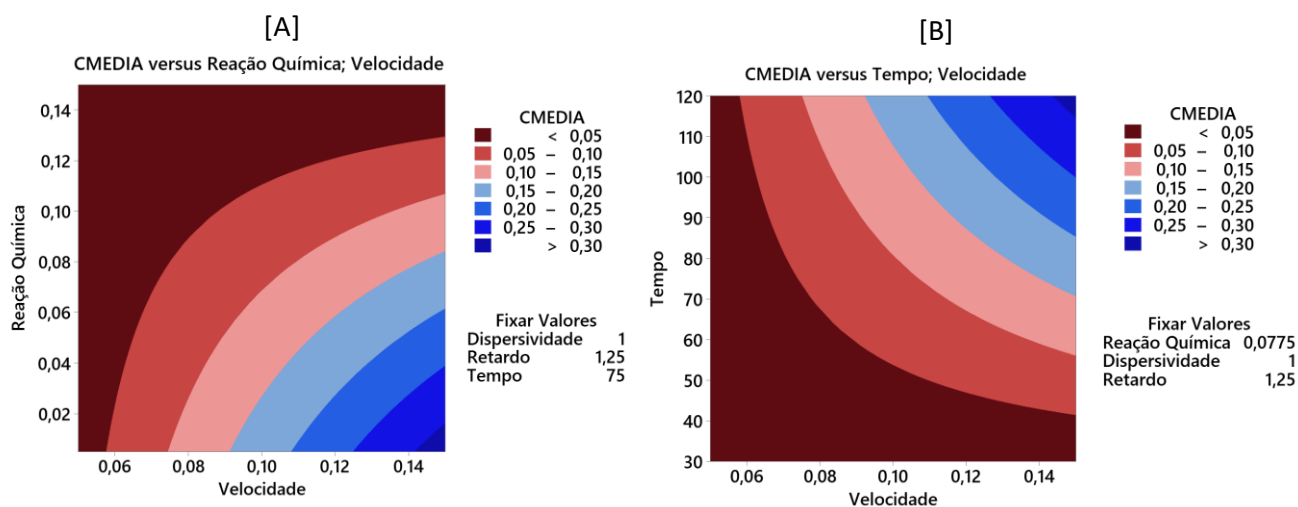
autora descreve, reforçando a compreensão do papel desses processos no controle da dispersão dos contaminantes.

Portanto, o impacto substancial da constante de reações químicas na concentração média, conforme observado nos resultados experimentais, corrobora as análises teóricas e experimentais previamente estabelecidas na literatura hidrogeológica.

A velocidade de escoamento também desempenhou um papel crucial na análise conduzida neste trabalho, com os resultados obtidos sendo amplamente suportados pela literatura existente, por exemplo, Ford (2005) discute que as interações entre águas subterrâneas e superficiais impactam o transporte de contaminantes, demonstrando que fluxos mais rápidos podem transportar contaminantes a profundidades maiores, enquanto fluxos mais lentos podem favorecer um maior número de interações químicas, potencialmente reduzindo a concentração das espécies contaminantes.

Adicionalmente ao diagrama de Pareto foram criados gráficos de contorno para analisar a influência dos principais fatores e suas interações na CMEDIA. A Figura 5.4 [A] mostra a influência combinada da reação química e da velocidade do fluxo subterrâneo na CMEDIA. Observa-se que a CMEDIA aumenta com o incremento da velocidade do fluxo, indicando um transporte mais rápido dos contaminantes.

Figura 5.4 - Distribuição da CMEDIA em Função da Velocidade: Análise com Variação da Reação Química [A] e do Tempo [B]



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

No entanto, a CMEDIA diminui com o aumento da taxa de reação química. Áreas de maior velocidade (próximas de 0,14 m/dia) apresentam valores mais altos de CMEDIA, especialmente visíveis nas regiões azuis do gráfico.

O coeficiente de reação química, por sua vez, tende a reduzir a CMEDIA, sugerindo que reações mais rápidas transformam ou degradam os contaminantes, resultando em uma menor concentração média efetiva.

O gráfico de contorno da Figura 5.4 [B] ilustra a relação entre CMEDIA, tempo e velocidade do fluxo subterrâneo. Observa-se que a CMEDIA aumenta com a velocidade, similar ao observado anteriormente. Regiões de maior velocidade (próximas de 0,14 m/dia) apresentam valores mais altos de CMEDIA, especialmente nas áreas azuis do gráfico.

Além disso, a CMEDIA também aumenta com o tempo, indicando que a concentração de contaminantes continua a crescer à medida que o tempo avança, refletindo a acumulação e dispersão contínua no meio subterrâneo.

A interação entre o tempo e a velocidade do fluxo subterrâneo é evidente. Em tempos iniciais (próximos de 30 dias), a CMEDIA é baixa, especialmente em velocidades menores, como indicado pelas áreas vermelhas. À medida que o tempo avança, a CMEDIA aumenta substancialmente, especialmente em velocidades mais altas.

Isso sugere que o efeito acumulativo do tempo combinado com uma maior velocidade de fluxo resulta em uma advecção mais ampla e significativa dos contaminantes em aquíferos. Em tempos mais longos (próximos de 120 dias), a influência da velocidade é mais pronunciada, com regiões de alta velocidade exibindo as maiores CMEDIA.

Essa análise é fundamental para prever a dispersão de contaminantes em ambientes subterrâneos, auxiliando na implementação de estratégias de remediação eficazes. A capacidade do modelo de simular adequadamente as nuances do transporte reativo de poluentes reflete uma fina sintonia entre a representação matemática e os processos físico-químicos reais.

A análise de sensibilidade do sistema permite identificar quais parâmetros exercem maior influência sobre a dispersão dos contaminantes, facilitando o ajuste de estratégias de intervenção. Isso contribui para uma tomada de decisão mais assertiva no manejo de aquíferos contaminados e na aplicação de técnicas de remediação.

5.3 Cenários de Dispersão – Condição de Contorno Tipo I.

5.3.1 Cenário 1 – Benzeno em Aquífero Arenoso

Foram considerados quatro cenários distintos, utilizando diferentes condições de contorno e variados parâmetros físicos do meio e dos contaminantes.

Neste primeiro cenário, a condição de contorno de concentração prescrita (Tipo I) foi utilizada para modelar a dispersão de benzeno no aquífero arenoso. O benzeno, um contaminante comum em derramamentos de hidrocarbonetos, foi simulado em um aquífero com densidade de 1,59 g/cm³ e porosidade de 0.395, conforme estabelecido na metodologia.

Conforme os parâmetros apresentados na Tabela 4.10, a constante de distribuição do benzeno foi definida como 0,0432 cm³/g. As velocidades de fluxo foram especificadas como 0,490 m/dia na direção x , 0,147 m/dia na direção y e 0,147 m/dia na direção z . A constante de reação adotada foi de 0,00187 dia⁻¹, enquanto o fator de retardo utilizado foi de 1,174. Os coeficientes de dispersividade foram estabelecidos como $\alpha_x = 1$, $\alpha_y = 0,1$ e $\alpha_z = 0,1$.

As simulações foram realizadas para quatro intervalos de tempo distintos: 90, 180, 270 e 360 dias e a concentração prescrita inicial de benzeno foi fixada em 1000 mg/L. Os dados de entrada e tempo computacional foram inseridos conforme ilustrado na Tabela 5.8.

Tabela 5.8- Cenário 1 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional

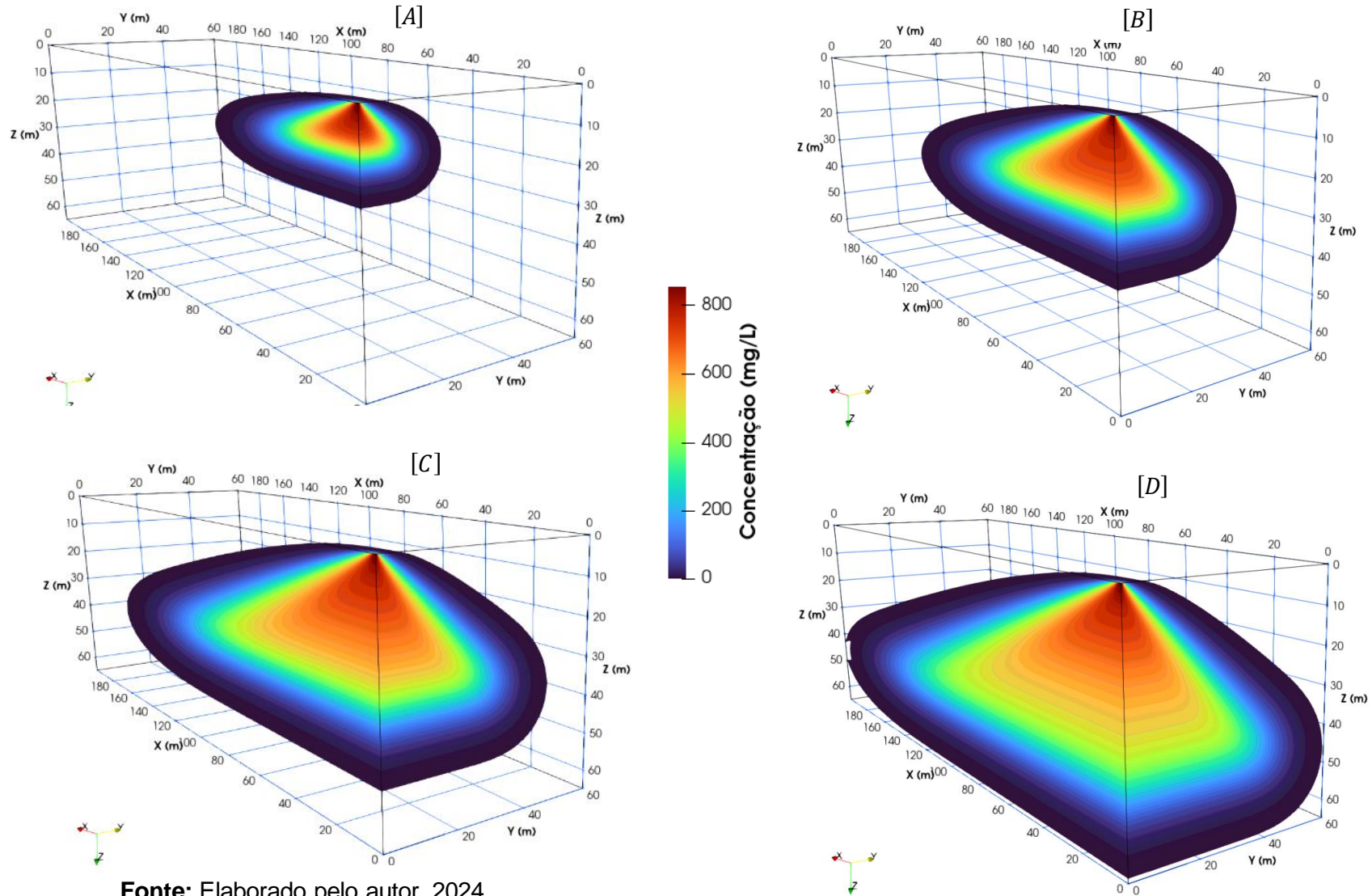
Dimensões do Aquífero (m)	Malha 3D (-)	Tempo de Simulação Total (dias)	Tempo CPU (s) ¹
500x500x500	500x500x500	360	39780

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.5 ilustra o desenvolvimento da pluma 3D da concentração de benzeno ao longo do tempo, gerada no ParaView® 5.12 para uma visualização qualitativa.

¹ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

Figura 5.5 - Plumas da concentração de benzeno em um aquífero arenoso ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura [A]: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura [B]: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura [C]: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura [D]: Pluma de Concentração após 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.5 [A] ilustra a concentração após 90 dias, mostrando a dispersão inicial da pluma de contaminação na direção do fluxo predominante. Esse comportamento indica uma forte influência da advecção, com a pluma movendo-se rapidamente ao longo do fluxo principal.

Na Figura 5.5 [B], que ilustra a concentração após 180 dias, a pluma continua a se espalhar, mostrando uma maior dispersão longitudinal e vertical. Neste estágio, a influência dos processos de transporte e transformação torna-se mais evidente, ampliando a área afetada pelo poluente. A pluma se estende aproximadamente 120 metros na direção do fluxo principal.

A Figura 5.5 [C] exibe a concentração após 270 dias, mostrando uma dispersão mais ampla da pluma de contaminação. A influência das heterogeneidades do aquífero torna-se mais evidente, resultando em uma forma mais pronunciada da pluma, que se estende a 160 metros na direção do fluxo.

A Figura 5.5 [D], que apresenta a concentração após 360 dias, mostra a pluma de contaminação atingindo sua extensão máxima observável nesta simulação. A combinação de alta velocidade de fluxo e a porosidade do solo arenoso resulta em uma dispersão lateral e vertical mais intensa.

A pluma de benzeno é influenciada tanto pela advecção predominante quanto pela dispersão molecular, resultando em uma diluição significativa do poluente ao longo do tempo. A extensão da pluma atinge aproximadamente 200 metros no aquífero.

Este comportamento é consistente com estudos anteriores, como o de Bugan *et al.*, (2018), que investigaram o desenvolvimento temporal de plumas de poluição em aquíferos arenosos. Eles observaram que em aquíferos arenosos, a combinação de advecção predominante e dispersão molecular resulta em uma pluma de contaminação que se espalha rapidamente, com uma expressiva diluição do poluente ao longo do tempo. Tais resultados corroboram o comportamento observado na simulação, onde a pluma de benzeno se expande expressivamente ao longo do tempo no interior do aquífero com características arenosas.

A advecção predominante fica evidente ao observar os números de Peclet. O número de Peclet calculado para a direção x foi de 245, enquanto para as direções y e z foram de 70. Esses valores indicam uma predominância da advecção sobre a difusão no transporte do contaminante em todas as direções, especialmente na direção x , corroborando com os gráficos 3D.

Após a avaliação qualitativa da dispersão tridimensional da pluma de benzeno, foi realizada uma análise quantitativa detalhada por meio de perfis de concentração ao longo de seções verticais e distâncias longitudinais no aquífero arenoso.

Os gráficos de linha apresentados a seguir fornecem uma visão detalhada das concentrações de benzeno em diferentes profundidades e distâncias ao longo do fluxo principal, em momentos distintos (90, 180, 270 e 360 dias).

Os perfis verticais de concentração ilustram a variação do benzeno com a profundidade em coordenadas específicas, permitindo avaliar o comportamento da pluma ao longo do eixo vertical.

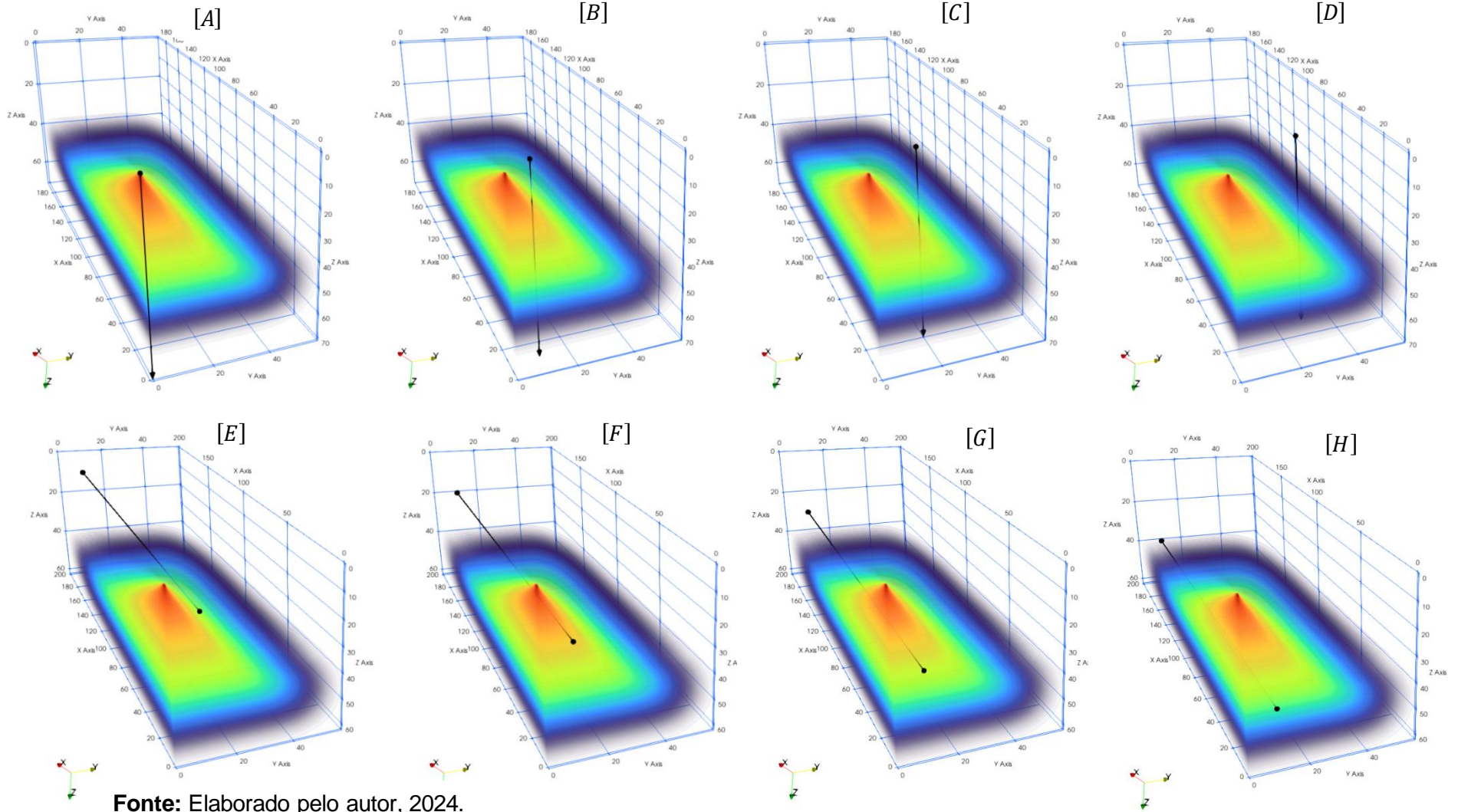
Os perfis longitudinais, por sua vez, mostram a distribuição da concentração de benzeno ao longo da direção do fluxo principal em diversas profundidades.

Os gráficos a seguir permitem a observação do alcance da pluma de contaminação e a avaliação da eficácia dos mecanismos de dispersão ao longo do tempo.

A Figura 5.6 ilustra as coordenadas onde os perfis de concentração foram obtidos. Essas localizações foram selecionadas para fornecer uma visão detalhada da dispersão do contaminante no aquífero.

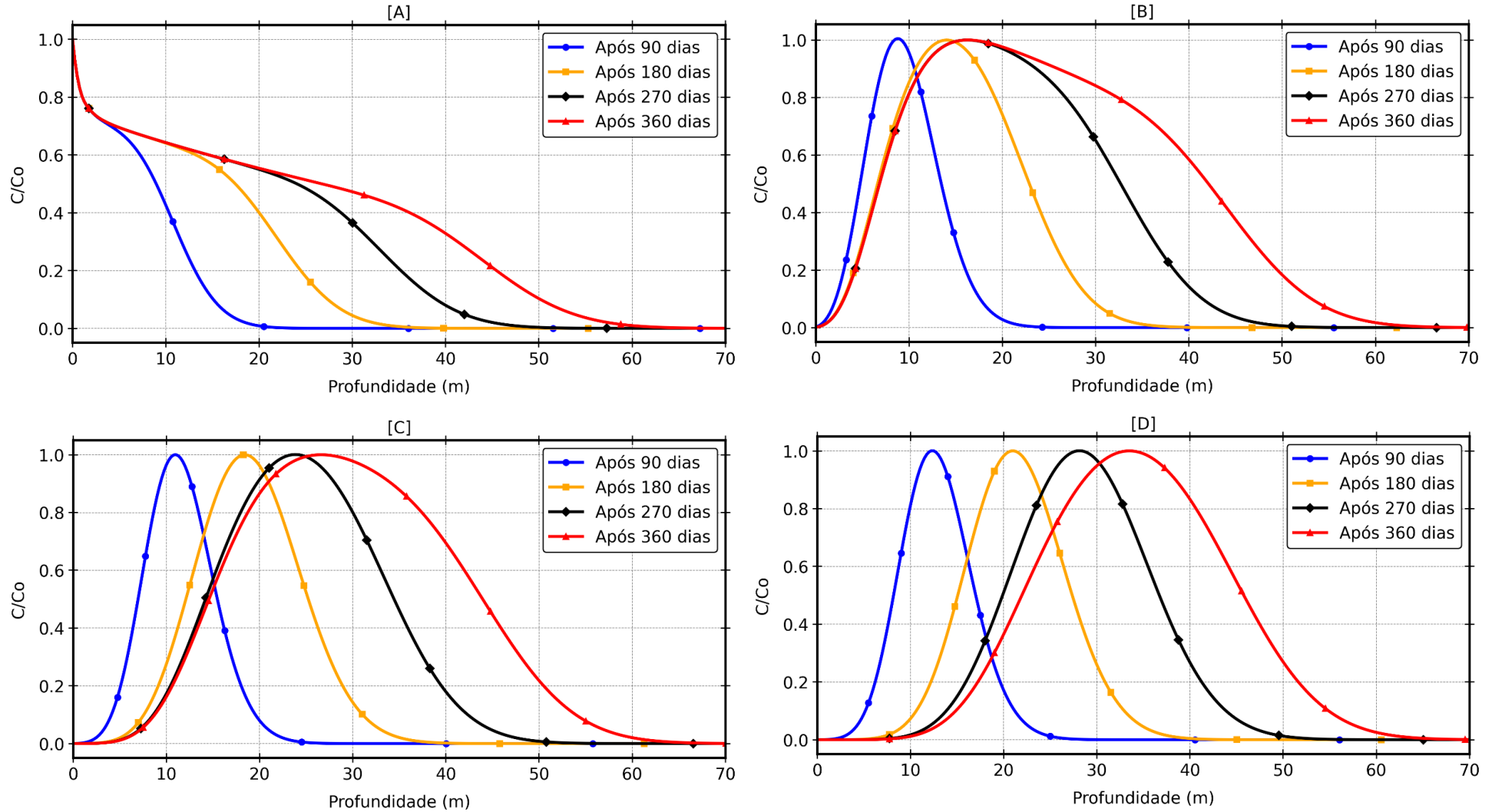
As Figuras 5.7 e 5.8 apresentam perfis nas coordenadas mencionadas, proporcionando uma compreensão clara e precisa da dinâmica e do movimento temporal da dispersão do benzeno. Esses perfis fornecem dados quantitativos que complementam a análise qualitativa prévia.

