

SOLUÇÕES HÍBRIDAS PARA PROBLEMAS DE MIGRAÇÃO DE  
CONTAMINANTES NO SOLO

Raphaela Nogueira Antonio

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS  
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE  
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS  
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS EM  
ENGENHARIA CIVIL.

Aprovada por:

---

Prof. Otto Corrêa Rotunno Filho, Ph.D.

---

Dr. Nerbe José Ruperti Junior, Ph.D.

---

Dr. Jesús Salvador Pérez Gerrero, D.Sc.

---

Prof. Luiz Claudio Gomes Pimentel, D.Sc.

---

Prof. Renato Machado Cotta, Ph.D.

---

Prof. Webe João Mansur, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JUNHO DE 2005

# **Livros Grátis**

<http://www.livrosgratis.com.br>

Milhares de livros grátis para download.

ANTONIO, RAPHAELA NOGUEIRA

Soluções Híbridas para Problemas de Migração de Contaminantes no Solo [Rio de Janeiro] 2005

XVI, 122 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Civil, 2005)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Hidrologia Subterrânea
2. Migração de Contaminantes no Solo
3. Soluções Híbridas
4. GITT – Técnica da Transformada Integral Generalizada

I. COPPE/UFRJ II. Título ( série )

*“Quando nada parece dar certo,  
vou ver o cortador de pedras  
martelando sua rocha talvez cem vezes,  
sem que uma única rachadura apareça.  
Mas na centésima primeira martelada  
a pedra se abre em duas,  
e eu sei que não foi aquela que conseguiu isto,  
mas todas as que vieram antes”*

**Jacob Riis**

**À minha avó, sempre!**

## **Agradecimentos**

Agradeço aos meus orientadores, Nerbe José Ruperti Junior e Otto Corrêa Rotunno Filho, pelos ensinamentos, confiança e motivação.

À CNEN, autarquia federal criada em 10 de outubro de 1956, vinculada ao Ministério de Ciência e Tecnologia, pela ajuda prestada durante todo o desenvolvimento deste trabalho.

Aos professores do departamento de Meteorologia e do Laboratório de Hidrologia.

Ao professor Luiz Cláudio, por QUERER e FAZER sempre o melhor para os alunos de pós-graduação.

A todos os meus amigos do departamento de Meteorologia, em especial, Felipe das Neves e Talita Reis, pela ajuda, carinho e compreensão.

À minha linda família e ao meu companheiro, Edilson Marton, pelo encorajamento, amor e dedicação.

A todos aqueles que contribuíram, de alguma maneira, para finalização deste trabalho.

E agradeço, acima de tudo, a Deus, por colocar em minha vida pessoas tão maravilhosas e especiais.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

## SOLUÇÕES HÍBRIDAS PARA PROBLEMAS DE MIGRAÇÃO DE CONTAMINANTES NO SOLO

Raphaela Nogueira Antonio

Junho/2005

Orientadores: Otto Corrêa Rotunno Filho  
Nerbe José Ruperti Junior

Programa: Engenharia Civil

Sendo o solo e as águas subterrâneas recursos naturais cada vez mais ameaçados pela ação do homem, sua proteção tem-se tornado uma necessidade mundial. Com o intuito de se manter a qualidade do solo e, conseqüentemente, a da água, o presente trabalho foi desenvolvido visando propiciar soluções para o problema de migração de contaminantes no solo. Considerou-se um problema unidimensional transiente de transporte de contaminantes em um meio poroso heterogêneo, composto por várias camadas homogêneas, com propriedades constantes. Três soluções para o campo de concentração foram obtidas através de uma aproximação híbrida numérico-analítica conhecida como técnica da transformada integral generalizada (GITT), utilizando-se um caso teste previamente proposto na literatura. A partir da obtenção das três soluções, um estudo de análise de convergência e de procedimento numérico de truncamento foi conduzido. Duas aplicações foram feitas com o intuito de ilustrar a utilidade das soluções como ferramentas para simular a migração de contaminantes no solo. Os resultados obtidos mostram a relevância no uso desta técnica, pois é possível obter soluções robustas que contornem as dificuldades e os custos computacionais associados a métodos estritamente numéricos.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Mester of Science (M.Sc.)

## HYBRID SOLUTIONS FOR PROBLEMS OF SOLUTE MIGRATION IN SOIL

Raphaela Nogueira Antonio

June/2005

Advisors: Otto Corrêa Rotunno Filho  
Nerbe José Ruperti Junior

Department: Civil Engineering

As the soil and groundwater are natural resources increasingly affected by human action, their protection is required worldwide. In order to preserve soil quality and therefore water quality, the present work was developed to provide solutions for the problem addressing soil contaminant migration. A transient one-dimensional problem of contaminant transport through a multi-layer porous media was considered in which the flow is known. Three solutions for the contaminant plume concentration field were obtained through a numerical-analytical hybrid approach, which is known as generalized transformed technique (GITT), using a case study previously proposed in the literature. Then, a study including convergence analysis and truncating numerical procedures was conducted. Two examples were developed to illustrate the applicability of the proposed approach to simulate soil contaminant migration. The results show the relevance of the presented technique, since it is possible to obtain reliable solutions, which overcome the difficulties and the computational costs associated to strictly numerical methods.



## SUMÁRIO

<b>CAPÍTULO I</b>	<b>1</b>
<hr/>	
INTRODUÇÃO	1
<b>CAPÍTULO II</b>	<b>5</b>
<hr/>	
<b>FUNDAMENTOS TEÓRICOS</b>	<b>5</b>
II.1 – INTRODUÇÃO	5
II.2 – FORMAÇÕES GEOLÓGICAS E AQÜÍFEROS	6
II.2.1 – LOCALIZAÇÃO E DISTRIBUIÇÃO DA ÁGUA NO SUBSOLO	6
II.2.2 – POROSIDADE, PERMEABILIDADE E CONDUTIVIDADE HIDRÁULICA	7
II.2.3 – CONCEITO DE AQÜÍFERO	9
II.2.4 – REABASTECIMENTO DO AQÜÍFERO OU RECARGA	12
II.3 – MIGRAÇÃO DE CONTAMINANTES NO SOLO	12
II.4 – EQUAÇÕES BÁSICAS	14
II.5 – EQUAÇÃO GOVERNANTE: EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO	17
<b>CAPÍTULO III</b>	<b>23</b>
<hr/>	
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
<b>CAPÍTULO IV</b>	<b>36</b>
<hr/>	
<b>SOLUÇÃO DO PROBLEMA UNIDIMENSIONAL</b>	<b>36</b>
IV.1 – FORMULAÇÃO DO PROBLEMA	36
IV.2 – METODOLOGIA DE SOLUÇÃO	39
IV.2.1 – SOLUÇÃO A: SOLUÇÃO SEM FILTRO	39
IV.2.2 – SOLUÇÃO B: SOLUÇÃO COM FILTRO	46
IV.2.3 – SOLUÇÃO C: SOLUÇÃO COM REDUÇÃO DE DOMÍNIO	49
IV.2.4 – SOLUÇÃO NUMÉRICA	52
IV.2.5 – PROCESSO DE TRUNCAMENTO	52
IV.2.5.1 – CRITÉRIO DE CONTROLE DE ERRO: PROCEDIMENTO ADAPTATIVO	53
IV.3 – RESULTADOS PRELIMINARES	54
IV.3.1 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO A	56
IV.3.2 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO B	59
IV.3.3 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO C	62
IV.3.4 – ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA	66
IV.3.5 – RESULTADOS DO PROCESSO DE TRUNCAMENTO	71
IV.4 - CONCLUSÕES	72
<b>CAPÍTULO V</b>	<b>74</b>
<hr/>	
<b>APLICAÇÃO DE UM CASOS-TESTE</b>	<b>74</b>
V.1 – INTRODUÇÃO	74
V.2 – CASO-TESTE A	74
V.2.1 – RESULTADOS DO CASO-TESTE A	75
V.2.2 – CONCLUSÕES DO TESTE-A	78
V.3 – CASO-TESTE B	79
V.3.1 – RESULTADOS DO CASO-TESTE B	82
V.3.2 – CONCLUSÕES DO CASO-TESTE B	92

<b>CAPÍTULO VI</b>	<b>94</b>
CONCLUSÕES E SUGESTÕES	94
<b>CAPÍTULO VII</b>	<b>96</b>
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	96
<b>ANEXOS</b>	<b>103</b>
ANEXO A - PROPRIEDADE DA ORTOGONALIDADE	103
ANEXO B - CÁLCULO DOS COEFICIENTES DA MATRIZ DO SISTEMA	105

## LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1 – Ciclo Hidrológico	5
Figura 2.2 – Água no subsolo	7
Figura 2.3 – Tipos de aquíferos	10
Figura 2.4 – Aquífero livre	10
Figura 2.5 – Aquífero artesiano	11
Figura 2.6 – Poluição das águas subterrâneas	13
Figura 2.7 – Experimento de Darcy	14
Figura 2.8 – Balanço de massa em um volume elementar do solo	17
Figura 4.1 – Esquematização do Problema	36
Figura 4.2 – Fluxograma sintetizador da solução C	51
Figura 4.3 – Distribuição da concentração relativa ( $C/C_0$ ) em um meio poroso composto por três camadas	55
Figura 4.4 – Comparação dos resultados obtidos por Liu <i>et al.</i> (1998) e a solução B	56
Figura 4.5 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 5000 s – Solução A	57
Figura 4.6 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 15000 s – Solução A	57
Figura 4.7 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 40000 s – Solução A	58
Figura 4.8 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 5000 s – Solução A	58
Figura 4.9 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para os tempos de 5000 s e 100000 s – Solução A	59
Figura 4.10 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 5000 s – Solução B	60
Figura 4.11 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 15000 s – Solução B	60

Figura 4.12 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 40000 s – Solução B	61
Figura 4.13 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 100000 s – Solução B	61
Figura 4.14 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para os tempos de 5000 s e 100000 s– Solução B	62
Figura 4.15 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 5000 s – Solução C	63
Figura 4.16 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 15000 s – Solução C	64
Figura 4.17 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 40000 s – Solução C	64
Figura 4.18 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para o tempo de 100000 s – Solução C	65
Figura 4.19 – Comportamento dos Potenciais Transformados, ordenado e não ordenado, para os tempos de 5000 s e 100000 s– Solução C	65
Figura 5.1 – Distribuição da concentração relativa ( $C/C_0$ ) para um meio poroso sem presença de argila.	76
Figura 5.2 – Distribuição da concentração relativa ( $C/C_0$ ) para um meio poroso com presença de argila.	76
Figura 5.3 – Distribuição da concentração para os cenários 1 (sem argila) e 2 (com argila) em $z = 1$ m	77
Figura 5.4 – Distribuição da concentração para os cenários 1 (sem argila) e 2 (com argila) em $z = 4.55$ m	77
Figura 5.5 – Distribuição da concentração para os cenários 1 (sem argila) e 2 (com argila) em $z = 5$ m	78
Figura 5.6 – Esquematização do sistema solo-trincheira	79
Figura 5.7 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_1	83
Figura 5.8 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_2	84
Figura 5.9 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_3	85

Figura 5.10 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_4	86
Figura 5.11 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_5	87
Figura 5.12 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_6	88
Figura 5.13 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_7	88
Figura 5.14 – Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso_8	89
Figura 5.15 – Distribuição da dose na base da trincheira para uma barreira de 20 cm	90
Figura 5.16 – Distribuição da dose no topo do aquífero para uma barreira de 20 cm	91
Figura 5.17 – Distribuição da dose na base da trincheira para uma barreira de 30 cm	91
Figura 5.18 – Distribuição da dose no topo do aquífero para uma barreira de 30 cm	92

## **LISTA DE TABELAS**

Tabela 2.1 – Variações de porosidades representativas para materiais sedimentares	8
Tabela 4.1 – Valores das propriedades de cada camada	54
Tabela 4.2 – Análise de convergência para a solução A no tempo = 5.000 s	66
Tabela 4.3 – Análise de convergência para a solução A no tempo = 15.000 s	67
Tabela 4.4 – Análise de convergência para a solução A no tempo = 50.000 s	67
Tabela 4.5 – Análise de convergência para a solução A no tempo = 100.000 s	67
Tabela 4.6 – Análise de convergência para a solução B no tempo = 5.000 s	68
Tabela 4.7 – Análise de convergência para a solução B no tempo = 15.000 s	68
Tabela 4.8 – Análise de convergência para a solução B no tempo = 50.000 s	68
Tabela 4.9 – Análise de convergência para a solução B no tempo = 100.000 s	69
Tabela 4.10 – Análise de convergência para a solução C no tempo = 5.000 s	69
Tabela 4.11 – Análise de convergência para a solução C no tempo = 5.000 s	70
Tabela 4.12 – Análise de convergência para a solução C no tempo = 15.000 s	70
Tabela 4.13 – Análise de convergência para a solução C no tempo = 50.000 s	70
Tabela 4.14 – Número de autovalores requeridos pela solução A	71
Tabela 4.15 – Número de autovalores requeridos pela solução B	71
Tabela 4.16 – Número de autovalores requeridos pela solução C	72
Tabela 5.1 – Características das camadas constitutivas do meio poroso para o 1º cenário	75
Tabela 5.2 – Características das camadas constitutivas do meio poroso para o 2º cenário	75
Tabela 5.3 – Propriedades consideradas para o Caso-teste B	80
Tabela 5.4 – Diferentes configurações consideradas nos casos-teste	81

## NOMENCLATURA

$A$	Área de seção transversal de um cilindro
$A_{ef}$	Área efetiva
$\mathbf{A}_{kn}, \mathbf{B}_{kn}$	Matrizes do sistema
$C, U$	Concentração adimensional do soluto
$\hat{C}$	Concentração dimensional do soluto
$C^*$	Quantidade de soluto sorvido
$C_T$	Concentração total no depósito
$\bar{U}_n$	Concentração transformada
$\bar{U}^*$	Potencial Transformado em $\tau = \tau'$
$D_x, D_y, D_z$	Coefficientes adimensionais de dispersão
$\hat{D}$	Coefficiente dimensional de dispersão
$D^*$	Coefficiente de difusão molecular
$d$	Comprimento característico representando o diâmetro médio dos canais elementares do meio poroso
$dA$	Elemento de área transversal ao volume
$E_m$	Energia mecânica de um fluido
$F_x, F_y, F_z$	Massa total de soluto por unidade de área transportada nas respectivas direções
$f(\tau)$	Filtro
$g_n$	Termo fonte
$g$	Aceleração da gravidade
$h$	Carga hidráulica
$K$	Condutividade hidráulica
$\tilde{K}$	Tensor
$K_d$	Coefficiente de distribuição
$k$	Permeabilidade intrínseca do meio poroso
$L$	Distância entre piezômetros
$m$	Massa do fluido
$N$	Número de termos

$N_n$	Normas
$p$	Pressão hidrodinâmica
$Q$	Vazão
$Q$	Decaimento radioativo
$q$	Velocidade de Darcy
$R$	Fator de retardamento
$R_e$	Número de Reynolds
$t$	Tempo dimensional
$S$	Grau de saturação do solo
$V_v$	Volume de vazios no solo
$V_{vit}$	Volume de vazios interconectados
$V$	Volume total
$\mathbf{V}$	Vetor velocidade
$x, y, z$	Coordenadas espaciais
$u, v, w$	Velocidade de poro dimensional nas respectivas direções
$W$	Velocidade de poro adimensional
$z$	Distância dimensional
$Z$	Distância adimensional

## SÍMBOLOS GREGOS

$\alpha^*$	Dispersividade dimensional
$\alpha$	Dispersividade adimensional
$\alpha_L$	Dispersividade longitudinal
$\beta_n$	Autovalores
$\gamma$	Decaimento radioativo adimensional
$\varepsilon_T$	Porosidade total
$\varepsilon$	Porosidade efetiva
$\eta$	Tolerância prescrita para o erro relativo global da solução
$\theta$	Teor de umidade volumétrico
$\lambda$	Decaimento radioativo dimensional
$\mu$	Viscosidade absoluta do fluido
$\rho$	Massa específica do fluido



$\rho_d$	Densidade do solo seco
$\rho_s$	Densidade do solo
$\tau$	Tempo adimensional
$\nu$	Viscosidade cinemática do fluido
$\Psi_n$	Autofunções
$\Psi^*$	Autofunções em $\tau = \tau'$
$\psi$	Pressão capilar
$v$	Velocidade efetiva do fluido em movimento
$\vec{\nabla}$	Operador gradiente

# CAPÍTULO I

## INTRODUÇÃO

O estudo do solo tornou-se tarefa fundamental para a comunidade científica, pois, apesar de 75% do nosso planeta ser composto por água, é em terra firme que se desenvolve a grande diversidade de vida e a maior parte do processo produtivo da humanidade (CAMPOS, 1998).

Sendo o solo o principal meio de proteção das águas subterrâneas, atuando como um filtro capaz de depurar e imobilizar parte das impurezas nele introduzidas, a alteração de sua qualidade torna-se extremamente relevante, já que a quantidade de água disponível no planeta tem-se tornado cada vez mais limitada (CETESB, 2001). Água subterrânea, segundo a Associação Brasileira de Normas Técnicas, é a água que ocupa a zona saturada do subsolo ou em um sentido mais amplo, é toda a água situada abaixo da superfície do solo, na litosfera (ABNT, 1993).

No planeta Terra, 99,4 % da água encontra-se indisponível para consumo humano, existindo apenas 0,6 % de água doce líquida, da qual 97,5% corresponde às águas subterrâneas (CETESB, 2001). O Brasil é um país privilegiado, pois possui 12% das reservas mundiais de água doce, apresentando disponibilidade hídrica de 40.732 m<sup>3</sup>/hab/ano (ANA, 2002). Entretanto, como no resto do mundo, as interferências no ciclo de renovação, principalmente nas águas superficiais, como extração excessiva, uso inadequado, lançamento de efluentes domésticos e industriais nos corpos de água, ausência de controle de erosão, têm diminuído a quantidade e qualidade de água disponível para consumo. Nesse cenário, a água subterrânea vem assumindo importância relevante como fonte de abastecimento doméstico, industrial e agrícola, sendo mais da metade da água de abastecimento público no Brasil proveniente das reservas subterrâneas (ANA, 2002).

Proteger a qualidade da água significa proteger, também, a qualidade do solo. Para que se mantenha a qualidade do solo e, conseqüentemente, a do meio ambiente faz-se necessário um desenvolvimento sustentável que, de acordo com a Comissão Mundial para o Meio Ambiente e Desenvolvimento (CMMAD, 1988), é o desenvolvimento que

satisfaz as necessidades da geração presente, sem comprometer a satisfação das necessidades de gerações futuras.

Com o desenvolvimento industrial ocorrido na segunda metade do século XX, numa época anterior ao advento da gestão ambiental, em que não se adotavam medidas preventivas, a desenfreada exploração econômica do solo, assim como sua utilização como depósito de rejeitos, fez perecer a idéia de um desenvolvimento sustentável, proporcionando danosos impactos ambientais.

Área contaminada, de acordo com a Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB, 2004), é local onde há comprovadamente poluição ou contaminação, causada pela introdução de substâncias ou resíduos que nele tenham sido depositados, acumulados, armazenados, enterrados ou infiltrados, de forma planejada ou acidental. O crescimento de regiões sujeitas a riscos de contaminação fez-se notar, nascendo a necessidade de uma maior atuação governamental com o intuito de sanar o problema.

Nessas áreas, os poluentes ou contaminantes podem se concentrar no ar, nas águas superficiais, no solo, nos sedimentos, ou nas águas subterrâneas, podendo, ainda, ser transportados, propagando-se por diferentes vias, o que dificulta diagnosticar sua proveniência e determinar de que maneira sua atuação será prejudicial.

A interação solo-água-contaminante é bastante complexa, já que são muitos os fenômenos físicos, químicos e biológicos que podem ocorrer simultaneamente. A qualidade do solo pode ser alterada devido a fatores como acúmulo de defensivos agrícolas e fertilizantes, vazamentos de produtos químicos e disposição de resíduos sólidos urbanos, industriais, materiais tóxicos e radioativos. Até mesmo os contaminantes em suspensão no ar, oriundos das descargas de escapamentos de veículos, de chaminés e da volatilização de compostos em superfície, são dissolvidos pela água da chuva e infiltram-se nos solos, contaminando-os (CETESB, 2001).

Entender a dinâmica dessas contaminações é fundamental para orientar as atividades de prospecção e diagnóstico dos impactos gerados pelo vazamento de rejeitos, bem como para desenvolver uma técnica de remediação econômica e ambientalmente viável. Dessa forma, o desenvolvimento de modelos computacionais,

capazes de prever o movimento de poluentes no meio poroso, tornou-se essencial. Inúmeros pesquisadores têm estudado diferentes modelos matemáticos, propiciando diversas soluções numéricas, analíticas e, mais freqüentemente, soluções híbridas numérico-analíticas.

A modelagem constitui-se numa tentativa, aproximada, de representar um fenômeno da natureza. Antes que o modelo seja aplicado a um sistema real, necessita ser validado para que seja assegurado que ele, realmente, represente o processo físico que, supostamente, deveria estar simulado. Essa tarefa é feita comparando-se os resultados do modelo com observações de campo e de laboratório, sendo que essa comparação não precisa fornecer aderências exatas, mas evidências de que os processos físicos, químicos e bioquímicos estão adequadamente representados e incorporados no modelo.

Nesse contexto, este trabalho tem como objetivo desenvolver soluções para o problema de migração de contaminantes no solo. Considera-se um problema unidimensional transiente de transporte de contaminantes em um meio poroso heterogêneo, saturado, composto por várias camadas homogêneas com propriedades constantes. Três diferentes soluções são propostas, sendo seus resultados analisados e discutidos. Todas as soluções são obtidas através de uma aproximação híbrida numérico-analítica, conhecida como técnica da transformada integral generalizada (GITT), que é baseada na expansão de autofunções do potencial original, servindo como ferramenta tanto para produção de resultados de referência, como para simulações de baixo custo. A natureza híbrida dessa aproximação permite o controle automático de erro em problemas convectivos-difusivos, lineares ou não lineares e multidimensionais (COTTA, 1993 e 1998). Faz-se, ainda, uma análise de convergência das soluções propostas, bem como o estudo de um processo de truncamento. Os resultados para as três soluções são comparados e discutidos. Dois exemplos de aplicação são propostos, com o intuito de se ilustrar a utilidade das soluções propostas. Na seqüência do texto, é apresentada a estrutura proposta para o desenvolvimento do trabalho.

No Capítulo II, apresenta-se uma breve revisão sobre os fundamentos teóricos necessários para que se entenda o problema proposto.

Em seguida, no Capítulo III, a revisão bibliográfica é apresentada. Nesse capítulo, encontram-se referências importantes relacionadas ao problema de migração de contaminantes no solo. Além de serem citados autores que tratam do problema de migração de contaminantes no solo através da GITT, enfoque deste trabalho, cita-se autores que propuseram tanto um tratamento puramente analítico, como numérico para o problema em questão. Algumas referências também são citadas em relação à possibilidade de utilização da GITT para outros problemas, que não somente a migração de contaminantes no solo.

No Capítulo IV, propõe-se o tratamento unidimensional do problema, bem como a metodologia utilizada para obtenção de cada uma das soluções propostas. O tratamento matemático é apresentado, assim como os resultados são analisados e discutidos. A partir da obtenção das três soluções, é feito um estudo da análise de convergência e de um processo de truncamento proposto, sendo os resultados desses estudos também analisados e discutidos.

Dois exemplos de aplicação, meramente ilustrativos, são apresentados no Capítulo V, com a finalidade de demonstrar-se a utilidade das ferramentas propostas. Os resultados obtidos são, ainda, analisados e discutidos.

As conclusões e sugestões para trabalhos futuros, bem como as referências bibliográficas, são apresentadas nos Capítulos VI e VII respectivamente.

## CAPÍTULO II

### FUNDAMENTOS TEÓRICOS

#### II.1 – INTRODUÇÃO

De toda água existente no planeta, 97,6% é constituída pelos oceanos, mares e lagos de água salgada. As águas doces, representadas pelos 2,4% restantes, têm sua maior parte situada nas calotas polares e geleiras (1,9%), inacessível aos homens pelos meios tecnológicos atuais, e, da parcela restante (0,5%), mais de 95% é constituída pelas águas subterrâneas (DRM – RJ, 2001).

A água subterrânea nada mais é do que água infiltrada no subsolo, presente nos espaços intergranulares dos solos ou nas fraturas das rochas e, em sendo uma importante fonte de suprimento de água, faz-se fundamental um breve entendimento de sua formação. No ciclo hidrológico (Figura 2.1), a água subterrânea provém da superfície, através da precipitação que se infiltra no solo.

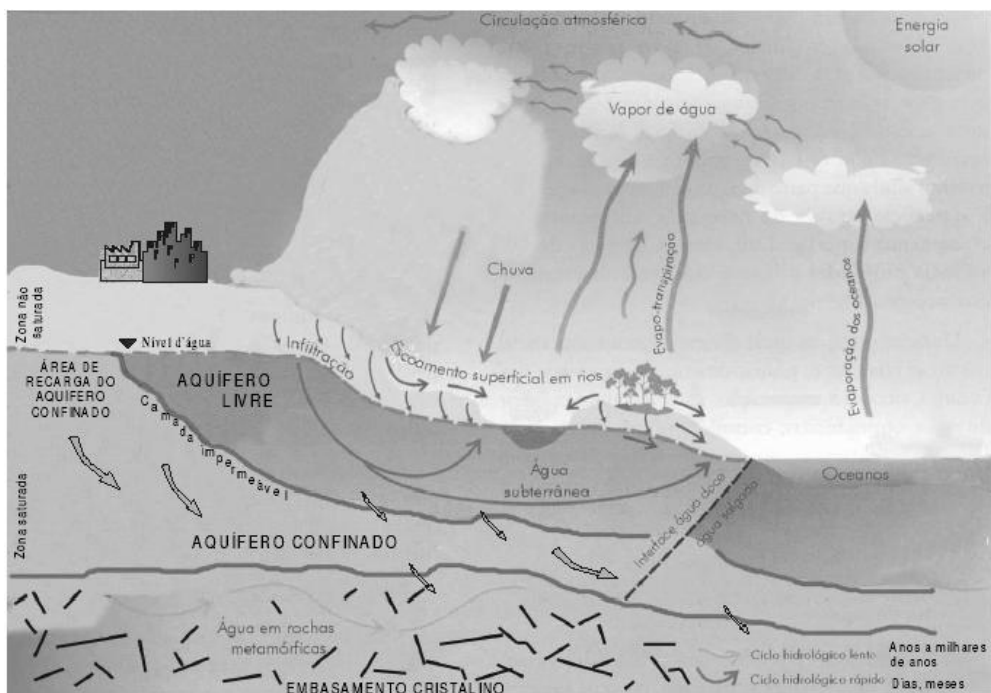


Figura 2.1: Ciclo hidrológico (Fonte: UNESCO, 1992 *apud* DRM – RJ, 2001).

Por efeito da radiação solar, as águas dos mares, rios e lagos evaporam-se, formando as nuvens que, ao encontrarem correntes frias de ar ou baixas pressões atmosféricas, condensam-se e precipitam-se sob a forma de chuva, granizo ou neve. Da água precipitada, uma parte evapora antes mesmo de atingir o solo ou ser interceptada pelas folhas dos vegetais; outra parte escoar para os rios, lagos e mares; e, finalmente, outra parte infiltra-se no subsolo formando os reservatórios naturais de água subterrânea também chamados de aquíferos. A água subterrânea, através de um fluxo muito lento, também alimenta os rios, lagos e mares ou emerge à superfície, formando fontes. As águas dos lagos, rios e mares evaporam-se outra vez e, assim, o ciclo é reiniciado (DRM – RJ, 2001). Dessa forma, os rios representam o sistema de drenagem da água doce para o mar, enquanto que os aquíferos representam os sistemas de armazenamento de água doce no continente (CETESB, 2004).

É importante ressaltar o papel fundamental que o solo exerce no ciclo hidrológico, já que atua como um mediador entre a água superficial e sub-superficial.

A infiltração é o processo de penetração da água no solo e é, justamente, o processo que mais tem relevância quando se aborda a migração de contaminantes no solo, enfoque deste trabalho.

O movimento descendente da água que se infiltra no solo continua devido à ação da gravidade, preenchendo os vazios do subsolo (poros ou fraturas) e acumulando-se ao encontrar barreiras menos permeáveis, o que se denomina zona saturada. A água subterrânea acumulada na zona saturada não fica estagnada. O movimento pode continuar descendente contribuindo para a recarga de aquíferos subjacentes (CETESB, 2004).

## **II.2 – FORMAÇÕES GEOLÓGICAS E AQUÍFEROS**

### **II.2.1 Localização e Distribuição da Água no Subsolo**

Ao infiltrar-se, em seu movimento descendente, a água preenche gradualmente os poros, saturando a faixa inferior dos solos e rochas. A parte que permanece preenchida parcialmente denomina-se zona de aeração, enquanto que a parte onde os

interstícios estão repletos de água denomina-se zona saturada (Figura 2.2) (DRM – RJ, 2001).

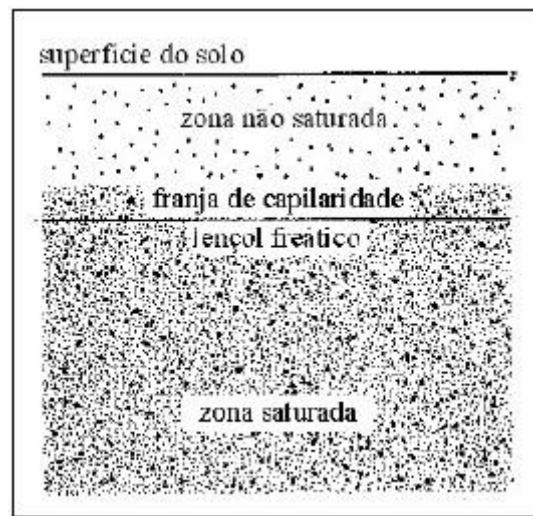


Figura 2.2 – Água no subsolo (Fonte: Fetter, 1994 *apud* DRM – RJ, 2001).

Na zona saturada, é onde, de fato, está localizada a água subterrânea propriamente dita. Sua espessura pode variar de alguns decímetros até centenas de metros, dependendo de fatores como a natureza geológica do subsolo e suas propriedades hidrogeológicas, vegetação e pluviosidade. A superfície superior da zona de saturação é denominada lençol freático ou superfície freática e nela a água contida nos poros encontra-se sob pressão atmosférica (DRM - RJ, 2001). Importante ressaltar que, para o desenvolvimento deste trabalho, o meio considerado encontra-se totalmente saturado.

## II.2.2 Porosidade, Permeabilidade e Condutividade Hidráulica

Porosidade é a capacidade que o solo ou rocha tem de armazenar água. A porosidade total ou, simplesmente, a porosidade de um solo pode ser definida como a relação entre o volume de vazios e o volume total:

$$\varepsilon_T = \frac{V_v}{V} \quad (\text{II.1})$$



em que  $\varepsilon_T$  é a porosidade total, que depende do tamanho dos grãos,  $V_v$  é o volume de vazios e  $V$  é o volume total. A Figura 2.3 mostra alguns tipos clássicos de interstícios em solos e rochas, indicando uma relação entre a textura e a porosidade.