Figura 5.6 - Distribuição das Concentrações: **A**) Coordenada (0,0, z); **B**) Coordenada (10,10, z); **C**) Coordenada (20,20, z); **D**) Coordenada (30,30, z). Perfis longitudinais: **E**) Coordenada (x,10,10); **F**) Coordenada (x,10,20); **G**) Coordenada (x,10,30); **H**) Coordenada (x,10,40).



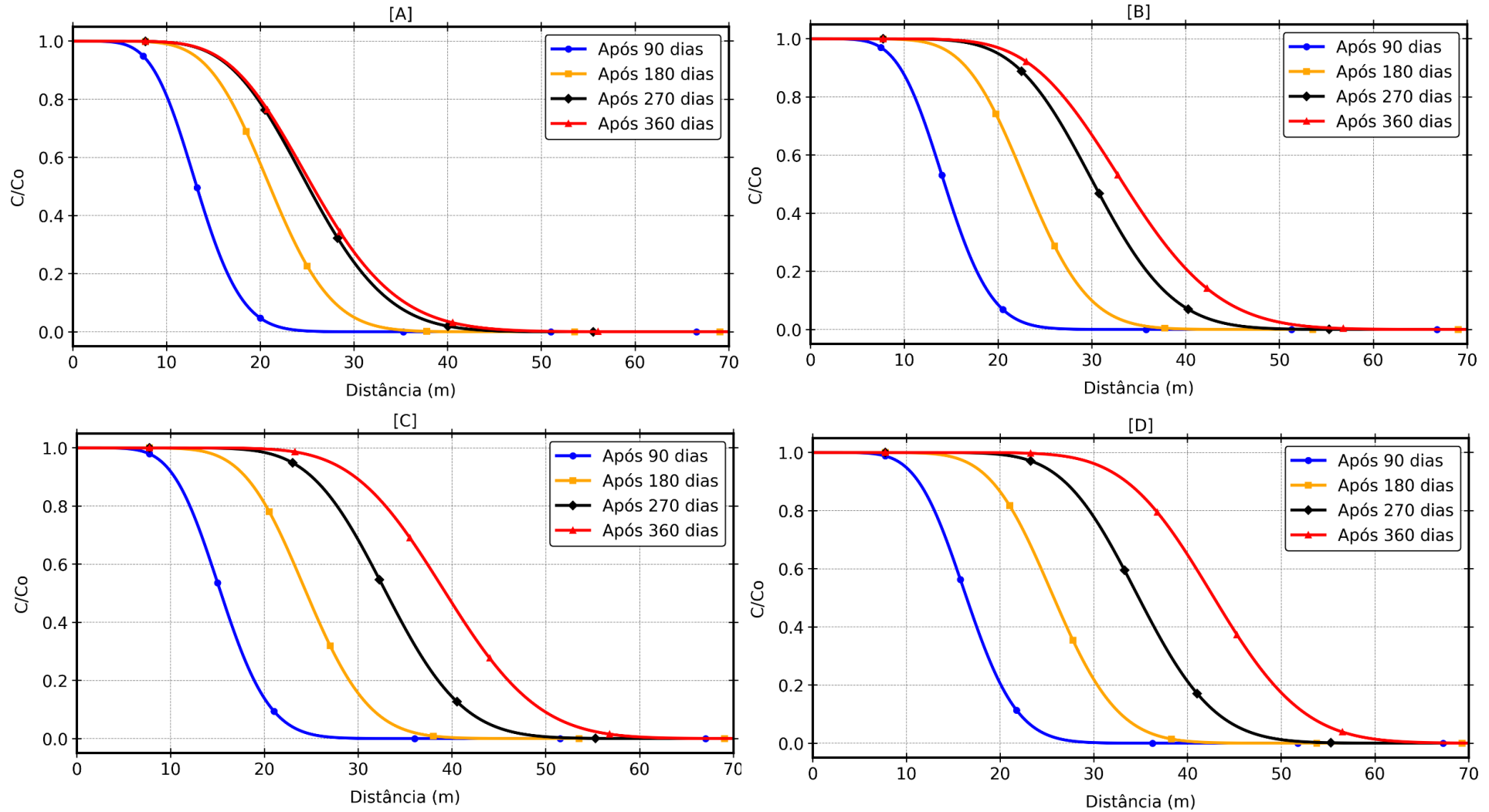
Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Figura 5.7 - Perfis de concentração do benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis verticais específicos. **Perfil [A]**: Coordenada (0,0, z), concentração na origem. **Perfil [B]**: Coordenada (10,10, z), concentração a 10 metros da origem. **Perfil [C]**: Coordenada (20,20, z), concentração a 20 metros da origem. **Perfil [D]**: Coordenada (30,30, z), concentração a 30 metros.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Figura 5.8 - Perfis de concentração de benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis longitudinais em diferentes profundidades: **Perfil [A]**: Coordenada $(x,10,10)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=10$. **Perfil [B]**: Coordenada $(x,10,20)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=20$. **Perfil [C]**: Coordenada $(x,10,30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$. **Perfil [D]**: Coordenada $(x,10,40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

O perfil [A] da Figura 5.7 localizado na coordenada $(0, 0, z)$, indica que a concentração de benzeno na origem ao longo do perfil vertical. Aos 90 dias, a concentração é maior na superfície, diminuindo rapidamente com a profundidade até cerca de 20 metros. Aos 180 dias, observa-se uma redução na concentração e uma dispersão mais uniforme em profundidade, alcançando aproximadamente 40 metros.

Aos 270 e 360 dias, a concentração superficial continua a diminuir, apresentando uma distribuição mais homogênea em profundidade, alcançando até 60 metros. Isso evidencia a influência dos mecanismos de transporte e das transformações que promovem a diluição do contaminante.

O perfil ilustrado na Figura 5.7 [B], na coordenada $(10, 10, z)$, indica que a concentração de benzeno a 10 metros da origem. Aos 180 dias, a concentração diminui na superfície e se distribui de forma mais uniforme ao longo da profundidade, até 30 metros. A partir dos 270 dias, a dispersão se torna mais evidente, com uma distribuição de concentração menos acentuada, alcançando 50 metros. Este padrão persiste aos 360 dias, refletindo o aumento da área afetada pela pluma e atingindo até 60 metros de profundidade.

A Figura 5.7 [C] ilustra a concentração a 20 metros da origem. Aos 270 e 360 dias, observa-se uma dispersão ainda maior, com concentrações mais homogêneas ao longo da profundidade, alcançando 50 e 60 metros, respectivamente. Isso reforça a influência dos mecanismos de transporte e transformação na diluição do contaminante.

A Figura 5.7 [D], na coordenada $(30, 30, z)$, representa a concentração a 30 metros da origem. Aos 270 e 360 dias, a concentração se torna mais homogênea, sugerindo que a pluma se dispersou significativamente, atingindo áreas mais distantes do ponto de origem, alcançando profundidades de até 50 e 60 metros, respectivamente.

A Figura 5.8 apresenta perfis longitudinais nas profundidades $z=10$ ([A]) e $z=20$ ([B]), mostrando a concentração de benzeno ao longo do eixo x . Após 90 dias, a concentração diminui rapidamente até cerca de 20 metros em $z=10$. Aos 180 dias, a dispersão se torna mais pronunciada, com a concentração diminuindo de forma mais gradual até 30 metros.

Aos 270 e 360 dias, a pluma se estende até 40 e 50 metros, respectivamente, indicando a contínua influência da advecção predominante. Em $z=20$, a tendência é semelhante, com a concentração diminuindo de forma menos acentuada aos 180 dias até 25 metros, e de forma mais gradual aos 270 e 360 dias, alcançando 35 e 45 metros, respectivamente.

Finalmente, a Figura 5.8 [D] na profundidade $z=40$ ilustra a concentração ao longo da distância. Aos 270 e 360 dias, a pluma se estende até 50 e 60 metros, respectivamente, evidenciando a contínua e progressiva dispersão do contaminante no aquífero arenoso.

Os perfis verticais e longitudinais demonstram claramente a evolução temporal e espacial da pluma de benzeno no aquífero arenoso. Inicialmente, a advecção domina o transporte, resultando em uma rápida propagação da pluma ao longo do fluxo principal.

Com o tempo, a dispersão molecular e as reações químicas passam a ter maior influência, promovendo a diluição do contaminante e aumentando a homogeneidade da concentração ao longo das profundidades e distâncias.

Essa análise detalhada apresenta tendências semelhantes às observadas por Rivett *et al.* (2001), que investigaram a dispersão de contaminantes em aquíferos arenosos por meio de experimentos de campo com líquidos densos não aquosos (DNAPLs). Assim como no estudo dos autores os resultados obtidos neste trabalho demonstram que, em condições de alta velocidade de fluxo, a advecção domina a propagação inicial da pluma de contaminantes. No entanto, à medida que a pluma avança, foi verificado que a dispersão molecular e as reações químicas desempenham um papel importante na diluição e homogeneização das concentrações, de forma consistente com o comportamento descrito por Rivett. Em ambos os estudos, a rápida propagação inicial, seguida por um processo de uniformização ao longo do tempo, é particularmente evidente em aquíferos arenosos, onde o coeficiente de retardo é baixo, permitindo uma evolução semelhante da pluma ao longo do tempo.

Tais comparações são consistentes com o comportamento observado na simulação do trabalho, onde a pluma de benzeno se expande rapidamente devido à predominância da advecção e às características do solo arenoso.

5.3.2 Cenário 2 – Benzeno em Aquífero Sedimentar

Considerando as heterogeneidades dos aquíferos, os cenários foram cuidadosamente projetados para serem distintos, permitindo uma comparação abrangente dos mecanismos de transporte e transformação do poluente.

O segundo cenário também emprega a condição de contorno de concentração prescrita (Tipo I) para modelar a dispersão do benzeno, mas em um aquífero de características sedimentares.

Sob os parâmetros apresentados na Tabela 4.10, o comportamento do benzeno foi simulado em um aquífero com densidade de 1.62 g/cm³ e porosidade de 0.47. A constante de distribuição do benzeno foi estabelecida em 0.304 cm³/g, com velocidades de fluxo de 0.10 m/dia na direção *x*, 0.03 m/dia na direção *y* e 0.03 m/dia na direção *z*. A constante de reação utilizada foi de 0.00187 dia⁻¹ e o fator de retardo foi de 2.04. Os coeficientes de dispersividade foram mantidos constantes em $\alpha_x = 1$, $\alpha_y = 0.1$ e $\alpha_z = 0.1$.

As simulações foram realizadas para quatro intervalos de tempo distintos: 90, 180, 270 e 360 dias e a concentração inicial de benzeno foi fixada em 1000 mg/L. Os dados de entrada e tempo computacional foram inseridos conforme ilustrado na Tabela 5.9.

Tabela 5.9 - Cenário 2 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional

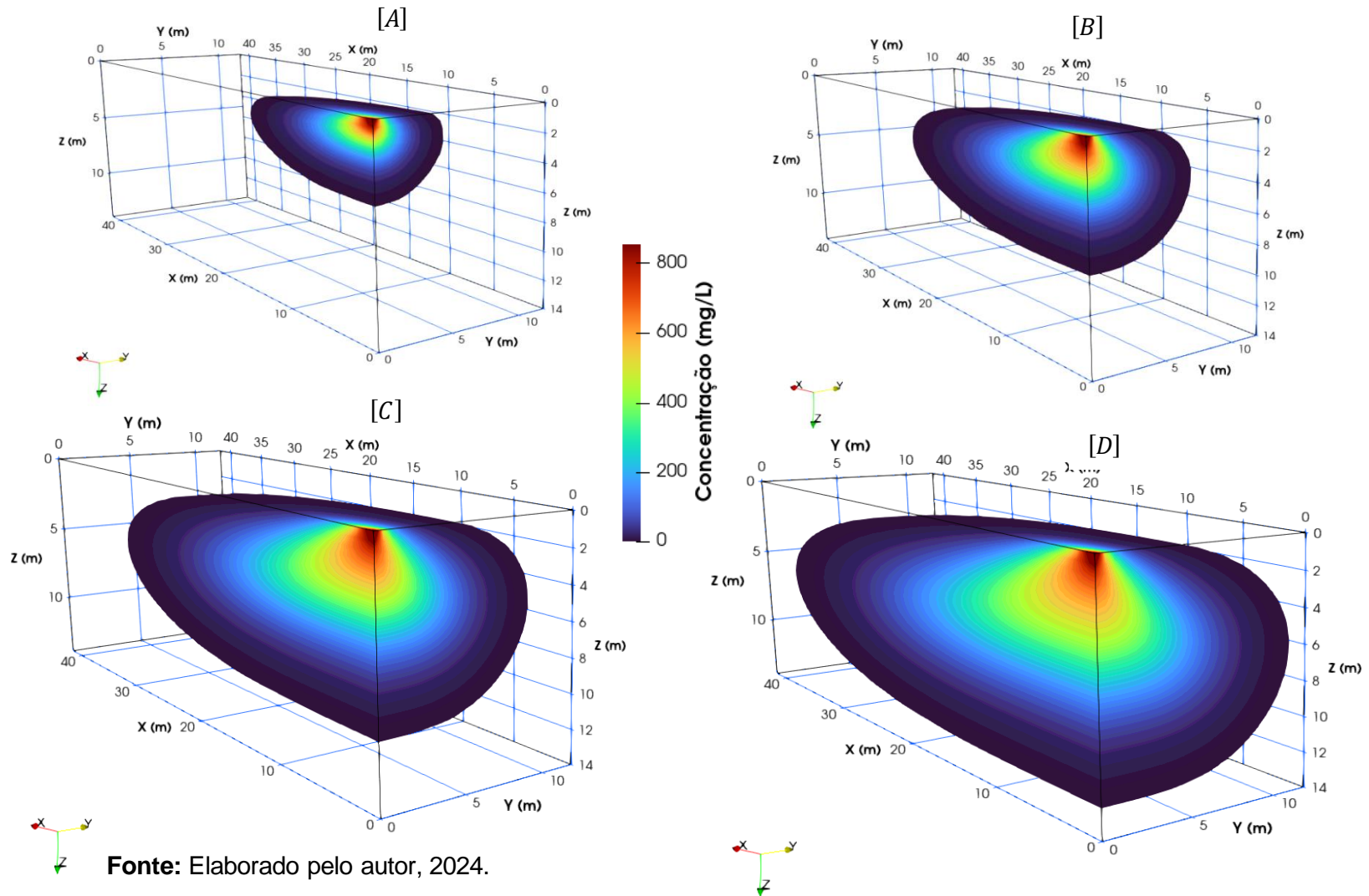
Dimensões do Aquífero (m)	Malha 3D (-)	Tempo de Simulação Total (dias)	Tempo CPU (s) ²
500x500x500	500x500x500	360	27288

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.9 ilustra a distribuição tridimensional da concentração de benzeno ao longo dos períodos analisados em um aquífero de características litológicas sedimentares, fornecendo uma visão qualitativa da pluma de contaminação e auxiliando na compreensão dos processos de transporte e transformação.

² Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

Figura 5.9 - Plumas da concentração de benzeno em um aquífero sedimentar ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura **[A]**: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura **[B]**: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura **[C]**: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura **[D]**: Pluma de Concentração após 360 dias.



Na Figura 5.9 [A], aos 90 dias, a pluma de contaminação no aquífero sedimentar ilustra uma dispersão inicial na direção do fluxo predominante. Similarmente ao aquífero arenoso, a advecção é o principal mecanismo de transporte, porém a velocidade de propagação é menor, refletindo as diferenças nas características hidráulicas do meio.

Na Figura 5.9 [B], a extensão da pluma no aquífero sedimentar é menor, alcançando cerca de 20 metros na direção do fluxo principal, em comparação com 120 metros no aquífero arenoso. Isso indica uma maior influência das heterogeneidades do meio.

Na Figura 5.9 [C], aos 270 dias, a pluma de benzeno continua a se dispersar, exibindo uma forma mais irregular devido à maior variabilidade nas características litológicas do aquífero sedimentar. A extensão na direção do fluxo atinge aproximadamente 30 metros, em contraste com os 160 metros observados no aquífero arenoso.

Na Figura 5.9 [D], após 360 dias, a pluma no aquífero sedimentar atinge sua extensão máxima observável de aproximadamente 40 metros, em comparação com os 200 metros no aquífero arenoso. A dispersão lateral e vertical é menos intensa, refletindo a menor permeabilidade do solo sedimentar.

Os gráficos tridimensionais apresentados anteriormente fornecem uma visão clara da evolução temporal da pluma de benzeno nos diferentes tipos de aquíferos. No aquífero arenoso, a pluma se propaga rapidamente devido à alta advecção e à natureza litológica do solo, alcançando distâncias maiores em menos tempo.

As simulações realizadas revelam que a heterogeneidade do meio aquoso desempenha um papel crucial na dinâmica da dispersão. Em aquíferos arenosos, a porosidade elevada e a maior permeabilidade facilitam uma dispersão mais rápida e extensa dos contaminantes, refletindo uma distribuição mais difusa ao longo do tempo.

Em contraste, os aquíferos sedimentares, com sua estrutura mais compacta e menor permeabilidade, restringem o movimento dos contaminantes, resultando em uma dispersão mais lenta e concentrada.

5.3.3 Cenário 3 – Xileno em Aquífero Arenoso

Neste cenário, é analisada a dispersão tridimensional do xileno em um aquífero arenoso. O xileno, outro contaminante comum em derramamentos de hidrocarbonetos, possui propriedades distintas em relação ao benzeno, requerendo uma análise específica. Estudar o comportamento do xileno também serve para fortalecer a robustez do modelo, garantindo sua aplicabilidade a diferentes tipos de contaminantes.

Sob os parâmetros apresentados na Tabela 4.10, foi simulado o comportamento do xileno, em um aquífero caracterizado por uma densidade de 1.59 g/cm^3 e uma porosidade de 0.395. A constante de distribuição do xileno foi definida como $0.171 \text{ cm}^3/\text{g}$, com velocidades de fluxo de 0.490 m/dia na direção x , 0.147 m/dia na direção y , e 0.147 m/dia na direção z . A constante de reação utilizada foi de 0.00365 dia^{-1} , os coeficientes de dispersividade foram mantidos constantes e a concentração inicial de benzeno foi fixada em 1000 mg/L .

Os dados relativos à configuração do aquífero, o tempo de simulação e o custo computacional para esta simulação são apresentados conforme ilustrado na Tabela 5.10.

Tabela 5.10- Cenário 3 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional

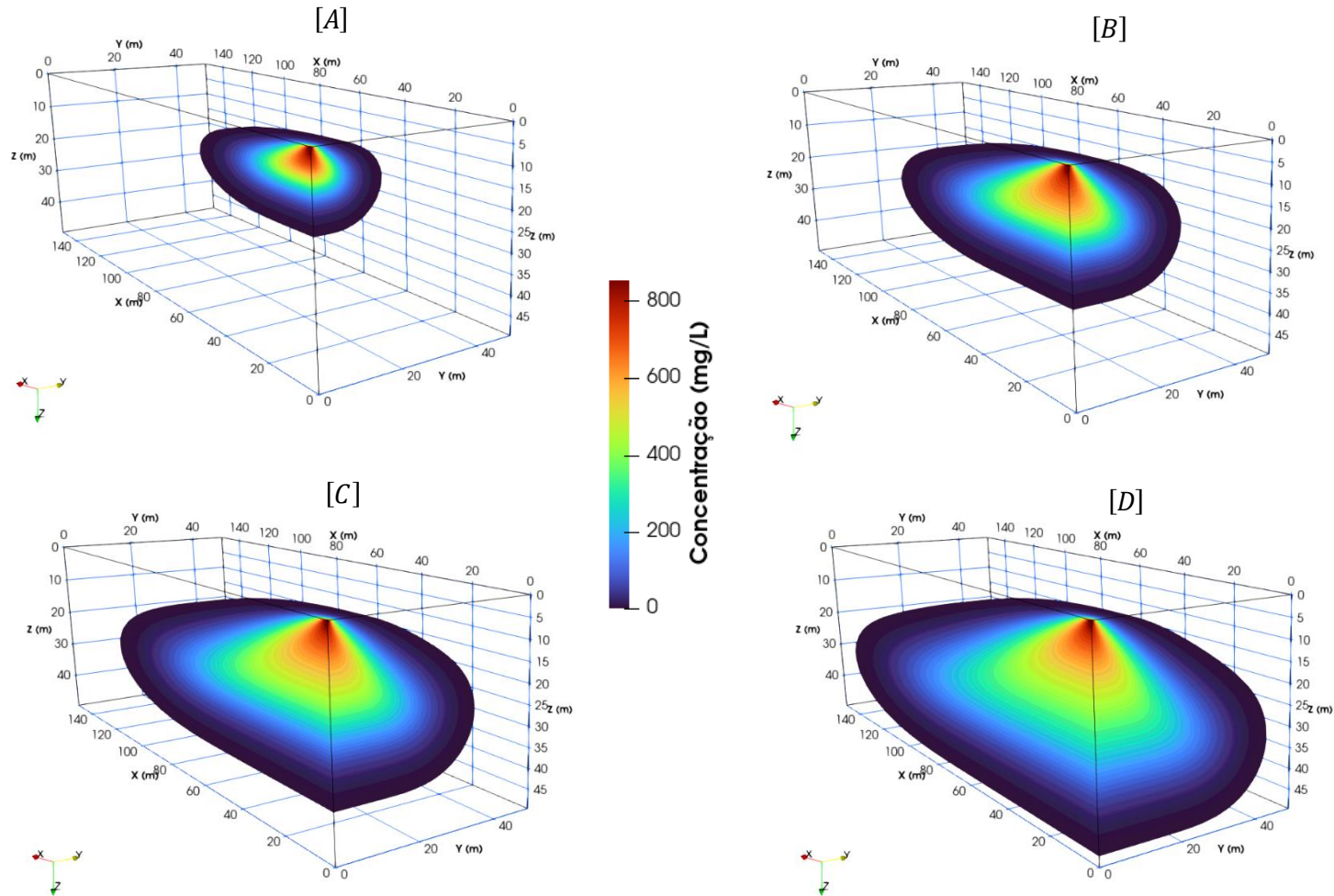
Dimensões do Aquífero (m)	Malha 3D (-)	Tempo de Simulação Total (dias)	Tempo CPU (s)³
500x500x500	500x500x500	360	32940

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.10 ilustra a distribuição tridimensional da concentração de xileno ao longo do tempo e do espaço, proporcionando uma visão qualitativa da pluma de contaminação e facilitando a compreensão dos processos de transporte e transformação.

³ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

Figura 5.10 - Plumas da concentração do xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura **[A]**: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura **[B]**: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura **[C]**: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura **[D]**: Pluma de Concentração após 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Na Figura 5.10 [A], aos 90 dias, a pluma de contaminação de xileno no aquífero arenoso mostra uma dispersão inicial na direção do fluxo predominante. Semelhante ao comportamento do benzeno, a advecção é o principal mecanismo de transporte. No entanto, a propagação do xileno é menor devido às suas propriedades específicas, como a maior reatividade química.

Na Figura 5.10 [B], aos 180 dias, observa-se uma dispersão mais ampla lateralmente e em profundidade, com a pluma de xileno atingindo aproximadamente 80 metros na direção do fluxo principal, em comparação aos 120 metros observados para o benzeno.

Esta menor extensão da pluma indica que o xileno possui mobilidade reduzida no aquífero arenoso, devido à sua maior reatividade química em comparação ao benzeno.

Na Figura 5.10 [C], aos 270 dias, a pluma de xileno continua a se dispersar, mas de forma mais contida, alcançando cerca de 120 metros. Nesse mesmo intervalo de tempo, a pluma de benzeno já teria atingido 160 metros.

Na Figura 5.10 [D], aos 360 dias, a pluma de xileno atinge cerca de 150 metros, em comparação aos 200 metros alcançados pela pluma de benzeno. A combinação dos mecanismos de transporte e transformação resulta em uma pluma de xileno mais concentrada e de menor extensão ao longo do tempo.

A análise dos gráficos 3D revela como as propriedades específicas do xileno influenciam sua dispersão no aquífero arenoso em comparação com o benzeno. O modelo indica que a maior reatividade química do xileno resulta em uma menor extensão da pluma ao longo do tempo, demonstrando uma mobilidade reduzida.

Essas observações ressaltam a importância de considerar as características específicas de cada contaminante ao avaliar o risco de contaminação. A menor mobilidade do xileno sugere que ele pode representar um risco mais persistente em áreas localizadas. O modelo utilizado consegue simular de forma coerente tanto os mecanismos de transporte quanto as transformações químicas, evidenciando sua robustez e aplicabilidade na análise de diferentes cenários de contaminação.

5.3.4 Cenário 4 – Xileno em Aquífero Sedimentar

Neste cenário final para a condição de contorno Tipo I, a análise foca na dispersão tridimensional do xileno em um aquífero sedimentar. Esta etapa completa o panorama geral das características de dispersão de dois poluentes, benzeno e xileno, em diferentes tipos de solo.

O comportamento do xileno em um aquífero sedimentar oferece uma perspectiva complementar e contrastante às simulações anteriores realizadas em aquíferos arenosos com diferentes poluentes.

Para esta simulação, o aquífero sedimentar foi simulado conforme Tabela 4.10, com propriedades específicas que incluem uma densidade de 1.62 g/cm³ e uma porosidade de 0.47. A constante de distribuição do xileno foi definida como 0.456 cm³/g, com velocidades de fluxo de 0.10 m/dia na direção x, 0.03 m/dia na direção y, e 0.03 m/dia na direção z. A constante de reação utilizada foi de 0.00365 dia⁻¹. Os coeficientes de dispersividade foram mantidos constantes em $\alpha_x = 1$, $\alpha_y = 0.1$ e $\alpha_z = 0.1$, e a concentração inicial de xileno foi fixada em 1000 mg/L.

Os dados relativos à configuração do aquífero, o tempo de simulação e o custo computacional para esta simulação são apresentados conforme ilustrado na Tabela 5.11.

Tabela 5.11- Cenário 4 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional

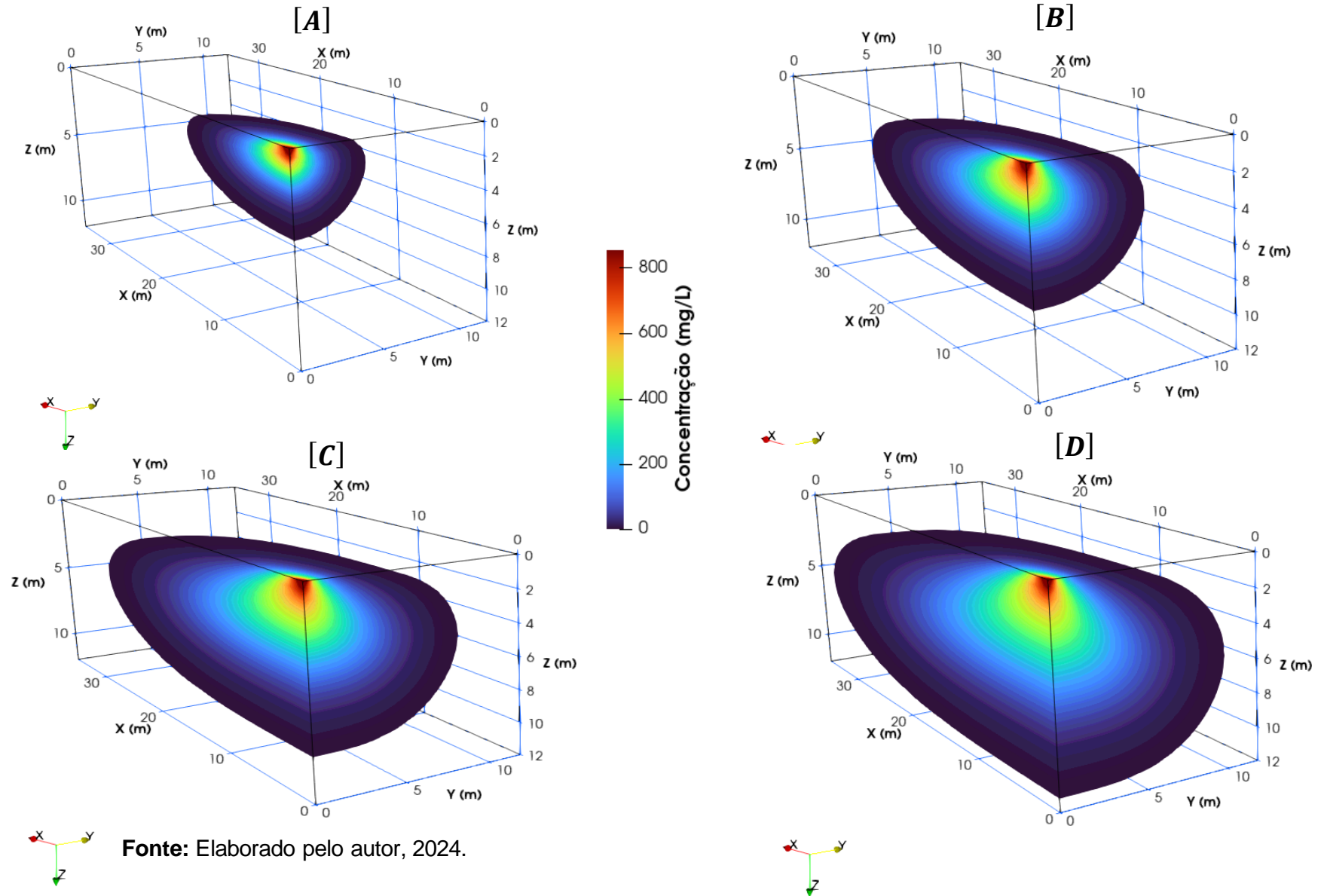
Dimensões do Aquífero (m)	Malha 3D (-)	Tempo de Simulação Total (dias)	Tempo CPU (s)⁴
500x500x500	500x500x500	360	32940

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.11 ilustra a distribuição tridimensional da concentração de xileno no aquífero sedimentar, proporcionando uma visão qualitativa da pluma de contaminação e favorecendo a compreensão dos processos de transporte e transformação.

⁴ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

Figura 5.11 - Plumagens da concentração do xileno em um aquífero sedimentar ao longo do tempo, representada em quatro momentos distintos: Figura **[A]**: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura **[B]**: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura **[C]**: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura **[D]**: Pluma de Concentração após 360 dias.



Na Figura 5.11 [A], aos 90 dias, a pluma de contaminação de xileno no aquífero sedimentar apresenta uma dispersão inicial na direção do fluxo predominante. Em comparação ao cenário do xileno no aquífero arenoso, a velocidade de propagação é menor devido à menor permeabilidade do meio sedimentar.

Na Figura 5.11 [B], aos 180 dias, observa-se uma maior dispersão lateral e vertical, embora ainda inferior à observada no aquífero arenoso. A pluma de xileno atinge cerca de 20 metros na direção do fluxo principal, enquanto no aquífero arenoso a extensão era de aproximadamente 100 metros.

O modelo indica que a heterogeneidade do aquífero sedimentar retarda a pluma de maneira substancial.

Na Figura 5.11 [C], aos 270 dias, a pluma de xileno continua a se dispersar, alcançando aproximadamente 30 metros na direção do fluxo principal. A dispersão lateral e vertical também é mais contida em comparação ao cenário arenoso, reforçando a menor eficiência de dispersão no meio sedimentar.

Na Figura 5.11 [D], após 360 dias, a pluma atinge sua extensão máxima observável de cerca de 40 metros, contrastando com os 150 metros alcançados no aquífero arenoso.

Os resultados obtidos são corroborados pelo estudo de Schäfer (1995), que examinou o transporte e a remoção de xileno durante a remediação de um aquífero. Schäfer observou que aquíferos com baixa permeabilidade e maior heterogeneidade, como os sedimentares, apresentam uma maior capacidade de retardar a pluma de contaminação em comparação com aquíferos arenosos. Isso resulta em plumas que se dispersam mais lentamente e percorrem distâncias menores, devido ao maior retardamento e menor eficiência de dispersão nesses meios sedimentares. O modelo desenvolvido demonstra coerência ao reproduzir essas dinâmicas, evidenciando sua capacidade de simular fielmente as condições geológicas complexas.

5.4 Comparações dos Cenários

5.4.1 Comparação por Tipo de Aquífero

Baseando-se nos resultados temporais, que já evidenciaram diferenças significativas entre os comportamentos dos contaminantes em distintos tipos de aquíferos, foram elaborados gráficos de comparação direta para melhor elucidar essas variações.

As Figuras 5.12 e 5.13 exibem perfis de concentração de benzeno e xileno em aquíferos arenosos e sedimentares ao longo do tempo, proporcionando uma análise detalhada das dinâmicas de dispersão. Nos perfis de concentração ao longo da profundidade, ilustrado nas Figuras 5.12 e 5.13, indicam que, em um aquífero arenoso, a pluma de benzeno se propaga com maior rapidez e extensão em comparação ao comportamento observado no aquífero sedimentar.

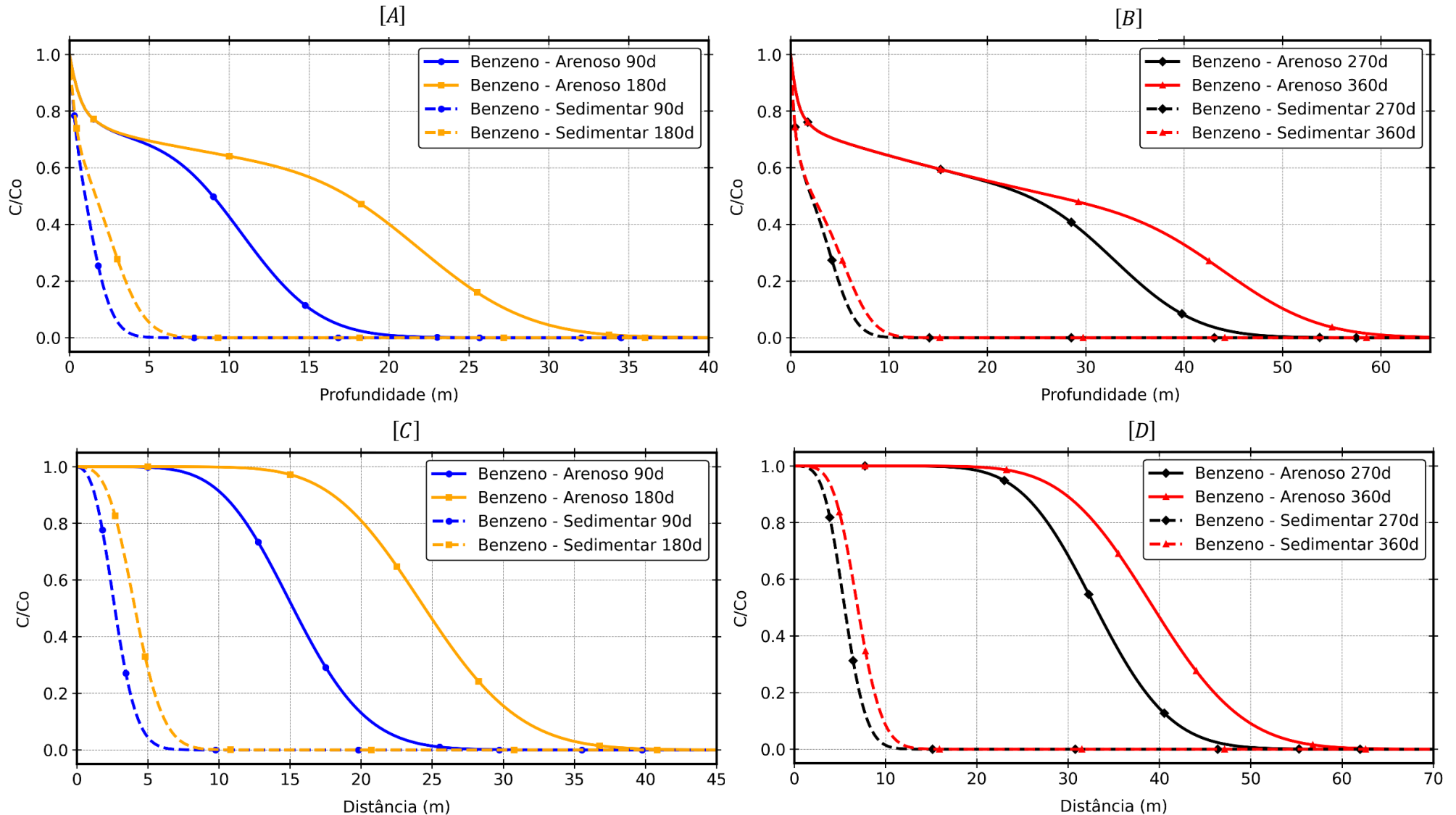
Aos 90 e 180 dias ilustrado nas Figura 5.12 e 5.13, a concentração de benzeno atinge aproximadamente 20 metros e 30 metros, respectivamente, no aquífero arenoso, enquanto no aquífero sedimentar, a pluma alcança apenas 5 metros aos 90 dias e 10 metros aos 180 dias.

Nos perfis de concentração ao longo da distância longitudinal ilustrado nas Figura 5.12 e 5.13 observa-se uma diferença similar. Aos 90 e 180 dias, a pluma de benzeno no aquífero arenoso alcança distâncias maiores, atingindo cerca de 25 metros e 35 metros, respectivamente. Em contraste, no aquífero sedimentar, a pluma se propaga de forma mais contida, alcançando aproximadamente 10 metros aos 90 dias e 15 metros aos 180 dias.

Os perfis aos 270 e 360 dias conforme Figuras 5.12 e 5.13 indicam que essa diferença se torna ainda mais pronunciada, com a pluma no aquífero arenoso se estendendo até 60 metros aos 270 dias e 70 metros aos 360 dias. Em contraste, no aquífero sedimentar, a pluma alcança apenas 20 metros aos 270 dias e 30 metros aos 360 dias.

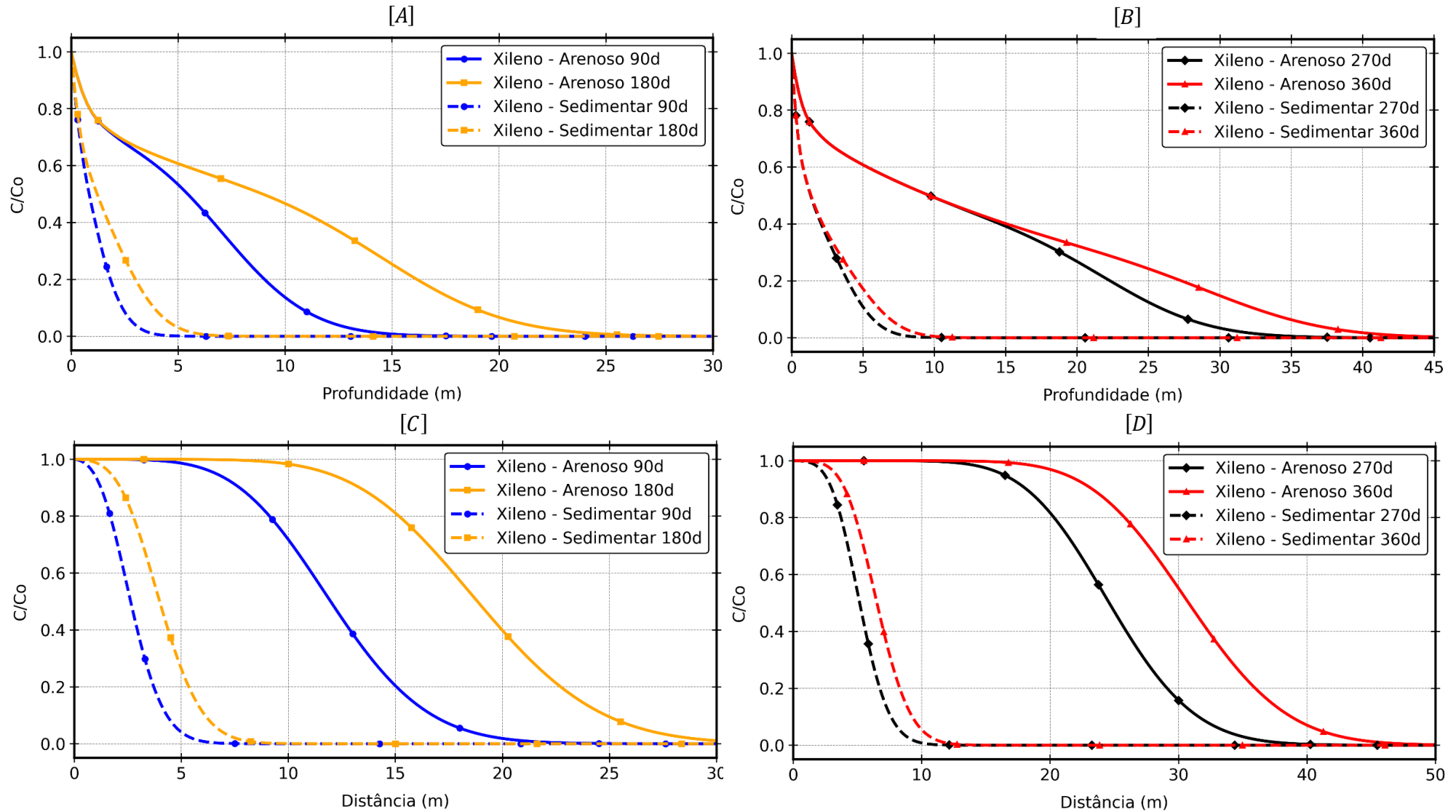
O comportamento de dispersão do benzeno e do xileno é semelhante, mas no aquífero arenoso a pluma se propaga mais rapidamente, enquanto no aquífero sedimentar o transporte é mais restrito devido às diferenças entre os meios.

Figura 5.12 - Perfis de concentração de benzeno em diferentes tipos de aquífero ao longo do tempo: **Perfil [A]**: Coordenada $(0, 0, z)$, concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. **Perfil [B]**: Coordenada $(0, 0, z)$, concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias. **Perfil [C]**: Coordenada $(x, 10, 30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. **Perfil [D]**: Coordenada $(x, 10, 30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Figura 5.13 - Perfis de concentração de xileno em diferentes tipos de aquífero ao longo do tempo: **Perfil [A]**: Coordenada (0, 0, z), concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. **Perfil [B]**: Coordenada (0, 0, z), concentração ao longo da profundidade, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias. **Perfil [C]**: Coordenada (x, 10, 30), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 90 e 180 dias. **Perfil [D]**: Coordenada (x, 10, 30), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$, comparando aquíferos arenoso e sedimentar aos 270 e 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

5.4.2 Comparação por Tipo de Contaminante

Para compreender melhor as diferenças na dispersão dos contaminantes, foram gerados gráficos comparativos entre benzeno e xileno (Figura 5.14). Os gráficos proporcionam uma visualização detalhada das variações no comportamento dos contaminantes ao longo do tempo e da distância, destacando as particularidades de cada um em termos de propagação e concentração.

Nos perfis de concentração ao longo da profundidade (Figura 5.14 [A] e [B]), observa-se que a pluma de benzeno se propaga com maior rapidez e alcança uma extensão maior em comparação à pluma de xileno.

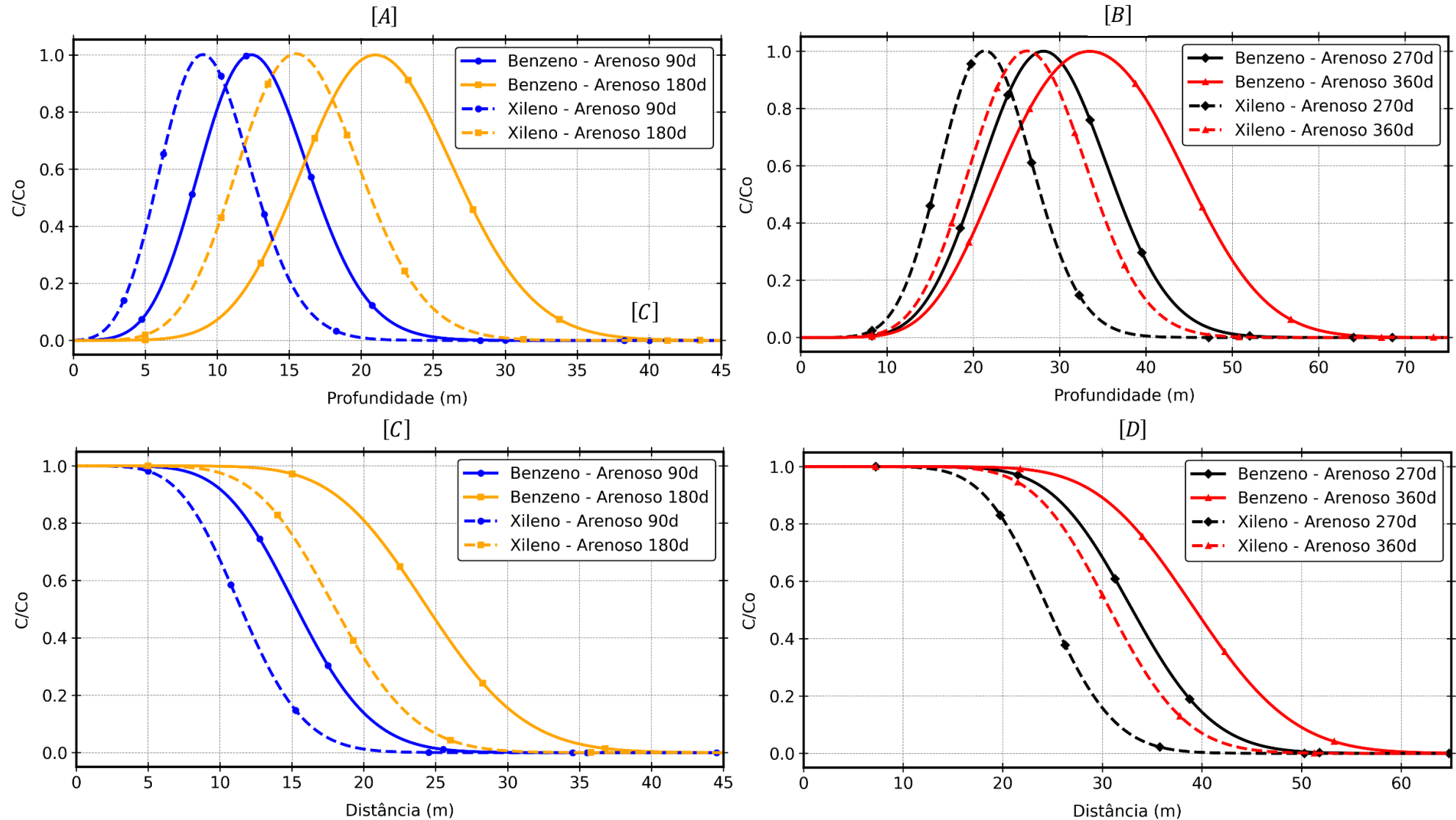
Aos 90 e 180 dias (Figura 5.14 [A]), a pluma de benzeno atinge aproximadamente 20 e 30 metros, respectivamente, enquanto a pluma de xileno se propaga até 10 e 15 metros. Aos 270 e 360 dias (Figura 5.14 [B]), a pluma de benzeno alcança 50 metros, enquanto a de xileno se estende até 30 metros.

Nos perfis de concentração ao longo da distância longitudinal (Figura 5.14 [C] e [D]), essa diferença se mantém. Aos 90 e 180 dias (Figura [C]), a pluma de benzeno se propaga até 25 e 35 metros, enquanto a de xileno atinge 15 e 20 metros.

Aos 270 e 360 dias (Figura 5.14 [D]), a pluma de benzeno alcança 60 metros, enquanto a de xileno atinge 40 metros. Essas observações destacam a maior mobilidade do benzeno, devido à menor reatividade química e às menores influências das heterogeneidades do meio.

Os resultados do presente trabalho corroboram com os apresentados por Cheng *et al.*, (2016). Ao investigar a migração de BTEX (benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos) em um tanque de combustível simulado em um aquífero arenoso, eles observaram que o benzeno apresentou uma dispersão ampla devido à sua menor reatividade e maior mobilidade em comparação aos outros compostos do BTEX.

Figura 5.14 - Perfis de concentração de benzeno e xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo: **Perfil [A]**: Coordenada (30, 30, z), concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. **Perfil [B]**: Coordenada (30, 30, z), concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias. **Perfil [C]**: Coordenada (x, 10, 40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. **Perfil [D]**: Coordenada (x, 10, 40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

5.5 Cenário de dispersão – Condição de Contorno Tipo II

5.5.1 Cenário 1 – Benzeno em Aquífero Arenoso (Fluxo Prescrito)

Este subcapítulo apresenta os resultados das simulações realizadas para avaliar o transporte de benzeno em um aquífero arenoso, utilizando a condição de contorno de fluxo prescrito.

Esta abordagem é crucial para refletir cenários mais realistas de vazamento de contaminantes, como o de um tanque subterrâneo de combustível, conforme descrito na metodologia.

O modelo foi configurado, para simular um tanque de combustível com um volume de 15 metros cúbicos, apresentando um vazamento inicial de 3.5 kg/(m²-dia).

Este cenário representa as condições típicas encontradas em postos de serviço ou instalações industriais, onde a taxa de vazamento foi calculada para refletir uma perda diária de combustível no tanque conforme descrição metodológica.

As simulações foram realizadas para quatro intervalos de tempo distintos: 90, 180, 270 e 360 dias. Os dados de entrada e tempo computacional foram inseridos conforme ilustrado na Tabela 5.12.

Tabela 5.12- Cenário 1 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional

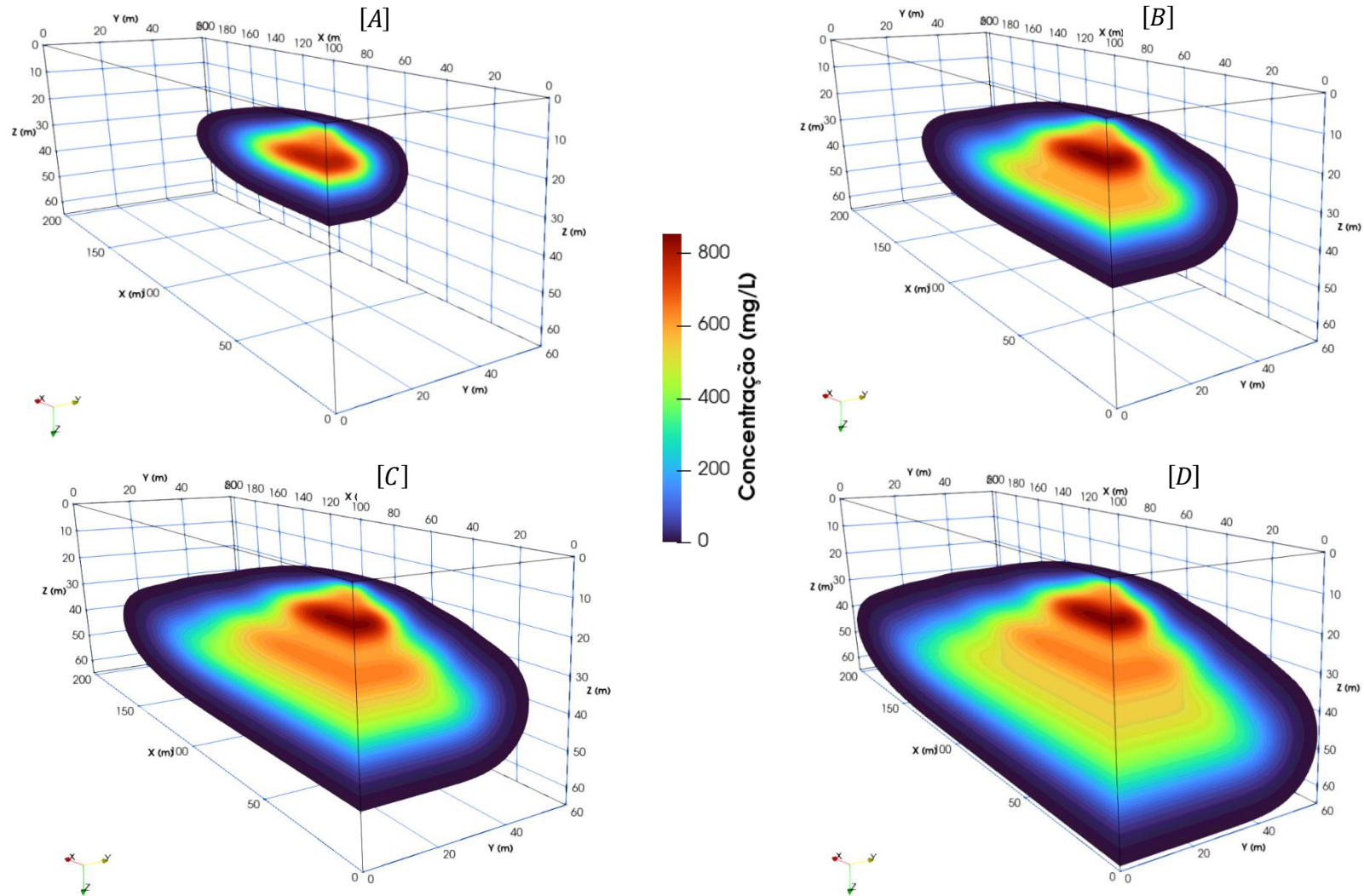
Dimensões do Aquífero (m)	Malha 3D (-)	Tempo de Simulação Total (dias)	Tempo CPU (s) ⁵
500x500x500	600x600x600	360	54864

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.15 ilustra a distribuição tridimensional da concentração de benzeno ao longo dos períodos analisados em um aquífero de características litológicas sedimentares. Esta análise permite uma compreensão aprofundada dos processos de transporte e transformação, bem como da eficácia das medidas de mitigação ao longo do tempo durante as fases do vazamento.

⁵ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

Figura 5.15 - Plumas concentração de benzeno em um aquífero arenoso ao longo do tempo sob condição de fluxo prescrito: Figura **[A]**: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura **[B]**: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura **[C]**: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura **[D]**: Pluma de Concentração após 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Nos gráficos tridimensionais apresentados na Figura 5.15, observa-se a evolução da pluma de benzeno em um aquífero arenoso sob a condição de contorno de fluxo prescrito.

O comportamento da pluma ao longo do tempo reflete as fases de vazamento ativo, decaimento gradual e cessação do fluxo, conforme previsto na simulação.

Na Figura 5.15 [A], aos 90 dias, a pluma de benzeno apresenta uma concentração inicial elevada, distribuindo-se na direção do fluxo predominante. Esta fase corresponde ao período de vazamento ativo, que ocorre durante os primeiros 30% do tempo total de simulação, com uma taxa de fluxo constante de $3.5 \text{ kg}/(\text{m}^2\cdot\text{dia})$.

A alta concentração observada é resultado da contínua liberação de benzeno no aquífero, que causa uma dispersão ampla devido à alta permeabilidade do solo arenoso.

Na Figura 5.15 [B], aos 180 dias, a pluma de benzeno mostra uma expansão adicional, com uma dispersão lateral e vertical mais pronunciada. Esta fase está dentro do período de decaimento gradual do fluxo, que abrange os 60% subsequentes do tempo total de simulação, com o fluxo reduzido para $1.5 \text{ kg}/(\text{m}^2\cdot\text{dia})$.

A menor taxa de vazamento resulta em uma dispersão mais controlada, embora ainda significativa, refletindo o decaimento gradual do fluxo prescrito.

Na Figura 5.15 [C], aos 270 dias, a pluma de benzeno continua a se dispersar, ainda dentro do período de decaimento gradual. A concentração de benzeno diminui gradualmente, e a pluma começa a estabilizar-se, com a dispersão amplamente influenciada pela advecção e pela dispersão mecânica no aquífero arenoso.

Na Figura 5.15 [D], aos 360 dias, a pluma de benzeno atinge sua extensão máxima observável. Esta fase representa o final do período de decaimento e o início da fase de cessação do fluxo, que ocorre nos últimos 10% do tempo total de simulação (aproximadamente de 324 a 360 dias), resultando em uma pluma com uma concentração mais homogênea.

Os resultados evidenciam claramente como as diferentes fases de vazamento e decaimento influenciam a dinâmica da pluma de benzeno em um aquífero arenoso, destacando os efeitos combinados da advecção e da dispersão.

Os perfis de concentração ao longo da profundidade são ilustrados na Figura 5.16. Esta figura mostra a variação da concentração de benzeno em diferentes profundidades do aquífero arenoso ao longo do tempo, permitindo uma visão detalhada da dispersão vertical do contaminante sob a condição de fluxo prescrito.

A Figura 5.17 apresenta os perfis de concentração ao longo da distância longitudinal. Esta figura detalha a propagação da pluma de benzeno na direção do fluxo principal, destacando a dispersão longitudinal do poluente em função do tempo, sob as mesmas condições de vazamento e decaimento.

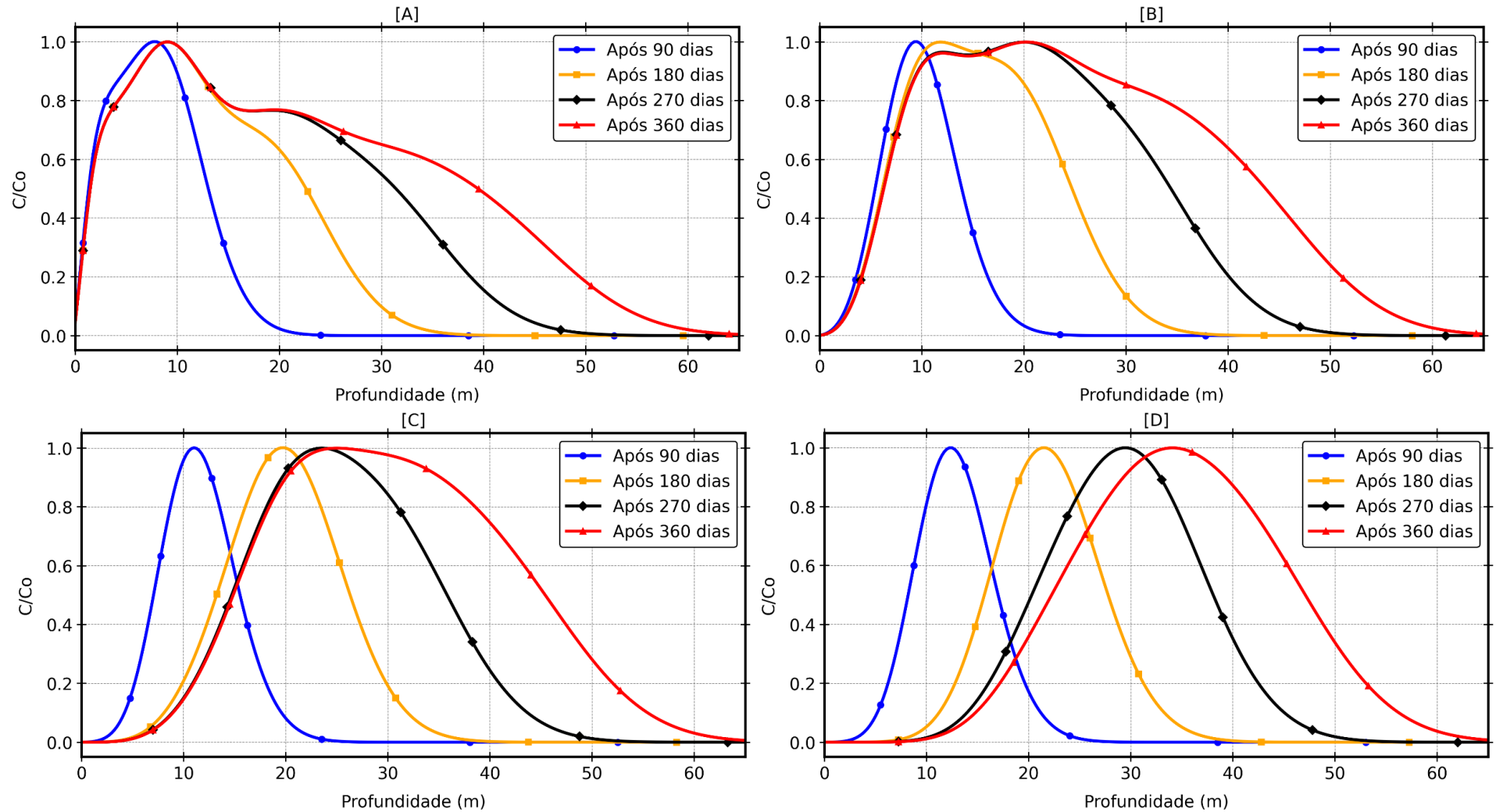
No perfil 5.16 [A], aos 90 dias, a concentração de benzeno atinge um pico inicial em cerca de 8 metros de profundidade, seguido por um decaimento acentuado até aproximadamente 15 metros.

Aos 180 dias, o perfil mostra um pico maior em 10 metros, refletindo a fase intermediária de fluxo. Aos 270 dias, a concentração diminui gradualmente, com um pico em 20 metros, decaindo até 40 metros, indicando a fase de decaimento.

Aos 360 dias, observa-se que a pluma de contaminantes se dispersa ainda mais, apresentando um pico de concentração em 30 metros e se estendendo até aproximadamente 50 metros durante a fase de cessação do fluxo.

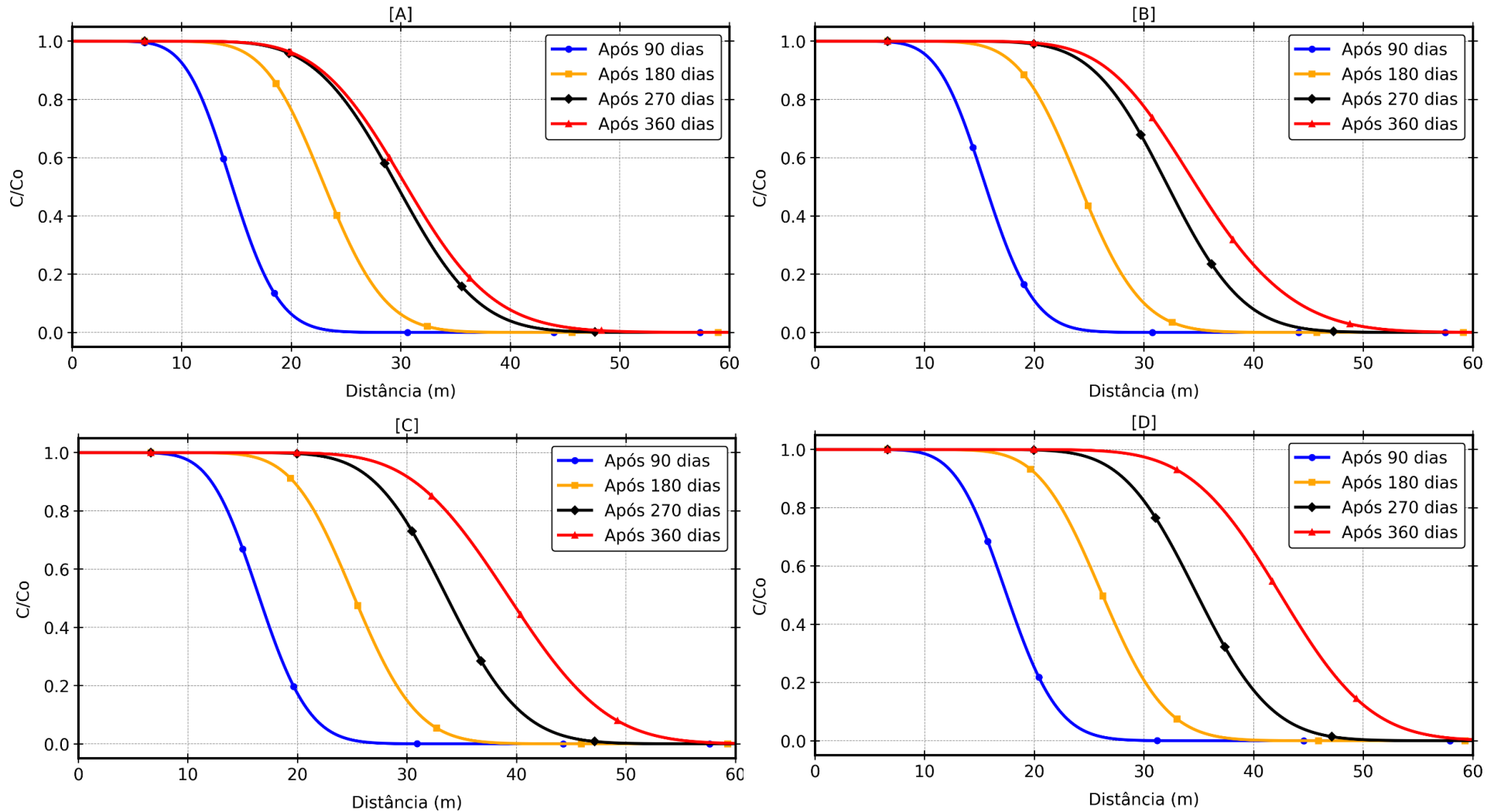
Esse comportamento indica que, mesmo após a interrupção da fonte de contaminação, o transporte dos contaminantes continua a ocorrer devido ao gradiente de concentração residual e aos processos de dispersão natural no aquífero.