Necessário, porém, é definir o conceito de porosidade efetiva, já que somente os poros vazios que estejam interconectados permitirão que a água flua livremente. Sendo assim, considera-se porosidade efetiva ( $\varepsilon$ ) a razão entre o volume de vazios interconectados ( $V_{vi}$ ) e o volume total ( $V$ ) de solo:

$$\varepsilon = \frac{V_{vi}}{V} \quad (\text{II.2})$$

Permeabilidade é a capacidade que tem a rocha ou solo para armazenar e transmitir a água. Ela depende do tamanho dos poros e da intercomunicação entre eles. As rochas sedimentares (rochas moles) têm alta porosidade ao contrário das rochas cristalinas (rochas duras), mas nem todas possuem alta permeabilidade. As argilas têm poros tão pequenos que não deixam passar água, sendo por isso consideradas praticamente impermeáveis. Outras rochas sedimentares como os arenitos e areias não consolidadas possuem tanto porosidade quanto permeabilidade elevadas. Já nas rochas cristalinas, a permeabilidade será proporcional ao número de fraturas e da interconexão entre elas (Tabela 2.1) (DRM – RJ, 2001).

Tabela 2.1 – Variações de porosidades representativas para materiais sedimentares.  
Fonte: Finkelstein (1970); Fetter (1994) *apud* DRM – RJ (2001)

<b>Material</b>	<b>Porosidade</b>	<b>Condutividade Hidráulica (cm/s)</b>
Solos	50-60	
Argila	45-55	$10^{-9} - 10^{-6}$
Silte	40-50	$10^{-6} - 10^{-4}$
Mistura de areia média e grossa	35-40	
Areia uniforme	30-40	
Mistura de areia fina e média	30-35	$10^{-5} - 10^{-3}$
Pedregulho	30-40	$10^{-3} - 10^{-1}$
Pedregulho e areia	20-35	$10^{-2} - 1$
Arenito	10-20	
Folhelho	1-10	
Calcário	1-10	

Condutividade hidráulica é uma propriedade do solo que leva em conta as características do meio, incluindo a porosidade, tamanho e distribuição das partículas, forma, arranjo, bem como as características do fluido que está escoando (viscosidade e massa específica) e pode ser expressa como:

$$K = \frac{k\rho g}{\mu} = \frac{kg}{\nu} \quad (\text{II.3})$$

em que K é a condutividade hidráulica [L/T]; k é a permeabilidade intrínseca do meio poroso [L<sup>2</sup>]; ρ e μ representam as características do fluido, respectivamente a massa específica e a viscosidade absoluta, ν (ν = ρ/μ) é a viscosidade cinemática [L<sup>2</sup>/T]; e g é a aceleração da gravidade [L/T<sup>2</sup>].

### II.2.3 Conceito de Aquífero

Aquíferos ou reservatórios naturais de água subterrânea são formações rochosas ou camadas geológicas que armazenam e transmitem água economicamente passível de extração. Existem três tipos básicos de aquíferos (Figura 2.3), de acordo com a formação rochosa na qual está contido (DRM – RJ, 2001):

- Aquíferos granulares ou porosos – aqueles em que a água está armazenada e flui nos espaços entre os grãos em sedimentos e rochas sedimentares de estrutura granular. Exemplo: arenitos e aluviões.
- Aquíferos fissurais – aqueles em que a água está presente nas fraturas e fendas das rochas cristalinas. Exemplo: granitos, gnaisses e diabásios.
- Aquíferos cárstico ou cavernoso – aqueles em que a água se faz presente em cavidades produzidas pela dissolução causada pela água. Exemplo: calcários e mármore.

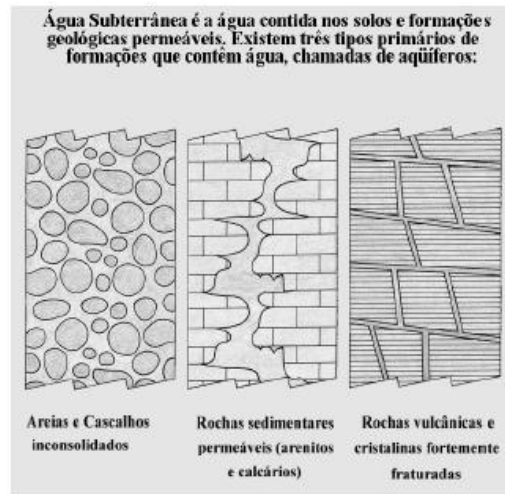


Figura 2.3 – Tipos de aquíferos (Fonte: UNESCO, 1992 *apud* DRM – RJ, 2001).

Quando a superfície que limita a zona saturada dos aquíferos coincide com o lençol freático eles são chamados aquíferos livres (Figura 2.4). Quando o aquífero encontra-se entre duas camadas impermeáveis, diz-se que está confinado. Nessa condição, a água está sob pressão superior à pressão atmosférica. O aquífero nesse caso é denominado aquífero confinado ou artesiano (Figura 2.5) (DRM – RJ, 2001).

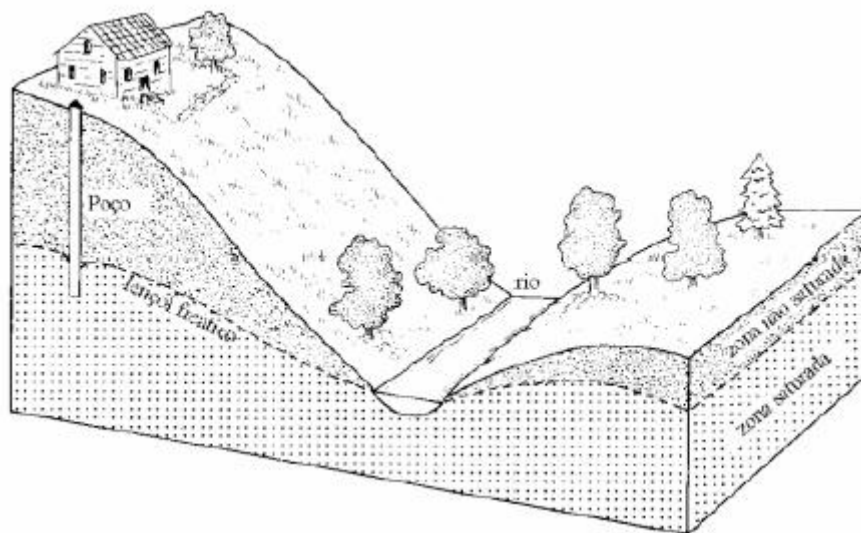


Figura 2.4 – Aquífero Livre (Fonte: Fetter, 1994 *apud* DRM – RJ, 2001).

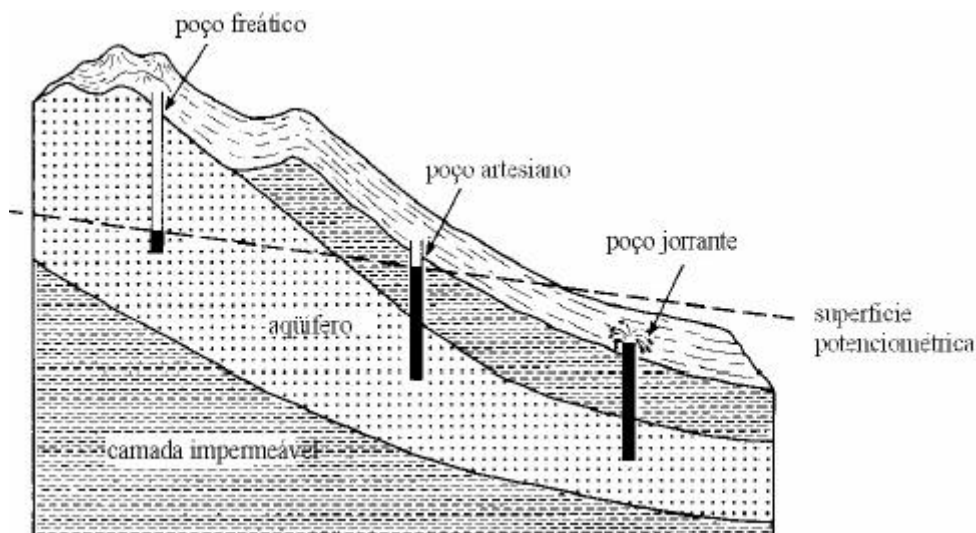


Figura 2.5 – Aquífero Artesiano (Fonte: Fetter, 1994 *apud* DRM – RJ, 2001).

Cada aquífero possui um conjunto de propriedades físicas e químicas que lhe conferem uma característica hidrogeoquímica. Essa característica pode variar regionalmente em um mesmo aquífero e também ao longo do tempo. O monitoramento da qualidade das águas subterrâneas visa identificar essas características naturais e diagnosticar possíveis alterações de origem antropogênica, para subsidiar as ações de controle. Um aquífero é, então, um reservatório de água. Sua qualidade dependerá da composição natural das rochas e das atividades humanas desenvolvidas nas áreas de ocorrência e sua disponibilidade hídrica dependerá de sua capacidade de recarga e do volume de água que se pretende extrair. As reservas de água dos aquíferos podem ser definidas sob quatro categorias (CETESB, 2004):

**Reserva Hidrogeológica Renovável ou Reguladora:** representa a quantidade de água livre armazenada pelo aquífero ao curso de uma importante recarga natural. São assim, submetidas ao efeito sazonal ou interanual das precipitações.

**Reserva Hidrogeológica Permanente:** também chamadas de seculares ou profundas constituem as águas acumuladas que não variam em função das precipitações anuais (CPRM, 2000). No caso de aquíferos confinados ou semiconfinados, em que os níveis piezométricos não respondem às variações climáticas sazonais, as reservas permanentes são aquelas não renováveis que permanecem armazenadas independentemente da vazão de escoamento natural.

Reservas Hidrogeológicas Explotáveis: são os volumes de água que podem ser economicamente extraídos, sem provocar exaustão ou degradação do aquífero como meio de armazenamento natural ou artificial de água. Estes recursos podem variar no espaço e no tempo, em função das condições hidrogeológicas, do efeito das explorações sobre o regime de fluxo de água nos aquíferos, da disposição e concepção das obras de captação e da evolução dos equipamentos de exploração.

#### **II.2.4 Reabastecimento do Aquífero ou Recarga**

O reabastecimento de um aquífero ocorre, basicamente, a partir da infiltração de água das chuvas e, em menor escala, de corpos de água superficiais. O maior ou menor grau de reabastecimento ou recarga depende de fatores como clima, vegetação, relevo, drenagem e geologia da região. A existência de solos porosos e permeáveis favorece à infiltração, mas essa condição pode ser ampliada se o solo for coberto por vegetação e estiver em relevo plano. Já em áreas de relevo íngreme e solos pouco permeáveis, a maior parte da água precipitada transforma-se em cursos superficiais, dificultando a infiltração. Em regiões de clima úmido e solos permeáveis, a recarga pode atingir até 25% da precipitação pluviométrica anual. Os aquíferos podem ser reabastecidos, localmente, pela infiltração da água das chuvas. É a chamada recarga direta, característica dos aquíferos livres. Já nos aquíferos confinados, o mais comum é que aconteça a recarga indireta, em que o reabastecimento ocorre somente nos locais onde a camada que contém o aquífero aflora. Esses locais são denominados zona de recarga desses aquíferos. Nos aquíferos fissurais, a recarga pode ser direta ou indireta ou ambas, de acordo com as condições e local de ocorrência (DRM – RJ, 2001).

### **II.3 – MIGRAÇÃO DE CONTAMINANTES NO SOLO**

Dada a imprópria disposição de resíduos sólidos, líquidos e gasosos no meio ambiente e em áreas do subsolo, muitos aquíferos estão se tornando contaminados. A qualidade da água subterrânea vem declinando muito lentamente, mas com certeza, em todos os lugares. A maior parte dos contaminantes são provenientes dos usos urbanos, industriais e da agricultura, sendo muita atenção dada às fontes pontuais de poluição, a exemplo dos rejeitos e resíduos industriais, aterros sanitários e lixos químicos e tóxicos

injetados no subsolo (Figura 2.6). Muitas soluções técnicas foram desenvolvidas para recuperar ou, no mínimo, conter esses tipos de poluição (DRM – RJ, 2001).

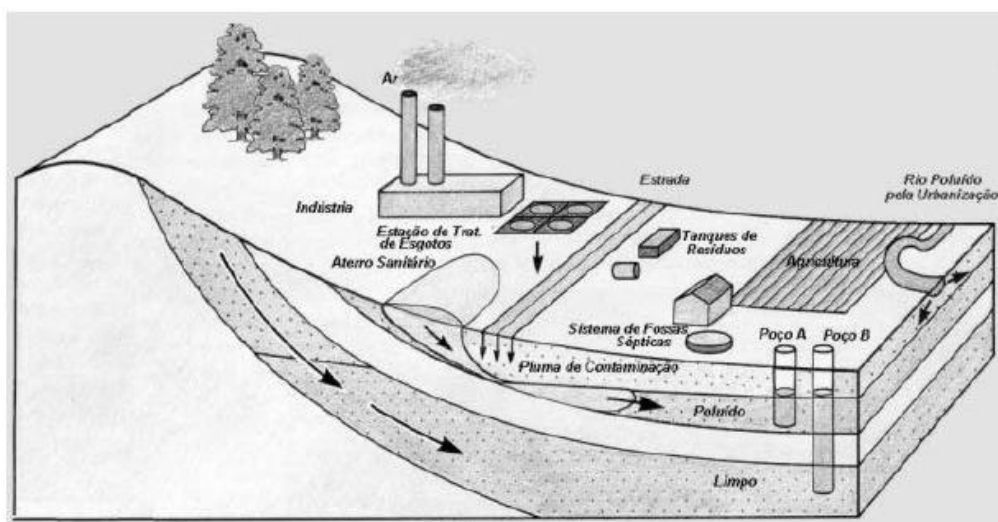


Figura 2.6: Poluição das águas subterrâneas (Fonte: UNESCO, 1992 *apud* DRM – RJ, 2001).

O solo, como já analisado anteriormente, atua como um filtro, sendo capaz de, muitas vezes, reter as impurezas que nele são introduzidas. Conhecer a capacidade do solo para retenção de poluentes, bem como sua formação, características essenciais e, assim, fazer um bom uso deste, proporcionando técnicas de proteção ao solo, às águas subterrâneas e, conseqüentemente, ao meio ambiente, torna-se tarefa fundamental numa época em que tanto se fala da escassez dos nossos recursos naturais.

Dentro desse contexto, surgiu a idéia deste trabalho que enfatiza o problema de migração de contaminantes no solo.

Uma vez penetrado no subsolo, o contaminante torna-se suscetível a uma variedade de processos geoquímicos e biológicos, que determinam a sua mobilização ou mesmo transformação no meio poroso. Esses processos estão intrinsecamente relacionados a inúmeras variáveis, tornando a prática de remediação de aquíferos uma tarefa complexa, muitas vezes custosa e dispendiosa (NOBRE *et al.*, 2005).

A prática de remediação de solos e águas subterrâneas é normalmente uma tarefa complexa e exige o envolvimento de profissionais qualificados e experientes na elaboração de diagnósticos precisos e definição da alternativa mais adequada para cumprimento dos padrões preestabelecidos em projeto. Assim, o conhecimento das

atuais tecnologias de remediação, suas limitações, relações custo-benefício e aplicabilidade quanto às questões hidrogeológicas e da natureza dos contaminantes são determinantes no sucesso do programa de remediação (NOBRE *et al.*, 2005).

Em face do exposto, mais relevante do que a proposta de técnicas de remediação é o estudo de técnicas que sejam capazes de evitar a exposição do solo à contaminação. Gerar modelos capazes de prever a migração de contaminantes em meios porosos e, assim, determinar o possível impacto ambiental a ser gerado parece uma medida econômica e ambientalmente mais viável, já que prevenir é melhor que remediar.

## II.4 – EQUAÇÕES BÁSICAS

Em 1856, Henry Darcy descobriu, através de um dispositivo similar ao mostrado na Figura (2.7), que a vazão do escoamento de um fluido era proporcional à seção transversal do filtro, à diferença de cargas hidráulicas entre os piezômetros 1 e 2 e inversamente proporcional à distância percorrida pelo fluido.

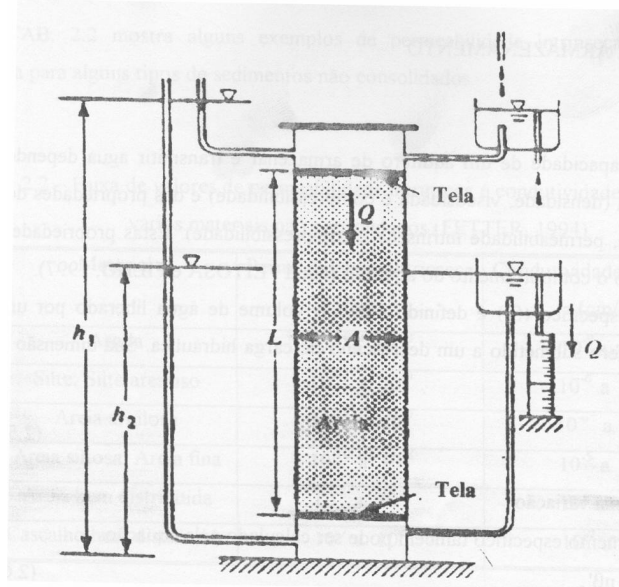


Figura 2.7: Experiência de Darcy (Fonte: BEAR, 1979, *apud* VASCONCELLOS, 2001)

A lei de Darcy para um fluxo saturado pode, então, ser escrita como:

$$Q = KA \frac{(h_1 - h_2)}{L} \quad (\text{II.4})$$

em que  $Q$  é a vazão constante que passa pelo cilindro [ $L^3/T$ ];  $h_1$  é a carga hidráulica no piezômetro 1 [ $L$ ];  $h_2$  é a carga hidráulica no piezômetro 2 [ $L$ ];  $A$  é a área de seção transversal do cilindro [ $L^2$ ];  $L$  é a distância entre os dois piezômetros [ $L$ ]; e  $K$  é o coeficiente de proporcionalidade, chamado de condutividade hidráulica [ $L/T$ ].

A energia mecânica de um fluido em movimento é composta, basicamente, de três componentes: a energia cinética, a energia gravitacional e a energia piezométrica, conforme descrito abaixo:

$$E_m = \frac{m v^2}{2} + mgz + pV \quad (\text{II.5})$$

A carga hidráulica ( $h$ ) é definida como a razão da energia mecânica pelo peso, sendo escrita como:

$$h = \frac{v^2}{2g} + z + \frac{p}{\rho g} \quad (\text{II.6})$$

em que  $v$  é a velocidade efetiva do fluido em movimento [ $L/T$ ],  $p$  é a pressão hidrodinâmica [ $M/LT^2$ ],  $g$  é a aceleração da gravidade [ $L/T^2$ ] e  $\rho$  é a massa específica do fluido [ $M/L^3$ ].

Em meios porosos, os escoamentos são muito lentos e, com isso, o termo da energia cinética relativo ao peso ( $v^2 / 2g$ ), por ser bem menor que as demais parcelas, é negligenciado, tornando a carga hidráulica igual à soma da carga devida à elevação ( $z$ ) e da carga devida à pressão ( $\psi = p / \rho g$ ). Pode-se, então, reescrever a Equação (II.6) como:

$$h = z + \psi \quad (\text{II.7})$$



A velocidade de Darcy, também chamada de velocidade aparente ou descarga específica, é escrita como:

$$q = \frac{Q}{A} = K \frac{\Delta h}{L} \quad (\text{II.8})$$

Todavia, esse parâmetro não representa a velocidade real do escoamento, já que a área considerada representa a área total, ou seja, a área correspondente aos vazios e a área correspondente à parte sólida. A área de seção transversal do escoamento pelos poros, área efetiva ( $A_{ef}$ ), pode ser obtida multiplicando-se a área total pela porosidade efetiva (Equação II.2) e pelo grau de saturação do solo ( $0 < S \leq 1$ ) que, para um meio saturado é igual a um. Conseqüentemente:

$$A_{ef} = S \cdot \varepsilon \cdot A = \varepsilon A \quad (\text{II.9})$$

A velocidade de poro é, então:

$$u = \frac{q}{\varepsilon} \quad (\text{II.10})$$

A Equação (II.10) pode ser generalizada para um escoamento tridimensional, podendo ser escrita como:

$$\vec{q} = -\tilde{K}\vec{\nabla}h \quad (\text{II.11})$$

em que o sinal negativo indica que o escoamento do fluido ocorre no sentido contrário ao gradiente da carga hidráulica, sendo  $\tilde{K}$  um tensor e  $\vec{\nabla}$  o operador gradiente.

A lei de Darcy é válida, apenas, para escoamentos laminares. Nesse tipo de escoamento, as velocidades são relativamente pequenas e o fluido percola suavemente pelos poros do meio. O escoamento é dominado pelas forças viscosas do fluido e a perda de carga varia linearmente com a velocidade.

Para velocidades maiores, o escoamento passa a ser dominado pelas forças de inércia, deixando de ser laminar, transformando-se em turbulento. Ocorre a formação de turbulência, as moléculas do fluido se movem de maneira irregular e a perda da carga

não mais varia linearmente com a velocidade, não mais podendo aplicar-se a lei de Darcy.

O número de Reynolds ( $R_e$ ) é um parâmetro adimensional dado pela relação das forças de inércia com as forças viscosas. Segundo BEAR (1972), define-se  $R_e$  para meios porosos como:

$$R_e = \frac{qd}{\nu} \quad (\text{II.12})$$

em que  $d$  é um comprimento característico representando o diâmetro médio dos canais elementares do meio poroso. Inúmeras pesquisas comprovam que a lei de Darcy é válida para um número de Reynolds menor ou igual a um.

## II.5 – EQUAÇÃO GOVERNANTE: EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DISPERSÃO

O ponto de partida para o desenvolvimento de equações diferenciais que descrevem o transporte de solutos nos materiais porosos é considerar o fluxo de soluto que entra e sai em um dado elemento de volume fixado em relação ao domínio do escoamento.

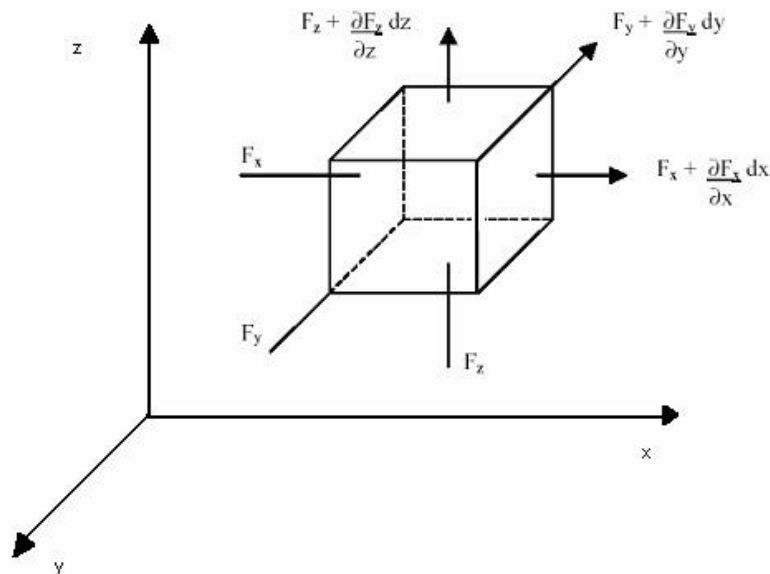


Figura 2.8: Balanço de massa em um volume elementar de solo.  
Fonte: FREEZE e CHERRY, 1979.

A conservação de massa para esse dado elemento de volume é (FREEZE e CHERRY, 1979):

$$\begin{aligned} \left[ \begin{array}{l} \text{taxa de mudança de} \\ \text{massa do soluto dentro} \\ \text{do elemento de volume} \end{array} \right] &= \left[ \begin{array}{l} \text{fluxo de soluto} \\ \text{que sai do elemento} \\ \text{de volume} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{l} \text{fluxo de soluto} \\ \text{que entra no elemento} \\ \text{de volume} \end{array} \right] \\ \pm \left[ \begin{array}{l} \text{perda ou ganho} \\ \text{de massa de soluto} \\ \text{devido a reações} \end{array} \right] & \end{aligned} \quad (\text{II.13})$$

A concentração do soluto  $C$  é definida como sendo a massa de soluto por unidade de volume de solução. A massa de soluto por unidade de volume do meio poroso é, então,  $\varepsilon C$ . Para um meio homogêneo, a porosidade  $\varepsilon$  é uma constante e, portanto,  $\partial(\varepsilon C)/\partial x = \varepsilon \partial C/\partial x$ . A massa do soluto transportada na direção  $x$  pode ser representada pelos dois mecanismos de transporte de soluto:

$$\text{Transporte por advecção} \rightarrow u \varepsilon C dA \quad (\text{II.14})$$

$$\text{Transporte por dispersão} \rightarrow \varepsilon D_x \frac{\partial C}{\partial x} dA \quad (\text{II.15})$$

em que

$u$  - velocidade de poro;

$u = q/\varepsilon$ ;

$q$  - velocidade de Darcy.

$D_x$  é o coeficiente de dispersão na direção  $x$  e  $dA$  é um elemento de área transversal ao volume. O coeficiente de dispersão  $D_x$  está relacionado à dispersividade  $\alpha_x$  e ao coeficiente de difusão molecular  $D^*$  pela seguinte equação:

$$D_x = \alpha_x u + D^* \quad (\text{II.16})$$

A forma da componente dispersiva do fluxo de massa, Equação (II.15) é análoga à primeira lei de Fick que diz que o fluxo de massa é proporcional ao gradiente de concentração (BIRD *et al.*, 1960; BEJAN, 1994; CRANK, 1956).

Se  $F_x$  representa a massa total de soluto por unidade de área transportada na direção  $x$ , por unidade de tempo, tem-se:

$$F_x = u\varepsilon C - \varepsilon D_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (\text{II.17})$$

O sinal negativo antes do termo dispersivo indica que o contaminante se move, por dispersão, em direção a zonas com concentrações mais baixas. Similarmente, as expressões para as demais direções:

$$F_y = v\varepsilon C - \varepsilon D_y \frac{\partial C}{\partial y} \quad (\text{II.18})$$

$$F_z = w\varepsilon C - \varepsilon D_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (\text{II.19})$$

O total de soluto entrando no volume é:

$$F_x dz dy + F_y dx dz + F_z dx dy$$

e o total de soluto que deixa o volume é:

$$\left( F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} dx \right) dy dz + \left( F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} dy \right) dx dz + \left( F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} dz \right) dx dy$$

em que os termos parciais indicam a mudança espacial de massa de soluto na especificada direção. A diferença da quantidade que entra e que sai é, então:

$$\left( \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) dx dy dz$$

A diferença entre o fluxo que entra no elemento de volume e o fluxo que sai é igual à quantidade de substância dissolvida acumulada no elemento de volume mais a

perda (ou menos o ganho) de massa de soluto no elemento de volume que pode ocorrer como resultado de reações químicas ou bioquímicas ou decaimento radiativo (FREEZE e CHERRY, 1979). A taxa de mudança de massa no elemento é:

$$-\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz + \sum Q(C) dx dy dz$$

A expressão completa da equação de conservação de massa torna-se, então:

$$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = -\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \sum Q(C) dx dy dz \quad (\text{II.20})$$

Aspecto importante considerado neste estudo é que a perda ou ganho de massa de soluto no volume de controle (Q) deve-se, exclusivamente, ao decaimento radioativo do soluto em questão. O último termo da Equação (II.20) torna-se, então:

$$\sum Q(C) = -\lambda RC \quad (\text{II.21})$$

em que R é o fator de retardamento e  $\lambda$  é o fator de decaimento.

Numa interpretação clássica, o retardamento que ocorre durante a migração de poluentes é totalmente atribuído aos processos de sorção. Os processos de sorção incluem a adsorção, a sorção química, a absorção e troca iônica. A adsorção inclui os processos em que o soluto se adere à superfície sólida. A sorção química ocorre quando o soluto é incorporado a um sedimento, solo, ou superfície rochosa por uma reação química. Já a absorção ocorre quando as partículas do aquífero são porosas de modo que o soluto possa se difundir na partícula e ser sorvido no interior da superfície (WODD *et al.*, 1990). Para o estudo em questão, o termo sorção será utilizado para indicar o resultado total dos vários processos que ocorrem.

A sorção é experimentalmente determinada pela medida de quanto um soluto pode ser sorvido por uma partícula sedimentar, solo ou rocha. Alíquotas de soluto em concentrações variáveis são bem misturadas com o sólido, e a quantidade de soluto removido é determinada. A capacidade de um sólido para remover um soluto é uma função da concentração do soluto. Os resultados do experimento são plotados em um

gráfico, chamado de isoterma, que mostra a concentração do soluto versus a quantidade sorvida no sólido (FETTER, 1999).

Se existir uma relação direta e linear entre a quantidade de soluto sorvido no sólido,  $C^*$  (mg/kg), e a concentração do soluto,  $C$  (mg/L), pode-se calcular o coeficiente de distribuição,  $K_d$  (L/kg), que é a grandeza utilizada para avaliar a capacidade de retenção de um solo, através de uma isoterma linear de sorção, sendo definido pela equação:

$$C^* = K_d C \quad (\text{II.22})$$

em que

$K_d$  é o coeficiente de distribuição

que é uma característica própria de um determinado solo em relação a uma determinada substância, podendo variar de acordo com alguns fatores como a atividade do solo, concentração inicial da substância na solução, concentração de outras substâncias presentes na solução, pH da solução, temperatura e velocidade de percolação, entre outros.

Através do coeficiente de distribuição, pode-se determinar o fator de retardamento, que é um parâmetro comumente utilizado nos modelos de transporte de contaminantes, como:

$$R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{\theta} \quad (\text{II.23})$$

em que  $\theta$  é o teor de umidade volumétrico, que é igual à porosidade quando o solo está saturado e  $\rho_d$  é a densidade do solo seco [ $M/L^3$ ].

Substituindo (II.17), (II.18) e (II.19) em (II.20) e cancelando  $\varepsilon$  em ambos os lados, obtém-se:

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left( D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] - \left[ \frac{\partial}{\partial x} (uC) + \frac{\partial}{\partial y} (vC) + \frac{\partial}{\partial z} (wC) \right] = R \frac{\partial C}{\partial t} - \lambda RC \quad (\text{II.24})$$

Importante ressaltar que, no estudo em questão, o escoamento considerado é incompressível, ou seja, o divergente do campo de velocidade é nulo:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (\text{II.25})$$

em que  $\mathbf{V}$  é o vetor velocidade.

A Equação (II.24) torna-se:

$$\left[ D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - \left[ u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right] = R \frac{\partial C}{\partial t} - \lambda RC \quad (\text{II.26})$$

## CAPÍTULO III

### REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

O transporte subterrâneo de contaminantes tem sido um dos mais importantes tópicos de pesquisa na hidrologia e na engenharia nas últimas décadas (BEAR, 1972; GELHAR, 1993; DOMENICO e SCHWARTZ, 1998; FETTER, 1999). Visando atenuar possíveis impactos, social e ecológico, muita atenção tem sido dada, atualmente, a problemas de migração de contaminantes no solo.

Dessa forma, a simulação de migração de contaminantes no solo tornou-se tarefa fundamental para a comunidade científica, sendo utilizada como uma importante ferramenta para diversos fins como, por exemplo, na avaliação de segurança de depósitos de rejeitos e aterros sanitários.