Figura 5.16 - Perfis de concentração do benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis verticais específicos. **Perfil [A]**: Coordenada (0,0, z), concentração na origem. **Perfil [B]**: Coordenada (10,10, z), concentração a 10 metros da origem. **Perfil [C]**: Coordenada (20,20, z), concentração a 20 metros da origem. **Perfil [D]**: Coordenada (30,30, z), concentração a 30 metros da origem.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Figura 5.17 - Perfis de concentração de benzeno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis longitudinais em diferentes profundidades: **Perfil [A]**: Coordenada $(x,10,30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$. **Perfil [B]**: Coordenada $(x,10,40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$. **Perfil [C]**: Coordenada $(x,10,50)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=50$. **Perfil [D]**: Coordenada $(x,10,60)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=60$.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

No perfil 5.16 [B], aos 90 dias, a pluma atinge um pico de concentração em aproximadamente 8 metros, seguido por uma rápida diminuição, caracterizando a fase de vazamento ativo.

Aos 180 dias, a pluma se propaga mais profundamente, atingindo cerca de 10 metros e demonstrando a influência do fluxo intermediário. Aos 270 dias, o pico de concentração se encontra em 15 metros, com a pluma se estendendo até 40 metros, mostrando a transição para a fase de decaimento. Aos 360 dias, a concentração atinge um novo pico em 20 metros e se dispersa até 50 metros, refletindo a cessação do fluxo.

No perfil 5.16 [C], aos 270 dias, a pluma se propaga até cerca de 30 metros, com a concentração máxima ocorrendo em 20 metros, representando a fase de decaimento. Aos 360 dias, a pluma de benzeno se espalha ainda mais, com um pico em 25 metros e alcançando uma profundidade de até 40 metros, durante a fase de cessação do fluxo.

No perfil 5.16 [D], a evolução é similar, aos 360 dias, a pluma atinge sua maior extensão, com o pico de concentração em 35 metros e se dispersando até 60 metros, demonstrando a fase final de cessação do fluxo.

Essas observações ilustram como a dinâmica do fluxo prescrito influencia a dispersão do benzeno ao longo do tempo, com diferentes fases de vazamento e decaimento afetando a propagação da pluma no aquífero arenoso.

Nos perfis de concentração ao longo da distância longitudinal (Figura 5.19), observa-se a dispersão do benzeno no aquífero arenoso em diferentes intervalos de tempo.

No perfil 5.17 [A], aos 90 dias, a concentração de benzeno diminui após cerca de 20 metros, indicando um rápido transporte inicial do poluente. Aos 180 dias, a pluma de benzeno se estende até aproximadamente 30 metros, demonstrando a fase intermediária de vazamento.

Aos 270 dias, a concentração máxima ocorre até cerca de 40 metros, refletindo a fase de decaimento do fluxo, e aos 360 dias, a pluma se propaga até 50 metros, durante a fase de cessação do fluxo, com uma diminuição gradual da concentração ao longo da distância.

No perfil 5.17 [B], aos 270 dias, a concentração máxima se encontra em 30 metros, com a pluma se estendendo até 40 metros, indicando a fase de decaimento. Aos 360 dias, a pluma atinge 50 metros, com a concentração diminuindo gradualmente, refletindo a fase final de cessação do fluxo.

No perfil 5.17 [C], aos 180 dias, a pluma se estende até 20 metros, evidenciando o fluxo intermediário. Aos 270 dias, a concentração máxima ocorre até 30 metros, com a pluma se propagando até 40 metros, representando a fase de decaimento. Aos 360 dias, a pluma atinge 50 metros, mostrando uma diminuição gradual da concentração, durante a fase de cessação do fluxo.

No perfil 5.17 [D], aos 360 dias, a pluma de benzeno atinge 60 metros, com uma diminuição gradual da concentração, durante a fase final de cessação do fluxo.

A evolução da pluma de benzeno ao longo das diferentes fases de vazamento e decaimento revela nuances importantes na dinâmica de dispersão. Durante a fase inicial de vazamento ativo, a pluma se expande rapidamente, refletindo a alta taxa de liberação do contaminante.

À medida que a fase de decaimento começa, a taxa de propagação diminui, mostrando uma transição para um fluxo mais controlado, o que facilita a observação dos processos de advecção e dispersão mecânica.

Na fase final de cessação do fluxo, a pluma de contaminantes atinge sua extensão máxima, espalhando-se ao longo do aquífero. Neste estágio, os mecanismos naturais de dispersão e degradação começam a atuar de maneira mais proeminente, reduzindo gradualmente as concentrações de benzeno.

A dispersão natural, influenciada por fatores como a heterogeneidade do meio e a difusão molecular, contribui para a diluição do contaminante, espalhando-o no meio poroso saturado.

Esse comportamento destaca a importância de entender a variabilidade temporal na resposta do aquífero a diferentes taxas de vazamento, o que é crucial para a gestão eficaz de contaminações em ambientes subterrâneos.

5.5.2 Cenário 1 – Xileno em Aquífero Arenoso (Fluxo Prescrito)

A sequência detalha a simulação do transporte de xileno em um aquífero arenoso sob a condição de contorno de fluxo prescrito, com o objetivo de analisar as diferenças de comportamento em relação ao benzeno.

A escolha do xileno, um contaminante com propriedades distintas, permite uma comparação detalhada das dinâmicas de dispersão e transformação entre diferentes hidrocarbonetos.

Na simulação, o fluxo de contaminante foi modelado de forma análoga à simulação do benzeno, refletindo um vazamento contínuo em um tanque subterrâneo de combustível. O cenário foi configurado para um vazamento inicial de 3.5 kg/(m²-dia), seguido por fases de decaimento gradual e cessação do fluxo, conforme descrito na metodologia.

O fluxo foi configurado para simular um derramamento típico em postos de combustível, utilizando o xileno como um substituto representativo dos compostos encontrados na gasolina, uma abordagem comum na literatura.

As simulações foram realizadas para quatro intervalos de tempo distintos: 90, 180, 270 e 360 dias. Os dados de entrada e tempo computacional foram inseridos conforme ilustrado na Tabela 5.13.

Tabela 5.13- Cenário 2 Configurações do Aquífero e Tempo Computacional

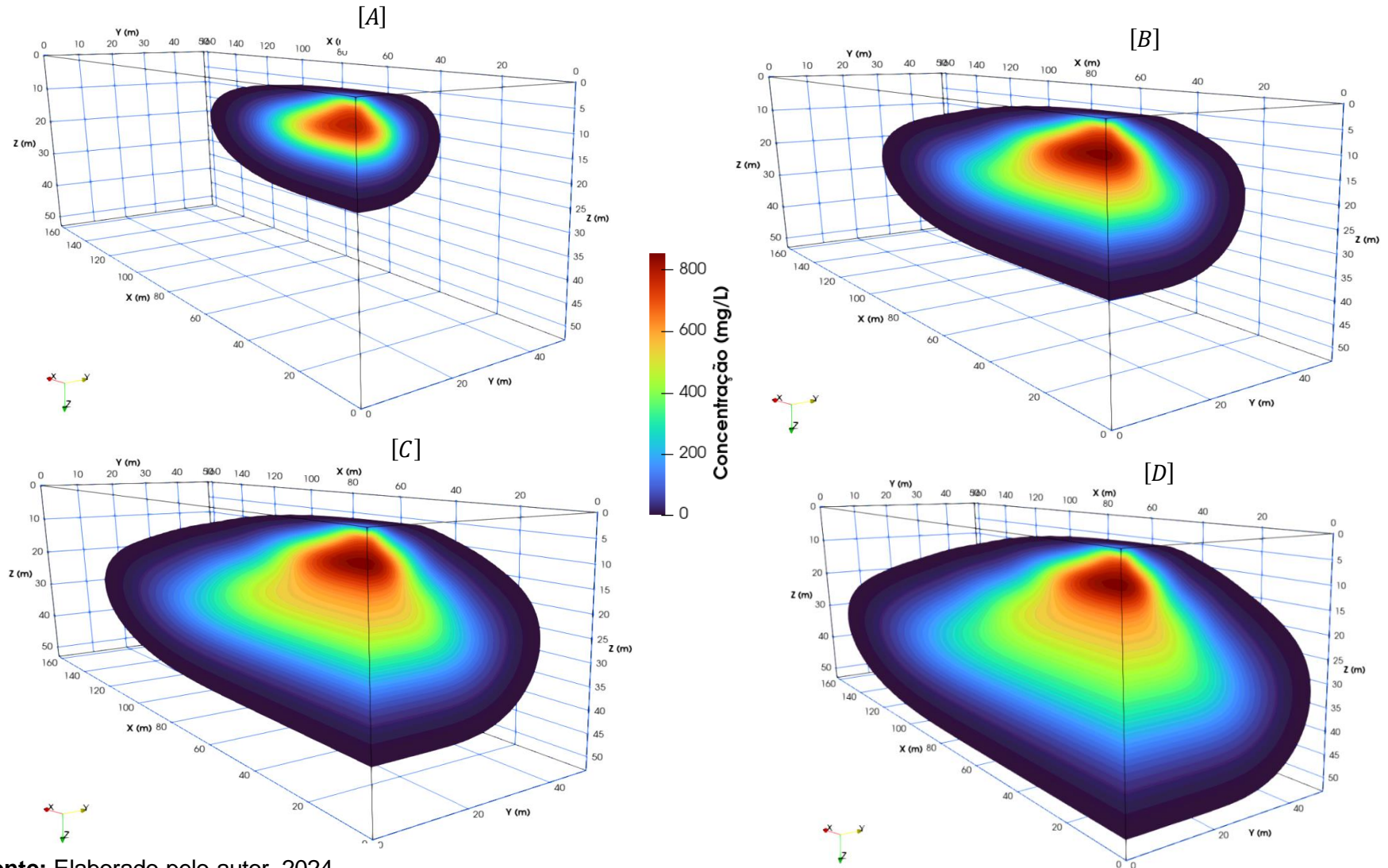
Dimensões do Aquífero (m)	Malha 3D (-)	Tempo de Simulação Total (dias)	Tempo CPU (s)⁶
500x500x500	600x600x600	360	54864

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

A Figura 5.18 ilustra detalhadamente o comportamento do poluente no aquífero arenoso sob condições de fluxo prescrito, permitindo a compreensão dos processos de transporte e transformação do xileno conforme a litologia apresentada, possibilitando também a em comparação qualitativa com a pluma do benzeno.

⁶ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

Figura 5.18 - Plumas concentração do xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo sob condição de fluxo prescrito: Figura **[A]**: Pluma de Concentração após 90 dias. Figura **[B]**: Pluma de Concentração após 180 dias. Figura **[C]**: Pluma de Concentração após 270 dias. Figura **[D]**: Pluma de Concentração após 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Na Figura 5.18 [A], aos 90 dias, a pluma de xileno em um aquífero arenoso apresenta uma concentração elevada próxima à origem, similar ao observado com o benzeno.

No entanto, a extensão da pluma de xileno é menor, propagando-se até aproximadamente 20 metros, enquanto o benzeno alcança cerca de 30 metros na vertical. Isso indica que o xileno possui menor mobilidade inicial em comparação ao benzeno, refletindo suas propriedades físico-químicas distintas.

Na Figura 5.18 [B], após 180 dias, a pluma de xileno continua a se expandir, porém menos do que a pluma de benzeno. A concentração elevada permanece próxima à origem, e a pluma se estende até cerca de 30 metros, enquanto o benzeno já se propaga além dessa profundidade. Esse comportamento no fluxo prescrito é semelhante ao observado na condição de concentração prescrita, evidenciando o maior retardamento do xileno no meio arenoso.

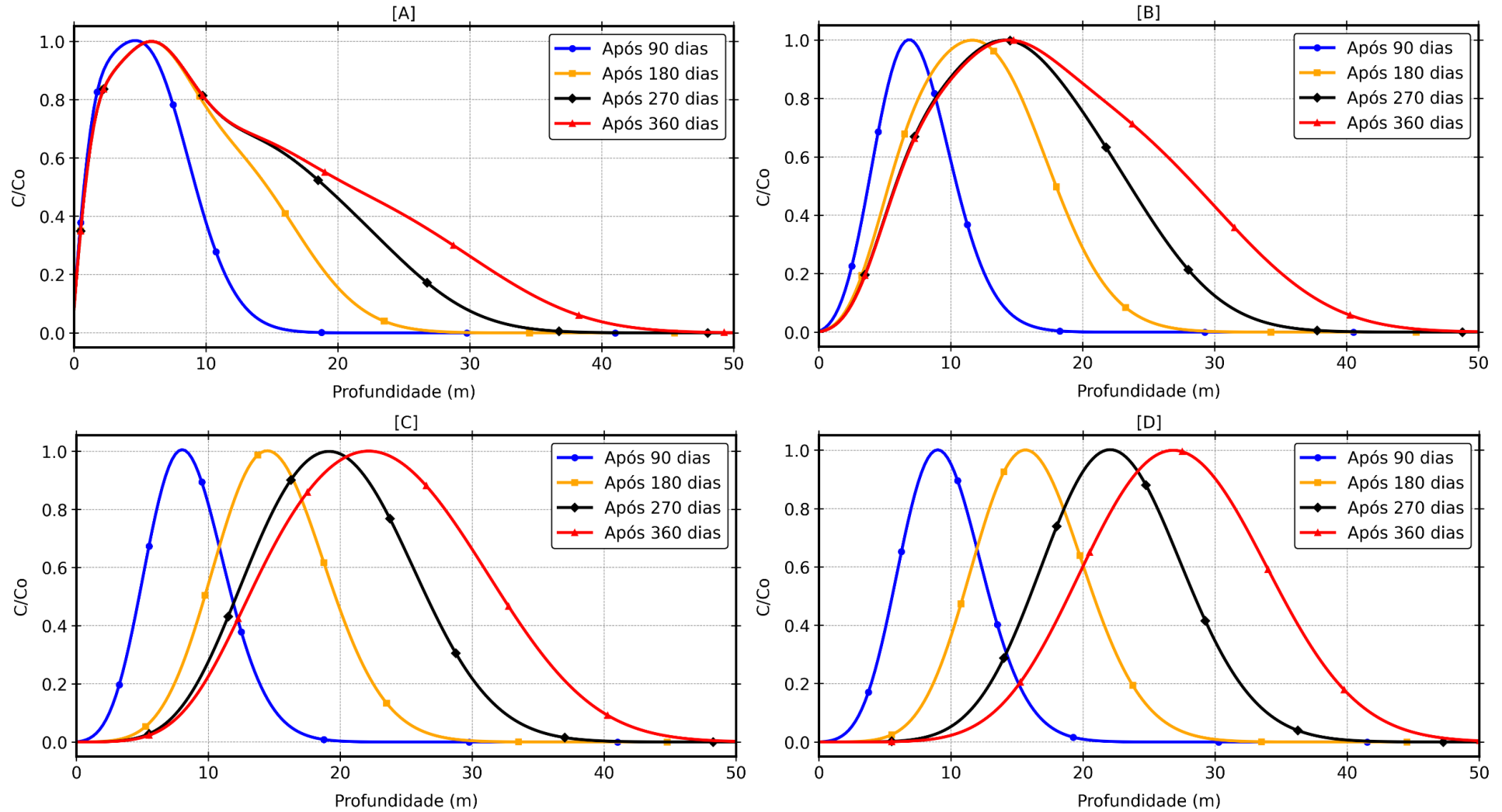
Na Figura 5.18 [C], aos 270 dias, a pluma de xileno mostra uma dispersão mais ampla, alcançando aproximadamente 40 metros. No entanto, a concentração mais elevada permanece próxima à origem do vazamento. Isso indica que, mesmo após um período prolongado, o xileno se move mais lentamente pelo aquífero arenoso em comparação ao benzeno, cuja pluma já atinge cerca de 50 metros nesse mesmo intervalo de tempo.

Na Figura 5.18 [D], aos 360 dias, a pluma de xileno atinge sua extensão máxima observável de cerca de 50 metros. A concentração diminui de forma mais gradual ao longo dessa distância, similar ao observado com o benzeno, mas a extensão da pluma de benzeno é maior, chegando a aproximadamente 60 metros na vertical.

Esses resultados reforçam a maior retenção e menor mobilidade do xileno em comparação ao benzeno em aquíferos arenosos, influenciados pelas propriedades químicas específicas de cada contaminante.

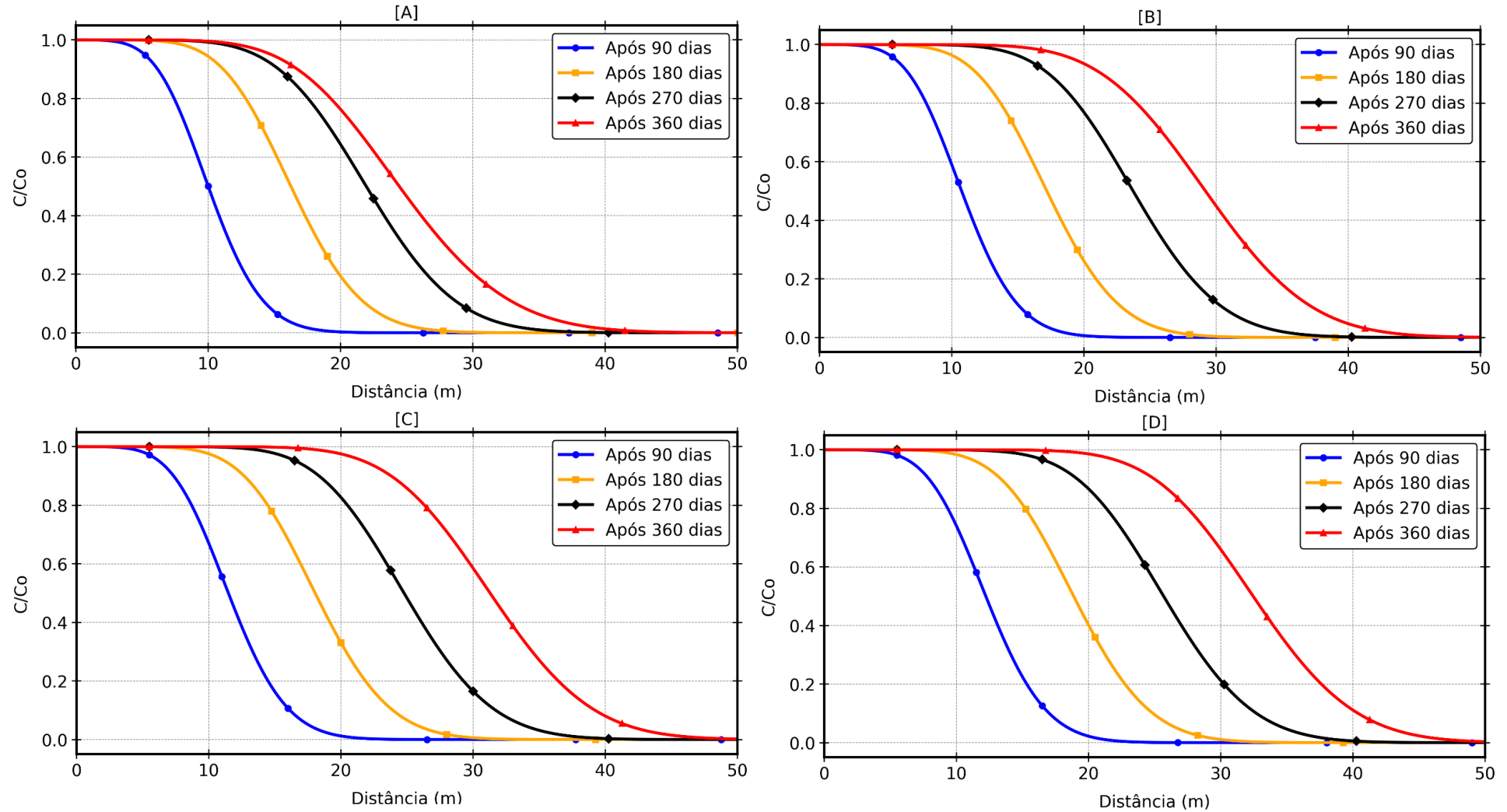
A seguir são apresentadas as Figuras 5.19 e 5.20, respectivamente, ilustrando os gráficos de linha dos perfis verticais e longitudinais para a dispersão do xileno em um aquífero arenoso.