Simular a migração de contaminantes no solo através de soluções puramente analíticas é bastante relevante, já que são usualmente derivadas de princípios físicos básicos, não sendo afetadas por dispersões numéricas e erros de ordem de truncamento que ocorrem nas soluções numéricas (ZHENG e BENNET, 1995). Utilizando-se soluções analíticas, pode-se entender melhor o mecanismo de transporte de contaminantes, predizer seu movimento, medir campos de parâmetros relativos ao transporte do soluto e verificar os resultados de modelos numéricos (PARK e ZHAN, 2001).

Uma aproximação comum para simulação de transporte de contaminantes reativos no meio poroso é assumir que ele é governado por uma isoterma de sorção linear (FETTER, 1993). Entretanto, estudos têm revelado que o transporte de muitos contaminantes no meio poroso é sensível a uma isoterma de sorção não linear (SERRANO, 2001).

Quando a equação de dispersão é sujeita à sorção ou decaimento não lineares, a equação diferencial não linear governante tem sido, tradicionalmente, resolvida numericamente, sendo a resolução puramente analítica mais difícil.



Nesse contexto, SERRANO (2001) deriva uma decomposição de séries de soluções da equação advectiva-dispersiva-reativa unidimensional em aquíferos sujeito a decaimento linear e não linear, isoterma de sorção de Freudlich não linear e isoterma de sorção de Langmuir não linear. Essa decomposição gera uma série analítica, que muito se parece com a série de Fourier e que converge rapidamente para a solução exata. A mais importante característica desse método é que ele oferece um procedimento sistemático simples para resolver equações não lineares sem linearização ou discretização. Utilizando o conceito de decomposição dupla, as séries foram usadas para obter soluções analíticas simuladas. Essa analítica simulada foi testada, para uma determinada acurácia numérica, em relação às séries de solução originárias, sendo obtida uma excelente concordância.

Os modelos propostos são flexíveis, estáveis e permitem ao hidrologista prever valores de parâmetros não lineares para uma dada pluma de contaminantes medida em laboratório.

O movimento da água e dos constituintes químicos no solo é, geralmente, melhor descrito por modelos tridimensionais em não equilíbrio, do que por modelos unidimensionais em equilíbrio, que são mais comumente usados (LEIJ *et al.*, 1993).

LEIJ *et al.* (1993) modelaram analiticamente o movimento tridimensional de um soluto em meios porosos em não equilíbrio, baseando-se em trabalhos previamente publicados que investigam o transporte unidimensional em não equilíbrio, assumindo-se uma mudança de fase de primeira ordem (VAN GENUCHTEN e WAGENET, 1989; TORIDE *et al.*, 1993) e o transporte multidimensional (LEIJ *et al.*, 1991). Combinaram essas duas aproximações, a fim de propiciar soluções para o transporte tridimensional em não equilíbrio para uma variedade de problemas de valor de contorno e de valor inicial.

Consideraram um solo isotrópico, semi-infinito, com dispersão tridimensional, assumindo-se que tanto a velocidade como os coeficientes de dispersão são constantes no tempo e no espaço. Soluções gerais e específicas foram apresentadas, sendo que as soluções gerais foram derivadas com a ajuda das transformadas de Laplace e Fourier, enquanto que as soluções específicas foram apresentadas utilizando funções de Dirac.

As soluções analíticas gerais foram derivadas para um transporte advectivo-dispersivo tridimensional durante um escoamento unidimensional constante em um solo semi-infinito. O procedimento analítico consistiu na transformação de Laplace em relação ao tempo e à coordenada espacial longitudinal semi-infinita e na transformação de Fourier para as direções transversais infinitas.

As soluções específicas foram apresentadas usando funções de Dirac e/ou Heaviside para a distribuição inicial e de entrada ou funções exponenciais para perfis iniciais, de entrada e de geração. Os exemplos de perfis de concentração em função do tempo e da posição foram apresentados para os problemas selecionados. Os resultados mostraram que os efeitos do não equilíbrio no transporte tridimensional são muito similares àqueles para o transporte unidimensional.

Fator bastante relevante a ser considerado, quando se trata do transporte de solutos no solo, é a consideração de termos fonte na solução do problema. PARK e ZHAN (2001) propuseram soluções analíticas para o transporte de contaminantes de fontes finitas de uma, duas e três dimensões em um aquífero finito utilizando o método da função de Green. Esse método é utilizado para resolver uma forma geral de transporte de contaminantes para fontes tridimensionais finitas, instantâneas ou contínuas, em um aquífero finito. As fontes podem ser consideradas como um ponto, uma linha ou uma área. Esse método é uma ferramenta conveniente para resolver problemas de escoamento tridimensional e transporte que incluam termos fonte. Outro objetivo desse trabalho foi utilizar a metodologia geral para derivar várias soluções para fontes representadas por um ponto, uma linha e uma área. Pelas curvas de concentração geradas usando as soluções derivadas, pôde-se observar como cada diferente geometria da fonte e como as condições do aquífero influenciam na distribuição da concentração.

Para o cálculo das integrações temporais nas soluções analíticas e para obter soluções finais de concentração, foi utilizada a ferramenta MATLAB. As soluções analíticas são examinadas pela reprodução de soluções de alguns casos especiais discutidos em trabalhos anteriores. A sensibilidade da geometria da fonte, coeficientes de dispersão e distância da fonte foram testadas. A concentração do contaminante em um ponto próximo à fonte de contaminação mostra-se sensível à geometria da fonte e à anisotropia dos coeficientes de dispersão. Quando esse ponto situa-se longe da fonte, a sensibilidade em relação à geometria da fonte é bem menor.

Diversas soluções analíticas encontram-se disponíveis para a equação de transporte tridimensional de soluto, incluindo aquelas apresentadas em CLEARY e UNGS (1978), CODELL *et al.* (1982), SAGAR (1982), e HUNT (1978). Essas soluções são particularmente úteis, porque podem simular o transporte dos contaminantes de fontes em aquíferos relativamente extensos quando as propagações vertical e horizontal do soluto são relevantes. WEXLER (1992), além de utilizar uma solução modificada de CLEARY e UNGS (1978), fez uso de duas outras soluções. Na primeira solução apresentada, supõe-se que o aquífero é infinito ao longo das três coordenadas. O líquido é injetado no aquífero como uma fonte pontual a uma taxa constante e a concentração do soluto é  $C_0$ . Supõe-se, ainda, que a taxa da injeção é baixa e não perturba o campo de escoamento predominantemente uniforme. Nas outras duas soluções, o aquífero é semi-infinito, tendo uma fonte de soluto situada ao longo do contorno de entrada.

QUESADA *et al.* (2004) apresentou um método geral para resolver equações multidimensionais de transporte reativo de multiespécies. Esse método pode ser usado para resolver problemas de transporte de multiespécies que envolvem interações cinéticas de primeira ordem e fatores distintos de retardamento. O processo de solução emprega a transformação de Laplace e etapas lineares de transformação para desacoplar as equações governantes diferenciais parciais acopladas. As equações desacopladas são resolvidas usando uma solução elementar. Ele resolveu três problemas unidimensionais e dois problemas tridimensionais para ilustrar o uso do método. O esquema de solução que foi proposto é um procedimento robusto para resolver uma variedade de problemas multidimensionais de transporte de multiespécies que são acoplados com uma rede de reação de primeira ordem. A principal vantagem do método é no sentido de que pode se dirigir a problemas com diferentes velocidades de transporte, sendo a desvantagem principal o fato de que se encontra restrito ao transporte de três espécies.

Apesar de vantajosa a utilização de soluções analíticas, um grande esforço vem sendo realizado com o intuito de desenvolver técnicas numéricas para solução de problemas mais complexos. Considerável progresso tem sido alcançado no aperfeiçoamento de algumas técnicas numéricas que incluem os efeitos de propriedades heterogêneas, condições irregulares e interações químicas e biológicas entre as fases sólida e líquida.

SUN (1989) tratou em seu artigo da solução, através de métodos numéricos, de problemas de transporte dominados por advecção e problemas inversos. Analisou diversos modelos matemáticos que são utilizados, geralmente, em problemas de campo e uma variedade de soluções numéricas para modelos tridimensionais foi introduzida, incluindo um método que pode ser considerado como uma variação do método dos elementos finitos. Esse método é de fácil compreensão, sendo conveniente para resolver problemas de campo.

Quando o transporte de advecção domina o de dispersão, dois tipos de dificuldades numéricas aparecem, superestimativa e dispersão numérica. Visando superar essas dificuldades numéricas, SUN (1989) desenvolveu várias técnicas numéricas, mencionando, ainda, problemas de identificação de parâmetros e análise da confiabilidade que são absolutamente necessários para construir um modelo prático.

FABRITZ (1995), em sua tese de mestrado, apresentou um modelo numérico bidimensional capaz de simular o movimento e a biodegradação de contaminantes em um aquífero saturado. Utilizou o modelo com o intuito de investigar diferentes estratégias de remediação, comprovando ser o modelo bastante vantajoso, pois é capaz de simular processos envolvidos na remediação da subsuperfície e possibilita uma maior flexibilidade nos parâmetros e configurações de entrada. O modelo inclui os processos de escoamento bidimensional saturados, isotermas de sorção de Freundlich e Langmuir e toxicidade intermediária, sendo capaz de simular, simultaneamente, o movimento de múltiplos solutos.

PEPER (1995) fez uso de um método multidimensional de elementos finitos (GWADAPT), que utiliza adaptação local, para calcular o escoamento subterrâneo e o transporte de contaminantes na subsuperfície em condições saturadas e não saturadas e deduziu que a incorporação da adaptação local no método dos elementos finitos produz um esquema numérico muito poderoso e acurado para solução de problemas de transporte.

Assim como as soluções puramente analíticas, as numéricas também possuem suas desvantagens. Um enorme esforço computacional é despendido nesse tipo de solução, além de determinadas restrições apontadas na literatura contemporânea como longo tempo de processamento, precisão limitada, lenta convergência, como também

um enorme esforço despendido na elaboração e expansão de algoritmos numéricos. Enquanto, por um lado, tem-se a possibilidade de formular problemas mais complexos, a generalidade de aproximações puramente numéricas pode carregar custos computacionais inaceitáveis durante sua simulação e desenvolvimento, sendo capazes, em alguns casos, de servir simplesmente como resultados de natureza qualitativa (COTTA e MIKHAILOV, 1997).

Sendo assim, um dos grandes desafios para a simulação computacional direcionada ao desenvolvimento científico-tecnológico consiste na descoberta de novos procedimentos, objetivando minimizar essas determinadas restrições.

Um dos procedimentos que vem sendo utilizado com muita frequência, ultimamente, é o método da transformada integral. Esse método é uma das soluções aproximadas mais gerais para certas classes de problemas lineares difusivos (MIKHAILOV e ÖZISIK, 1984). A técnica da transformada integral generalizada (GIT), derivada da técnica da transformada integral clássica, é uma aproximação híbrida numérico-analítica que permite a maximização do tratamento analítico da solução do problema, já que transforma analiticamente sistemas de equações diferenciais parciais (EDPs) em sistemas de equações diferenciais ordinárias (EDOs), reduzindo a dependência das variáveis independentes a uma única variável. Permite, ainda, que se reduza a dependência de uma única variável, transformando um sistema de EDP's em outro sistema acoplado de EDP's que pode ser numericamente resolvido. Essa aproximação permite a utilização de acurácia controlada, sendo sua performance computacional bastante eficiente.

Além de ser um método computacional alternativo, essa aproximação é particularmente boa quando utilizada com a finalidade de obtenção de valor de referência, já que possui uma característica automática do controle de erro, retendo as mesmas características de uma solução puramente analítica. Além do controle e da estimativa de erro direto, um aspecto proeminente desse método é a extensão direta às situações multidimensionais. Outra vez, a natureza híbrida é responsável por esse comportamento, já que a parte analítica no procedimento da solução é excessivamente empregada com exceção de uma variável independente, e a tarefa numérica é reduzida sempre por um sistema de integração a um sistema diferencial ordinário em uma única coordenada (COTTA e MIKHAILOV, 1997).

Dentre os muitos ramos de aplicação da GITT em ciência e tecnologia, pode-se destacar sua utilização em problemas de convecção-difusão, problemas de autovalor equações de camada limite e equações de Navier-Stokes.

Mais especificamente, para problemas de migração de contaminantes no solo, enfoque deste trabalho, muitas revisões são encontradas na literatura.

Quando se aborda migração unidimensional de rejeitos no solo, pode-se citar OSTWALD *et al.* (1992), ROMANI *et al.* (1997) e COTTA *et al.* (1997), ressaltando-se que as duas últimas referências abordam a migração unidimensional de rejeitos no solo, fazendo uso da ferramenta computacional Mathematica.

Muitas soluções analíticas e semi-analíticas têm sido desenvolvidas para simular o transporte de soluto no meio poroso, servindo, também, para checar a acurácia das soluções numéricas. Para a obtenção dessas soluções, fazem-se necessários determinados requisitos como homogeneidade, escoamento permanente, coeficiente de dispersão constante, o que torna essas soluções limitadas a condições simples e específicas (LIU *et al.*, 2000).

LIU *et al.* (1998) propuseram uma solução analítica para a equação unidimensional de advecção-dispersão em um meio poroso de multicamadas, obtida através da GITT. Consideraram condições de estado permanente e condições de contorno e inicial arbitrárias. Compararam os resultados obtidos com resultados numéricos fornecidos em trabalhos anteriores, concluindo a existência de concordância entre os resultados. A vantagem desse método é a possibilidade de uma maior flexibilidade em relação às condições iniciais, podendo ser facilmente adaptado a modelos bi e tridimensionais.

Os problemas de transporte de soluto em que as propriedades de transporte são mais complicadas não são avaliadas pela maioria das aproximações analíticas tradicionais. Para esse tipo de problema, as soluções numéricas mostram-se mais eficientes (LIU *et al.*, 2000).

LIU *et al.* (2000) apresentaram soluções para problemas de transporte unidimensional de soluto acoplado com sorção e/ou decaimento linear e não linear e com condições que permitem escoamento e coeficiente de dispersão variáveis no tempo

e/ou espaço, assim como condição inicial variável no espaço e condições de contorno variáveis no tempo. Demonstram, em seus estudos, como a GITT pode ser utilizada para derivar soluções analíticas para problemas de transporte no meio poroso com escoamento e coeficiente de dispersão variáveis no tempo e no espaço, como para derivar soluções híbridas numérico-analíticas quando se considera sorção ou decaimento não lineares.

Para casos lineares, uma solução analítica foi proposta, sendo as comparações feitas com exemplos já existentes na literatura, tanto para o meio poroso homogêneo quanto para um meio heterogêneo. Para o meio homogêneo, consideraram dois exemplos distintos. O primeiro exemplo, proposto por BRENNER (1962), não considera decaimento e as condições de contorno são constantes. Já o segundo exemplo, proposto por VAN GENUCHEN e ALVES (1982), possui as condições de contorno dependentes do tempo, com concentração variável e decaimento linear

Para o meio heterogêneo, consideraram um exemplo com parâmetros de transporte em função do espaço. Esse exemplo é baseado em um modelo de camada média e, de acordo com os resultados obtidos, pôde-se perceber que quando se utiliza uma única camada, os resultados se mostram menos satisfatórios do que quando se utiliza o modelo para duas camadas. O aumento do número de camadas faz o modelo representar melhor o sistema heterogêneo.

Para os casos não lineares, uma solução híbrida numérico-analítica foi proposta, sendo a parte numérica resolvida através da rotina DIVPAG, contida na biblioteca numérica do ISML. Utilizaram, como exemplo comparativo, uma solução numérica bastante acurada para um problema de transporte com sorção não linear, proposta por HUANG *et al.* (1998), checando que os resultados daquele mostram-se idênticos aos obtidos por este. Mostraram, ainda, como exemplo ilustrativo que essa solução pode simular a bio-redução de óxido de ferro com sorção não linear.

Puderam perceber que soluções, para problemas de transporte não linear, obtidas através da GITT, convergem mais devagar e exigem maior esforço computacional do que quando se utiliza aproximações puramente numéricas. Entretanto, aquela é capaz de prover uma solução altamente acurada para problemas não lineares.

ALMEIDA e COTTA (1999), investigaram a solução de problemas convectivos-difusivos, definidos dentro de regiões sem contorno, através do uso da GITT. Essa aproximação híbrida numérico-analítica, extensamente empregada na solução de várias classes de problemas com domínios finitos, é testada na manipulação de domínios sem contorno, através de dois diferentes esquemas: um domínio truncado e um domínio transformado. Os resultados numéricos são obtidos de um modelo linear do tipo Burgers a fim de ilustrar os méritos relativos a cada esquema de solução proposto. A análise dos resultados pôde demonstrar que tanto os procedimentos de um domínio truncado como o domínio transformado são aplicados com sucesso, mas requerem uma pesquisa prévia dos valores necessários para truncamento do domínio, no primeiro caso, ou para um parâmetro de transformação, no segundo esquema, tendo um custo computacional adicional quando comparado às regiões com contorno formulado.

LEAL e RUPERTI (2000) desenvolveram uma solução híbrida para um modelo bidimensional de seleção de transporte em um aquífero homogêneo com escoamento subterrâneo uniforme. A GITT foi utilizada para prover a solução híbrida numérico-analítica e dois procedimentos numéricos foram utilizados, tendo sido selecionado um caso teste para verificar a eficácia das soluções propostas.

O comportamento dos potenciais transformados foi analisado quando esquemas de ordenamento são aplicados, levando-se em conta as contribuições mais importantes e quando uma transformação simples é feita e a sub-rotina DMOLCH é aplicada para resolver o sistema de PDE. Foram utilizados quatro tipos de esquemas de ordenamento, chegando-se à conclusão de que o melhor esquema foi o sugerido por MIKHAILOV e COTTA (1996). Além disso, fizeram uma comparação da solução exata sugerida por SHAN e JAVANDEL (1997) com as soluções obtidas através das sub-rotinas DIVPAG e DMOLCH, concluindo-se que os melhores resultados são obtidos quando se utiliza a sub-rotina DMOLCH. Estudaram, ainda, o comportamento da convergência concluindo que uma baixa convergência foi obtida para regiões próximas à fonte de contaminantes. Ao analisarem a variação da concentração, puderam perceber que era exatamente próximo à fonte que se encontrava um maior gradiente de concentração.

Com o intuito de estudar a distribuição da concentração para diferentes valores de coeficiente de dispersão, consideraram três casos distintos, chegando à conclusão de que, para valores maiores de coeficiente de dispersão, o movimento do contaminante é



muito lento, enquanto que, quando se anula esse coeficiente, o contaminante se move na direção horizontal e chega a tocar a condição de contorno inferior.

LEAL e RUPERTI (2001) utilizaram a GITT para simular o transporte bidimensional de contaminantes em um sistema de multicamadas. Duas camadas foram consideradas, sendo que, na primeira, uma zona não saturada é tratada como solo saturado e a segunda camada é considerada como sendo a camada de percolação. O campo de escoamento é conhecido e a fonte de concentração encontra-se no topo do sistema. Analisaram dois tipos de condições de contorno: injeção de fluxo constante e fluxo dependente do tempo e concluíram que a GITT é empregada com sucesso para obtenção da distribuição da concentração transiente em um sistema hipotético heterogêneo com campo de escoamento conhecido e constante. Eles verificaram que, uma melhoria na modelagem do termo fonte teria um forte impacto nos resultados finais. Analisaram que o comportamento transiente da pluma de contaminante é eficientemente simulado através da aproximação híbrida proposta. Esse tipo de modelo pode ser aplicado a problemas ambientais envolvendo contaminação do solo por eliminação de poluentes e avaliação de segurança de áreas próximas a depósitos.

Grande importância tem sido dada à energia nuclear, ultimamente, já que todos os métodos de geração de energia resultam em contaminantes radioativos e não radioativos, que podem ameaçar a saúde humana e o meio ambiente. Para se comparar esses diferentes contaminantes, é necessário considerar o potencial de migração desses contaminantes e suas características (radioativo, não radioativo, orgânicos, não orgânicos), sua forma (sólido, líquido, gasoso) e sua disposição no ambiente (superficial, atmosférica, geológica). Dessa forma, muitos esforços vêm sendo realizados, com o objetivo de se propor o manejo seguro desses poluentes, respeitando os limites possíveis para que não se coloque em risco o homem e o meio ambiente e prever os impactos que possam atingir gerações futuras devido a uma imposição de carga indevida.

A análise de problemas com escoamento tridimensional é raramente encontrada na literatura, especialmente, para situações transientes, principalmente devido ao aumento do esforço computacional associado a aproximações puramente discretas (LUZ *et al.*, 2001).

LUZ *et al.* (2001) fizeram uso de uma ferramenta computacional para obter uma solução acurada para problemas de escoamento tridimensional transiente. Para ilustrar o problema, consideraram uma convecção natural tridimensional transiente em uma cavidade constituída de material poroso saturado com um fluido newtoniano. O escoamento foi induzido pelas trocas de calor entre o meio poroso e as paredes impermeáveis. A configuração geométrica configura-se em uma cavidade vertical, em que as condições de contorno são do primeiro tipo. Considera-se a lei de Darcy, aproximação de Boussinesq e negligencia-se o termo derivado do tempo. A condição de contorno é homogeneizada através da GITT e um filtro para o campo de temperatura, que é baseado na solução do problema de condução de calor para estado permanente, é utilizado. Um par de transformada inversa que envolve soma tripla é obtido e transformado em uma única soma através de um esquema de ordenamento, sendo o sistema resultante resolvido numericamente, através da rotina DIVPRK, contida na biblioteca numérica do ISML.

Para se forçar um regime de convecção, uma perturbação precisa ser introduzida nas equações governantes. LUZ *et al.* (2001) analisaram, em um primeiro momento, a resposta da perturbação na condição inicial no comportamento do sistema transiente. Esta análise foi feita, considerando-se quatro níveis de perturbação para diferentes números de Rayleigh. Posteriormente, um código foi construído para permitir a análise qualitativa do fenômeno transiente em função do número de Rayleigh para uma situação de cavidade cúbica. O código foi validado e os resultados obtidos demonstram, de maneira satisfativa, o balanço de energia global, através da evolução transiente dos números médios de Nusselt no fundo e no topo das paredes da cavidade.

Problemas que envolvam a contaminação da água, devido à poluição não conhecida, são um importante tipo de problema inverso e requerem o uso de métodos para estimar a localização ou a história de contaminação da fonte de contaminação (ATMADJA e BAGTZOGLU, 2001; NEUPAUER e BORCHERS, 2000). A partir dessa referência, RUPERTI (2002) propôs uma solução inversa eficiente baseada no uso de um método seqüencial associado à solução numérica de uma equação parcial diferencial unidimensional a fim de estimar a história do fluxo de massa de uma fonte contaminante dependente do tempo em um aquífero bidimensional. Um caso hipotético foi utilizado para investigar a performance da solução como função do número de

tempos e localizações. Três situações foram consideradas para estimativa do fluxo de massa: dados exatos, dados experimentais simulados e dados com ruídos filtrados. O desempenho do método proposto foi comparado para as três situações apresentadas, concluindo-se que o uso da estratégia do filtro pode ser útil quando se considera dados colhidos longe da fonte contaminante. Também se percebeu que os fluxos estimados são avançados no tempo quando se aumenta o número de tempos futuros ou a distância entre a amostragem e a fonte. Uma comparação entre os perfis de concentração exata e estimada mostrou que estimativas multidimensionais podem ser eficientemente obtidas por tal método.

Para prever o impacto ambiental devido a esses poluentes produzidos no Brasil e analisar a segurança de repositórios, HEILBRON *et al.* (2002), utilizaram um código computacional POLUTANF, baseado em experiências prévias de manejo de poluentes e taxa de risco para geração de energia nuclear e aplicações radioativas. Esse código simula a migração do potencial do contaminante e o risco de sua exposição para o homem e o meio ambiente, incluindo formulações simplificadas para a geosfera e fatores de transferência para análise da biosfera. Possui uma completa implementação numérica da solução transiente da equação de advecção-dispersão, incluindo termo de decaimento linear.

A condição de contorno utilizada representa o vazamento do contaminante numa região saturada abaixo do repositório.

O modelo utilizado trata do termo fonte, zonas saturadas e não saturadas e biosfera. O termo fonte é baseado numa fração anual de lixiviação de contaminante, assumindo que toda a água que entra no repositório, deixa-o e entra na geosfera. A zona não saturada é constituída por um meio poroso isotrópico e homogêneo, com escoamento unidirecional constante na direção vertical, sendo que os contaminantes se movem com a velocidade vertical da água. Já a zona saturada considera a equação de transporte unidimensional, incluindo dispersão, retardamento e decaimento do contaminante no aquífero. A solução desse sistema é obtida através da GITT, sendo a solução analítica resolvida utilizando a ferramenta computacional Mathematica.

Para composição da biosfera, foram utilizados dois cenários: cenário de intrusão; cenário residencial.

Para o cálculo da equação de risco para substâncias não radioativas, foram utilizados fatores de inalação e ingestão baseados no EPA (1999). Para materiais radioativos, o risco de câncer é obtido pela multiplicação da quantidade inalada ou ingerida pelo fator dose obtido pelo ICRP (1979).

Os resultados demonstram boa concordância entre a Agência de Registro de Substâncias Tóxicas e Doenças (ATSDR) e os resultados obtidos pelo modelo em relação à lista de prioridade de substâncias perigosas.

O modelo apresentado permite o estabelecimento dos valores negligenciáveis das substâncias depositadas em aterros sanitários, uma vez que a biosfera necessária e as características da geosfera do lugar são avaliadas. O modelo oferece, também, uma completa avaliação de segurança dos depósitos se o termo fonte é conhecido. Também pôde ser concluído que o modelo permite ao usuário estimar o erro/ppm não somente para substância radioativa, como também para substâncias não radioativas.

## CAPÍTULO IV

### SOLUÇÃO DO PROBLEMA UNIDIMENSIONAL

#### IV.1 – FORMULAÇÃO DO PROBLEMA

O problema estudado é composto por um meio poroso heterogêneo, saturado, constituído por  $N$  camadas homogêneas, em perfeito contato, conforme mostrado na Figura (4.1). Considera-se a equação de transporte unidimensional transiente, sendo as propriedades dentro de cada camada, coeficiente de dispersão, fator de retardamento, porosidade e velocidade de poro, constantes. Considera-se, ainda, a inclusão do decaimento radioativo, sem formação de cadeia radioativa, bem como se permite que a concentração inicial em cada camada seja constante e diferente de zero. Assume-se que a concentração injetada em  $z = 0$  e o fluxo de massa no contorno da primeira camada são funções conhecidas e dependentes do tempo e que a velocidade de Darcy é igual em todas as camadas.

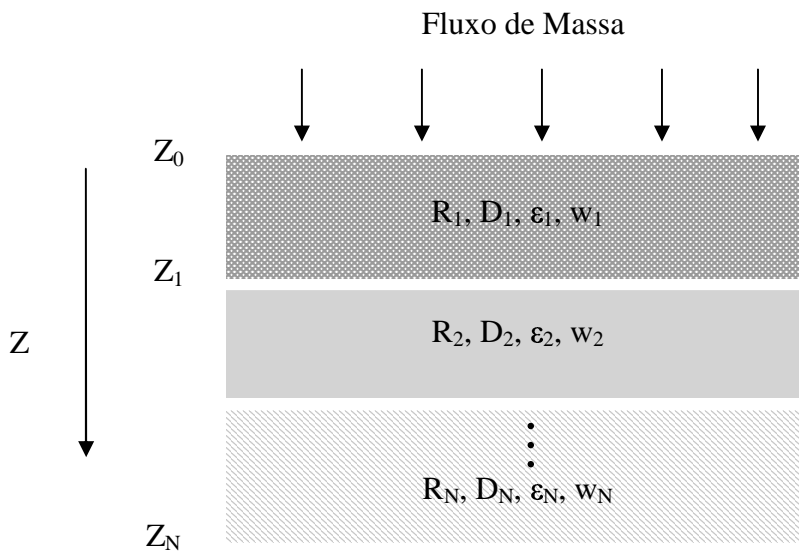


Figura 4.1: Esquematização do problema.  $R$  é o fator de retardamento,  $D$  é o coeficiente de dispersão,  $\epsilon$  é a porosidade e  $w$  é a velocidade de poro.

O transporte unidimensional de soluto neste meio é, tipicamente, modelado utilizando-se a equação geral de advecção-dispersão (ADE) (BEAR, 1972):

$$R_k \frac{\partial \hat{C}_k(z,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left( \hat{D}_k \frac{\partial \hat{C}_k(z,t)}{\partial z} \right) - w_k \frac{\partial \hat{C}_k(z,t)}{\partial z} - R_k \lambda \hat{C}_k(z,t) \quad (\text{IV.1})$$

$$\begin{aligned} z_{k-1} < z < z_k \\ k = 1, 2, \dots, N, \quad t > 0 \end{aligned}$$

em que

$\hat{C}$  – concentração dimensional

O problema (IV.1) está sujeito às seguintes condições de contorno (LEIJ *et al.*, 1991):

$$z = z_{k-1} \quad (\text{IV.2.a})$$

$$\hat{C}_k = \hat{C}_{k-1} \quad (\text{IV.2.b})$$

$$\hat{D}_k \varepsilon_k \frac{\partial \hat{C}_k}{\partial z} = \hat{D}_{k-1} \varepsilon_{k-1} \frac{\partial \hat{C}_{k-1}}{\partial z} \quad (\text{IV.2.c})$$

$$z = z_k \quad (\text{IV.3.a})$$

$$\hat{C}_k = \hat{C}_{k+1} \quad (\text{IV.3.b})$$

$$\hat{D}_k \varepsilon_k \frac{\partial \hat{C}_k}{\partial z} = \hat{D}_{k+1} \varepsilon_{k+1} \frac{\partial \hat{C}_{k+1}}{\partial z} \quad (\text{IV.3.c})$$

$$z = z_0$$

$$-\hat{D}_1 \frac{\partial \hat{C}_1}{\partial z} + w_1 \hat{C}_1 = w_1 f(t) \quad (\text{IV.4})$$

$$z = z_N$$

$$\frac{\partial \hat{C}_N}{\partial z} = 0 \quad (\text{IV.5})$$

A condição inicial é escrita como:

$$\hat{C} = \hat{C}_{0,k} \quad z_{k-1} < z < z_k, \quad k = 1, 2, \dots, N, \quad t = 0 \quad (\text{IV.6})$$

A condição de contorno (IV.4) assume que o fluxo de massa não é constante, mas sim uma função do tempo. Essa condição, variável no tempo, possibilita uma maior flexibilidade para modelar diversos cenários com diferentes funções de injeção. As condições (IV.2.b, IV.2.c, IV.3.b e IV.3.c) demonstram a continuidade do campo concentração e do fluxo de massa nas interfaces das camadas.

A Equação (IV.1) pode ser reescrita na forma adimensional como:

$$R_k \frac{\partial C_k(Z, \tau)}{\partial \tau} = D_k \frac{\partial^2 C_k(Z, \tau)}{\partial Z^2} - W_k \frac{\partial C_k(Z, \tau)}{\partial Z} - R_k \gamma C_k(Z, \tau) \quad (\text{IV.7})$$

Sendo os grupos adimensionais definidos por:

$$\tau = \frac{D_0 t}{L^{*2}}; Z = \frac{z}{L^*}; C = \frac{\hat{C}}{C_0}; U = \frac{\hat{U}}{U_0} D_z = \frac{\hat{D}_z}{D_0}; W = \frac{L^* w}{D_0}; \gamma = \frac{\lambda L^{*2}}{D_0}; \alpha = \frac{\alpha^*}{L^*} \quad (\text{IV.8})$$

em que os subscritos “\*” identificam as variáveis dimensionais, o subscrito “0” denota os valores de referência dos parâmetros e  $\gamma$  é o decaimento radioativo dimensional a uma taxa constante. O fator de retardamento dimensional e o coeficiente de dispersão são definidos, respectivamente, como:

$$R_d = 1 + \frac{\rho_s K_d}{\varepsilon} \quad (\text{IV.9})$$

$$D = \frac{\alpha_L \cdot q}{\varepsilon} \quad (\text{IV.10})$$

em que

$\rho_s$  – densidade do solo;

$K_d$  – coeficiente de distribuição;

$\alpha_L$  – dispersividade longitudinal.

## **IV.2 – METODOLOGIA DE SOLUÇÃO**

Este trabalho propõe três diferentes soluções para o problema apresentado, a fim de se comparar as diferentes soluções. Foi utilizado, para isso, um caso teste previamente proposto na literatura por LIU *et al.* (1998), sendo os resultados comparados e analisados.

Foi feito um estudo da análise de convergência para as três soluções, sendo feito, ainda, o estudo de um processo de truncamento, a fim de se verificar, dentro de uma tolerância prescrita, o número de termos requeridos por cada solução. Com o intuito de exemplificação, duas diferentes aplicações foram simuladas, considerando-se distintos cenários para a migração de contaminantes no solo.

### **IV.2.1 –SOLUÇÃO A: SOLUÇÃO SEM FILTRO**

Este modelo baseia-se no problema (IV.7), levando-se em conta as seguintes considerações:

- ✓ Não se considera a utilização de um filtro  $f(t)$  para homogeneizar a condição de contorno, ou seja, busca-se uma solução para o problema  $U(z,t)$ , igual ao campo potencial original,  $C(z,t)$
- ✓ A concentração injetada em  $z = 0$  e o fluxo de massa no contorno da primeira camada são funções conhecidas e dependentes do tempo, estando o problema sujeito às seguintes condições de contorno (LEIJ *et al.*, 1991):

$$Z = Z_{k-1} \tag{IV.11.a}$$

$$U_k = U_{k-1} \tag{IV.11.b}$$

$$D_k \varepsilon_k \frac{\partial U_k}{\partial Z} = D_{k-1} \varepsilon_{k-1} \frac{\partial U_{k-1}}{\partial Z} \tag{IV.11.c}$$



$$Z = Z_k \quad (\text{IV.12.a})$$

$$U_k = U_{k+1} \quad (\text{IV.12.b})$$

$$D_k \varepsilon_k \frac{\partial U_k}{\partial Z} = D_{k+1} \varepsilon_{k+1} \frac{\partial U_{k+1}}{\partial Z} \quad (\text{IV.12.c})$$

$$Z = 0$$

$$-D_1 \frac{\partial U_1}{\partial Z} + W_1 U_1 = W_1 f(\tau) \quad (\text{IV.13})$$

$$Z = 1$$

$$\frac{\partial U_N}{\partial Z} = 0 \quad (\text{IV.14})$$

A condição inicial é escrita como:

$$U(Z,0) = C_{o,k}, \quad Z_{k-1} < Z < Z_k, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (\text{IV.15})$$

O problema formulado pela equação diferencial (IV.7) pode ser resolvido através da utilização da Técnica da Transformada Integral Generalizada – GITT. Segundo esse método, que faz uso de uma expansão em série de autofunções ortogonais, a equação diferencial parcial original é transformada em um sistema infinito de equações diferenciais parciais ou ordinárias acopladas. Um truncamento realizado em uma ordem adequada permite a resolução aproximada do sistema finito resultante por uma técnica numérica apropriada.

Para a aplicação da GITT, faz-se necessária, em primeiro lugar, a escolha de um problema auxiliar que contenha o máximo de informações possíveis sobre o problema original. A escolha deste é um compromisso entre a dificuldade de sua resolução e a minimização do esforço computacional para a resolução do sistema diferencial ordinário acoplado, resultante da transformação (COTTA e MIKHAILOV, 1997).

O problema auxiliar escolhido é um problema de Sturm-Liouville, já que gera funções ortogonais, necessárias ao formalismo da determinação dos coeficientes da expansão, para valores discretos de  $\beta_n$  e certos tipos de condições de contorno homogêneas como do tipo *Dirichlet*, *Neumann* ou combinação entre elas (ALMEIDA, 2003):

$$\frac{d}{dZ} \left( D(Z) \frac{d\Psi_n(Z)}{dZ} \right) + \beta_n^2 R(Z) \Psi_n(Z) = 0 \quad (\text{IV.16})$$

em que:

$$Z_{k-1} < Z < Z_k, \quad k = 1, 2, \dots, N$$

$$\Psi_n(Z) = \Psi_{kn}(Z)$$

$$D(Z) = D_k$$

$$R(Z) = R_k$$

As condições de interface e de contorno no problema de autovalor são dadas, respectivamente, por:

$$Z = Z_{k-1}$$

$$\Psi_k = \Psi_{k-1}$$

$$D_k \varepsilon_k \frac{d\Psi_k}{dZ} = D_{k-1} \varepsilon_{k-1} \frac{d\Psi_{k-1}}{dZ} \quad (\text{IV.17})$$

$$Z = Z_k$$

$$\Psi_k = \Psi_{k+1}$$

$$D_k \varepsilon_k \frac{d\Psi_k}{dZ} = D_{k+1} \varepsilon_{k+1} \frac{d\Psi_{k+1}}{dZ} \quad (\text{IV.18})$$

$$Z = 0$$

$$-D_1 \frac{d\Psi_{1n}}{dZ} + W_1 \Psi_{1n} = 0 \quad (\text{IV.19})$$

$$Z = 1$$

$$\frac{d\Psi_{Nn}}{dZ} = 0 \quad (\text{IV.20})$$

Para cada autovalor  $\beta_n$ , tem-se uma autofunção correspondente que satisfaz à Equação (IV.16) e às condições de interface e de contorno (IV.17 –IV.20).

A solução geral para o sistema de autovalores pode ser expressa como (MIKHAILOV *et al.*, 1983):

$$\Psi_{kn}(Z) = \Psi_{kn}(Z_k) \frac{\text{sen} \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z)}{\text{sen} \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k)} + \Psi_{kn}(Z_{k+1}) \frac{\text{sen} \omega_{kn}(Z, Z_k)}{\text{sen} \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k)} \quad (\text{IV.21})$$

$$Z_{k-1} < Z < Z_k, \quad k = 1, 2, \dots, N$$

em que

$$\omega_{kn}(a, b) = \beta_n \sqrt{\frac{R_k}{D_k}} (a - b) \quad (\text{IV.22})$$

$\Psi_{1n}(Z_0)$ ,  $\Psi_{1n}(Z_1)$ ,  $\Psi_{2n}(Z_2)$ , ...,  $\Psi_{Nn}(Z_N)$  são os valores nas interfaces da autofunção correspondente ao autovalor  $\beta_n$ . Utilizando as condições de contorno e de interface, pode-se montar uma equação matricial para a obtenção desses coeficientes.

$$[K(\beta_n)][\Psi_n] = 0 \quad (\text{IV.23})$$

em que

$$[\Psi_n] = [\Psi_{1n}(Z_0) \quad \Psi_{1n}(Z_1) \quad \Psi_{2n}(Z_2) \quad \dots \quad \Psi_{Nn}(Z_N)]^T$$

e

$$[K(\beta_n)] = \begin{bmatrix} a_{0n} & -b_{1n} & 0 & 0 & \dots & 0 \\ -b_{1n} & a_{1n} & -b_{2n} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -b_{2n} & a_{2n} & -b_{3n} & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & -b_{N-1n} & a_{N-1n} & -b_{Nn} \\ 0 & \dots & 0 & 0 & -b_{Nn} & a_{Nn} \end{bmatrix}$$

Os elementos da matriz  $[K(\beta_n)]$  podem ser calculados das condições de interface e de contorno (IV.17 – IV.20):

$$a_n = A_{in} + A_{i+1n}$$

$$b_{in} = B_{in} \quad i = 0, 1, \dots, N,$$

e

$$A_{0n} = \varepsilon_1 w_1, \quad A_{N+1n} = 0$$

$$B_{kn} = \frac{\varepsilon_k \beta_n \sqrt{R_k D_k}}{\text{sen } \omega_{kn}(z_{k+1}, z_k)}$$

e

$$A_{kn} = B_{kn} \cos \omega_{kn}(z_{k+1}, z_k)$$

Para se obter uma solução não trivial do sistema representado pela Equação (IV.23), o determinante  $[K(\beta_n)]$  precisa ser igual a zero. Logo,  $|K(\beta_n)| = 0$ .

Obtendo-se os coeficientes, uma forma de se calcular, eficientemente, os autovalores e autofunções e que foi utilizada por Liu *et al.* (1998), é através de um algoritmo denominado método da contagem de sinal. Uma forma alternativa e que foi utilizada para este trabalho, é utilizar um algoritmo implementado na sub-rotina DSLEIG da biblioteca numérica do ISML, que utiliza o método de tiros múltiplos (PRUESS e FULTON, 1993) para marchar no espaço da primeira condição de contorno do problema de Sturm-Liouville em direção ao último contorno. É feita uma iteração sobre o autovalor calculado até que a segunda condição de contorno seja satisfeita.

As idéias originais da sub-rotina DSLEIG foram concebidas por BAILEY (1966) e, futuramente, desenvolvidas por BAILEY (1976) e BAILEY (1978). Essa sub-rotina foi desenvolvida para trabalhar com condições de contorno separadas ou acopladas e com casos que envolvam a classificação de pontos de intervalo da equação diferencial, fornecendo informações tanto quantitativas como qualitativas sobre as propriedades de problemas de Sturm-Liouville. DSLEIG é uma sub-rotina eficiente para computação de autofunções e autovalores para problemas de Sturm-Liouville com valor de contorno.

Definindo-se os autovalores e autofunções, parte-se para a definição do par transformada-inversa que é uma consequência direta da propriedade da ortogonalidade (Anexo A) das autofunções oriundas do problema auxiliar. A transformada integral é:

$$\begin{aligned}\overline{U}_n(\tau) &= \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) R(Z) \Psi_n(Z) U(Z, \tau) dZ \\ &= \frac{1}{N_n^{1/2}} \sum_{k=1}^N \varepsilon_k R_k \int_{Z=0}^1 \Psi_{kn}(Z) U(Z, \tau) dZ\end{aligned}\quad (\text{IV.24})$$

e a fórmula da inversa é:

$$U(Z, \tau) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{N_n^{1/2}} \Psi_n(Z) \overline{U}_n(\tau) \quad (\text{IV.25.a})$$

A norma pode ser calculada através da equação abaixo:

$$\begin{aligned}N_n &= \sum_{k=1}^N \frac{\varepsilon_k \sqrt{R_k D_k}}{2\beta_n} \frac{\Psi_{kn}^2(Z_k) + \Psi_{kn}^2(Z_{k+1})}{\text{sen}^2 \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k)} (\omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k) - \\ &\text{sen} \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k) \cos \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k)) + \\ &\sum_{k=1}^N \frac{\varepsilon_k \sqrt{R_k D_k}}{\beta_n} \frac{\Psi_{kn}(z_k) + \Psi_{kn}(z_{k+1})}{\text{sen}^2 \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k)} (\text{sen} \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k) - \\ &\omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k) \cos \omega_{kn}(Z_{k+1}, Z_k)) \quad n = 1, 2, \dots, \infty\end{aligned}\quad (\text{IV.26})$$

Do ponto de vista computacional, a transformada inversa (IV.25.a) é truncada em um termo L, suficientemente grande para produzir uma boa acurácia. Pode-se reescrever a Equação (IV.25.a) como:

$$U(Z, \tau) = \sum_{n=1}^L \frac{1}{N_n^{1/2}} \Psi_n(Z) \overline{U}_n(\tau) \quad (\text{IV.25.b})$$

A Equação (IV.25.b) envolve  $\overline{U}_n(\tau)$  potenciais transformados ( $n = 1, 2, 3, \dots, L$ ), que podem ser determinados a partir da transformação integral da Equação (IV.7).

Para derivar  $\overline{U}_n(\tau)$ , aplica-se o operador  $\int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z) \Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} dZ$  na Equação (IV.7) a fim de se obter:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) \Psi_n(Z) R(Z) \frac{\partial U}{\partial \tau} dZ \\
&= \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) \Psi_n(Z) \frac{\partial}{\partial Z} \left( D(Z) \frac{\partial U}{\partial Z} \right) dZ - \\
& \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) \Psi_n(Z) W(Z) \frac{\partial U}{\partial Z} dZ - \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) \Psi_n(Z) R(Z) \gamma U(\tau) dZ \quad (IV.27)
\end{aligned}$$

O lado esquerdo da Equação (IV.27) é igual a  $(d\bar{U}_n(\tau)/d\tau)$  da definição da transformada integral (IV.24). O primeiro termo do lado direito da Equação (IV.27) pode ser integrado por partes. Pode-se reescrever a Equação (IV.27) como:

$$\begin{aligned}
\frac{d\bar{U}_n(\tau)}{d\tau} &= -\beta_n^2 \bar{U}_n(\tau) - \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z) \Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} W(Z) \frac{\partial U}{\partial Z} dZ - \gamma \bar{U}_n(\tau) + \\
f(\tau) \frac{\varepsilon(Z_0) \Psi_n(Z_0)}{N_n^{1/2}} \quad n &= 1, 2, \dots, L \quad (IV.28)
\end{aligned}$$

O termo fonte é definido como:

$$g_n(\tau) = f(\tau) \frac{\varepsilon(Z_0) \Psi_n(Z_0)}{N_n^{1/2}} \quad n = 1, 2, \dots, L \quad (IV.29)$$

Utilizando a fórmula inversa (IV.25.a), pode-se reescrever o segundo termo do lado direito da Equação (IV.28), obtendo-se:

$$\frac{d\bar{U}_n(\tau)}{d\tau} + \sum_{r=1}^{\infty} A_{nr} \bar{U}_r(\tau) = g_n(\tau) \quad n = 1, 2, \dots, L \quad (IV.30)$$

em que

$$A_{nr} = \beta_n^2 \delta_{nr} + \frac{1}{N_n^{1/2} N_r^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) W(Z) \Psi_n(Z) \frac{d\Psi_r(Z)}{dZ} dZ \quad (IV.31)$$

Os coeficientes da matriz (IV.31) foram obtidos através do *Mathematica* e, posteriormente, implementados em FORTRAN, encontrando-se detalhadamente descritos no Anexo B.

Da mesma forma, transforma-se a condição inicial do problema, Equação (IV.15), para se obter:

$$\overline{U}_n(0) = \sum_{k=1}^N \frac{C_{0,k}}{N_n^{1/2}} \varepsilon_k R_k \int_{Z_{k-1}}^{Z_k} \Psi_{kn}(Z) dZ \quad (IV.32)$$

## **IV 2.2 – SOLUÇÃO B: SOLUÇÃO COM FILTRO**

As mesmas hipóteses consideradas para a obtenção da solução A são, aqui, consideradas, sendo que, para obtenção desta solução, aplica-se ao problema original a utilização de um filtro  $f(\tau)$ . O filtro é um artifício matemático e baseia-se na idéia de eliminar ou, ao menos, reduzir a influência do termo fonte no problema. É uma técnica que consiste em filtrar o potencial através de uma função adequada que torne homogêneas as condições de contorno. Reescreve-se, então, o potencial original, como:

$$C(Z, \tau) = U(Z, \tau) = f(\tau) \quad (IV.33)$$

em que  $U(Z, \tau)$  corresponde á solução do problema homogêneo e  $f(\tau)$  é o filtro utilizado.

Reescrevendo-se a Equação original (IV.7) com filtro, tem-se:

$$R_k \frac{\partial U_k(Z, \tau)}{\partial \tau} = \frac{\partial}{\partial Z} \left( D_k \frac{\partial U_k(Z, \tau)}{\partial Z} \right) - W_k \frac{\partial U_k(Z, \tau)}{\partial Z} - R_k \gamma U_k(Z, \tau) - R_k \gamma f(\tau) - R_k \frac{df(\tau)}{d\tau} \quad (IV.34)$$

Note-se que os dois últimos termos do lado direito da equação (IV.34) surgem devido à existência do filtro.

As condições de contorno para esse problema tornam-se:

$$Z = Z_{k-1} \quad (\text{IV.35.a})$$

$$U_k = U_{k-1} \quad (\text{IV.35.b})$$

$$D_k \varepsilon_k \frac{\partial U_k}{\partial Z} = D_{k-1} \varepsilon_{k-1} \frac{\partial U_{k-1}}{\partial Z} \quad (\text{IV.35.c})$$

$$Z = Z_k \quad (\text{IV.36.a})$$

$$U_k = U_{k+1} \quad (\text{IV.36.b})$$

$$D_k \varepsilon_k \frac{\partial U_k}{\partial Z} = D_{k+1} \varepsilon_{k+1} \frac{\partial U_{k+1}}{\partial Z} \quad (\text{IV.36.c})$$

$$Z = 0$$

$$-D_1 \frac{\partial U_1}{\partial Z} + W_1 U_1 = 0 \quad (\text{IV.37})$$

$$Z = 1$$

$$\frac{\partial U_N}{\partial Z} = 0 \quad (\text{IV.38})$$

A condição inicial é escrita como:

$$U_k(Z, 0) = C_{o,k} - f(0), \quad Z_{k-1} < Z < Z_k, \quad k = 1, 2, \dots, N \quad (\text{IV.39})$$

Define-se o mesmo par de transformada-inversa da solução anterior, sendo a transformada integral

$$\begin{aligned} \overline{U}_n(\tau) &= \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z) R(Z) \Psi_n(Z) U(Z, \tau) dZ \\ &= \frac{1}{N_n^{1/2}} \sum_{k=1}^N \varepsilon_k R_k \int_{Z=0}^1 \Psi_{kn}(Z) U(Z, \tau) dZ \end{aligned} \quad (\text{IV.40})$$

e a fórmula da inversa

$$U(Z, \tau) = \sum_{n=1}^L \frac{1}{N_n^{1/2}} \Psi_n(Z) \overline{U}_n(\tau) \quad (\text{IV.41})$$

Da mesma forma que a Equação (IV.25.b), a Equação (IV.41) envolve  $\overline{U}_n(\tau)$  potenciais transformados ( $n = 1, 2, 3, \dots, L$ ), que podem ser determinados a partir da



solução da Equação (IV.34). Aplicando-se o operador  $\int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} dZ$  na Equação

(IV.34) obtém-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z)\Psi_n(Z)R(Z) \frac{\partial U}{\partial \tau} dZ \\
&= \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z)\Psi_n(Z) \frac{\partial}{\partial Z} \left( D(Z) \frac{\partial U}{\partial Z} \right) dZ - \\
& \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z)\Psi_n(Z)W(Z) \frac{\partial U}{\partial Z} dZ - \frac{\gamma}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z)\Psi_n(Z)R(Z)U dZ - \\
& \frac{\gamma}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z)\Psi_n(Z)R(Z)f(\tau) dZ - \frac{1}{N_n^{1/2}} \int_{Z=0}^1 \varepsilon(Z)R(Z)\Psi_n(Z) \frac{df(\tau)}{d\tau} dZ \quad (IV.42)
\end{aligned}$$

O lado esquerdo da Equação (IV.42) é igual a  $(d\overline{U}_n(\tau)/d\tau)$  da definição da transformada integral (IV.40). O primeiro termo do lado direito da Equação (IV.42) pode ser integrado por partes. Pode-se reescrever a Equação (IV.42) como:

$$\begin{aligned}
\frac{d\overline{U}_n(\tau)}{d\tau} &= -\beta_n^2 \overline{U}_n(\tau) - \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} W(Z) \frac{\partial U}{\partial Z} dZ - \\
\gamma \overline{U}_n(\tau) - \gamma \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} U_n(\tau) dZ &- \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} R(Z) \frac{df(\tau)}{d\tau} dZ - \\
\gamma \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} R(Z) f(\tau) dZ & \quad n = 1, 2, \dots, L \quad (IV.43)
\end{aligned}$$

O termo fonte é definido como:

$$\begin{aligned}
g_n(\tau) &= - \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} R(Z) \frac{df(\tau)}{d\tau} dZ - \\
\gamma \int_{Z=0}^1 \frac{\varepsilon(Z)\Psi_n(Z)}{N_n^{1/2}} R(Z) f(\tau) dZ & \quad n = 1, 2, \dots, L \quad (IV.44)
\end{aligned}$$

Utilizando a fórmula inversa (IV.41), pode-se reescrever o segundo termo do lado direito da Equação (IV.43), obtendo-se:

$$\frac{d\overline{U}_n(\tau)}{d\tau} + \sum_{r=1}^{\infty} A_{nr} \overline{U}_r(\tau) = g_n(\tau) \quad n = 1, 2, \dots, L \quad (\text{IV.45})$$

em que  $A_{nr}$  e  $A_{mn}$  possuem o mesmo valor da solução anterior.

Transformando-se também a condição inicial, tem-se:

$$\overline{U}_n(0) = \sum_{k=1}^N \frac{[C_{0,k} - f(0)]}{N_n^{1/2}} \varepsilon_k R_k \int_{Z_{k-1}}^{Z_k} \Psi_{kn}(Z) dZ \quad (\text{IV.46})$$

### **IV.2.3 – SOLUÇÃO C: SOLUÇÃO COM REDUÇÃO DE DOMÍNIO**

Esta solução foi desenvolvida com o intuito de se analisar os potenciais transformados calculados quando se considera, apenas, a região do domínio onde os valores das concentrações não podem ser negligenciados. As mesmas hipóteses da solução anterior foram, aqui, consideradas.

Para começar a resolver o problema, em vez de se considerar o domínio total, considera-se o número de camadas  $N = 1$ , quando a concentração inicial em todas as camadas é igual a zero,  $C_0 = 0$ , ou  $N = N_k + 1$ , para o caso em que se considera uma concentração inicial diferente de zero na camada  $N_k$ . Inicia-se, então, a integração temporal até o tempo desejado,  $\tau_f$ . A sub-rotina DIVPAG permite que se acompanhe o processo de integração, bastando, para isso, que se escolha um valor de PARAM(7) diferente de zero.

Para cada valor de  $\tau < \tau_f$ , é feito um teste no contorno de  $N$ ,  $z_N$ , onde se calcula a concentração. Caso esta seja menor do que uma tolerância prescrita, continua-se a integração para calcular os potenciais transformados, armazenando o valor dos mesmos para que possam ser usados posteriormente quando uma nova camada for atribuída e um novo cálculo de potenciais for feito. Caso contrário, a integração é interrompida e os últimos valores calculados dos potenciais transformados são descartados. Considera-se, então, um novo problema em que uma nova camada é atribuída, fazendo-se  $N = N + 1$ . As autofunções, normas e autovalores do novo

problema são calculados, bem como os coeficientes da matriz A do sistema diferencial. A condição inicial dos novos potenciais transformados em  $\tau = \tau'$  é obtida a partir da transformação integral da solução do problema anterior, sendo dada pela expressão:

$$\begin{aligned} \overline{U}_n(\tau') &= \frac{1}{N_n^{1/2}} \sum_{j=1}^N \int_{Z=0}^{Z_{N-1}} \frac{\varepsilon(Z)R(Z)}{N_j^{*1/2}} \Psi_n(Z) \Psi_j^*(Z) \overline{U}_j^*(\tau') dZ \\ &- f(\tau') \frac{\varepsilon_N R_N}{N_n^{1/2}} \int_{Z=Z_{N-1}}^{Z_N} \Psi_n(Z) dZ \end{aligned} \quad (\text{IV.47})$$

em que o sobrescrito “\*” é usado para referenciar as autofunções, normas e potenciais transformados utilizados em  $\tau < \tau'$ . A solução C pode ser melhor representada através do fluxograma abaixo:

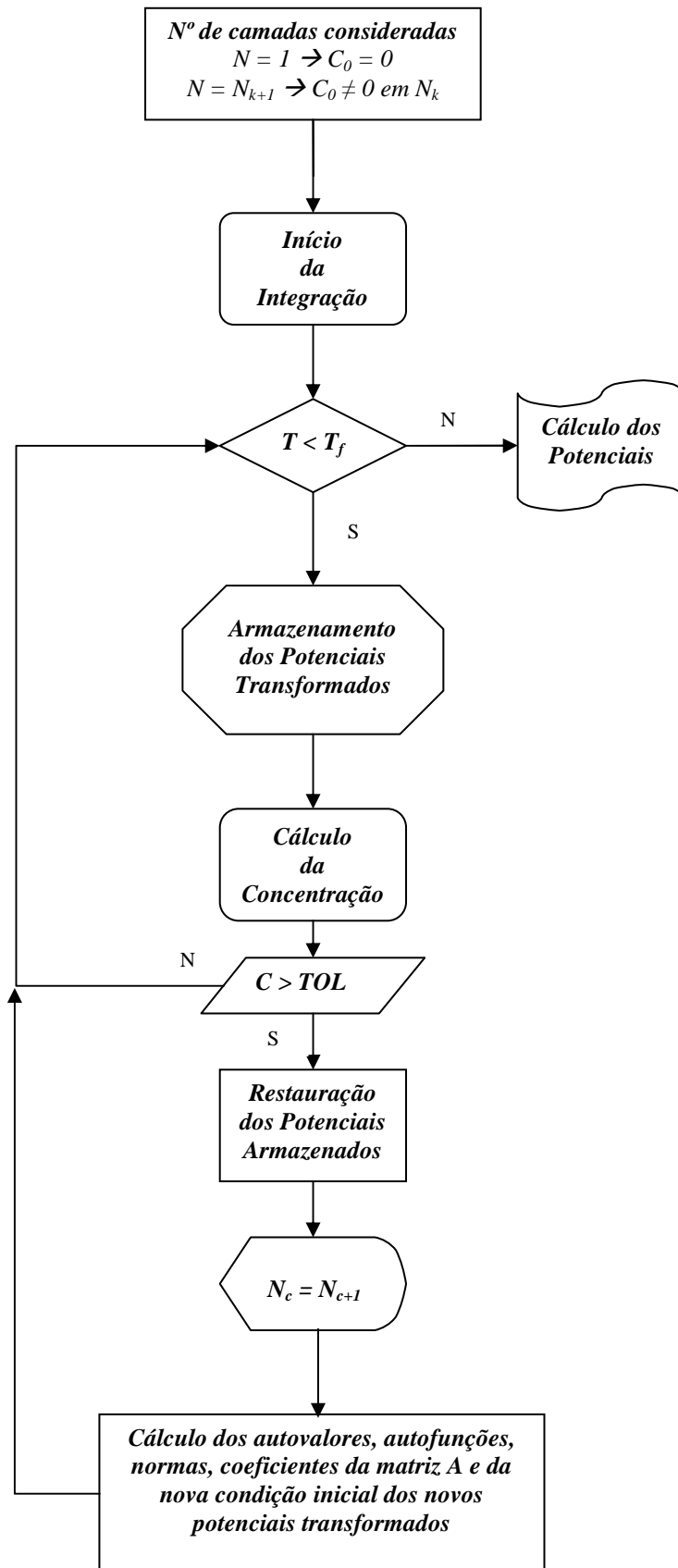


Figura 4.2: Fluxograma sintetizador da solução C.

#### **IV.2.4 – SOLUÇÃO NUMÉRICA**

O sistema de equações diferenciais ordinárias truncado pode ser numericamente resolvido através de diferentes ferramentas, dependendo do tipo de problema considerado. Para um problema com valor inicial, enfoque deste estudo, a integração numérica pode ser obtida através da sub-rotina DIVPAG, incorporada na biblioteca do ISML (IMSL MATH/LIBRARY,1991). Essa sub-rotina oferece uma interessante combinação de controle de acurácia, simplicidade de uso e confiabilidade (COTTA e MIKHAILOV, 1997).

#### **IV.2.5 – PROCESSO DE TRUNCAMENTO**

A resolução de um sistema de equações diferenciais ordinárias, sob um ponto de vista numérico, somente é possível com uma versão truncada do sistema. O simples truncamento do sistema numa determinada tolerância prescrita pelo usuário pode não ser totalmente eficiente, uma vez que a série global resultante pode conter termos da solução que não são importantes para se obter uma convergência e desprezar combinações de outros autovalores que podem ter importante influência para o cálculo dos potenciais transformados, sendo fundamentais para a aceleração da convergência (BARROS, 2004).

Sendo assim, torna-se bastante relevante estabelecer um critério de truncamento para a solução por expansão de autofunções que selecione somente os termos mais relevantes para a convergência da série na precisão requerida. Esse procedimento é de extrema importância para casos multidimensionais, já que se tem um grande espectro de combinações de autovalores e a seleção inapropriada dos mesmos pode levar a resultados com falsa convergência (BARROS, 2004).

Analisa-se o processo de truncamento, a fim de se verificar o número de termos requeridos, para a obtenção de cada solução, dentro da tolerância desejada de  $10^{-4}$ .

#### IV.2.5.1 – CRITÉRIO DE CONTROLE DE ERRO: PROCEDIMENTO ADAPTATIVO

O procedimento adaptativo (COTTA & MIKHAILOV, 1997) permite o desenvolvimento de algoritmos com controle automático do erro global, através de seleção adaptativa da ordem de truncamento das fórmulas de inversão, o que reduz sensivelmente o tempo de CPU. Considere-se a escolha de um valor inicial superestimado para a ordem de truncamento  $N$  do problema de valor inicial ordinário transformado. Efetua-se, então, a primeira integração numérica sobre o intervalo  $t_0$  a  $t_1$ , onde  $t_0$  corresponde ao início do processo e  $t_1$  é o primeiro estágio a ser alcançado.

A natureza analítica da fórmula de inversão permite a utilização de procedimentos de verificação direta sobre cada posição dentro do meio em que uma solução é desejada. Assim sendo, a ordem de truncamento  $N$  pode ser reduzida, gradualmente, até o menor valor  $N^*$  que satisfaça o seguinte critério de convergência:

$$\eta = \max_{z \in V} \left| \frac{\sum_{i=N^*}^N \tilde{\psi}_i(z) \bar{C}_i(t)}{C_s(z; t) + \sum_{i=1}^N \tilde{\psi}_i \bar{C}_i(t)} \right| \quad (\text{IV.48})$$

em que  $\eta$  corresponde à tolerância prescrita para o erro relativo global da solução (fórmula de inversão); o domínio espacial  $V$  corresponde ao conjunto de pontos onde se deseja calcular as soluções. Enquanto não for encontrado um inteiro  $N^*$  menor do que  $N$  e que satisfaça o critério acima, este deverá ser incrementado à última integração numérica repetida e um novo  $N^*$  deverá ser procurado. Após a redução de  $N$  ao valor  $N^*$ , a integração numérica do próximo intervalo,  $t_1$  a  $t_2$ , sendo  $t_1 < t_2$ , envolverá um sistema truncado de menor ordem, respeitando-se a precisão requerida para a solução final. Na seqüência, um novo  $N^*$  deverá ser encontrado, o valor de  $N$  ajustado para  $N^*$  e a integração numérica do intervalo seguinte efetuada. Este ciclo se repete até a obtenção da solução para o último tempo desejado. O procedimento adaptativo torna-se mais eficiente à medida que se marcha no tempo físico, quando um número cada vez menor de termos é necessário para atingir a convergência da fórmula de inversão.