Figura 5.19 - Perfis de concentração do xileno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis verticais específicos. **Perfil [A]**: Coordenada (0,0, z), concentração na origem. **Perfil [B]**: Coordenada (10,10, z), concentração a 10 metros da origem. **Perfil [C]**: Coordenada (20,20, z), concentração a 20 metros da origem. **Perfil [D]**: Coordenada (30,30, z), concentração a 30 metros da origem.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Figura 5.20 - Perfis de concentração de xileno em um aquífero arenoso em diferentes momentos (90, 180, 270 e 360 dias) ao longo de perfis longitudinais em diferentes profundidades: **Perfil [A]**: Coordenada $(x,10,30)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=30$. **Perfil [B]**: Coordenada $(x,10,40)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=40$. **Perfil [C]**: Coordenada $(x,10,50)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=50$. **Perfil [D]**: Coordenada $(x,10,60)$, concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade $z=60$.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

Nos perfis verticais (Figura 5.19), observa-se que, aos 90 dias, a concentração de xileno atinge seu pico a cerca de 10 metros de profundidade, refletindo a fase inicial de vazamento ativo.

Aos 180 dias, o pico de concentração se desloca para cerca de 15 metros, indicando a fase intermediária de decaimento.

Aos 270 e 360 dias, os picos de concentração se movem para 25 e 35 metros, respectivamente, durante a fase de cessação do fluxo, com uma diminuição gradual da concentração ao longo da profundidade.

Nos perfis longitudinais (Figura 5.20), aos 90 dias, a concentração de xileno diminui acentuadamente após aproximadamente 20 metros, demonstrando um rápido transporte inicial devido à velocidade predominante.

Aos 180 dias, a pluma de xileno se estende até aproximadamente 30 metros, ainda sob a fase de vazamento ativo.

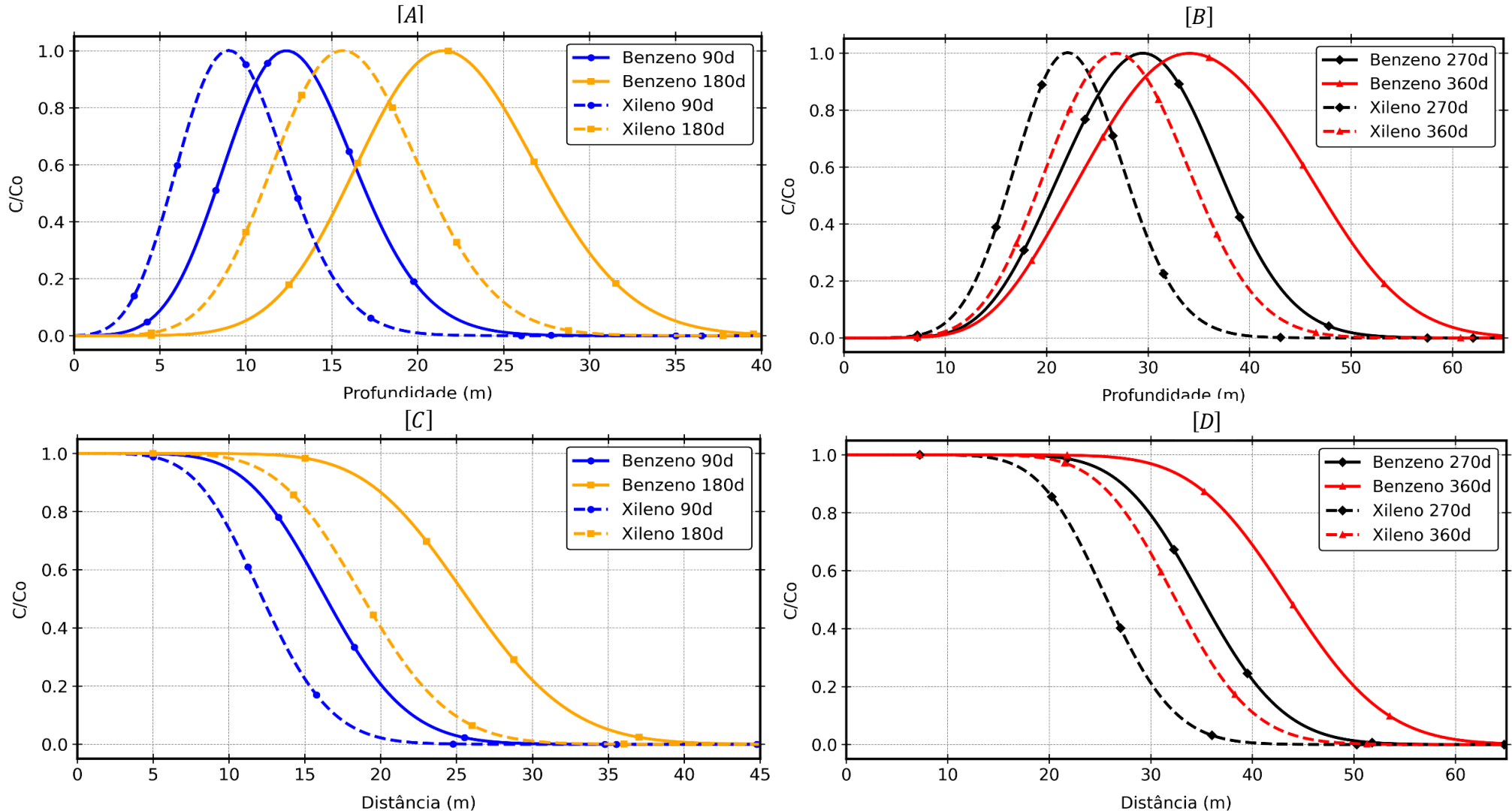
Aos 270 dias, a concentração máxima se propaga até cerca de 40 metros, durante a fase de decaimento, e aos 360 dias, a pluma atinge 50 metros, refletindo a fase final de cessação do fluxo com uma diminuição mais gradual das concentrações.

Semelhante aos comportamentos observados anteriormente, essas observações indicam que, em comparação ao benzeno, o xileno apresenta uma mobilidade mais contida no aquífero arenoso, resultando em uma pluma mais concentrada e menos extensa.

Para elucidar essa comparação de maneira mais efetiva, a Figura 5.21 apresenta gráficos de linha que comparam os resultados verticais e longitudinais do benzeno e do xileno em um aquífero arenoso sob condições de contorno de fluxo prescrito.

Os perfis ilustram as diferenças nas mobilidades dos dois contaminantes, permitindo uma análise comparativa da dispersão do benzeno e do xileno em um aquífero arenoso sob condições de contorno de fluxo prescrito. Essa visualização facilita a compreensão dos padrões de transporte e transformação de cada contaminante.

Figura 5.21 - Perfis de concentração de benzeno e xileno em um aquífero arenoso ao longo do tempo (fluxo prescrito): **Perfil [A]**: Coordenada (30, 30, z), concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. **Perfil [B]**: Coordenada (30, 30, z), concentração ao longo da profundidade, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias. **Perfil [C]**: Coordenada (x, 10, 40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40, comparando benzeno e xileno aos 90 e 180 dias. **Perfil [D]**: Coordenada (x, 10, 40), concentração ao longo da distância longitudinal na profundidade z=40, comparando benzeno e xileno aos 270 e 360 dias.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

No perfil 5.21 [A], observa-se que, aos 90 dias, a pluma de benzeno (linha azul sólida) alcança aproximadamente 20 metros em profundidade, enquanto a pluma de xileno (linha azul tracejada) atinge cerca de 10 metros. Aos 180 dias, o benzeno se estende até 30 metros, enquanto o xileno se propaga até aproximadamente 15 metros. Essa diferença é atribuída à maior mobilidade do benzeno.

No perfil 5.21 [B], aos 270 dias, a pluma de benzeno atinge cerca de 40 metros de profundidade enquanto a de xileno se estende até 25 metros. Após 360 dias, o benzeno se propaga até 50 metros, enquanto o xileno atinge cerca de 30 metros.

No perfil 5.21 [C], aos 90 dias, no perfil designado, o benzeno alcança 25 metros em distância longitudinal, enquanto o xileno se propaga até cerca de 15 metros. Aos 180 dias, o benzeno se estende até 35 metros, enquanto o xileno atinge aproximadamente 20 metros.

Aos 270 dias, a pluma de benzeno alcança 45 metros, enquanto a de xileno atinge cerca de 30 metros. Aos 360 dias, o benzeno se propaga até 50 metros, enquanto o xileno atinge cerca de 40 metros. No perfil [D], as tendências são semelhantes, com o benzeno se propagando mais longe que o xileno em todas as etapas.

Estes resultados corroboram com a citação de Cheng *et al.* (2016), ao afirmarem que benzeno, tolueno e xileno (BTEX) exibem diferentes comportamentos de mobilidade e degradação em um aquífero arenoso. Segundo os autores o benzeno tende a migrar mais longe e mais rápido devido à sua maior solubilidade em comparação ao xileno, que mostra um movimento mais limitado e maior retenção no ambiente subterrâneo.

Isso destaca a eficácia do modelo computacional desenvolvido, que fornece respostas coerentes com os fenômenos físicos observados. Ao considerar as propriedades individuais dos contaminantes, o modelo consegue prever com precisão a extensão e a concentração das plumas em cenários de contaminação, demonstrando sua robustez e aplicabilidade em estudos de dinâmica de poluentes.

5.6 Implementação da Interface Gráfica

Neste subcapítulo, apresenta-se o resultado da interface gráfica desenvolvida para o modelo computacional tridimensional que simula a dispersão de poluentes em aquíferos.

A interface gráfica desenvolvida ilustrada na Figura 5.22 tem como objetivo principal democratizar o uso de modelos complexos de simulação de poluentes, facilitando o acesso de estudantes e pesquisadores de diferentes níveis de especialização.

Ao tornar o processo de inserção de dados e análise de resultados mais intuitivo, esta ferramenta promove um entendimento mais profundo dos fenômenos de dispersão de poluentes em meios porosos.

5.6.1 Estrutura da Interface Gráfica

A interface gráfica (Figura 5.22), foi desenvolvida com o intuito de ser intuitiva. As principais funcionalidades estão organizadas em abas, permitindo uma navegação simples e direta. A seguir, são descritas as principais telas e funcionalidades da interface.

5.6.2 Inserir os Parâmetros da Litologia

Nesta seção, o usuário pode inserir dados referentes à porosidade efetiva do solo, densidade, e fração de carbono orgânico. A interface permite armazenar esses valores e apresenta tabelas com valores típicos para diferentes materiais, facilitando a inserção de dados por usuários menos experientes.

5.6.3 Inserir a Reação Química

A interface permite a inserção do tempo de meia-vida dos poluentes, apresentando valores típicos para diferentes substâncias como benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno. Também é possível armazenar e calcular a constante de reação com base nos dados inseridos.

5.6.4 Inserção da Dispersividade

Os parâmetros de dispersividade podem ser configurados nesta seção. O usuário pode ajustar as proporções da dispersividade nas direções y e z em relação à direção x , e armazenar os valores calculados.

5.6.5 Geometria do Modelo

Nesta tela, o usuário define as dimensões do domínio do modelo nas direções x , y , e z , garantindo que o modelo tridimensional se ajuste às características específicas do aquífero em estudo.

5.6.6 Malha do Modelo

A configuração da malha do modelo é realizada nesta seção, onde o usuário especifica o número de elementos em cada direção (x , y , z). Esse ajuste é fundamental para a precisão dos cálculos de dispersão.

5.6.7 Escolha da Condições de Contorno

O usuário pode inserir os dados de concentração inicial e fluxo prescrito, bem como a duração da simulação. Esses parâmetros são essenciais para possibilitar a habilitação do botão para iniciar a simulação.

5.7 Resultados da GUI

Os resultados das simulações são visualizados e interpretados de forma eficaz através da interface gráfica desenvolvida. A interface permite a inserção intuitiva de dados e a apresentação clara dos resultados, facilitando a compreensão e a interação mesmo por usuários não especialistas.

Ao final da execução, a interface gráfica gera automaticamente um arquivo NPY. Este tipo de arquivo é um formato eficiente utilizado para armazenar arrays multidimensionais em Python, facilitando a manipulação dos dados em etapas de pós-processamento.

O arquivo NPY contém a matriz do tempo final simulado, permitindo uma análise mais detalhada e customizada dos resultados. A seguir, os principais benefícios da GUI são:

- Interface intuitiva e de fácil navegação.
- Armazenamento de valores típicos para diferentes parâmetros, facilitando a inserção de dados.

A interface gráfica desenvolvida para o modelo computacional tridimensional representa uma ferramenta avançada para a simulação da dispersão de poluentes em aquíferos.

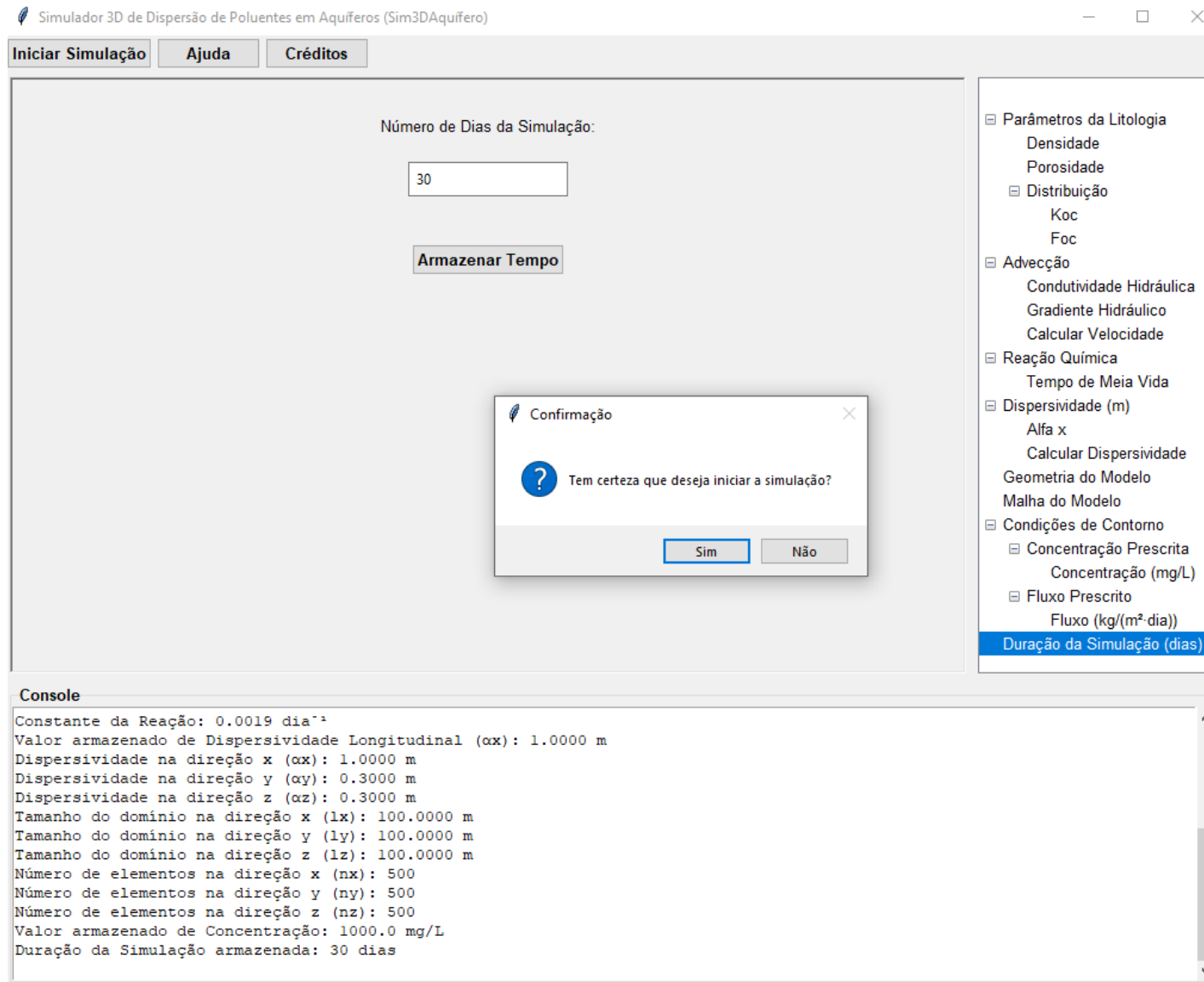
Utilizando métodos numéricos conservativos, como o Método dos Volumes Finitos, o modelo garante a precisão e a conservação das propriedades físicas ao longo das simulações.

A simplificação dos processos complexos de simulação representa um avanço crucial para a ampliação da aplicabilidade prática e da utilidade do software, tornando-o uma ferramenta essencial tanto para a pesquisa quanto para a prática na engenharia ambiental. Esse desenvolvimento torna o uso de modelos computacionais mais acessível a um público diversificado de profissionais, incluindo engenheiros, técnicos e gestores ambientais, como também facilita a compreensão dos resultados por partes interessadas que não possuem profundo conhecimento técnico.

A abordagem adotada para simplificar as simulações permite que modelos computacionais robustos sejam integrados de maneira mais eficiente em estudos ambientais. Isso promove uma análise mais precisa e detalhada dos fenômenos de dispersão de poluentes em aquíferos, essencial para a tomada de decisões informadas sobre a gestão e mitigação de contaminação em sistemas hídricos. Além disso, essa simplificação potencializa a capacidade de explorar diferentes cenários, oferecendo suporte às políticas públicas e iniciativas de conservação ambiental, ao mesmo tempo que possibilita a replicação em diferentes contextos geográficos e condições hidrológicas.

A seguir, apresenta-se uma imagem obtida da interface gráfica desenvolvida especificamente para o modelo computacional tridimensional de simulação da dispersão de poluentes em aquíferos, elaborada no contexto desta tese. Através dela, é possível ajustar parâmetros cruciais, como as características do aquífero, a natureza do poluente, as condições de contorno e os períodos de simulação, garantindo maior precisão nas análises e previsões.

A Figura 5.22 demonstra a tela de configuração da Duração da Simulação, permitindo ao usuário definir o número de dias para a simulação após o preenchimento de todos os parâmetros anteriores. Esta é uma das últimas telas da interface, outras estão disponíveis no apêndice desta tese.

Figura 5.22 - Tela de Configuração da Simulação na Interface Gráfica.

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

6 CONCLUSÃO

O presente estudo implementou um modelo matemático e desenvolveu um modelo computacional robusto para simular a dispersão tridimensional e transiente de poluentes em aquíferos.

Utilizando o método dos volumes finitos para a discretização das equações de conservação, foi possível prever o comportamento de contaminantes na zona saturada do solo, com ênfase nos mecanismos de advecção, difusão, sorção e reação química.

As análises de convergência e de sensibilidade realizadas trouxeram segurança e confiança aos resultados do modelo. A análise de convergência foi crucial para garantir que a discretização do método dos volumes finitos mantivesse a precisão necessária, indicando que o modelo responde de maneira estável a diferentes resoluções de malha.

A análise de sensibilidade permitiu identificar os parâmetros mais influentes no comportamento do modelo, essencial para compreender como variações nos parâmetros físicos, como velocidades de fluxo e constantes de reação, impactam a dispersão dos contaminantes.

Os cenários de dispersão sob condições de contorno de concentração prescrita e fluxo prescrito revelaram nuances importantes na mobilidade dos contaminantes benzeno e xileno, evidenciando a influência das propriedades físico-químicas e das condições geológicas.

Os resultados destacaram a rápida propagação do benzeno em aquíferos arenosos devido à maior permeabilidade e predominância da advecção, enquanto no aquífero sedimentar, a dispersão se mostrou mais lenta e irregular, influenciada pelas heterogeneidades litológicas. O xileno, por suas características físico-químicas, apresentou menor mobilidade e uma pluma mais concentrada.

A interface gráfica desenvolvida não só facilitou a inserção de dados e a visualização dos resultados, mas também desempenhou um papel crucial na usabilidade do modelo. Esta interface permite que uma ampla gama de usuários,

incluindo aqueles sem especialização técnica, interajam de maneira eficiente com o modelo.

A GUI, ao simplificar a complexidade das simulações, amplifica o alcance e a aplicabilidade do modelo, destacando-se como um avanço importante na integração de ciência e prática.

O modelo matemático e computacional desenvolvido demonstra sua eficácia ao lidar com diferentes condições de contorno e parâmetros ambientais, proporcionando uma base sólida para futuras pesquisas. A capacidade de simular diversos cenários ressalta sua utilidade prática para a avaliação de contaminações em águas subterrâneas.

A modelagem e simulação detalhada dos processos envolvidos oferecem uma ferramenta científica, contribuindo para o avanço das ciências ambientais e a gestão sustentável dos recursos hídricos subterrâneos, com tempos de execução eficientes para análises detalhadas e precisas.

REFERÊNCIAS

ABAS – Associação Brasileira de Águas Subterrâneas. **Águas subterrâneas: o que são?** 2022. Disponível em: <https://www.abas.org/aguas-subterraneas-o-que-sao/>. Acesso em: 03 fev. 2022.

AMEUR, M.; AOUITI, S.; HAMZAOUI-AZAZA, F.; CHEIKHA, L. B.; GUEDDARI, M. Vulnerability assessment, transport modeling and simulation of nitrate in groundwater using SI method and modflow-MT3DMS software: case of Sminja aquifer, Tunisia. **Environmental Earth Sciences**, v. 80, p. 1-16, 2021.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING AND MATERIALS. Standard guide for risk-based corrective action applied at petroleum release sites. ASTM E-1739-95. Philadelphia, PA, 1995.

BEAR, Jacob; CHENG, Alexander H.-D. **Modeling groundwater flow and contaminant transport**. Springer Science & Business Média, 2010.

BEAR, J.; VERRUIJT, A. **Modeling groundwater flow and pollution**. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1987.

BRASIL. Ministério do Meio Ambiente. Secretaria de Recursos Hídricos e Ambiente Urbano. **Águas subterrâneas: um recurso a ser conhecido e protegido**. Brasília, 2007.