### IV.3 – RESULTADOS PRELIMINARES

Com o objetivo de se comparar as três soluções propostas, um caso teste proposto por Liu *et al.* (1998) foi escolhido. Esse caso constitui-se de três camadas com propriedades definidas na tabela abaixo:

Tabela 4.1: Valores das propriedades de cada camada.  
O coeficiente de dispersão ( $D_z$ ) é dado em  $\text{cm}^2/\text{s}$  e a velocidade de poro ( $w$ ), em  $\text{cm}/\text{s}$ .

<b>Camada_1 (<math>z = 0</math> a <math>100</math> cm)</b>	
$R_1$	1
$D_1$	0,1
$\varepsilon_1$	0,34
$w_1$	0,002
<b>Camada_2 (<math>z = 100</math> a <math>200</math> cm)</b>	
$R_2$	1
$D_2$	0,15
$\varepsilon_2$	0,15
$w_2$	0,0045
<b>Camada_3 (<math>z = 200</math> a <math>300</math> cm)</b>	
$R_3$	1
$D_3$	0,1
$\varepsilon_3$	0,68
$w_3$	0,001

As soluções foram implementadas na linguagem computacional FORTRAN-90, sendo os resultados, obtidos pelos programas gerados, comparados aos obtidos na literatura (LIU *et al.*, 1998), a fim de verificar-se os programas criados. Para esta verificação, fez-se uso da solução B, já que esta é uma cópia fiel da solução proposta por Liu *et al.* (1998), ressaltando-se que a única diferença existente entre as duas soluções é que o autor resolve o sistema diferencial ordinário analiticamente, enquanto que a solução B, proposta neste trabalho, resolve este sistema numericamente, através da DIVPAG, como mencionado anteriormente. Além dos valores das propriedades de cada camada, estabelecidos na Tabela 4.1, considera-se a concentração inicial em cada

camada igual a zero, o filtro  $f(t)$  igual a um, além de não se considerar o decaimento radioativo.

A Figura 4.3 mostra a distribuição de concentração relativa ao longo das três camadas consideradas para tempos pré-determinados.

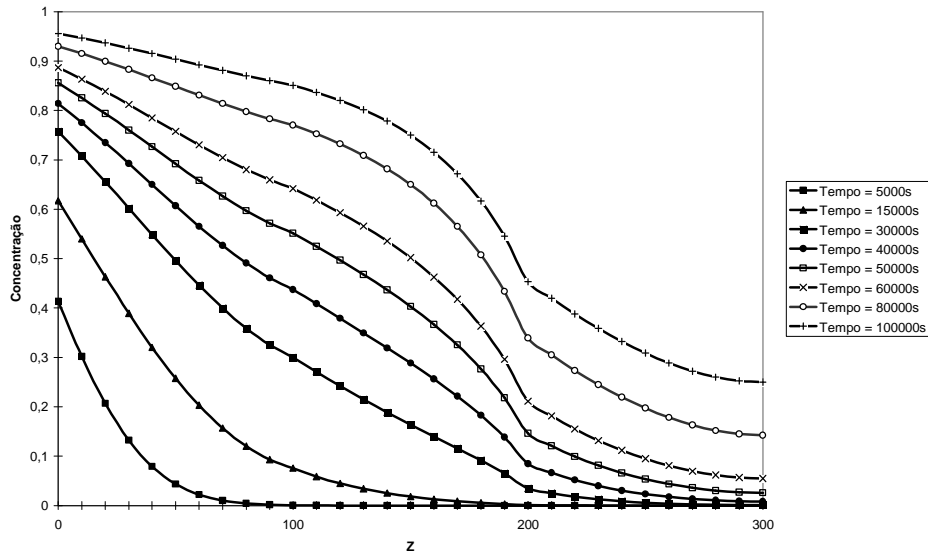


Figura 4.3: Distribuição da concentração relativa ( $C/C_0$ ) em um meio poroso composto por três camadas.

Para que os resultados simulados reproduzam fielmente os resultados obtidos por Liu *et al.* (1998), fez-se necessário utilizar valores de tempo de  $0.5 \times 10^4$  a  $10 \times 10^4$  s, enquanto que Liu *et al.* (1998) utilizam valores de tempo de  $0.5 \times 10^5$  a  $10 \times 10^5$  s. Para garantir a certeza quanto aos valores gerados por este trabalho, uma comparação foi feita entre os valores obtidos por Liu *et al.* (1998) e os valores obtidos pela solução B. Fez-se uso de um programa capaz de digitalizar os valores do gráfico proposto por Liu *et al.* (1998), obtendo-se, assim, os valores numéricos do gráfico em questão, sendo, então, possível sobrepor os resultados gerados por Liu *et al.* (1998) e pela solução B, proposta neste trabalho (Figura 4.4).



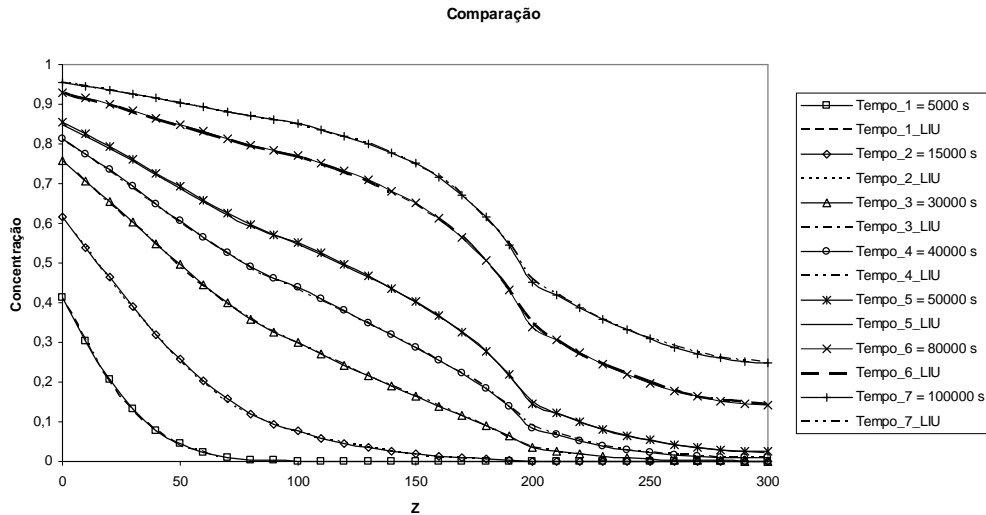


Figura 4.4: Comparação dos resultados obtidos por Liu *et al.* (1998) e pela solução B.

Através da Figura 4.4, pode-se perceber que os tempos gerados pelo autor e pela solução B equivalem-se. Isso mostra que, realmente, existiu um engano por parte do autor em relação à grandeza do tempo, já que todas as curvas mostram-se coincidentes.

#### **IV.3.1 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO A**

A fim de se verificar as soluções propostas, um caso-teste, previamente publicado na literatura (Liu *et al.*, 1998), foi escolhido. Considera-se a concentração inicial em cada camada,  $C_0$ , igual a zero e a inexistência de decaimento radioativo,  $\lambda$ . É importante ressaltar que a tolerância utilizada para o cálculo das autofunções é de  $5 \times 10^{-7}$ , enquanto que a tolerância utilizada pela sub-rotina DIVPAG é igual a  $10^{-7}$ .

As Figuras 4.5 a 4.8 mostram o comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para tempos pré-determinados, para a solução em questão. Pode-se perceber que, apesar de bem ordenada, a solução mostra-se pouco convergente. Percebe-se, ainda, de acordo com a Figura 4.9, que a convergência mantém-se constante à medida que o tempo aumenta.

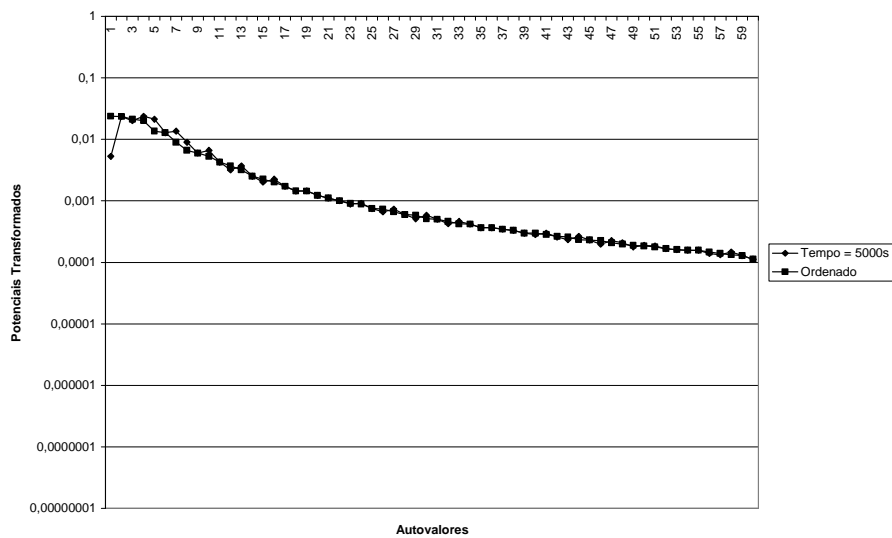


Figura 4.5: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 5000 s – Solução A.

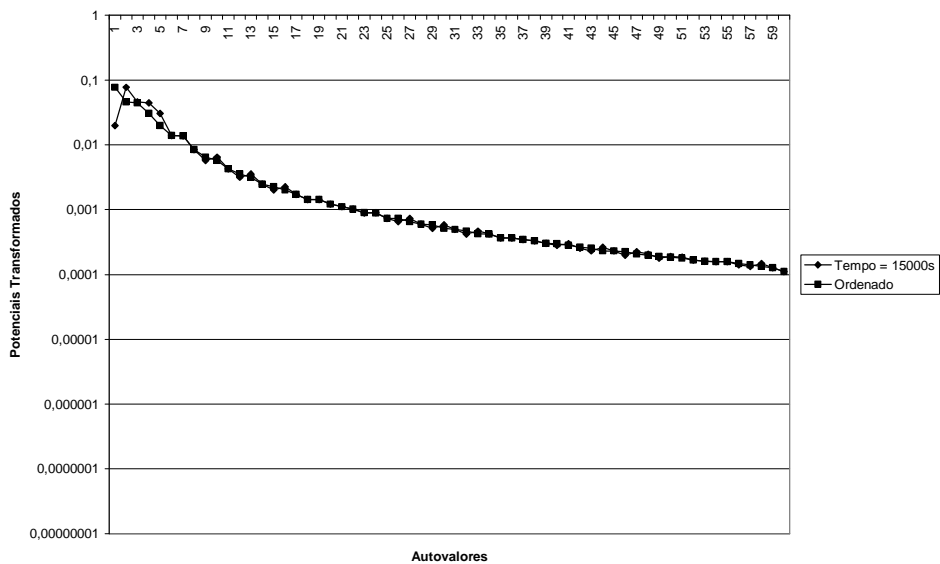


Figura 4.6: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 15000 s – Solução A.

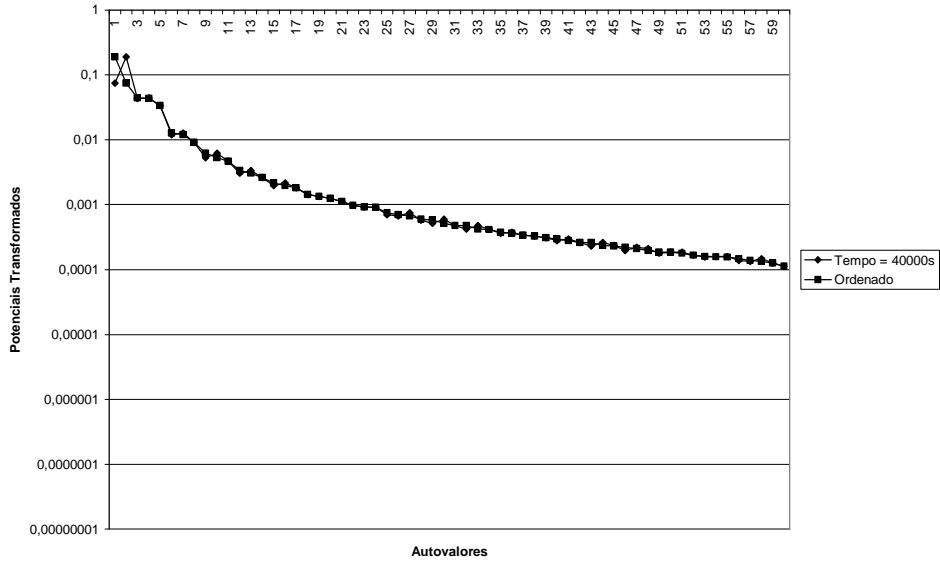


Figura 4.7: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 40000 s – Solução A.

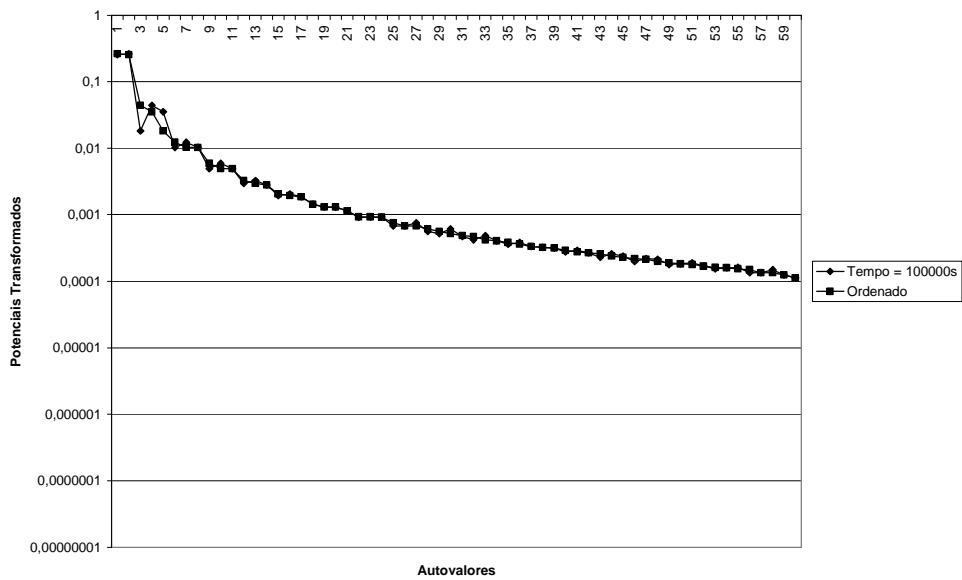


Figura 4.8: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 100000 s – Solução A.

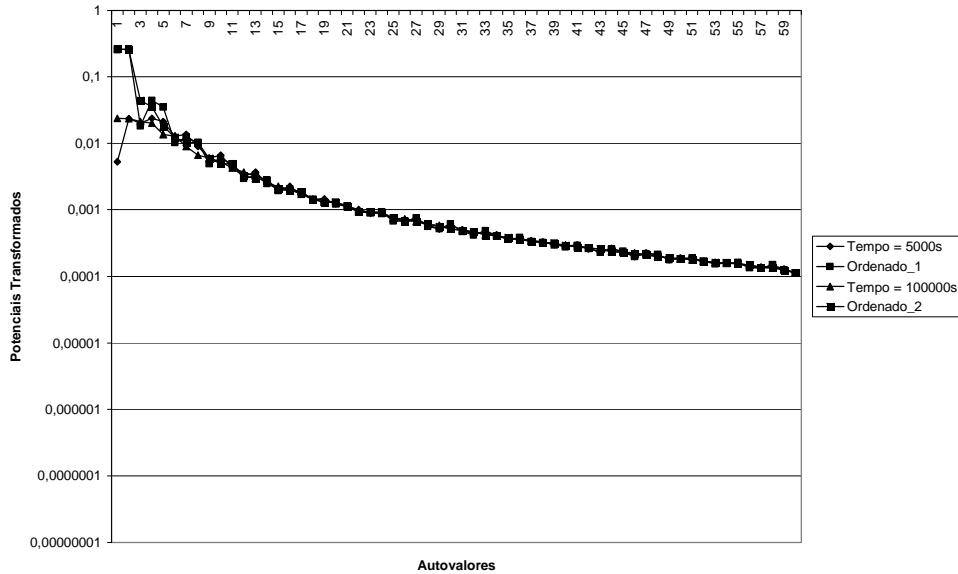


Figura 4.9: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para os tempos de 5000 s e 100000 s – Solução A.

### **IV.3.2 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO B**

Para o desenvolvimento desta segunda solução, são feitas as mesmas considerações da solução anterior. A única diferença encontra-se na utilização de um filtro que, para o estudo em questão, é igual a um,  $f(t) = 1$ .

As Figuras 4.10 a 4.13 mostram o comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para tempos pré-determinados, para a solução B. É possível perceber que esta solução mostra-se mais desordenada que a solução anterior, porém muito mais convergente. Para os mesmos 60 termos utilizados, a convergência obtida, para a solução em questão, é muito maior que a solução anterior.

Ao comparar-se a Figura 4.13 com a Figura 4.8, por exemplo, percebe-se que, para obter-se um potencial transformado com três casas decimais, a solução B precisa de, apenas, 7 termos, enquanto que a solução A, sem filtro, precisa de 22 termos.

Note-se, ainda, que, com o passar do tempo, a convergência tende a ficar constante, mas, diferentemente da solução anterior, é possível identificar, de acordo com a Figura 4.14, uma notória diferença entre os tempos inicial e final.

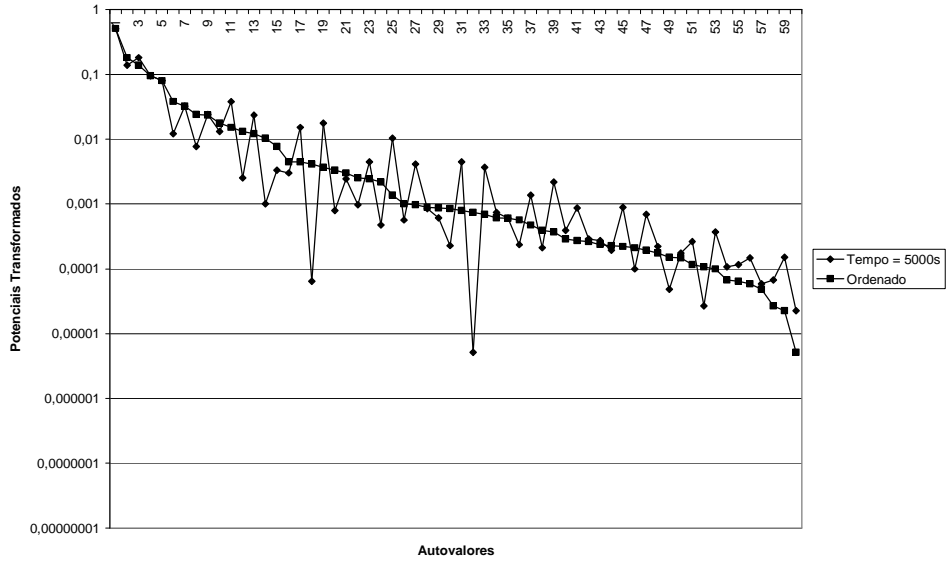


Figura 4.10: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 5000 s– Solução B.

Os potenciais transformados encontram-se desordenados para todos os tempos, característica esta, não encontrada na solução anterior.

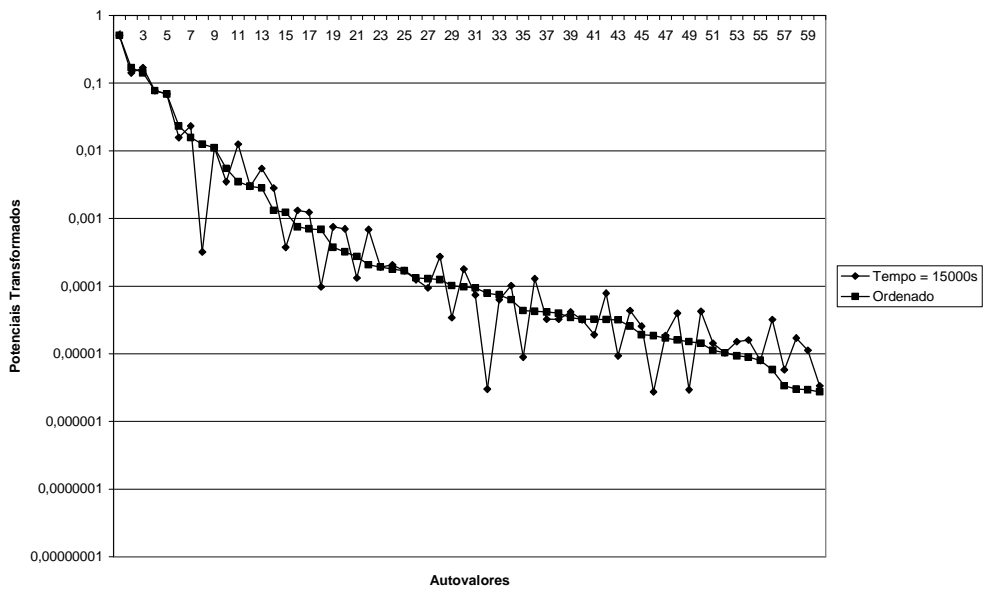


Figura 4.11: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 15000 s – Solução B.

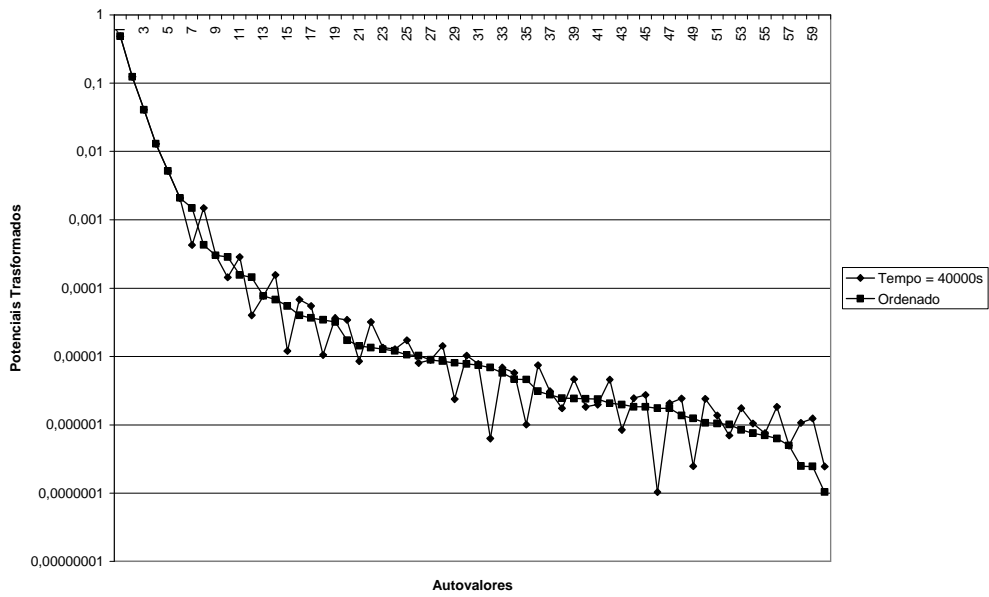


Figura 4.12: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 40000 s – Solução B.

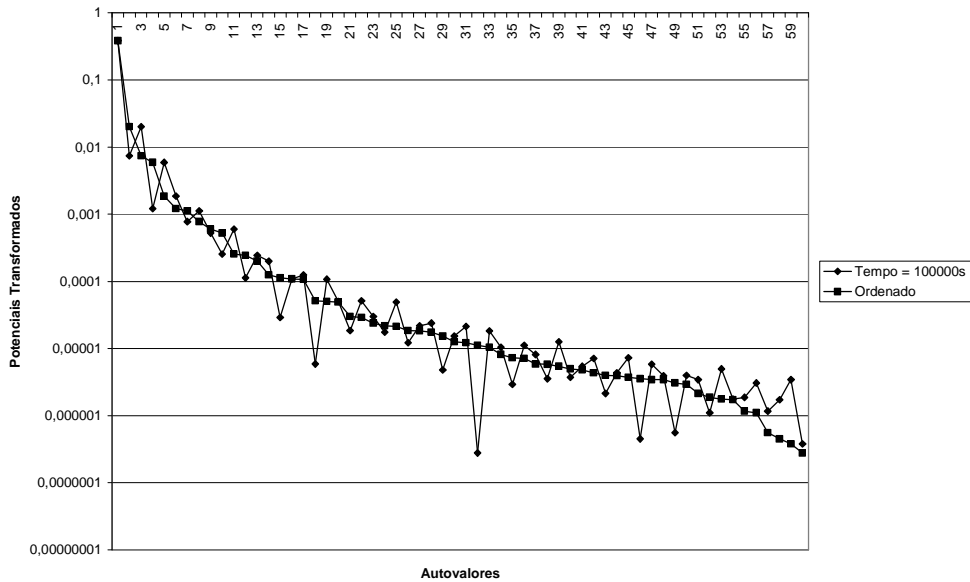


Figura 4.13: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 100000 s – Solução B.

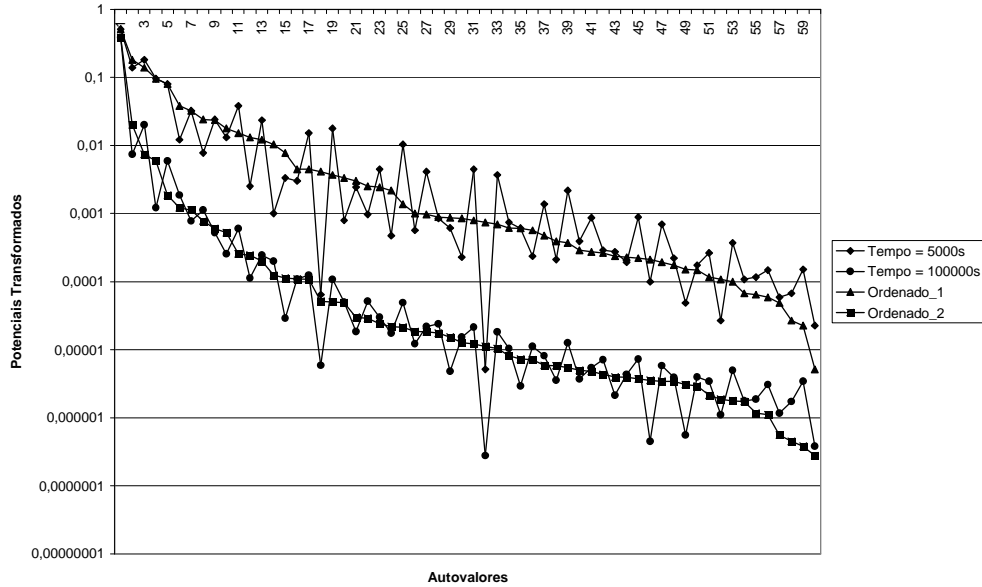


Figura 4.14: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para os tempos de 5000 s e 100000 s – Solução B.

### IV.3.3 – RESULTADOS DA SOLUÇÃO C

O caso-teste utilizado nesta solução identifica-se ao utilizado na solução B, sendo que para esta solução, além das tolerâncias relativas ao cálculo de autofunções e à da sub-rotina DIVPAG, considera-se, ainda, uma tolerância de truncamento igual a  $10^{-7}$ .

As Figuras 4.15 a 4.18 mostram o comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para tempos pré-determinados, para a solução C. Pode-se perceber, comparando as Figuras 4.15 e 4.10 que, logo no primeiro tempo, a solução C mostra-se muito mais convergente e ordenada. Isto porque, para o tempo em questão, uma única camada é considerada, ou seja, o domínio é limitado, o que torna os potenciais calculados muito mais representativos do problema físico. Analisando o tempo seguinte (Figura 4.16), momento em que a frente de contaminação atinge a segunda camada, não se nota o mesmo comportamento. Nesta, os potenciais transformados mostram-se tão desordenados quanto à solução anterior.

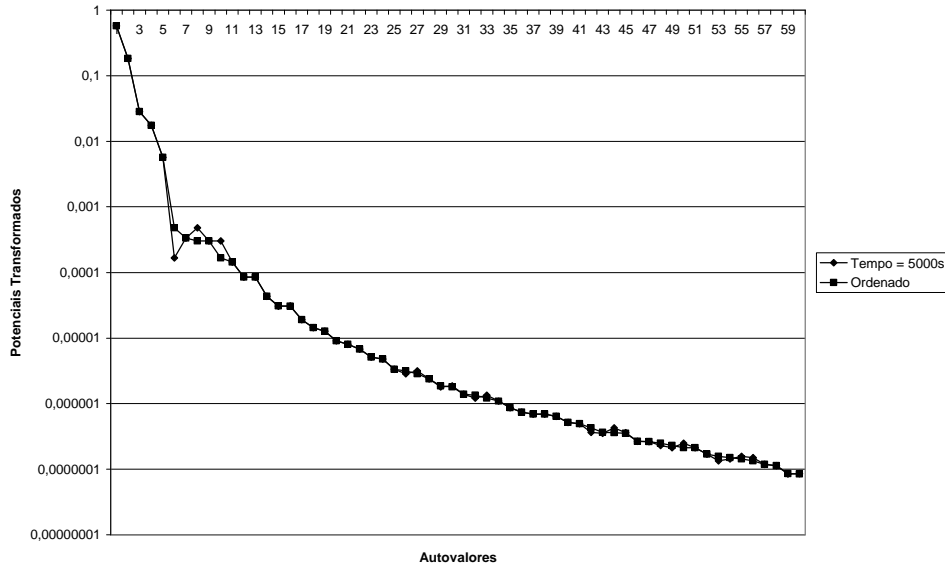


Figura 4.15: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 5000 s – Solução C.

A solução C mostra-se mais convergente que a solução B. Comparando as Figuras 4.16 e 4.11, por exemplo, para um potencial calculado com três casas decimais, a solução C precisa de, apenas, 7 termos, enquanto que a solução B precisa de, aproximadamente, 16 termos.

Diferença notória e válida de se ressaltar pode ser analisada na Figura 4.19, em que os tempos inicial e final são plotados juntos. Diferentemente das soluções anteriores, o último tempo sempre se mostra mais convergente que os iniciais. Característica que não se percebe para esta última solução.

Importante ressaltar que, comparando as Figuras 4.19 e 4.14, o melhor resultado obtido pela solução B, para o tempo igual a 100.000 s, equivale ao pior resultado obtido pela solução C, para o mesmo tempo.



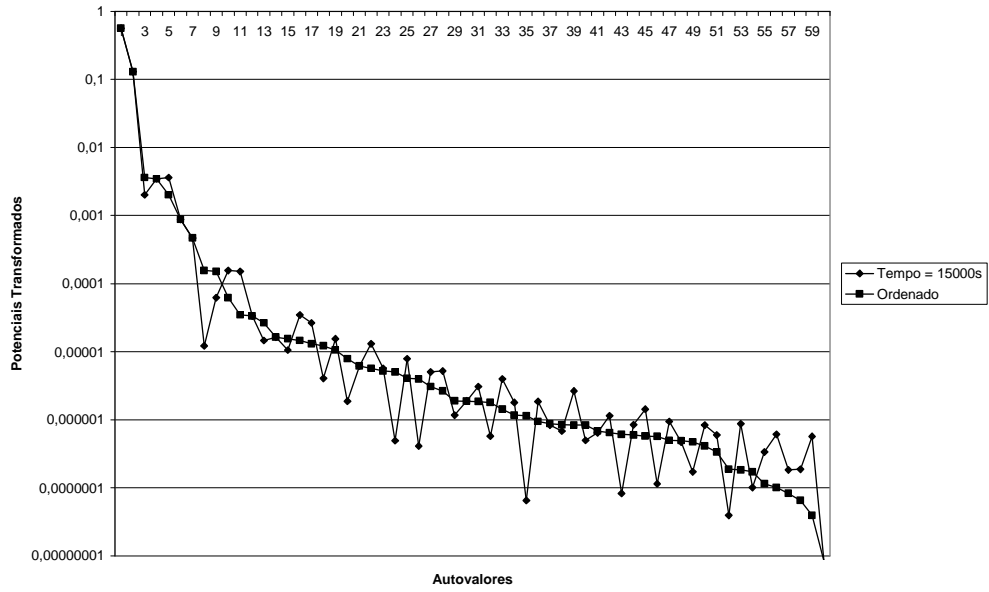


Figura 4.16: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 15000 s – Solução C.

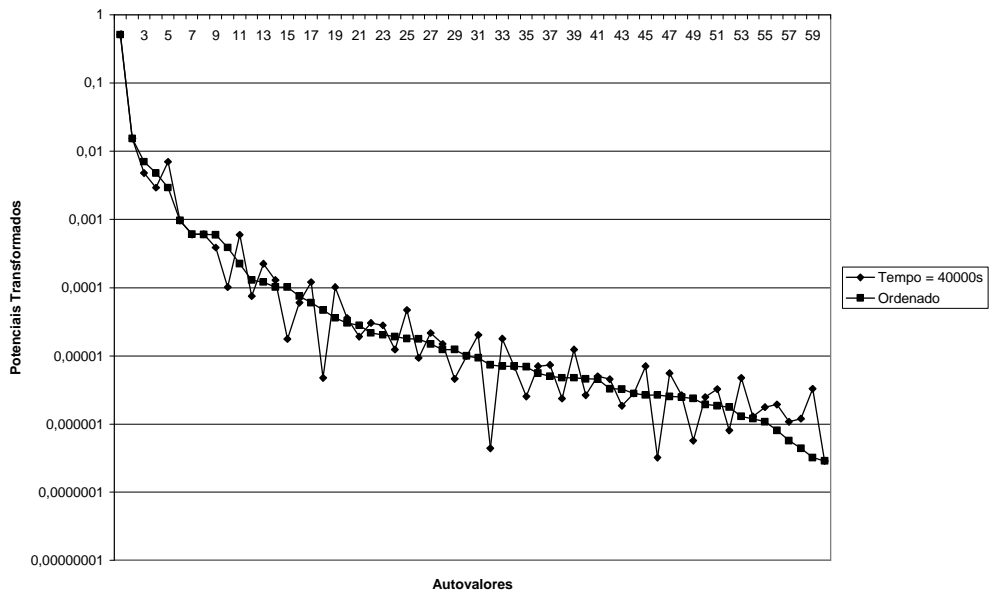


Figura 4.17: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 40000 s – Solução C.

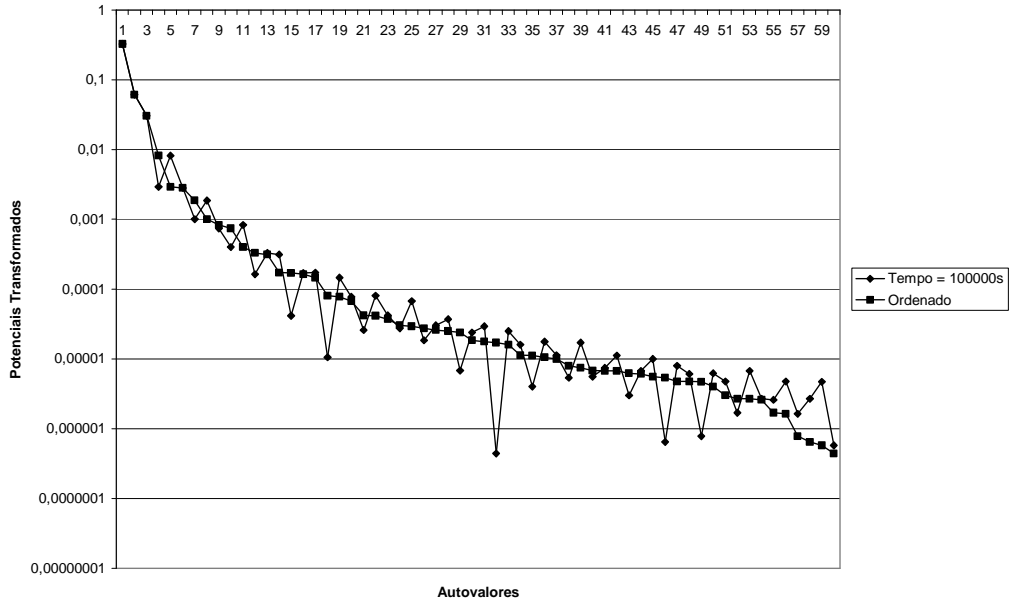


Figura 4.18: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para o tempo de 100000 s – Solução C.

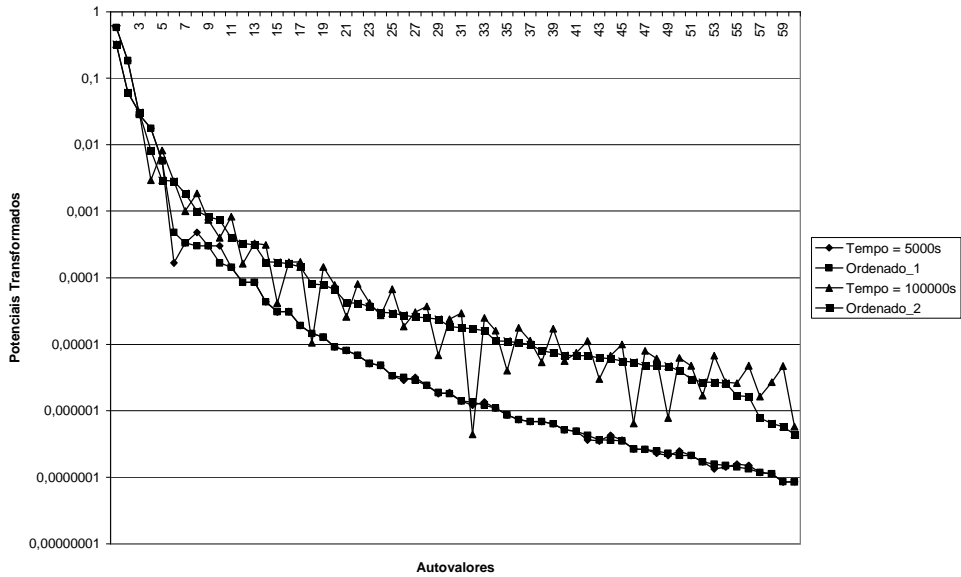


Figura 4.19: Comportamento dos potenciais transformados, ordenados e não ordenados, para os tempos de 5000 s e 100000 s – Solução C.

#### IV.3.4 – ANÁLISE DE CONVERGÊNCIA

As Tabelas 4. 2 a 4.13 mostram a análise de convergência para as soluções A, B e C, respectivamente.

Analisando todas as soluções, de uma maneira geral, é possível perceber o progresso da convergência na medida em que se aumenta a ordem de truncamento da série. Para a solução B, no tempo igual a 15.000 s e Z igual a 120 cm, por exemplo, uma convergência na quarta casa decimal é obtida para um número de termos igual a 15. Já na solução C, para este mesmo tempo e profundidade, uma convergência na quarta casa decimal é conseguida com, apenas, 10 termos. Note-se que a convergência da solução C mostra-se mais acelerada em relação à solução B, utilizando-se, um menor número de termos ao utilizado na solução anterior. Importante ressaltar que, para a primeira solução, solução A, os 100 termos utilizados não são suficientes para que se obtenha convergência em tempo algum.

Esse resultado deve-se ao fato da introdução de um filtro nas soluções B e C. Isto porque, o filtro atua no sentido de homogeneizar as condições de contorno, acelerando, por fim, a convergência. O problema físico da solução A não possui as condições de contorno homogeneizadas e, dessa forma, a convergência é muito mais lenta, já que os valores do potencial ou de sua derivada nos contornos não se anulam como as autofunções que visam representá-lo (ALMEIDA, 2003).

Tabela 4.2: Análise de convergência para a solução A no tempo = 5.000 s.

<b>Z</b>	<b>CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 5000 s</b>					
	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,1402	0,2587	0,3061	0,3596	0,3861	0,3969
60	0,0540	0,0154	0,0220	0,0227	0,0222	0,0219
120	-0,0216	-0,0084	-0,0037	0,0006	0,0005	0,0001
180	0,0180	-0,0066	0,0030	-0,0007	0,0002	0,0001
240	-0,0052	-0,0020	-0,0019	-0,0001	0,0001	0,0000
300	0,0045	-0,0014	0,0015	-0,0001	-0,0001	0,0000

Tabela 4.3: Análise de convergência para a solução A no tempo = 15.000 s.

**CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 15000 s**

<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,2908	0,4396	0,4945	0,5560	0,5863	0,5987
60	0,2030	0,1767	0,1894	0,1967	0,1996	0,2007
120	0,0111	0,0318	0,0381	0,0440	0,0447	0,0447
180	0,0197	-0,0016	0,0083	0,0050	0,0060	0,0059
240	-0,0051	-0,0020	-0,0019	0,0000	0,0002	0,0001
300	0,0040	-0,0012	0,0012	-0,0001	-0,0001	0,0000

Tabela 4.4: Análise de convergência para a solução A no tempo = 50.000 s.

**CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 50000 s**

<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,4851	0,6499	0,7150	0,7853	0,8201	0,8343
60	0,5525	0,5800	0,6097	0,6348	0,6462	0,6508
120	0,3789	0,4310	0,4557	0,4785	0,4876	0,4911
180	0,2233	0,2380	0,2592	0,2655	0,2717	0,2737
240	0,0477	0,0562	0,0590	0,0635	0,0649	0,0654
300	0,0229	0,0217	0,0245	0,0248	0,0253	0,0256

Tabela 4.5: Análise de convergência para a solução A no tempo = 100.000 s.

**CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 100000 s**

<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,5695	0,7386	0,8081	0,8819	0,9186	0,9335
60	0,7365	0,7874	0,8259	0,8600	0,8759	0,8822
120	0,6412	0,7180	0,7551	0,7900	0,8052	0,8111
180	0,4879	0,5394	0,5732	0,5922	0,6048	0,6094
240	0,2589	0,2927	0,3046	0,3195	0,3260	0,3284
300	0,1991	0,2209	0,2310	0,2402	0,2449	0,2469

Tabela 4.6: Análise de convergência para a solução B no tempo = 5.000 s.

<b>CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 5000 s</b>						
<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,4162	0,4122	0,4127	0,4130	0,4130	0,4130
60	0,0224	0,0221	0,0223	0,0222	0,0222	0,0222
120	0,0026	-0,0002	0,0001	0,0002	0,0001	0,0001
180	0,0019	-0,0003	0,0001	0,0000	0,0000	0,0000
240	-0,0003	-0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000
300	0,0005	-0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela 4.7: Análise de convergência para a solução B no tempo = 15.000 s.

<b>CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 15000 s</b>						
<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,6134	0,6164	0,6169	0,6171	0,6171	0,6171
60	0,2082	0,2031	0,2033	0,2031	0,2031	0,2031
120	0,0420	0,0446	0,0453	0,0452	0,0452	0,0452
180	0,0083	0,0055	0,0060	0,0059	0,0059	0,0059
240	-0,0005	0,0000	0,0001	0,0001	0,0001	0,0001
300	0,0006	-0,0001	0,0000	0,0000	0,0000	0,0000

Tabela 4.8: Análise de convergência para a solução B no tempo = 50.000 s.

<b>CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 50000 s</b>						
<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,8628	0,8532	0,8556	0,8555	0,8554	0,8554
60	0,6531	0,6567	0,6582	0,6584	0,6584	0,6584
120	0,5063	0,4930	0,4971	0,4968	0,4967	0,4967
180	0,2653	0,2744	0,2777	0,2767	0,2768	0,2767
240	0,0674	0,0652	0,0664	0,0661	0,0661	0,0661
300	0,0257	0,0255	0,0257	0,0259	0,0259	0,0259

Tabela 4.9: Análise de convergência para a solução B no tempo = 100.000 s.

<b>CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 100000 s</b>						
<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,9703	0,9530	0,9564	0,9559	0,9558	0,9558
60	0,8877	0,8899	0,8923	0,8925	0,8924	0,8924
120	0,8404	0,8157	0,8212	0,8206	0,8205	0,8205
180	0,6021	0,6132	0,6176	0,6163	0,6163	0,6163
240	0,3361	0,3308	0,3326	0,3322	0,3321	0,3321
300	0,2500	0,2492	0,2496	0,2497	0,2497	0,2497

Quando se reduz o domínio utilizado, solução C, um resultado bastante semelhante à solução B, para tempos grandes, é obtido. Porém, para os tempos iniciais, em que o sistema de equações diferenciais ordinárias é resolvido para um domínio reduzido, a convergência na solução C é muito maior que na solução B. Esse fato pode ser percebido, por exemplo, no primeiro passo de tempo, 5000 s, numa profundidade igual a 60 cm, em que a convergência na quarta casa decimal, para a solução B é obtida com trinta termos, enquanto que, na solução C, a mesma convergência é obtida com apenas dez termos. Para um passo de tempo posterior, 15000 s, a uma mesma profundidade, uma convergência na quarta casa decimal é obtida pela solução B com trinta termos, enquanto que o número de termos requeridos pela solução C, para a obtenção da mesma convergência, equivale à metade do número de termos necessários na solução B. Já para o último tempo analisado, 100000 s, os resultados das duas soluções mostram-se bastante parecidos. Para uma profundidade de 60 cm, por exemplo, os mesmos resultados são obtidos a partir de dez termos.

Tabela 4.10: Análise de convergência para a solução C no tempo = 5.000 s.

<b>CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 5000 s</b>						
<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,4127	0,4130	0,4130	0,4130	0,4130	0,4130
15	0,2525	0,2519	0,2519	0,2518	0,2518	0,2518
30	0,1327	0,1325	0,1325	0,1325	0,1325	0,1325
45	0,0593	0,0592	0,0592	0,0592	0,0592	0,0592
60	0,0225	0,0222	0,0222	0,0222	0,0222	0,0222

Tabela 4.11: Análise de convergência para a solução C no tempo = 15.000 s.

**CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 15000 s**

<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,6154	0,6169	0,6171	0,6171	0,6171	0,6171
60	0,2024	0,2032	0,2031	0,2031	0,2031	0,2031
120	0,0445	0,0452	0,0453	0,0452	0,0452	0,0452
180	0,0065	0,0067	0,0066	0,0066	0,0066	0,0066

Tabela 4.12: Análise de convergência para a solução C no tempo = 50.000 s.

**CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 50000 s**

<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,8623	0,8532	0,8556	0,8555	0,8554	0,8554
60	0,6522	0,6566	0,6582	0,6584	0,6584	0,6584
120	0,5049	0,4929	0,4971	0,4968	0,4967	0,4967
180	0,2641	0,2742	0,2776	0,2767	0,2767	0,2767
240	0,0668	0,065	0,0663	0,0661	0,066	0,066
300	0,0253	0,0254	0,0256	0,0258	0,0258	0,0258

Tabela 4.13: Análise de convergência para a solução C no tempo = 100.000 s.

**CONCENTRAÇÃO NO TEMPO = 100000 s**

<b>Z</b>	<b>Nº TERMOS</b>					
	5	10	15	30	60	100
0	0,9702	0,9530	0,9564	0,9559	0,9558	0,9558
60	0,8874	0,8899	0,8923	0,8925	0,8924	0,8924
120	0,8400	0,8157	0,8211	0,8206	0,8205	0,8205
180	0,6015	0,6132	0,6176	0,6163	0,6163	0,6163
240	0,3354	0,3307	0,3326	0,3321	0,3321	0,3321
300	0,2493	0,2491	0,2495	0,2497	0,2497	0,2497

#### **IV.3.5 – RESULTADOS DO PROCESSO DE TRUNCAMENTO**

As Tabelas 4.14 a 4.16 foram construídas com a finalidade de se mostrar o número total de autovalores requeridos pelas três soluções propostas, para tempos pré-determinados, quando se utiliza o processo de truncamento proposto pela Equação (IV.48), processo adaptativo, considerando-se uma malha de 31 nós. O valor de tolerância utilizado, para este procedimento, é de  $10^{-4}$ .

Tabela 4.14: Número de autovalores requerido pela solução A.

<i>Tempos</i>	<i>Nº Autovalores</i>
<i>Tempo = 5000 s</i>	>100
<i>Tempo = 15000 s</i>	>100
<i>Tempo = 30000 s</i>	>100
<i>Tempo = 40000 s</i>	>100
<i>Tempo = 50000s</i>	>100
<i>Tempo = 60000s</i>	>100
<i>Tempo = 80000 s</i>	>100
<i>Tempo = 100000 s</i>	>100

Tabela 4.15: Número de autovalores requerido pela solução B.

<i>Tempos</i>	<i>Nº Autovalores</i>
<i>Tempo = 5000 s</i>	21
<i>Tempo = 15000 s</i>	17
<i>Tempo = 30000 s</i>	24
<i>Tempo = 40000 s</i>	37
<i>Tempo = 50000s</i>	40
<i>Tempo = 60000s</i>	42
<i>Tempo = 80000 s</i>	42
<i>Tempo = 100000 s</i>	42



Tabela 4.16: Número de autovalores requerido pela solução C.

<i>Tempos</i>	<i>Nº Autovalores</i>
<i>Tempo = 5000 s</i>	8
<i>Tempo = 15000 s</i>	13
<i>Tempo = 30000 s</i>	24
<i>Tempo = 40000 s</i>	37
<i>Tempo = 50000s</i>	40
<i>Tempo = 60000s</i>	42
<i>Tempo = 80000 s</i>	42
<i>Tempo = 100000 s</i>	42

Os resultados obtidos mostram que, com a utilização desse processo de truncamento, o número de autovalores requeridos para solução do problema, para uma tolerância de  $10^{-4}$ , é bem menor.

Pode-se perceber, ainda, comparando-se as três tabelas, que a solução A não converge para os 100 termos utilizados para tempo algum, enquanto que as demais soluções já se mostram convergentes utilizando-se um número de termos bastante inferior. Note-se que o número de termos requeridos por ambas as soluções, soluções B e C, para que as mesmas convirjam, não é superior a 42. Fator bastante interessante de se ressaltar é que para tempos pequenos, a solução C mostra-se convergente com um número de termos bem inferior à solução B. No tempo igual a 5000 s, por exemplo, a solução B necessita de 21 termos para convergir, enquanto que a solução C precisa de apenas 7 termos.

#### **IV.4 – CONCLUSÕES**

Através do estudo proposto neste capítulo, pôde-se concluir que as soluções que obtêm um melhor desempenho para a resolução do problema unidimensional de migração de contaminantes no solo para um meio heterogêneo, saturado, constituído por múltiplas camadas homogêneas são as soluções B e C. Isso porque essas soluções consideraram um filtro para homogeneizar as condições de contorno e, assim, acelerar a convergência.

Analisando-se os potenciais transformados, pôde-se perceber que a solução C mostra-se mais convergente que a solução B, principalmente para os primeiros tempos, devido ao fato daquela restringir, através de um procedimento de teste, o domínio físico em uma sub-região onde as concentrações não podem ser negligenciadas. Torna, portanto, a solução do problema, para as primeiras camadas e tempos iniciais, muito mais precisa, já que os potenciais transformados calculados são mais representativos do problema físico. Esses resultados são claramente percebidos na análise das Figuras 4.13 e 4.18, em que a melhor solução obtida pela solução B equivale à pior solução obtida pela solução C.

O mesmo comportamento é observado quando se faz um estudo da análise de convergência. Pode-se notar uma convergência muito superior da solução C em relação à B, principalmente para os tempos iniciais.

Conclui-se, ainda, que a introdução de um processo de truncamento no problema pode ser bastante interessante para reduzir o custo computacional, uma vez que a solução pode ser obtida, para uma determinada tolerância prescrita, utilizando-se um número bem menor de autovalores no cálculo dos potenciais transformados. Para um problema unidimensional essa ferramenta não se mostra essencial, já que o custo computacional despendido para a solução do problema é pequeno. Essa ferramenta toma relevância quando se pensa numa extensão do problema unidimensional a problemas multidimensionais e/ou não lineares que, por serem muito mais complexos, possuem um custo computacional muito maior.

## CAPÍTULO V

### EXEMPLOS DE APLICAÇÃO

#### V.1 – INTRODUÇÃO

Com o intuito de se demonstrar a aplicabilidade das soluções obtidas, como interessantes ferramentas para simulação de migração de contaminantes no solo, dois exemplos de aplicação são, neste capítulo, propostos.

#### V.2 – EXEMPLO A

Para este exemplo, utiliza-se a solução C, sendo dois cenários simulados, tendo como única diferença existente entre eles o fato de que o segundo cenário, além das três camadas de areia existentes no primeiro, considera, ainda, uma última camada constituída por argila.

Como analisado anteriormente, a solução C permite que se introduza uma concentração constante e diferente de zero, para cada camada considerada, bem como decaimento radioativo. Considera-se um meio poroso saturado constituído por três camadas homogêneas de areia, no caso do *1º Cenário*. Já para o *2º Cenário*, o meio poroso saturado é considerado como sendo constituído pelas mesmas três camadas de areia, consideradas no *1º Cenário*, além de uma quarta camada constituída de argila. Para os dois cenários, a segunda camada encontra-se contaminada com Sr-90, ou seja, a concentração inicial é diferente de zero nessa camada. Considera-se, ainda, que a meia vida do poluente considerado é igual a 28,6 anos, tendo-se que levar em conta, conseqüentemente, o decaimento radioativo que é calculado em função da meia vida considerada.

$$\lambda = \frac{\ln(2)}{\text{meia vida}} \quad (\text{V.1})$$

A concentração na segunda camada é considerada como sendo igual a um.

As características consideradas em cada camada, para os dois cenários simulados, são descritas nas Tabelas 5.1 e 5.2.

Tabela 5.1: Características das camadas constitutivas do meio poroso para o 1º cenário.

w é velocidade de poro (m/ano); D é coeficiente de dispersão (m<sup>2</sup>/ano); K<sub>d</sub> é o coeficiente de distribuição (cm<sup>3</sup>/g); R é o fator de retardamento; ε é porosidade; λ é o decaimento radioativo (ano<sup>-1</sup>); ρ é a densidade do solo (g/cm<sup>3</sup>); e C é a concentração inicial em cada camada. A espessura da camada é dada em metros.

Camadas	Espessura	w	D	K <sub>d</sub>	R	ρ	ε	λ	C
1ª Camada	0 a 1	0.875	0.4375	15	76	2	0.4	0.0242	0
2ª Camada	1 a 2	0.875	0.4375	15	76	2	0.4	0.0242	1
3ª Camada	2 a 5	0.875	0.4375	15	76	2	0.4	0.0242	0

Tabela 5.2: Características das camadas constitutivas do meio poroso para o 2º cenário.

w é velocidade de poro (m/ano); D é coeficiente de dispersão (m<sup>2</sup>/ano); K<sub>d</sub> é o coeficiente de distribuição (cm<sup>3</sup>/g); R é o fator de retardamento; ε é porosidade; λ é o decaimento radioativo (ano<sup>-1</sup>); ρ é a densidade do solo (g/cm<sup>3</sup>); e C é a concentração inicial em cada camada. A espessura da camada é dada em metros.

Camadas	Espessura	w	D	K <sub>d</sub>	R	ρ	ε	λ	C
1ª Camada	0 a 1	0.875	0.4375	15	76	2	0.4	0.0242	0
2ª Camada	1 a 2	0.875	0.4375	15	76	2	0.4	0.0242	1
3ª Camada	2 a 4.5	0.875	0.4375	15	76	2	0.4	0.0242	0
4ª Camada	4.5 a 5	0.875	0.4375	110	551	2	0.4	0.0242	0

## V.2.1 – RESULTADOS DO EXEMPLO A

As Figuras 5.1 e 5.2 mostram a distribuição da concentração, para tempos pré-determinados, para os dois cenários considerados. Pode-se perceber que, com a introdução da camada de argila, a concentração, ao atingir o limite inferior considerado, encontra-se substancialmente reduzida. Isto porque a camada de argila serve como uma barreira de proteção natural, já que seu fator de retardamento (R) é alto, o que significa dizer que essa camada possui uma alta capacidade de retenção.

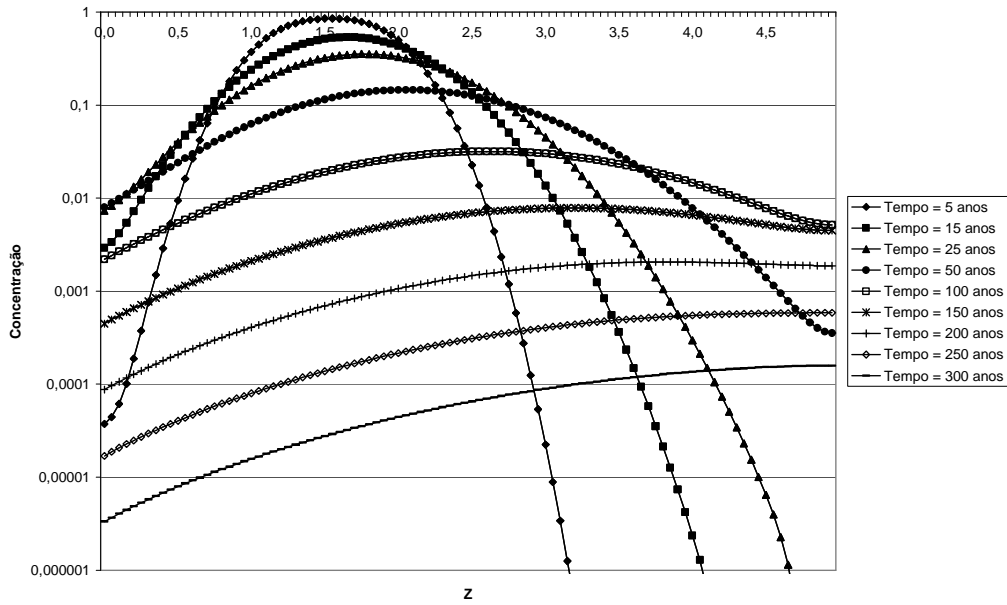


Figura 5.1: Distribuição da concentração relativa ( $C/C_0$ ) para um meio poroso sem presença de argila.

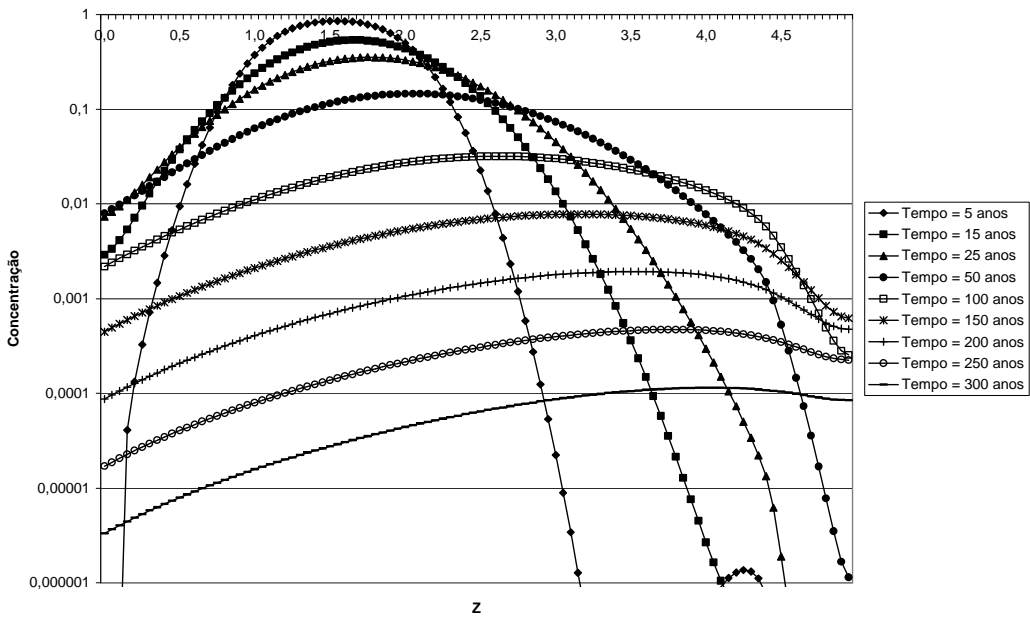


Figura 5.2: Distribuição da concentração relativa ( $C/C_0$ ) para um meio poroso com presença de argila.

As Figuras 5.3, 5.4 e 5.5 mostram a distribuição da concentração para os dois cenários considerados, nos níveis  $z = 1$ ,  $z = 4,55$  e  $z = 5$  m, respectivamente.

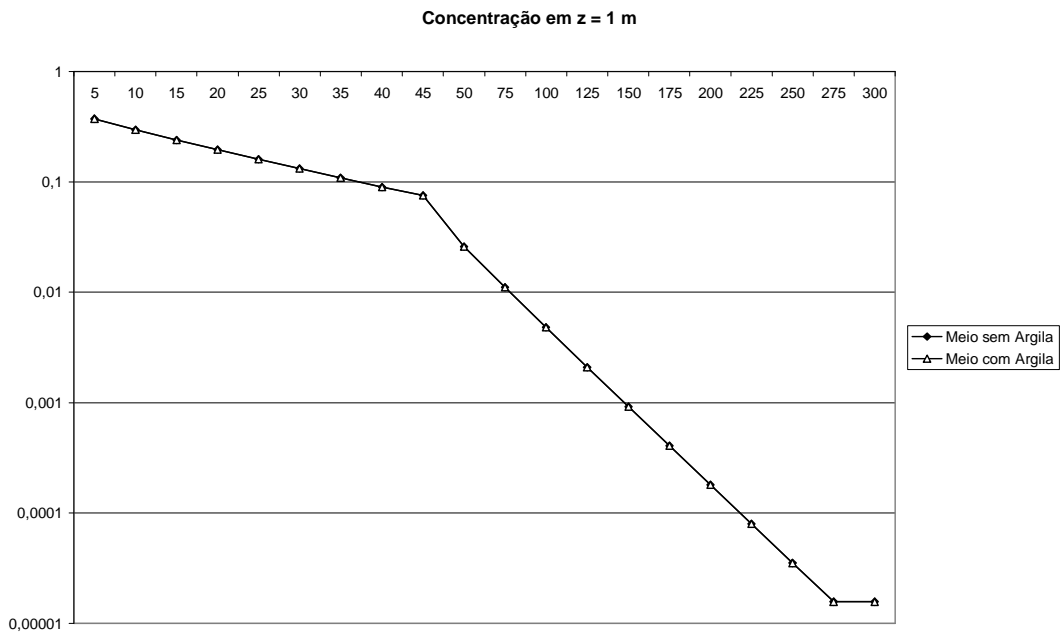


Figura 5.3: Distribuição da concentração para os cenários 1 (sem argila) e 2 (com argila) em  $z = 1$  m.