BUGAN, R.; TREDoux, G.; JOVANOVIĆ, N.; ISRAEL, S. **Pollution plume development in the primary aquifer at the Atlantis historical solid waste disposal site, South Africa**. Geosciences, v. 8, n. 7, p. 231, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/geosciences8070231>. Acesso em: 19 jul. 2023.

CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Qualidade das águas subterrâneas no Estado de São Paulo**. São Paulo, 2015.

CETESB – Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. **Poluição das águas subterrâneas**. 2022. Disponível em: <https://cetesb.sp.gov.br/aguas-subterraneas/informacoes-basicas/poluicao-das-aguas-subterraneas/>. Acesso em: 07 fev. 2022.

CHEN, J. S.; HO, Y. C.; LIANG, C. P.; WANG, S. W.; LIU, C. W. **Semi-analytical model for coupled multispecies advective-dispersive transport subject to rate-limited sorption**. Journal of Hydrology, v. 579, 124164, 2019. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.124164>. Acesso em: 19 jul. 2023.

CHEN, Z.; ZHAN, H. **Universal relationship between mass flux and properties of layered heterogeneity on the contaminant-flushing process**. Water, v. 15, n. 18, p. 3292, 2023. Disponível em: <https://doi.org/10.3390/w15183292>. Acesso em: 19 jul. 2023.

CHENG, Y.; CHEN, Y.; JIANG, Y.; JIANG, L.; SUN, L.; LI, L.; HUANG, J. **Migration of BTEX and biodegradation in shallow underground water**

through fuel leak simulation. BioMed Research International, 2016.
Disponível em: <https://doi.org/10.1155/2016/7040872>. Acesso em: 19 jul. 2023.

COTA, Stela Dalva Santos. **Modelagem da contaminação de aquíferos livres por NAPLs residuais na zona não-saturada.** 2000. 165 f. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2000. Disponível em: <https://lume.ufrgs.br/handle/10183/205892>. Acesso em: 22 mar. 2024.

COSTA, C. W.; LORANDI, R.; LOLLO, J. A. D.; SERIKAWA, V. D. S. **Combinação de atributos naturais e antrópicos na definição do potencial de contaminação de aquíferos, sudeste do Brasil.** Sociedade & Natureza, v. 32, p. 603-619, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.14393/SN-v32-2020-56221>. Acesso em: 27 abr. 2024.

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

DAGAN, G. **Flow and transport in porous formations.** 2. ed. New York: Springer, 2012. Disponível em: https://link.springer.com/chapter/10.1007/978-3-030-20516-4_10. Acesso em: 25 jun. 2024.

DARWISH, Marwan; MOUKALLED, Fadl. **The finite volume method in computational fluid dynamics: an advanced introduction with OpenFOAM® and Matlab®.** Springer, 2016.

DAYANTI, M. P.; FACHRUL, M. F.; WIJAYANTI, A. **Escherichia coli as bioindicator of the groundwater quality in Palmerah District, West Jakarta, Indonesia.** In: IOP Conference Series: Earth and Environmental Science, IOP Publishing, 2018. p. 012081.

DENIZMAN, C. **Land use changes and groundwater quality in Florida.** Applied Water Science, v. 8, n. 5, 6 ago. 2018. Disponível em: <http://dx.doi.org/10.1007/s13201-018-0776-9>. Acesso em: 12 jan. 2024.

DOMENICO, P. A.; SCHWARTZ, F. W. Physical and chemical hydrogeology. New York: John Wiley and Sons, 1990. 824 p.

ELBACHÁ, A. T. **Estudo da influência de alguns parâmetros no transporte de massa em solos argilosos.** 1989. 178 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Departamento de Engenharia Civil, PUC-Rio, Rio de Janeiro, 1989.

FERREIRA, J. P. C. L. **A dispersão de poluentes em águas subterrâneas (análise custo-eficácia de modelos matemáticos e ensaios de traçadores para realização de estudos de impacto ambiental).** 1996. Tese (Especialista) – Laboratório Nacional de Engenharia Civil (LNEC), Lisboa, 1996.

FORTUNA, Armando. **Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Flúidos** Vol. 30. Edusp, 2000.

FREEZE, R. A.; WITHERSPOON, P. A. **Theoretical analysis of regional groundwater flow:** 1. Analytical and numerical solutions to the mathematical

model. *Water Resources Research*, v. 2, n. 4, p. 641-656, 1966. Disponível em: <https://doi.org/10.1029/WR002i004p00641>. Acesso em: 18 mar. 2023.

FREUNDLICH, H. **Kapillarchemie: eine Darstellung der Chemie der Kolloide und verwandter Gebiete**. Leipzig: Akademische Verlagsgesellschaft, 1909.

FREEZE, R. A. **Three-dimensional, transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin**. *Water Resources Research*, v. 7, n. 2, p. 347-366, 1971. Disponível em: <https://doi.org/10.1029/WR007i002p00347>. Acesso em: 12 fev. 2024.

FETTER, C. W. **Contaminant hydrogeology**. New York: Macmillan Publishing Company, 1993.

FETTER, C. W.; BOVING, T.; KREAMER, D. **Contaminant hydrogeology**. [S.l.]: Waveland Press, 2017.

GHOSH, M. M.; YUAN, J. Y. **Modified Langmuir-Freundlich isotherm model for adsorption in heterogeneous systems**. *Environmental Science & Technology*, v. 21, n. 2, p. 130-134, 1987.

GUIGUER, Nilson; KOHNKE, Michael Wolfgang. **Métodos para determinação da vulnerabilidade de aquíferos**. Águas Subterrâneas, 2002.

HANDBOOK OF ENVIRONMENTAL DEGRADATION RATES. Philip H. Howard et al. (eds.). Chelsea, MI: Lewis Publishers, 1991.

HOLZBECHER, Ekkehard. **Environmental modeling: using MATLAB**. Springer Science & Business Media, 2012.

KREYSZIG, E. **Advanced engineering mathematics**. 8. ed. New York: Wiley, 1999.

KUMAR, P.; AGARWAL, S.; BHUSHAN, M.; AIND, S. P.; SHYAM, G. M. **Groundwater contaminant transport analysis and numerical solution of diffusion in saturated aquifer**. *International Journal of Special Education*, v. 37, n. 3, 2022.

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: Coletânea de Trabalhos Técnicos, Florianópolis, SC, 2002. p. 85-91.

LANGMUIR, I. **The adsorption of gases on plane surfaces of glass, mica, and platinum**. *Journal of the American Chemical Society*, v. 40, n. 9, p. 1361-1403, 1918.

LEE, C.-H.; CHENG, R.-T.-S. **On seawater encroachment in coastal aquifers**. *Water Resources Research*, v. 10, n. 5, p. 1039-1043, 1974. Disponível em: <https://doi.org/10.1029/WR010i005p01039>. Acesso em: 02 fev. 2024.

LI, B.; MA, X.; DENG, J.; LI, Q.; CHEN, W.; LI, G.; CHEN, G.; WANG, J. **Comparison of acetaminophen degradation in UV-LED-based advanced**

oxidation processes: reaction kinetics, radicals' contribution, degradation pathways and acute toxicity assessment. *Science of the Total Environment*, v. 723, 137993, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.scitotenv.2020.137993>. Acesso em: 02 fev. 2024.

LIU, P., WANG, Q., ZHENG, C., HE, C. **Sorption of Sulfadiazine, Norfloxacin, Metronidazole and Tetracycline by granular activated carbon: Kinetics, Mechanisms, and Isotherms.** *Water Air Soil Pollut*, v. 228, n. 4, p.129, 2017.

MALIVA, Robert G. **Aquífer characterization techniques.** Berlin: Springer, 2016.

MALISKA, Clovis R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional.** ISBN 8521613962. 1ª Edição–2004. LTC, 1995.

MALISKA, C. R. **Transferência de Calor e Mecânica dos Fluidos Computacional.** 2ª. Edição. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos Editora, v. 200, 2004.

MIDÕES, Carla; FERNANDES, Judite; COSTA, Cristina Gomes da. **Água subterrânea: conhecer para proteger e preservar.** Publicação sob o projeto nº P-IV-1052, do Programa Ciência Viva, 2001.

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

MOORE, K. B.; EKWURZEL, B.; ESSER, B. K.; HUDSON, G. B.; MORAN, J. E. **Sources of groundwater nitrate revealed using residence time and isotope methods.** *Applied Geochemistry*, v. 21, n. 6, p. 1016-1029, 2006.

MUNSON, B. R.; OKIISHI, T. H.; HUEBSCH, W. W.; ROTHMAYER, A. P. **Fundamentals of Fluid Mechanics.** 7. ed. Hoboken: Wiley, 2013.

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

NYENDE, J.; ENYOGOI, I.; MANGO, J.; KASUMBA, H. **Numerical simulation of a two-dimensional groundwater pollutant transport problem using incompressible steady-state Navier-Stokes equations and diffusion-convection equations.** *Modelling and Simulation in Engineering*, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1155/2022/7419502>. Acesso em: 14 fev. 2024.

OSTAD-ALI-ASKARI, Kaveh; SHAYANNEJAD, Mohammad. **Quantity and quality modelling of groundwater to manage water resources in Isfahan-Borkhar Aquifer.** *Environment, Development and Sustainability*, v. 23, n. 11, p. 15943-15959, 2021. Disponível em: <https://link.springer.com/article/10.1007/s10668-021-01323-1>. Acesso em: 03 fev. 2024.

PATANKER, Suhas V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** 1980.

PERINA, T. **Semi-analytical three-dimensional solute transport of sequentially decaying species with mobile-immobile regions, sorption, decay, and arbitrary transient source**. *Mathematical Geosciences*, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s11004-021-09975-5>. Acesso em: 18 abr. 2024.

PINDER, George F.; COOPER JR, Hilton H. **A numerical technique for calculating the transient position of the saltwater front**. *Water Resources Research*, v. 6, n. 3, p. 875-882, 1970.

RIVETT, M. O.; FEENSTRA, S.; CHERRY, J. A. **A controlled field experiment on groundwater contamination by a multicomponent DNAPL: creation of the emplaced-source and overview of dissolved plume development**. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 49, n. 1-2, p. 111-149, 2001. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/S0169-7722\(00\)00191-1](https://doi.org/10.1016/S0169-7722(00)00191-1). Acesso em: 19 jan. 2024.

ROACHE, P. J. Perspective: a method for uniform reporting of grid refinement studies. *ASME. Journal of Fluids Engineering*, v. 116, n. 3, p. 405-413, set. 1994. Disponível em: <https://doi.org/10.1115/1.2910291>. Acesso em: 12 mar. 2023.

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.l.: s.n.], 2001.

SAUERWEIN, H. **Numerical calculations of multidimensional and unsteady flows by the method of characteristics**. *Journal of Computational Physics*, v. 1, n. 3, p. 406-432, 1967. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0021-9991\(67\)90048-4](https://doi.org/10.1016/0021-9991(67)90048-4). Acesso em: 10 mar. 2023.

SARMA, Riki; SINGH, Santosh Kumar. **Simulating contaminant transport in unsaturated and saturated groundwater zones**. *Water Environment Research*, v. 93, n. 9, p. 1496-1509, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.1002/wer.1555>. Acesso em: 22 jan. 2024.

SCHÄFER, W. **Simulating transport and removal of xylene during remediation of a sandy aquifer**. 1995. Disponível em: [https://doi.org/10.1016/0169-7722\(95\)00018-Q](https://doi.org/10.1016/0169-7722(95)00018-Q). Acesso em: 28 abr. 2023.

SHARMA, P. K.; MAYANK, M.; OJHA, C. S. P.; SHUKLA, S. K. **A review on groundwater contaminant transport and remediation**. *ISH Journal of Hydraulic Engineering*, v. 26, n. 1, p. 112-121, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1080/09715010.2018.1438213>. Acesso em: 18 mar. 2023.

SHIRES, G. L. **Péclet number**. In: **A-to-Z Guide to Thermodynamics, Heat & Mass Transfer, and Fluids Engineering, 2011**. Disponível em: https://doi.org/10.1615/atoz.p.pecllet_number. Acesso em: 23 mar. 2024.

SEGOL, G.; PINDER, G. F.; GRAY, W. G. **A Galerkin finite element technique for calculating the transient position of seawater front**. *Water Resources Research*, v. 11, p. 343-347, 1975.

SIMÃO, Daniel Amgarten. **O método de Monte Carlo como estimativa de incertezas na modelagem de transporte de benzeno em meios porosos saturados: uma revisão da literatura**. 2020. Monografia (Especialização em Gestão de Áreas Contaminadas, Desenvolvimento Urbano Sustentável e Revitalização de Brownfields) – Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2020.

SILVA, C. M. D. P. S. **Ferramentas analíticas e numéricas para a descrição da secagem de sólidos na forma de cilindros e de elipsoides**. 2012. 254 p. Tese (Doutorado em Engenharia de Processos) – Centro de Ciências e Tecnologia, Universidade Federal de Campina Grande, Campina Grande, PB, Brasil, 2012.

SILVA, A. L. **Modelagem e simulação numérica do transporte de poluentes em meios porosos com reação química**. 91f. Dissertação (Programa de Pós-Graduação em Ciência e Tecnologia Ambiental - PPGCTA) - Universidade Estadual da Paraíba, Campina Grande, 2016.

SOLDERA, Bruna Camargo; MANZIONE, Rodrigo Lilla. **Modelagem de níveis freáticos no Sistema Aquífero Bauru como ferramenta na gestão de recursos hídricos subterrâneos**. *Ciência Geográfica*, p. 54-61, 2017.

SUN, Ne-Zheng; SUN, Alexander. **Mathematical modeling of groundwater pollution**. Springer Science & Business Media, 2014.

TEIXEIRA, W.; TOLEDO, C. M.; FAIRCHILD, T. R.; TAIOLI, F. **Decifrando a Terra**. São Paulo: Companhia Editora Nacional, 2007. 624 p.

TODD, D. K. Annotated bibliography on artificial recharge of ground water through 1954. **U.S. Geological Survey Water-Supply Paper**, n. 1477, 115 p., 1959.

TYSON, H. N.; WEBER, Ernest M. **Ground-water management for the nation's future: computer simulation of ground-water basins**. Proceedings of ASCE, 1964.

USOH, G. A.; AHANEKU, I. E.; UGWU, E. C.; SAM, E. O.; ITAM, D. H.; ALANEME, G. U.; NDAMZI, T. C. **Mathematical modeling and numerical simulation technique for selected heavy metal transport in MSW dumpsite**. *Scientific Reports*, v. 13, n. 1, p. 5674, 2023.

VARNIER, C.; SUHOGUSOFF, A. V.; HIRATA, R.; ARAVENA, R. **Uso dos isótopos ¹⁵N e ¹⁸O em nitrato e a sua importância em estudos de contaminação de aquíferos urbanos na América Latina**. *Derbyana*, v. 42, 2021.

VALSALA, R.; GOVINDARAJAN, S. K. **Interaction of dissolution, sorption, and biodegradation on transport of BTEX in a saturated groundwater system: numerical modeling and spatial moment analysis**. *Journal of Earth System Science*, 2018. Disponível em: <https://doi.org/10.1007/s12040-018-0950-3>. Acesso em: 24 abr. 2024.

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

Minas Gerais: UFOP/MG, 2008. 189 p. Dissertação (Mestrado Profissional em Engenharia Geotécnica) – Universidade Federal de Ouro Preto, 2008.

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

YONG, Raymond Nen; MOHAMED, Abdel-Mohsen Onsy; WARKENTIN, Benno P. **Principles of contaminant transport in soils**. Amsterdam: Elsevier, 1992.

WIEDEMEIER, T. H.; SWANSON, M. A.; WILSON, J. T.; KAMPBELL, D. H.; MILLER, R. N.; HANSEN, J. Approximation of degradation rate constants for monoaromatic hydrocarbons (BTEX) in groundwater. **Groundwater Monitoring and Remediation**, v. 16, p. 186-194, 1995.

ZHENG, C.; BENNETT, G. D. **Applied contaminant transport modeling**. 2. ed. New York: John Wiley & Sons, 2002.

ZHENG, Chunmiao; WANG, P. P. **MT3DMS: a modular three-dimensional multispecies transport model for simulation of advection, dispersion, and chemical reactions of contaminants in groundwater systems; documentation and user's guide**. 1999.

ZHENG, C. **Recent developments and future directions for MT3DMS and related transport codes**. *Ground Water*, v. 47, n. 5, p. 620-625, 2009.

ZHENG, C. **MT3DMS v5.3 supplemental user's guide**. Tuscaloosa, Alabama: University of Alabama, Department of Geological Sciences, 2010. 50 p.

APÊNDICE A: ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DOS CENÁRIOS

CENÁRIOS	Velocidade (m/dia)	Reações (dia ⁻¹)	Dispersividade (m)	Retardo (-)	Tempo (dia)	CMEDIA (mg/L)
CENÁRIO 1	0.05	0.005	0.5	1	30	0.0065
CENÁRIO 1	0.05	0.005	0.5	1	60	0.0245
CENÁRIO 1	0.05	0.005	0.5	1	90	0.0576
CENÁRIO 1	0.05	0.005	0.5	1	120	0.1073
CENÁRIO 2	0.05	0.005	0.5	1.5	30	0.0031
CENÁRIO 2	0.05	0.005	0.5	1.5	60	0.0102
CENÁRIO 2	0.05	0.005	0.5	1.5	90	0.0220
CENÁRIO 2	0.05	0.005	0.5	1.5	120	0.0389
CENÁRIO 3	0.05	0.005	1.5	1	30	0.0064
CENÁRIO 3	0.05	0.005	1.5	1	60	0.0177
CENÁRIO 3	0.05	0.005	1.5	1	90	0.0336
CENÁRIO 3	0.05	0.005	1.5	1	120	0.0533
CENÁRIO 4	0.05	0.005	1.5	1.5	30	0.0036
CENÁRIO 4	0.05	0.005	1.5	1.5	60	0.0090
CENÁRIO 4	0.05	0.005	1.5	1.5	90	0.0161
CENÁRIO 4	0.05	0.005	1.5	1.5	120	0.0246
CENÁRIO 5	0.05	0.15	0.5	1	30	0.0009
CENÁRIO 5	0.05	0.15	0.5	1	60	0.0009
CENÁRIO 5	0.05	0.15	0.5	1	90	0.0009
CENÁRIO 5	0.05	0.15	0.5	1	120	0.0009
CENÁRIO 6	0.05	0.15	0.5	1.5	30	0.0005
CENÁRIO 6	0.05	0.15	0.5	1.5	60	0.0005
CENÁRIO 6	0.05	0.15	0.5	1.5	90	0.0005
CENÁRIO 6	0.05	0.15	0.5	1.5	120	0.0005
CENÁRIO 7	0.05	0.15	1.5	1	30	0.0012
CENÁRIO 7	0.05	0.15	1.5	1	60	0.0012
CENÁRIO 7	0.05	0.15	1.5	1	90	0.0012
CENÁRIO 7	0.05	0.15	1.5	1	120	0.0012
CENÁRIO 8	0.05	0.15	1.5	1.5	30	0.0007
CENÁRIO 8	0.05	0.15	1.5	1.5	60	0.0007
CENÁRIO 8	0.05	0.15	1.5	1.5	90	0.0007

CENÁRIO 8	0.05	0.15	1.5	1.5	120	0.0007
CENÁRIO 9	0.15	0.005	0.5	1	30	0.0740
CENÁRIO 9	0.15	0.005	0.5	1	60	0.3946
CENÁRIO 9	0.15	0.005	0.5	1	90	0.9792
CENÁRIO 9	0.15	0.005	0.5	1	120	1.2618
CENÁRIO 10	0.15	0.005	0.5	1.5	30	0.0279
CENÁRIO 10	0.15	0.005	0.5	1.5	60	0.1344
CENÁRIO 10	0.15	0.005	0.5	1.5	90	0.3510
CENÁRIO 10	0.15	0.005	0.5	1.5	120	0.6624
CENÁRIO 11	0.15	0.005	1.5	1	30	0.0413
CENÁRIO 11	0.15	0.005	1.5	1	60	0.1445
CENÁRIO 11	0.15	0.005	1.5	1	90	0.2803
CENÁRIO 11	0.15	0.005	1.5	1	120	0.4288
CENÁRIO 12	0.15	0.005	1.5	1.5	30	0.0196
CENÁRIO 12	0.15	0.005	1.5	1.5	60	0.0648
CENÁRIO 12	0.15	0.005	1.5	1.5	90	0.1308
CENÁRIO 12	0.15	0.005	1.5	1.5	120	0.2053
CENÁRIO 13	0.15	0.15	0.5	1	30	0.0063
CENÁRIO 13	0.15	0.15	0.5	1	60	0.0070
CENÁRIO 13	0.15	0.15	0.5	1	90	0.0071
CENÁRIO 13	0.15	0.15	0.5	1	120	0.0071
CENÁRIO 14	0.15	0.15	0.5	1.5	30	0.0028
CENÁRIO 14	0.15	0.15	0.5	1.5	60	0.0030
CENÁRIO 14	0.15	0.15	0.5	1.5	90	0.0031
CENÁRIO 14	0.15	0.15	0.5	1.5	120	0.0031
CENÁRIO 15	0.15	0.15	1.5	1	30	0.0052
CENÁRIO 15	0.15	0.15	1.5	1	60	0.0055
CENÁRIO 15	0.15	0.15	1.5	1	90	0.0055
CENÁRIO 15	0.15	0.15	1.5	1	120	0.0055
CENÁRIO 16	0.15	0.15	1.5	1.5	30	0.0028
CENÁRIO 16	0.15	0.15	1.5	1.5	60	0.0030
CENÁRIO 16	0.15	0.15	1.5	1.5	90	0.0030
CENÁRIO 16	0.15	0.15	1.5	1.5	120	0.0030

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE B: CONVERGÊNCIA DA CC TIPO I E II.