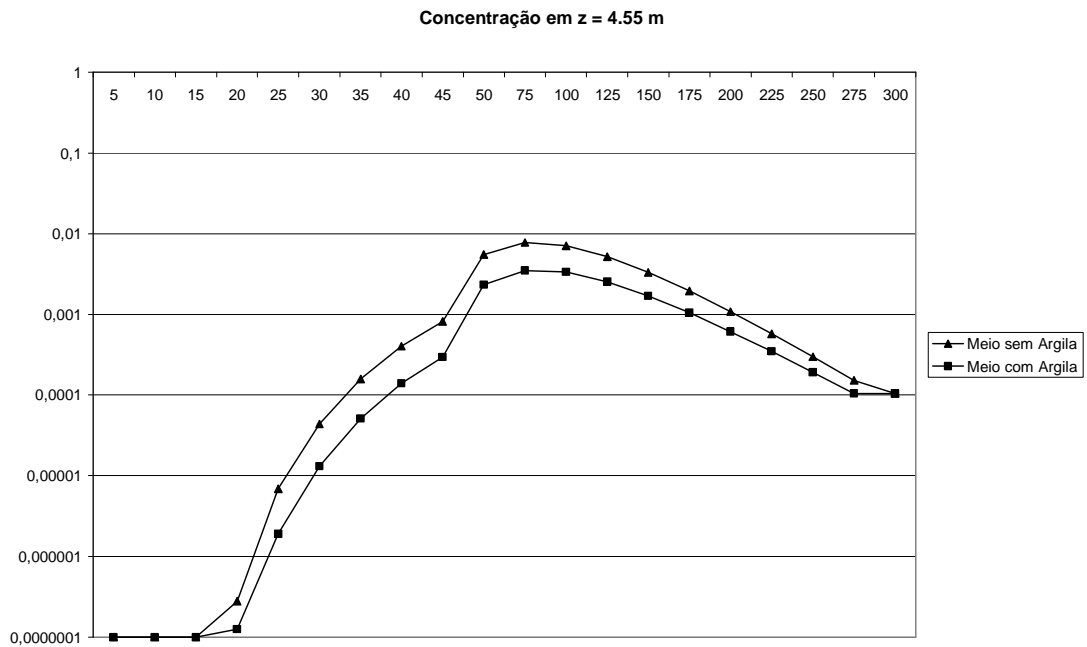


Figura 5.4: Distribuição da concentração para os cenários 1 (sem argila) e 2 (com argila) em  $z = 4,55$  m.

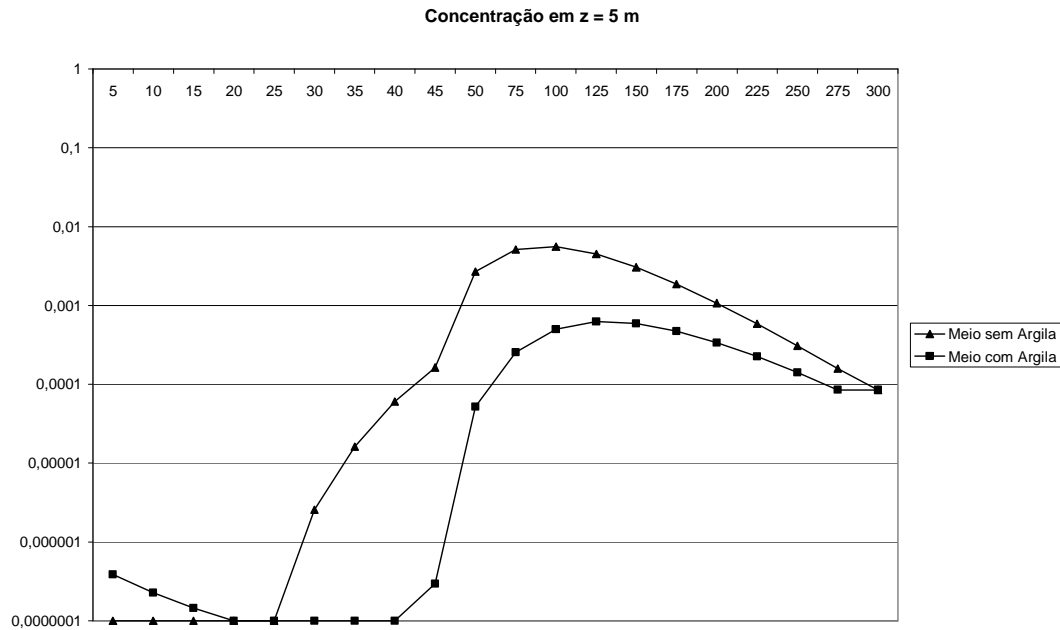


Figura 5.5: Distribuição da concentração para os cenários 1 (sem argila) e 2 (com argila) em z = 5 m.

Analisando-se as três figuras, em questão, é possível perceber a influência gerada pela camada constituída por argila. Note-se que em z = 1 m, a camada de argila ainda não foi atingida pelo contaminante, o que é claramente percebido, já que as curvas dos dois cenários coincidem. Quando se utiliza um nível em que já se faça perceber a camada de argila, para o 2º Cenário, torna-se fácil identificar qual é o cenário que possui o meio constituído de argila. Pode-se notar que a curva que demonstra este cenário, encontra-se abaixo da que representa o cenário cujo meio não possui argila, já que, como analisado anteriormente, a alta capacidade de retenção da camada de argila faz com que a concentração do contaminante seja menor do que quando se considera o meio sem argila.

Maior influência, ainda, pode ser notada na Figura 5.5, em que o nível utilizado para análise coincide justamente com o contorno considerado. Nessa figura, a diferença na distribuição de concentração encontrada entre os dois cenários é muito maior.

## V.2.2 – CONCLUSÕES DO EXEMPLO A

O teste proposto possui caráter apenas ilustrativo e permitiu a demonstração da possibilidade de criação de diferentes cenários que caracterizem a migração

unidimensional de contaminantes no solo. A ferramenta utilizada é prática e bastante flexível, permitindo que o usuário simule o cenário que lhe convier, tendo, ainda, o controle do erro prescrito que desejar.

Nos exemplos, em questão, pôde-se perceber a utilidade de se utilizar uma camada de argila como uma barreira natural para a migração de contaminantes no solo. Sua alta capacidade de retenção faz com que o poluente demore mais tempo para atingir o contorno.

### V.3 – EXEMPLO B

Para a simulação desse caso teste, considerou-se um cenário geral formado por uma trincheira constituída por areia contaminada com Ra-226, solo e um aquífero, conforme mostrado na Figura 5.6. A espessura total do sistema, considerado desde o topo da trincheira até o topo do aquífero, é de 10 m, sendo o volume total do depósito equivalente a 150 m<sup>3</sup>.

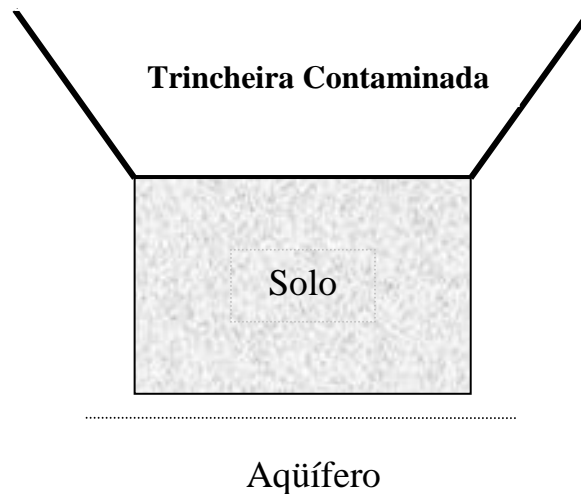


Figura 5.6: Esquematização do sistema solo-trincheira.

As propriedades consideradas para esse sistema são descritas na Tabela 5.3.



Tabela 5.3: Propriedades consideradas para o Caso-teste B (IAEA,2004).

Densidade do solo, $\rho$	1,9 g/cm <sup>3</sup>
Porosidade, $\varepsilon$	0,3
Velocidade de Darcy, $q$	1,5 m/ano
Velocidade de poro, $w$	5 m/ano
Coefficiente de dispersão, $D$	3 m <sup>2</sup> /ano
Coefficiente de distribuição, $k_d$ (Solo e Poluente)	500 cm <sup>3</sup> /g
Fator de Retardamento, $R$ (Solo e Poluente)	3167,67
Coefficiente de distribuição, $k_d$ (Barreira de argila)	9100 cm <sup>3</sup> /g
Fator de retardamento, $R$ (Barreira de argila)	57634,3

A concentração inicial do problema, na fase líquida, pode ser escrita como:

$$C_{o,k} = \frac{C_T}{\rho k_d + \varepsilon} \quad (\text{V.II})$$

em que  $C_T$  é a concentração total no depósito e é dada por:

$$C_T = \frac{\textit{Atividade Total}}{\textit{Volume Total do depósito}} \quad (\text{V.III})$$

em que

$$\textit{Atividade Total} = 6,84 \times 10^9 \text{ Bq/m}^3.$$

A partir da concentração inicial do problema, pode-se calcular a dose (mSv/ano) ingerida por um usuário, considerando seu consumo de água equivalente a dois litros por dia através da equação a seguir:

$$\textit{Dose}(Z, \tau) = C_{o,k} \times \textit{Consumo de água} \times \textit{Fator dose} \times 1000 \quad (\text{V.IV})$$

em que o fator de dose, estipulado pelo ICRP (2001) é igual a  $2,8 \times 10^{-7}$  Sv/Bq.

Tabela 5.4: Diferentes configurações consideradas nos casos-teste.

<b>Caso</b>	$z_{min}$ (m)	$z_{max}$ (m)	<b>Material</b>
<b>1</b>	0.00	5,40	Poluente
	5,40	10,00	Solo
<b>20 cm de camada de argila</b>			
<b>Caso</b>	$z_{min}$ (m)	$z_{max}$ (m)	<b>Material</b>
<b>2</b>	0,00	5,40	Poluente
	5,40	5,60	Argila
	5,60	10,00	Solo
<b>3</b>	0,00	2,70	Poluente
	2,70	2,80	Argila
	2,80	5,50	Poluente
	5,50	5,60	Argila
	5,60	10,00	Solo
<b>4</b>	0,00	1,80	Poluente
	1,80	1,90	Argila
	1,90	3,70	Poluente
	3,70	3,80	Argila
	3,80	5,60	Poluente
	5,60	10,00	Solo
<b>30 cm de camada de argila</b>			
<b>5</b>	0,00	5,40	Poluente
	5,40	5,70	Argila
	5,70	10,00	Solo
<b>6</b>	0,00	2,70	Poluente
	2,70	2,85	Argila
	2,85	5,55	Poluente
	5,55	5,70	Argila
	5,70	10,00	Solo
<b>7</b>	0,00	1,80	Poluente
	1,80	1,95	Argila
	1,95	3,75	Poluente
	3,75	3,90	Argila
	3,90	5,70	Poluente
	5,70	10,00	Solo

<b>8</b>	0,00	1,80	Poluente
	1,80	1,90	Argila
	1,90	3,70	Poluente
	3,70	3,80	Argila
	3,80	5,60	Poluente
	5,60	5,70	Argila
	5,70	10,00	Solo

A partir desse cenário geral, oito casos foram simulados, considerando-se a introdução de barreiras, representadas por camadas de argila, distribuídas ao longo da trincheira. A Tabela 5.4 sintetiza a disposição das barreiras de engenharia nas simulações realizadas.

O problema formulado consistiu em avaliar, para os casos-teste em questão, a dose de poluente ingerida por um membro do grupo crítico, durante determinado tempo, considerando-se seu consumo diário de água de dois litros.

### **V.3.1 – RESULTADOS DO EXEMPLO B**

As Figuras 5.7 a 5.14 mostram a distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para os tempos 50, 500, 1000 e 4000 anos, para os casos-teste 1 a 8 respectivamente.

Analisando-se a Figura 5.7, caso\_1, em que não há a utilização de qualquer tipo de isolamento e a base da trincheira encontra-se em 5,40 m, pode-se perceber a penetração do contaminante no solo já para a curva relativa a 50 anos. Note-se, porém, que, para essa curva, o poluente ainda não atingiu uma profundidade de 7 metros, enquanto que para as curvas relativas a 500, 1000 e 4000 anos, pode-se notar, para a mesma profundidade, uma dose de aproximadamente 1,5, 3,5 e 1/mSv, respectivamente.

Percebe-se, ainda, que, em 500 anos, o contaminante não é capaz de contaminar o aquífero. A retenção total do poluente para esse período de tempo acontece em uma profundidade inferior a 9 metros. Já para os demais tempos, a ingestão de água por um usuário desse aquífero mostra-se comprometida, pois o aquífero já se encontra contaminado, principalmente em relação à curva de 4000 anos, em que se pode

encontrar uma dose equivalente a 1 mSv no topo do aquífero. Note-se que a contaminação do aquífero ocorrerá, nesse caso, apenas, após 1000 anos.

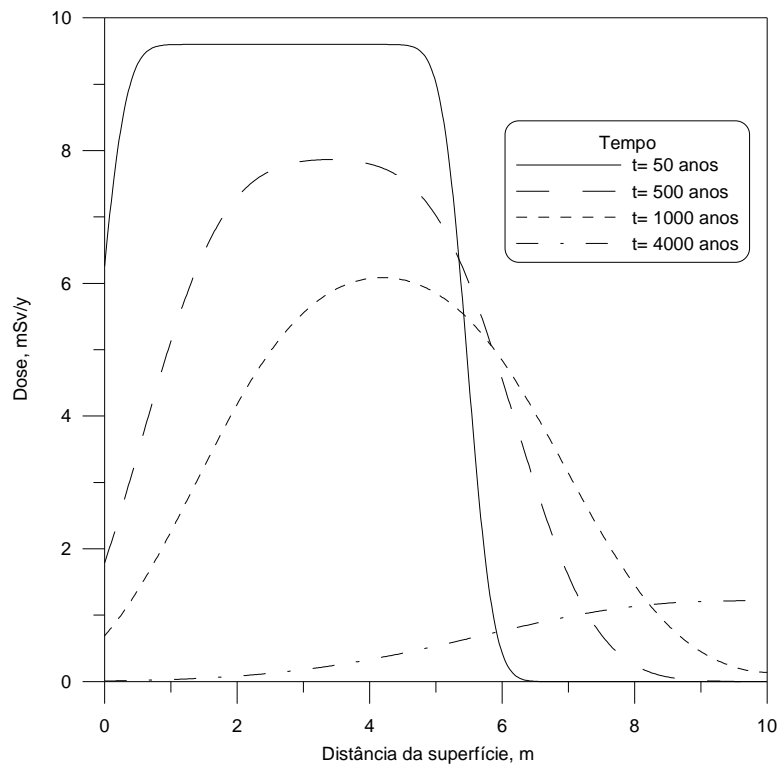


Figura 5.7: Distribuição da dose em função da distribuição vertical do sistema trincheira-solo, para tempos pré-determinados para o Caso\_1.

O caso\_2, mostrado na Figura 5.8, representa um sistema trincheira-solo com a utilização de uma barreira de 20 cm de argila, localizada na base da trincheira. Essa simulação mostra o efeito da barreira de argila, dificultando a penetração do contaminante no solo.

É possível perceber que, para a curva relativa a 50 anos, praticamente não existe contaminação do solo. Já as curvas para os tempos de 500 e 1000 anos apresentam valores de dose de, aproximadamente, 2,5 mSv no topo do solo, com diminuição ao longo da vertical e sem atingir o aquífero. Importante ressaltar que os valores encontrados para os tempos em questão, são substancialmente inferiores aos valores encontrados, para os mesmos tempos, no caso\_1, sem isolamento.

A curva relativa a 4000 anos mostra que o solo sofre uma contaminação constante, sendo o valor da dose por volta de 1 mSv. Atente-se que, somente para este último caso, o aquífero será contaminado.

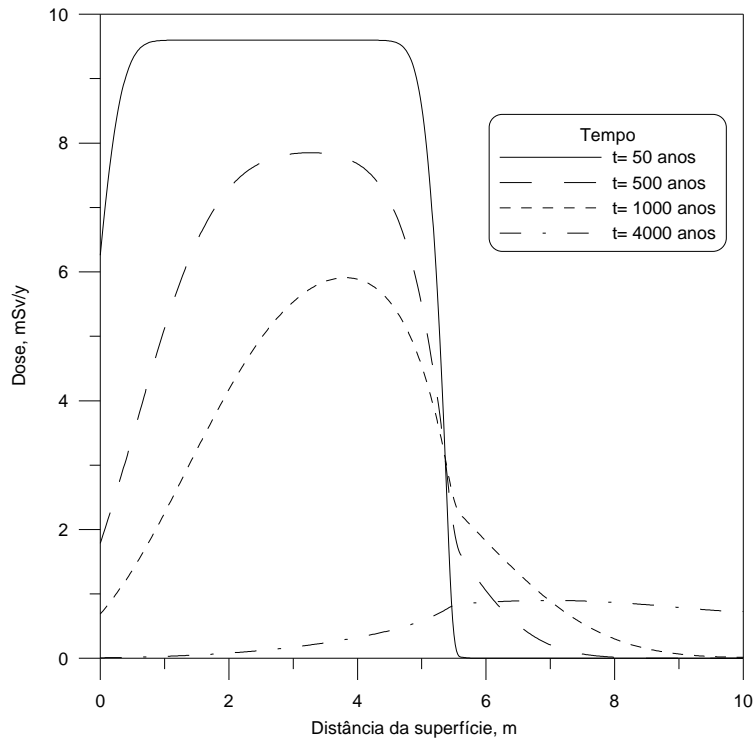


Figura 5.8: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_2.

A Figura 5.9, caso\_3, representa um sistema trincheira-solo em que duas camadas de 10 cm de argila são utilizadas como barreira, encontrando-se localizadas na base e no centro da trincheira.

A interferência da primeira barreira pode ser observada pela queda dos valores de dose, principalmente nas curvas relativas a 50 e 500 anos. Com relação à barreira posicionada na base da trincheira, percebe-se que há penetração do contaminante no topo do solo, por volta de 5,60 e 6,00 metros, com valores de dose entre 2 e 3 mSv, para as respectivas curvas.

Comparando-se este caso com o anterior, pode-se perceber que a migração do contaminante no solo, de uma maneira geral, é maior, o que demonstra ser esta simulação menos eficaz que a anterior. O comportamento da curva de 4000 anos é bastante semelhante ao comportamento da mesma para o caso\_2.

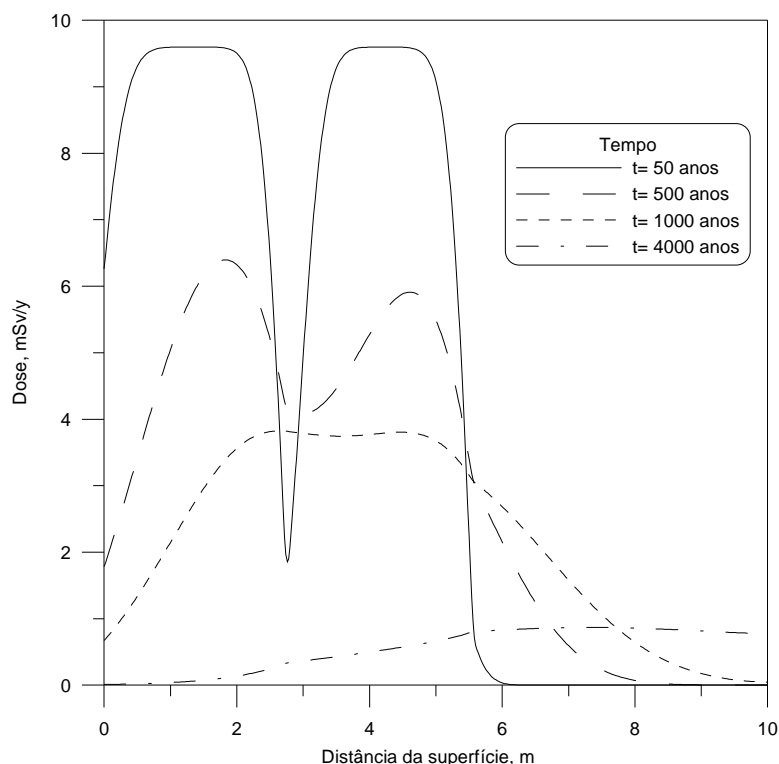


Figura 5.9: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_3.

O caso representado na Figura 5.10, caso\_4, também utiliza duas camadas de 10 cm de argila, mas que se encontram localizadas de maneira diversa da simulação anterior, já que as duas camadas situam-se dentro do volume da trincheira, possibilitando, com isso, um contato direto entre o contaminante, localizado na base da trincheira, e o solo.

A contaminação do solo, para o caso-teste em questão, é qualitativamente semelhante ao caso\_1, sem isolamento, apresentando o mesmo padrão de comportamento para as curvas de tempo, sendo as intensidades de dose menores.

Pode-se concluir, comparando-se diretamente os resultados deste caso, caso\_4, com o caso anterior, caso\_3, que esta disposição de barreiras é a menos adequada.

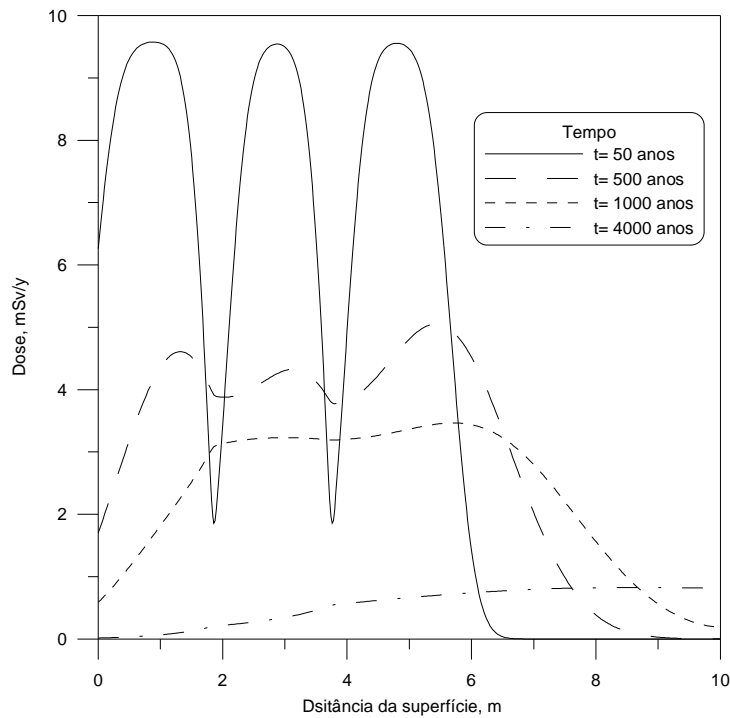


Figura 5.10: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_4.

O caso\_5, Figura 5.11, possui uma disposição de barreira de argila equivalente ao caso\_2, porém com uma espessura de 30 cm. Dessa forma, o padrão de comportamento para todas as curvas de tempo são muito semelhantes. Algumas diferenças no valor da dose podem ser verificadas. Em uma profundidade de 6 metros, por exemplo, os valores de dose para as curvas de 500 e 1000 anos são de, aproximadamente, metade dos respectivos valores para o caso\_2. Outro aspecto em comum que pode ser percebido, é que somente a curva relativa a 4000 anos é capaz de provocar contaminação no aquífero.

Há de se ressaltar que, apesar da melhor eficiência apresentada para este caso, uma camada muito espessa, superior a 50 cm de espessura não deve ser utilizada, uma vez que encontra-se mais susceptível a apresentar rachaduras, possibilitando, assim, caminhos preferenciais para a migração do contaminante no solo.

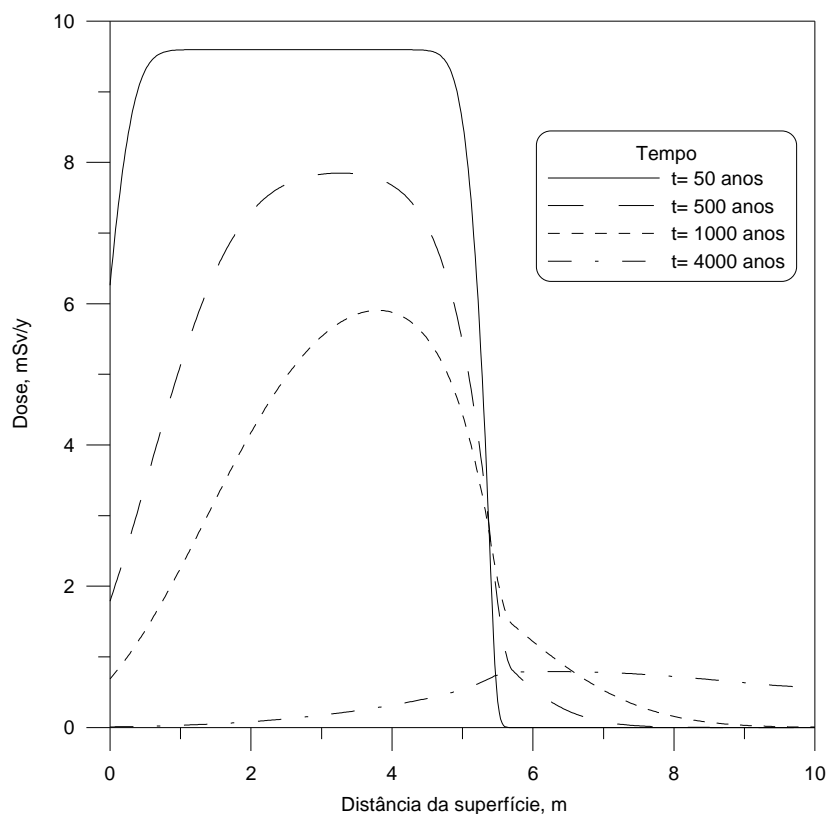


Figura 5.11: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_5

A Figura 5.12, caso\_6, considera um sistema trincheira-solo semelhante ao apresentado no caso\_3, porém as barreiras de argila possuem espessura equivalente a 15 cm.

As curvas de dose também possuem o mesmo comportamento quando comparadas ao caso\_3, diferindo, apenas, em relação à intensidade da dose. Em 6 metros de profundidade, por exemplo, as curvas relativas a 500 e 1000 anos apresentam valores inferiores às respectivas curvas do caso\_3.

Em relação ao caso\_5, em que apenas uma camada de argila com espessura de 30 cm é utilizada na base da trincheira, verifica-se que, neste caso, o contaminante é capaz de penetrar mais profundamente o solo, como já constatado anteriormente em comparação feita entre os casos 2 e 3.



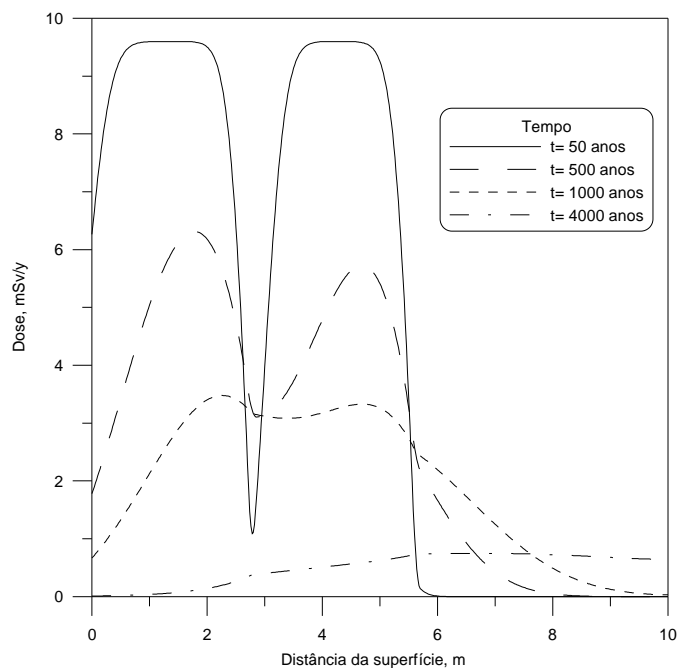


Figura 5.12: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_6.

A disposição das duas barreiras de argila neste caso\_7 (Figura 5.13) é a mesma utilizada no caso\_4, porém com espessuras de 15 cm. Novamente, os resultados obtidos para estes dois casos são muito semelhantes, diferindo, apenas, nas intensidades das doses, podendo-se notar, ainda, que a contaminação no aquífero, como também é verificado no caso\_4, ocorre para as curvas de 1000 e 4000 anos.

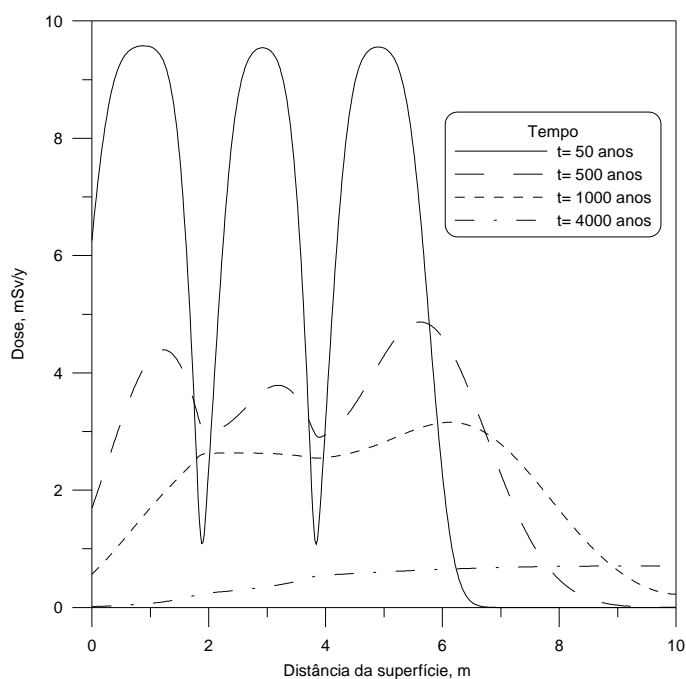


Figura 5.13: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_7.

A partir do sistema trincheira-solo descrito no caso\_7, o caso\_8 simulado (Figura 5.14) procura investigar a migração de contaminantes no solo inserindo-se uma terceira barreira de argila na base da trincheira, fazendo-se, porém, cada barreira com uma espessura de 10 cm. Os valores de dose, para o caso em questão, são substancialmente reduzidos logo abaixo da base da trincheira. Para este caso, a curva de 1000 anos não mais atinge o aquífero, como no caso\_7.

A contaminação do aquífero ocorre, para este caso, somente devida à curva relativa a 4000 anos.

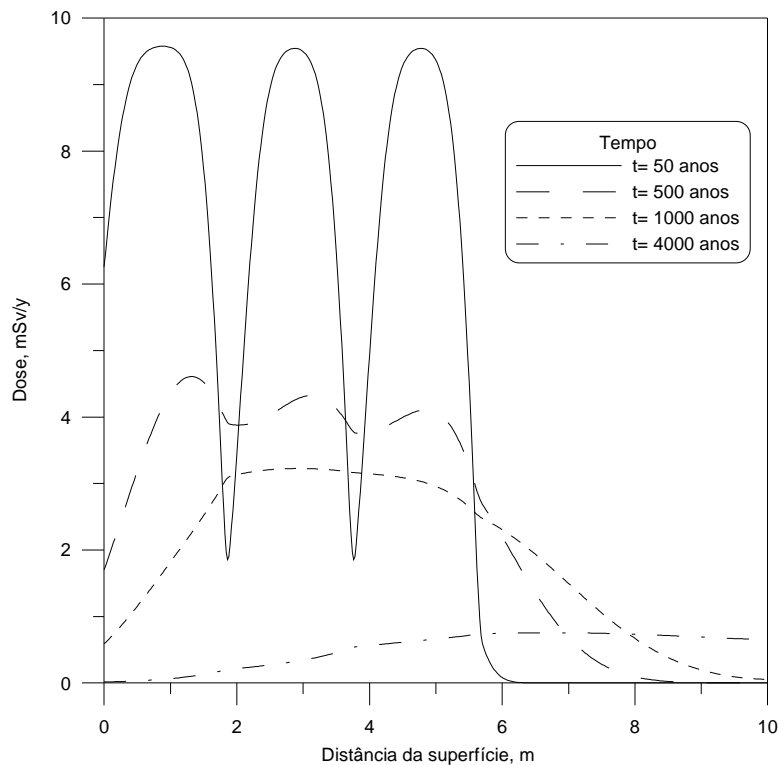


Figura 5.14: Distribuição da dose em função do tempo para o Caso\_8.