Condição de Contorno	Malha (m1)	Malha (m2)	Malha (m3)	Tempo Computacional (m1) (s) ⁷	Tempo Computacional (m2) (s) ¹	Tempo Computacional (m3) (s) ¹
Tipo I	500 ³	400 ³	300 ³	4544.54	2176.20	880.31
Tipo II	750 ³	600 ³	500 ³	13980.65	8004,08	4720,56

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

⁷ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

APÊNDICE C: DADOS CENÁRIOS DA CC TIPO I

Cenário	Poluente	Tipo de Solo	Dimensões do Aquífero (m³)	Malha	Tempo de Simulação (dias)	Tempo CPU (s)⁸
1	Benzeno	Arenoso	500x500x500	500x500x500	360	39780
2	Benzeno	Sedimentar	500x500x500	500x500x500	360	27288
3	Xileno	Arenoso	500x500x500	500x500x500	360	32940
4	Xileno	Sedimentar	500x500x500	500x500x500	360	25020

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

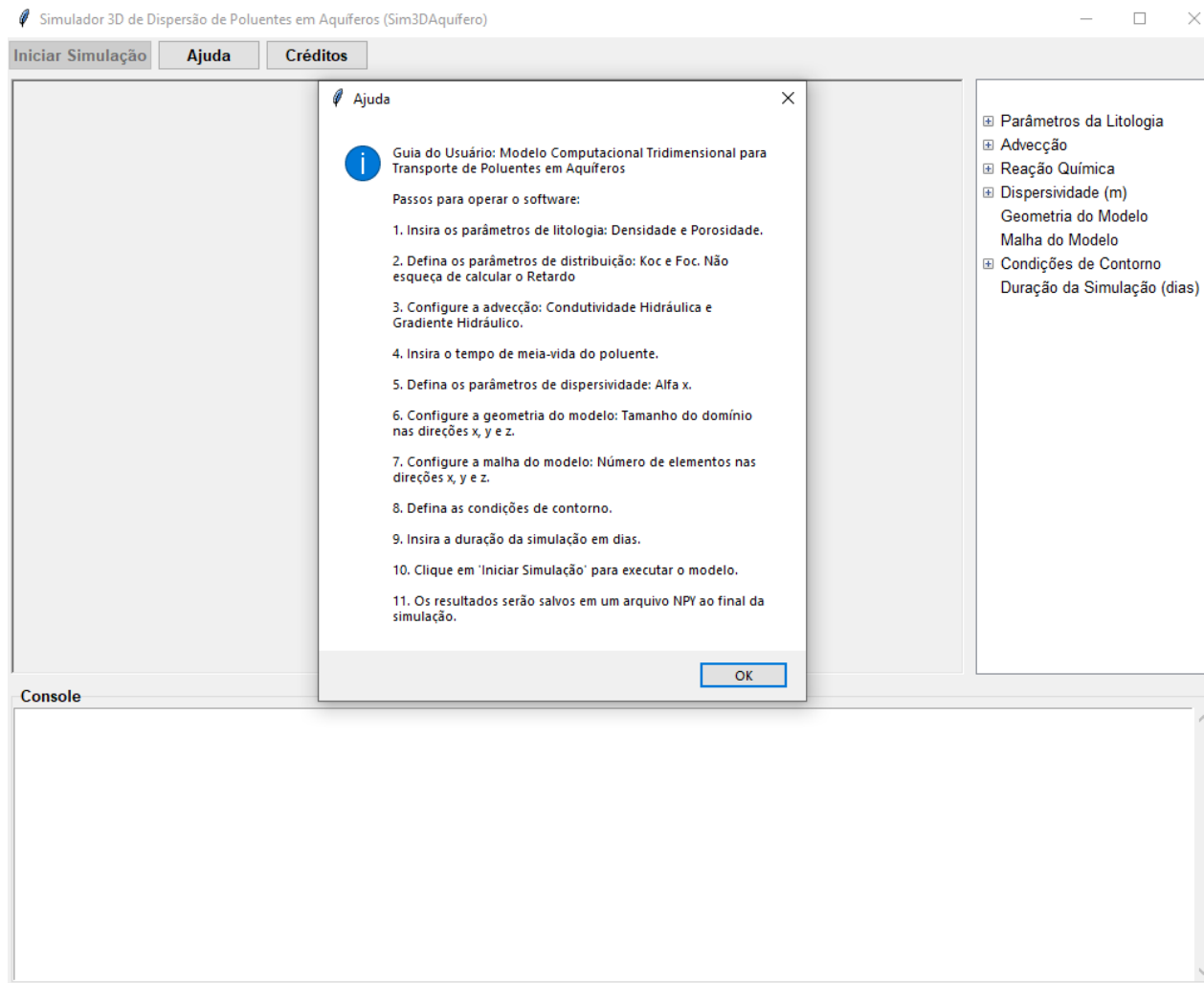
⁸ Configurações da máquina utilizada nas simulações (Processador - Core (TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz, Memória RAM - 16.0 GB).

APÊNDICE D: DADOS CENÁRIOS DA CC TIPO II

Cenário	Poluente	Tipo de Solo	Dimensões do Aquífero (m³)	Malha	Tempo de Simulação (dias)	Tempo CPU (s)
1	Benzeno	Arenoso	500x500x500	600x600x600	360	54864
2	Benzeno	Sedimentar	500x500x500	600x600x600	360	34488
3	Xileno	Arenoso	500x500x500	600x600x600	360	51480
4	Xileno	Sedimentar	500x500x500	600x600x600	360	32292

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE E: GUIA DO USUÁRIO PARA A GUI.



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE F: PARÂMETRO POROSIDADE NA GUI.

The screenshot displays the 'Simulador 3D de Dispersão de Poluentes em Aquíferos (Sim3DAquifero)' interface. At the top, there are buttons for 'Iniciar Simulação', 'Ajuda', and 'Créditos'. The main area is divided into a central configuration panel and a right-hand sidebar. The sidebar contains a tree view of parameters: 'Parâmetros da Litologia', 'Densidade', 'Porosidade' (highlighted in blue), 'Distribuição', 'Koc', 'Foc', 'Advecção', 'Reação Química', 'Dispersividade (m)', 'Geometria do Modelo', 'Malha do Modelo', 'Condições de Contorno', and 'Duração da Simulação (dias)'. The central panel shows 'Porosidade Efetiva (-):' with a text input field containing '0.35' and a button labeled 'Armazenar Porosidade'. Below this, a table titled 'Valores típicos:' lists typical porosity ranges for various materials.

Material	Porosidade
Cascalho Fino	0.25 – 0.38
Areia Grossa	0.31 – 0.46
Areia Fina	0.26 – 0.53
Sedimentos	0.34 – 0.61
Argila	0.34 – 0.60
Arenito	0.005 – 0.10
Calcário	0.001 – 0.05

At the bottom of the window, a 'Console' panel shows the message: 'Valor armazenado de Porosidade: 0.3500'.

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE G: INSERÇÃO DO PARÂMETRO FOC NA GUI.

Simulador 3D de Dispersão de Poluentes em Aquíferos (Sim3DAquifero)

Iniciar Simulação Ajuda Créditos

Fração de Carbono Orgânico no Solo (foc):

0.0017

Armazenar Foc

Valores típicos:

Material	Foc
Cascalho	0.0017 – 0.0019
Areia	0.00023 – 0.0012
Sedimentos	0.0011 – 0.029

Calcular Retardo

Parâmetros da Litologia

- Densidade
- Porosidade
- Distribuição
- Koc
- Foc**
- Advecção
- Reação Química
- Dispersividade (m)
- Geometria do Modelo
- Malha do Modelo
- Condições de Contorno
- Duração da Simulação (dias)

Console

```
Valor armazenado de Densidade: 1.3600
Valor armazenado de Porosidade: 0.3500
Valor armazenado de Koc: 38.0
Valor armazenado de Foc: 0.0017
Resultado de Kd: 0.0646
Retardo calculado: 1.2510
```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE H: CÁLCULO DA VELOCIDADE NA GUI.

Simulador 3D de Dispersão de Poluentes em Aquíferos (Sim3DAquífero)

Iniciar Simulação Ajuda Créditos

Proporção de v em relação a u (%):
30.0%

Proporção de w em relação a u (%):
30.0%

Calcular Advecção

- Parâmetros da Litologia
 - Densidade
 - Porosidade
- Distribuição
 - Koc
 - Foc
- Advecção
 - Conductividade Hidráulica
 - Gradiente Hidráulico
 - Calcular Velocidade**
- Reação Química
- Dispersividade (m)
- Geometria do Modelo
- Malha do Modelo
- Condições de Contorno
- Duração da Simulação (dias)

Console

```
Valor armazenado de Densidade: 1.3600
Valor armazenado de Porosidade: 0.3500
Valor armazenado de Koc: 38.0
Valor armazenado de Foc: 0.0017
Resultado de Kd: 0.0646
Retardo calculado: 1.2510
Valor armazenado de Conductividade Hidráulica: 10.0000
Valor armazenado de Gradiente Hidráulico: 0.0200
Velocidade na direção x (u): 0.5714 m/dia
Velocidade na direção y (v): 0.1714 m/dia
Velocidade na direção z (w): 0.1714 m/dia
```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE I: INSERÇÃO DO TEMPO DE MEIA VIDA NA GUI

Simulador 3D de Dispersão de Poluentes em Aquíferos (Sim3DAquífero)

Iniciar Simulação Ajuda Créditos

Tempo de Meia Vida (anos):

1

Armazenar Tempo de Meia Vida

Valores típicos:

Elemento	T _{1/2} (anos)
Benzeno	0.02 – 2.0
Tolueno	0.02 – 0.17
Etilbenzeno	0.016 – 0.62
Xileno	0.038 – 1.0

- Parâmetros da Litologia
 - Densidade
 - Porosidade
- Distribuição
 - Koc
 - Foc
- Advecção
 - Conductividade Hidráulica
 - Gradiente Hidráulico
 - Calcular Velocidade
- Reação Química
 - Tempo de Meia Vida
- Dispersividade (m)
 - Geometria do Modelo
 - Malha do Modelo
- Condições de Contorno
 - Duração da Simulação (dias)

Console

```

Valor armazenado de Densidade: 1.3600
Valor armazenado de Porosidade: 0.3500
Valor armazenado de Koc: 38.0
Valor armazenado de Foc: 0.0017
Resultado de Kd: 0.0646
Retardo calculado: 1.2510
Valor armazenado de Conductividade Hidráulica: 10.0000
Valor armazenado de Gradiente Hidráulico: 0.0200
Velocidade na direção x (u): 0.5714 m/dia
Velocidade na direção y (v): 0.1714 m/dia
Velocidade na direção z (w): 0.1714 m/dia
Valor armazenado de Tempo de Meia Vida: 1.0 anos
Constante da Reação: 0.0019 dia-1

```

Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE J: CÁLCULO DA DISPERSIVIDADE NA GUI

Simulador 3D de Dispersão de Poluentes em Aquíferos (Sim3DAquífero)

Iniciar Simulação Ajuda Créditos

Proporção de α_y em relação a α_x (%):
30.0%

Proporção de α_z em relação a α_x (%):
30.0%

Calcular Dispersividade

- Parâmetros da Litologia
 - Densidade
 - Porosidade
- Distribuição
 - Koc
 - Foc
- Advecção
 - Conductividade Hidráulica
 - Gradiente Hidráulico
 - Calcular Velocidade
- Reação Química
 - Tempo de Meia Vida
- Dispersividade (m)
 - Alfa x
 - Calcular Dispersividade**
 - Geometria do Modelo
 - Malha do Modelo
- Condições de Contorno
 - Duração da Simulação (dias)

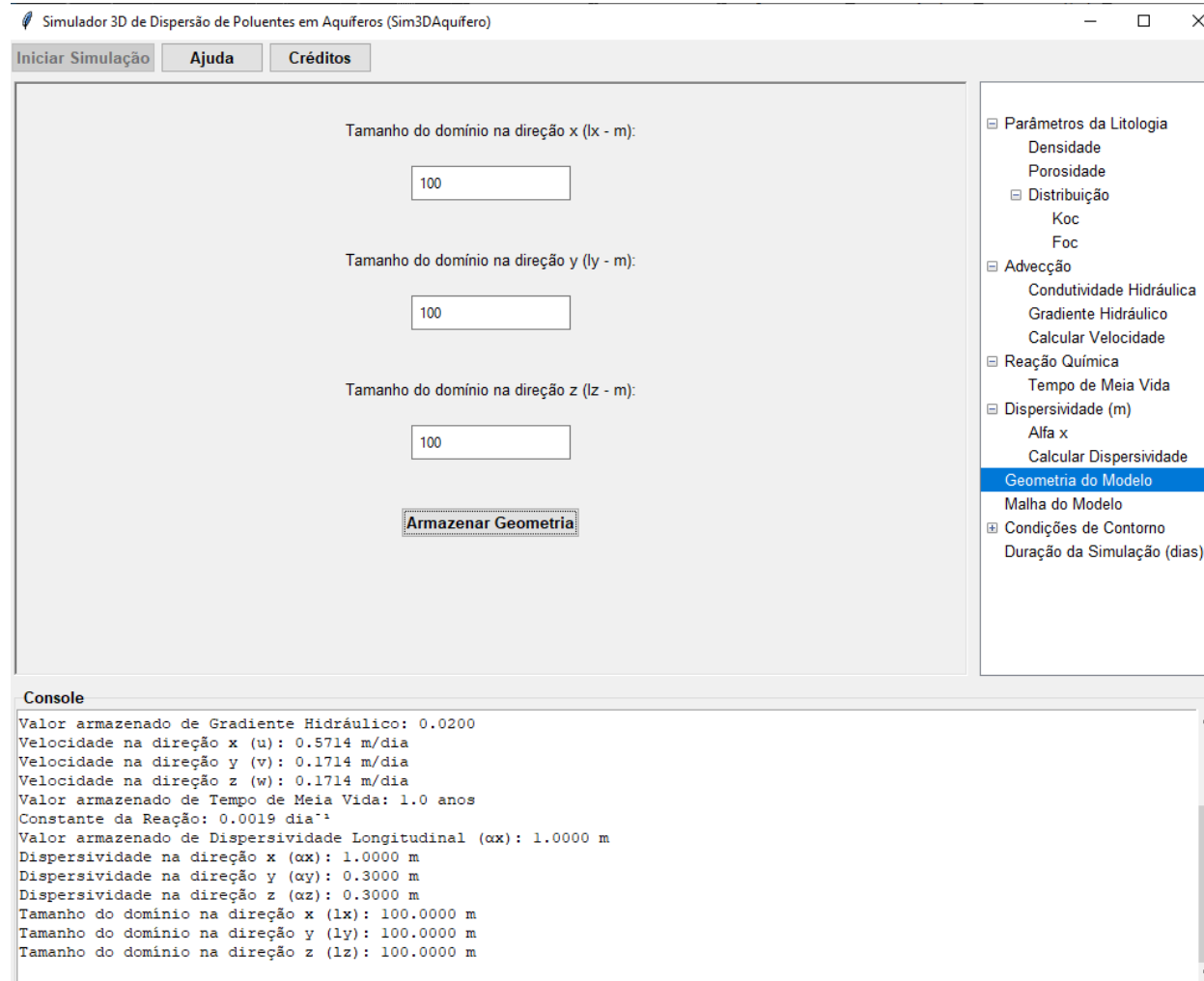
Console

```

Resultado de Kd: 0.0646
Retardo calculado: 1.2510
Valor armazenado de Conductividade Hidráulica: 10.0000
Valor armazenado de Gradiente Hidráulico: 0.0200
Velocidade na direção x (u): 0.5714 m/dia
Velocidade na direção y (v): 0.1714 m/dia
Velocidade na direção z (w): 0.1714 m/dia
Valor armazenado de Tempo de Meia Vida: 1.0 anos
Constante da Reação: 0.0019 dia-1
Valor armazenado de Dispersividade Longitudinal ( $\alpha_x$ ): 1.0000 m
Dispersividade na direção x ( $\alpha_x$ ): 1.0000 m
Dispersividade na direção y ( $\alpha_y$ ): 0.3000 m
Dispersividade na direção z ( $\alpha_z$ ): 0.3000 m
  
```

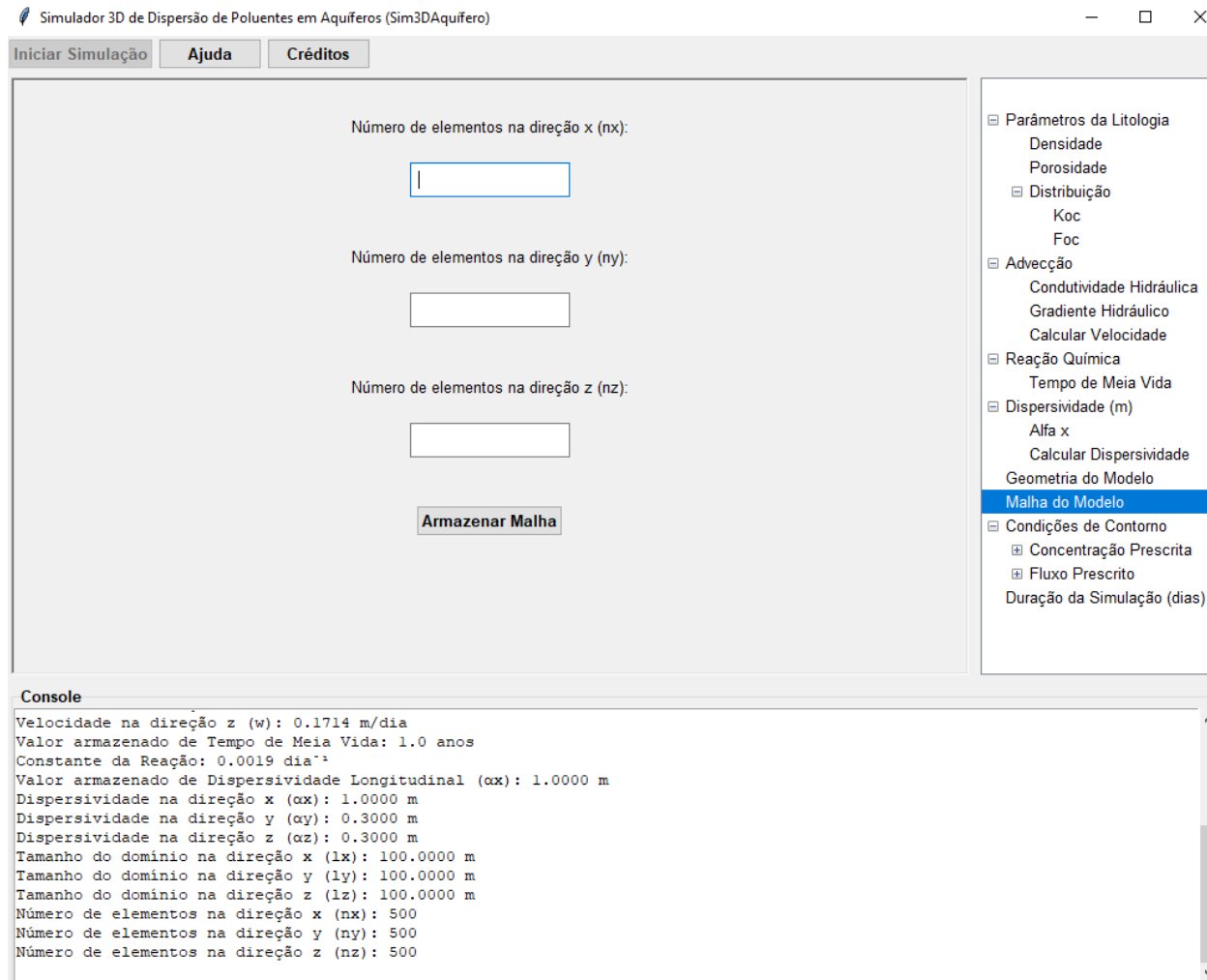
Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE K: INSERÇÃO DA GEOMETRIA DO MODELO



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE L: INSERÇÃO DA MALHA NO MODELO



Fonte: Elaborado pelo autor, 2024.

APÊNDICE M: REGISTRO DO PROGRAMA DE COMPUTADOR**INPI**
Instituto Nacional da Propriedade Industrial
Assinado Digitalmente

REPÚBLICA FEDERATIVA DO BRASIL
MINISTÉRIO DO DESENVOLVIMENTO, INDÚSTRIA, COMÉRCIO E SERVIÇOS
INSTITUTO NACIONAL DA PROPRIEDADE INDUSTRIAL
DIRETORIA DE PATENTES, PROGRAMAS DE COMPUTADOR E TOPOGRAFIAS DE CIRCUITOS

Certificado de Registro de Programa de Computador**Processo Nº: BR512024002404-2**

O Instituto Nacional da Propriedade Industrial expede o presente certificado de registro de programa de computador, válido por 50 anos a partir de 1º de janeiro subsequente à data de 06/06/2024, em conformidade com o §2º, art. 2º da Lei 9.609, de 19 de Fevereiro de 1998.

Título: Simulador 3D de Dispersão de Poluentes em Aquíferos**Data de publicação:** 06/06/2024**Data de criação:** 06/06/2024**Titular(es):** UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAIBA**Autor(es):** FERNANDO FERNANDES VIEIRA; ANDRÉ LUIZ DA SILVA**Linguagem:** PYTHON**Campo de aplicação:** MA-04**Tipo de programa:** SM-01**Algoritmo hash:** SHA-256**Resumo digital hash:** b937fc977928a46e2c983cbc9c2f417756fededd99c1075d4e68e3e27f6b3108**Expedido em:** 16/07/2024

Aprovado por:
Carlos Alexandre Fernandes Silva
Chefe da DIPTO

Fonte: Instituto Nacional da Propriedade Industrial, 2024.