As Figuras 5.15 e 5.16 mostram a distribuição da dose em função do tempo, na base da trincheira e no topo do aquífero, respectivamente, para o caso sem isolamento e para os casos em que se considera uma barreira de argila de 20 cm. Já as Figuras 5.17 e 5.18 mostram a distribuição da dose em função do tempo, na base da trincheira e no

topo do aquífero, respectivamente, para o caso sem isolamento e para os casos em que se considera uma barreira de argila de 30 cm.

Analisando-se as figuras, de uma maneira geral, é possível perceber que as doses medidas no topo do aquífero encontram-se em menor quantidade do que quando medidas na base da trincheira. Isso porque, o caminho percorrido pelo contaminante até o topo do aquífero é suficientemente grande para que haja uma dispersão quantitativa do contaminante durante o processo de migração. Pode-se perceber, ainda, que o tempo é fator crucial para o decaimento radioativo do contaminante. Para tempos superiores a 8000 anos, por exemplo, note-se que tanto na base da trincheira como no topo do aquífero a dose é quase nula.

A análise das Figuras 5.15 a 5.18 só vem a fortalecer os resultados anteriormente obtidos, no sentido de que os casos que melhor protegem a água do aquífero que poderá vir a ser consumida por um usuário, são os casos em que a barreira de argila encontra-se na base da trincheira, ressaltando o fato de que quanto mais espessa a barreira, melhor será o resultado obtido. Importante lembrar, porém, que barreiras com espessura superior a 50 cm não são muito indicadas por estarem susceptíveis a rachaduras, possibilitando, como mencionado anteriormente, caminhos preferenciais para o transporte do contaminante.

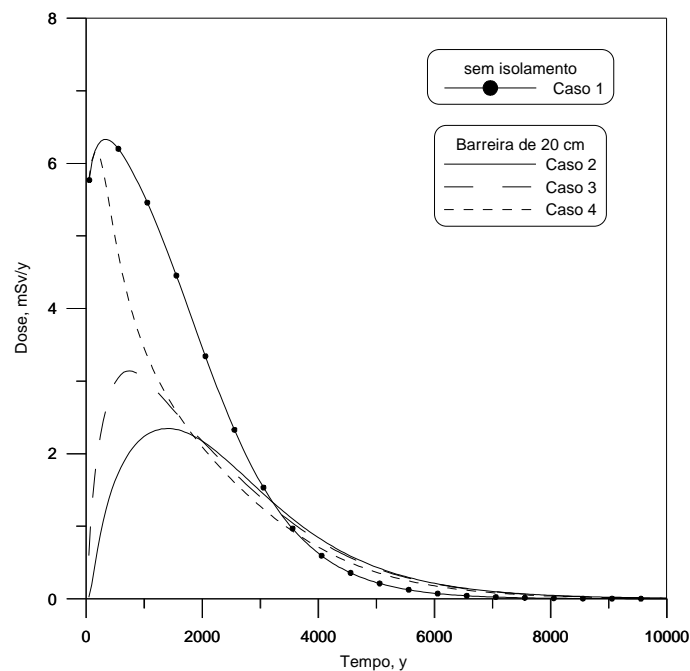


Figura 5.15: Distribuição da dose na base da trincheira para uma barreira de 20 cm.

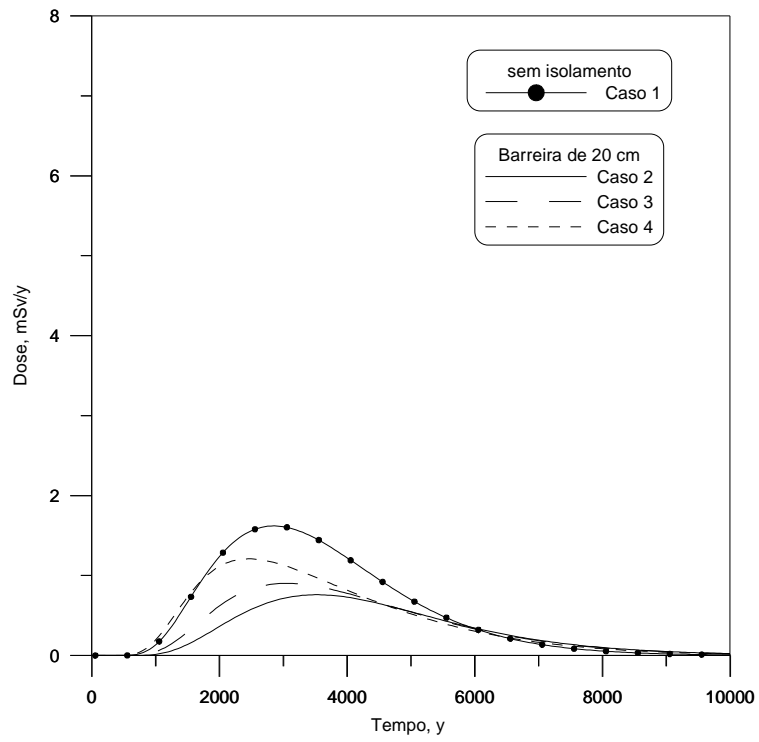


Figura 5.16: Distribuição da dose no topo do aquífero para uma barreira de 20 cm.

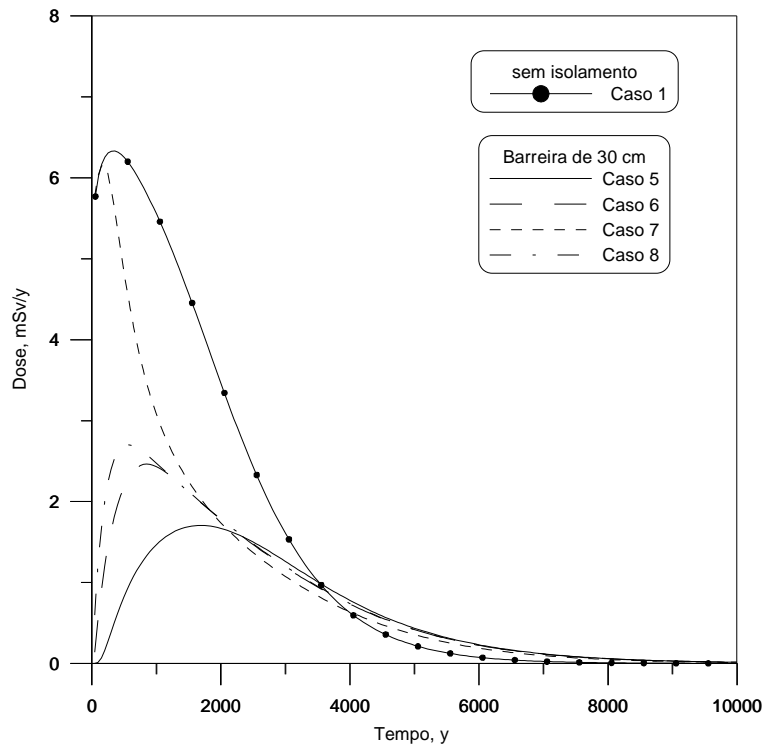


Figura 5.17: Distribuição da dose na base da trincheira para uma barreira de 30 cm.

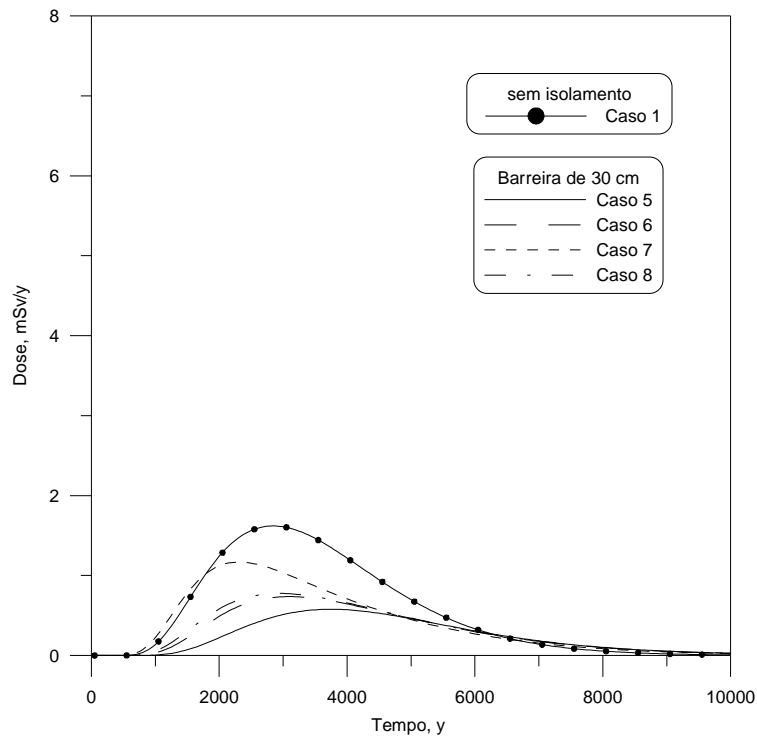


Figura 5.18: Distribuição da dose no topo do aquífero para uma barreira de 30 cm.

### **V.3.2 – CONCLUSÕES DO EXEMPLO B**

Uma avaliação dos oito casos simulados permite verificar que, quando se posiciona uma barreira de argila na base da trincheira, independente da existência de outras barreiras de argila no interior da trincheira, o contaminante somente atingirá o aquífero para a curva relativa a 4000 anos.

Nos demais casos, o aquífero já pode sofrer contaminação a partir de 1000 anos. Esse último resultado também é encontrado quando o sistema trincheira-solo não está isolado. Ou seja, do ponto de vista de contaminação do aquífero, os casos 4 e 7 comportam-se de forma semelhante a não existência de barreiras de argila.

Outro fator que pode ser observado é que, quando se analisa a contaminação no solo, o fato de se dividir uma única camada existente na base da trincheira em camadas com espessuras iguais e distribuí-las ao longo da trincheira, acarreta numa maior contaminação no topo do solo.

Através dos exemplos simulados, pôde-se perceber que o melhor resultado é obtido quando se utiliza uma camada de argila na base da trincheira. Ressalte-se, porém, que apesar dos resultados demonstrarem que quanto mais espessa essa barreira, menos contaminação existirá, não se indica a utilização de uma barreira com espessura superior a 50 cm, já que nestas podem existir rachaduras que favoreçam o caminho percorrido pelo contaminante.

## CAPÍTULO VI

### CONCLUSÕES E SUGESTÕES

No presente trabalho, fez-se uso da técnica da transformada integral generalizada para obtenção de três diferentes soluções híbridas numérico-analíticas visando resolver o transporte unidimensional transiente de contaminantes em meios porosos heterogêneos, saturados, compostos por múltiplas camadas homogêneas. Os resultados obtidos pelas soluções B, solução com filtro, e C, solução com filtro e redução de domínio, mostraram a importância, na aceleração da convergência, da utilização de um filtro que seja capaz de homogeneizar as condições de contorno consideradas. Os resultados da solução C mostraram, ainda, que o fato de se restringir o domínio físico total em uma sub-região onde as concentrações não podem ser negligenciadas melhora a convergência da solução para tempos pequenos. Vale lembrar, que a solução B foi obtida a partir de Liu *et al.* (1998), mas que enquanto o autor resolve o sistema de equações diferenciais ordinárias analiticamente, a solução, aqui proposta, resolve o mesmo sistema numericamente. Para o cálculo de autovalores e autofunções, utiliza-se a sub-rotina DSLEIG, implementada na biblioteca numérica do ISML, enquanto que para a resolução do sistema diferencial a sub-rotina utilizada é a DIVPAG. Importante ressaltar, ainda, a possibilidade permitida de inclusão de uma concentração inicial diferente de zero para cada camada, bem como a inclusão de decaimento radioativo sem a consideração de formação de cadeia radioativa, no modelo considerado.

Um estudo de dois processos de truncamento foi feito, visando resolver o problema original com o menor número possível de autovalores, mas sem descaracterizar a eficiência da solução, quando rodada para um número de termos, relativamente grande. O processo de truncamento pode ser bastante interessante, já que permite a possibilidade de se considerar autovalores que podem ter importante influência, dentro de determinada tolerância prescrita pelo usuário, para o cálculo dos potenciais transformados e desprezar aqueles não necessários para uma boa aceleração da convergência.

Os resultados obtidos mostraram que, quando se utiliza o processo de truncamento, uma mesma resposta pode ser obtida em relação aos resultados obtidos pela solução sem truncamento, com um número de termos significativamente menor.

Esse procedimento é de extrema importância para casos multidimensionais, já que se tem um grande espectro de combinações de autovalores e a seleção inapropriada dos mesmos pode levar a resultados com falsa convergência

No capítulo V, dois casos-teste foram propostos com o intuito de se demonstrar a aplicabilidade da solução criada como uma ferramenta bastante útil para a resolução de problemas unidimensionais de migração de contaminantes no meio poroso. Os resultados obtidos nos dois casos-teste, caso-teste A e caso-teste B, mostram a eficiência de se utilizar camadas de argila como barreiras naturais de engenharia, já que sua alta capacidade de retenção, para os casos dos poluentes Sr-90 e Ra 226, faz com que os mesmos demorem mais tempo para migrar para geosfera.

O método híbrido numérico-analítico utilizado mostrou-se bastante eficiente na obtenção das soluções apresentadas no capítulo IV. A possibilidade, permitida por este método, de se combinar as vantagens numéricas e analíticas permite a redução de forma considerável do esforço analítico. Mais do que reduzir o esforço computacional, a maior utilidade encontrada para a implementação da solução numérica, é a possibilidade de se estender a solução para resolver problemas mais complexos, tais como: problemas não lineares, como, por exemplo, problemas que considerem isotermas de sorção não lineares e migração em meios não saturados, problemas multidimensionais, bem como problemas que incluam cadeia radioativa.

A intenção de se propor um modelo unidimensional como ferramenta para determinação da migração dos contaminantes num meio poroso heterogêneo, saturado, composto por N camadas homogêneas, foi satisfeita. Propõe-se, no entanto, a extensão do estudo a problemas multidimensionais e/ou não lineares, bem como testar outros processos de truncamento, na solução de problemas multidimensionais e/ou não lineares.



## CAPÍTULO VII

### REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ALMEIDA, A.R., COTTA, R.M., 1999, “On the integral transform solution of convection-diffusion problems within unbounded domain”, *Journal of the Franklin Institute*, Vol 336, pp 821 – 832.

ALMEIDA, G.L., 2003, “*Análise da Dispersão de Poluentes na Atmosfera via Técnica da Transformada Integral Generalizada – GITT*”, Proposta de Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ.

ANA - Agência Nacional de Águas, 2002, disponível em <http://www.ana.gov.br>, acessada em maio de 2005.

ABNT - Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1993, *NBR 9896 - Glossário de Poluição das Águas*, Rio de Janeiro.

ATMADJA, J., BAGTZOGLU, A.C., 2001, “Pollution source identification in heterogeneous porous media”, *Water Resour. Res.*, Vol. 37, pp. 2113 - 2125.

BAILEY, P.B., 1966, “Sturm-Liouville eigenvalues via a phase function”, *SIAM J. Appl. Math.*, Vol 14, pp 242-249.

BAILEY, P.B., 1976, “SLEIGN: an eigenvalue-eigenfunction code for Sturm-Liouville problems”, *Rep. SAND 77-2044* (Sandia National Laboratory, Albuquerque, New Mexico, USA)

BAILEY, P.B., 1978, “A slightly modified Prüfer transformation useful for calculating Sturm-Liouville eigenvalues”, *J. Comput. Phys.*, Vol 29, pp 306-310.

BARROS, F.P.J., 2004, “*Modelos Multidimensionais para Dispersão de Contaminantes em Rios e Canais: Soluções Híbridas por Transformação Integral*”, Tese de Mestrado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ.

BEAR, J., 1972, *Dynamics of fluids in porous media*, American Elsevier, New York, NY.

BEJAN, A., 1994, *Convection Heat Transfer*, Capítulo 9, John Wiley & Sons.

BIRD, R.B., STEWART, W.E., LIGHTFOOT, E.N., 1960, *Transport phenomena*, Wiley International Edition.

BRENNER, H., 1962, “ The diffusion model of longitudinal mixing in beds of finite length, numerical values”, *Chem. Eng. Sci.*, Vol. 17, pp. 229 - 243.

CAMPOS, 1998, *Solos*, Revista Ação Ambiental, Ano I – Nº 2.

CODELL, R.B., KEY, K.T., WHELAN, G., 1982, A collection of mathematical models for dispersion in surface water and groundwater: U.S. Nuclear Regulatory Commission Report NUREG-0868.

CETESB - Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 2001, *Índice e Padrões de Qualidade*, disponível em <http://www.cetesb.sp.gov.br>, acessada em abril de 2005.

CETESB - Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 2004, *Relatório de Qualidade de Águas Subterrâneas*, disponível em <http://www.cetesb.sp.gov.br>, acessada em abril de 2005.

CMMAD - Comissão Mundial sobre Ambiente e Desenvolvimento, 1988, *Nosso Futuro Comum*, Rio de Janeiro, RJ.

CLEARY, R.W., UNGS, M.J., 1978, *Analytical models for ground-water pollution and hydrology*: Princeton University, Water Resources Program Report 78-WR-15, 165 p.

COTTA, R.M., 1993, *Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow*, CRC Press.

COTTA, R.M., MIKHAILOV, M.D., 1997, *Heat Conduction: Lumped Analysis, Integral Transforms, Symbolic Computation*, John Wiley & Sons.

COTTA, R.M., MIKHAILOV, M.D., RUPERTI JR, N.J., 1997, "Analysis of Radioactive Waste Contamination in Soils:- Solution Via Symbolic Manipulation", In: *Int. Conf. on the Radiological Accident of Goiânia - 10 Years Later*, Goiânia. IAEA Conference Proceedings Series - Int. Conf. on the Radiological Accident of Goiânia - 10 Years Later. Viena: IAEA-GOCP, Vol. 1, pp. 298-308.

COTTA, R.M., 1998, *The Integral Transform Method in Thermal and Fluids Science and Engineering*, Begell House, New York.

CPRM - Serviço Geológico do Brasil. *Hidrogeologia - Conceitos e Aplicações*. 2ª ed. Coord. Feitosa, A. C e Filho, J. M. Fortaleza: CPRM 2000.

CRANK, J., 1956, *The Mathematics of Diffusion*, Oxford University Press.

DRM – RJ - Departamento de Recursos Minerais, 2001, *Poços Tubulares e outras Captações de Águas Subterrâneas – Orientações aos Usuários*, disponível em <http://www.drm.rj.gov.br>, acessada em abril de 2005.

DOMENICO, P.A., SCHWARTZ, F.W., 1998. *Physical and Chemical Hydrogeology*, John Wiley, New York.

FABRITZ, J.E., 1995, "A Two Dimensional Numerical Model for Simulating the Movement and Biodegradation of Contaminants in a Saturated Aquifer", Tese de Mestrado, Universidade de Washington.

FETTER, C.W., 1993, *Contaminant Hydrogeology*. New York: Macmillian Publish Company, pp 458.

FETTER, C.W., 1994, *Applied Hydrogeology*. New Jersey.

FETTER, C.W., 1999, *Contaminant Hydrogeology*, 2<sup>nd</sup>. Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, USA, pp 501.

FINKELSTEIN, A., 1970, *Publicação Técnica*. Companhia T. Janér.

FREEZE, R.A., CHERRY, J.A, 1979, *Groundwater*. New Jersey: Prentice-Hall.

- GELHAR, L.G., 1993, *Stochastic Subsurface Hydrology*. Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall.
- van GENUCHTEN, M.Th., ALVES, W.J., Analytical solutions of the one-dimensional convective-dispersive solute transport equation. USDA Tech Bull 1982;1661.
- van GENUCHTEN, M.Th., WAGENET, R.J.,1989, “Two-site/two-region models for pesticide transport and degradation: theoretical development and analytical solutions”, *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol 53, pp 1303 - 1310.
- HEILBRON, P.F.L, SALVADOR, J.S.P., PONTEDEIRO, E.M., RUPERTI, N.J., 2002, “Analytical Model for Environmental Impact of Solid Waste Disposal from Electricity Generation”, *Hibrid Methods in Engineering*, Vol. 4, pp 1 - 26.
- HUANG, K., MOHANTY, P.B., LEIJ, F.J., van GENUCHTEN, M.T., 1998, “Solution of the non-linear transport equation using modified Picard iteration”, *Advances in Water Resources*, Vol. 21, pp. 237 - 249.
- HUNT, B., 1978, “Dispersive sources in uniform ground-water flow”, *Journal of Hydraulics Division*, Vol. 104, pp. 75 - 85.
- IAEA - International Atomic Energy Agency, 2004, *Application of Safety Assessment Methodologies for Near Surface Disposal Facilities - ASAM Project*, Vienna.
- ICRP - International Commission on Radiation Protection, 1979, *Limits for Intake of Radionuclides by Workers*, Oxford Pergamon Press, ICRP Publication 30, Ann. ICRP3, 1-4.
- ICRP - International Commission on Radiological Protection, 2001, *ICRP Database of Dose Coefficients: Workers and Members of the Public, version 2.0.1*.
- ISML Library, 1989, MATH/LIB., Houston.
- LEAL, M.A., RUPERTI, N.J., 2000, “A Numerical Study for the Two-Dimensional Solute Transport in Groundwater Pathway via Integral Transform Method”, *Hybrid Methods in Engineering*, New York, Vol. 2, n<sup>o</sup>. 1.

LEAL, M.A., RUPERTI, N.J., 2001, "A Hibrid Solution for Simulation of 2-D Contaminant Transport in Heterogeneous Subsurface Systems", *Hybrid Methods in Engineering*, Vol. 3, pp. 129 - 144.

LEIJ, F.J., DANE, J.H., VAN GENUCHTEN, M.T., 1991, "Mathematical analysis of one-dimensional solute transport in a layered soil profile", *Soil Sci. Soc. Am. J.*, Vol 55, pp 944-953.

LEIJ, F.J., TORIDE, N., van GENUCHTEN, M.Th., 1993, "Analytical solutiona for non-equilibrium solute transport in three-dimensional porous media", *Journal of Contaminat Hydrology*, Vol. 151, pp 193-228.

LIU, C., BALL, W.P., ELLIS, J.H., 1998, "An analytical solution to one-dimensional solute advection-dispersion equation in multi-layer porous media", *Transport Porous Media*, Vol. 30, pp 25-43.

LIU, C., SZECSDY, J.E., ZACHARA, J.M., BALL, W.P., 2000, "Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media", *Advances in Water Resources*, Vol. 23, pp. 483 - 492.

LUZ NETO, H., QUARESMA, J.N.N., COTTA, R.M., 2001, "Integral transform algorithm for heat and fluid flow in trhee dimensional porous media", In: *Proceedings of the 2<sup>nd</sup> International Conference on Computational Heat and Mass Transfer*, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil, Outubro.

MIKHAILOV, M. D., OZISIK, M. N., VULCHANOV, N. L., 1983, "Diffusion in composite layers with automatic solution of the eigenvalue problem", *Int. J. Heat Transfer*, Vol 26, pp. 1131–1141.

MIKHAILOV, M.D., OZISIK, M. N., 1984, *Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Transfer*, Dover.

MIKHAILOV, M.D., COTTA, R.M., 1996, "Ordering Rules for Double and Triple Eigenseries in the Solution of Multidimensional Heat and Fluid Flow Problems", *Int. Comm. Heat and Mass Transfer*, Vol. 23, pp. 299 - 303.

NEUPAUER, R.M., BORCHES, B., WILSON, J.L., 2000, “Comparison of inverse methods for reconstructing the release history of a groundwater contamination source”, *Water Resour. Res.*, Vol. 39, pp. 2469 - 2475.

NOBRE *et al.*, 2005, “Remediação de Solos”, *Revista Química e Derivados*, disponível em <http://www.quimica.com.br/quimicaederivados.htm> acessada em maio de 2005.

OSTWALD, P.N, COTTA, R. M., 1992, “Simulation of radionuclides migration in porous media through integral transform method”, In *Proceedings of 4<sup>th</sup> National Thermal Sciences Meeting - ENCIT-92*, Rio de Janeiro, Brasil, Dezembro, pp. 325-328.

PARK, E., ZHAN, H., 2001, “Analytical solutions of Contaminant Transport from Finite one-, two-, and three-dimensional Sources in a Finite-thickness Aquifer”, *Journal of Contaminat Hydrology*, Vol. 53, pp 41-61.

PEPER, D.W., CHEN, Y., LI, L., 1995, “Subsurface Transport Using Adaptative Finite Elements”, Disponível em: < [http://www.unlv.edu/Research\\_Centers/NCACM/HTML/research/gwt/publication\\_wpoll99a1.pdf](http://www.unlv.edu/Research_Centers/NCACM/HTML/research/gwt/publication_wpoll99a1.pdf)>

QUEZADA, C.R., CLEMENT, T.P., LEE, K.K., 2004, “Generalized solution to multi-dimensional multi-species transport equations coupled with a first-order reaction network involving distinct retardation factors”, *Advances in Water Resources*, Vol. 27, pp. 507 – 520.

ROMANI, Z.V., COTTA, R.M., GUERRERO, J.S.P., HEILBRON FILHO, P.F.L, 1997, “Analysis of Radioactive Waste Contamination in Soils. Part I:- Integral Transform Solutions” In: *Int. Conf. on the Radiological Accident of Goiânia - 10 Years Later*, Goiânia, Vol. 1, pp. 1-6.

RUPERTI, N.J., 2002, “Estimation of the release history of a contaminant source in 2-D groundwater systems”, In: *4<sup>th</sup> International Conference on Inverse Problems in Enginneering*, Rio de Janeiro, Brasil.

SAGAR, BUDHI, 1982, “Dispersion in three dimensions: Approximate analytical solutions”, *Journal of Hydraulics Division*, Vol. 108, pp. 47 - 62.

SERRANO, 2001, "Solute transport under non-linear sorption and decay", *Water Resour.*, Vol. 35, pp 1525 - 1533.

SHAN, C., JAVANDEL, I., 1997, "Analytical solutions for solute transport in a vertical aquifer section", *Journal of Contaminat Hydrology*, Vol. 27, pp. 63 - 82.

SUN, N.Z., 1989, "Applications of Numerical Methods to Simulate the Movement of Contaminants in Groundwater", *Environmental Health Perspective*, Vol. 83, pp. 97 – 115.

VASCONCELLOS, C.A.B., 2001, "*Simulação Numérica de Escoamentos em Meios Porosos não Saturados*", Tese de Mestrado, IME, Rio de Janeiro, RJ.

UNESCO, 1992, *GroundWater*, Environment and Development Briefs.

USEPA - US Environmental Protection Agency, 1999, Integrated Risk Information (IRIS) web-based information system

WEXLER, E.J., 1992, *Analytical solutions for one-, two-, and three-dimensional solutetransport in ground-water systems with uniform flow*. U.S. Geological Survey, Techniques of Water-Resources Investigations, Book 3, Chap. B7.

WOOD, W. W., KRAMER, T. P., HEM, P.P., 1990. "Intergranular diffusion: An important mechanism influencing solute transport in clastic aquifers", *Science*, Vol 247, pp 1569 – 1572.

YONG, R.N., MOHAMED, A.M.O, WARKENTIN, B.P., 1992. *Principles of contaminant transport in soils*, Netherlands: Elsevier Science Publishers.

ZHENG, C., BENNETT, G.D., 1995, *Applied Contaminant Transport Modeling, Theory and Prattice*, Van Nostrand-Reinhold, New York, USA.

## ANEXO A

### PROPRIEDADE DE ORTOGONALIDADE

Esse anexo, de acordo com Liu *et al.* (1998), prova a ortogonalidade das funções autovalores definidas pelas Equações (IV.23) e (IV.25). Primeiramente, aplica-se o operador

$$\int_{z_0}^{z_N} \frac{\mathcal{E}(z)\psi_r(z)}{N_n^{1/2}} dz$$

em ambos os lados da Equação (IV.18) correspondendo ao n-ésimo autovalor. Aplica-se, então, o operador

$$\int_{z_0}^{z_N} \frac{\mathcal{E}(z)\Psi_n(z)}{N_n^{1/2}} dz$$

em ambos os lados da Equação (IV.18) correspondendo ao r-ésimo autovalor. Essas operações produzem as seguintes expressões:

$$\begin{aligned} & \int_{z_0}^{z_N} \mathcal{E}(z)\Psi_r(z) \left( \frac{d}{dz} \left( D(z) \frac{d\Psi_n(z)}{dz} \right) + R(z)\beta_n^2 \Psi_n(z) \right) dz = \\ & \sum_{k=1}^N \int_{z_k}^{z_{k+1}} \mathcal{E}_k \psi_{kr}(z) \left( \frac{d}{dz} \left( D_i \frac{d\psi_{kn}(z)}{dz} \right) + R_k \beta_n^2 \psi_{kn}(z) \right) dz = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

$$\begin{aligned} & \int_{z_0}^{z_N} \mathcal{E}(z)\Psi_n(z) \left( \frac{d}{dz} \left( D(z) \frac{d\Psi_r(z)}{dz} \right) + R(z)\beta_r^2 \Psi_r(z) \right) dz = \\ & \sum_{k=1}^N \int_{z_k}^{z_{k+1}} \mathcal{E}_k \psi_{kn}(z) \left( \frac{d}{dz} \left( D_i \frac{d\psi_{kr}(z)}{dz} \right) + R_k \beta_r^2 \psi_{kr}(z) \right) dz = 0 \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Integrando por partes as Equações (A.1) e (A.2), subtraindo (A.1) de (A.2) e rearranjando os resultados, tem-se:



$$\begin{aligned}
& \sum_{k=1}^N \varepsilon_k D_k \psi_{kn} \frac{d\psi_{kr}(z)}{dz} \Big|_{z_k}^{z_{k+1}} - \sum_{k=1}^N \varepsilon_k D_k \psi_{kr} \frac{d\psi_{kn}(z)}{dz} \Big|_{z_k}^{z_{k+1}} = \\
& (\beta_r^2 - \beta_n^2) \sum_{k=1}^N \varepsilon_k R_k \int_{z_k}^{z_{k+1}} \psi_{kr}(z) \psi_{kn}(z) dz = \\
& (\beta_r^2 - \beta_n^2) \int_{z_0}^{z_N} \varepsilon(z) R(z) \psi_r(z) \psi_n(z) dz = 0
\end{aligned} \tag{A.3}$$

A ortogonalidade é provada desde que  $\beta_r$  e  $\beta_n$  sejam distintos.

## ANEXO B

### CÁLCULO DOS COEFICIENTES DA MATRIZ DO SISTEMA

Cálculo dos coeficientes da matriz A efetuados no *MATHEMATICA*:

$$\omega[i_, j_] := \beta[[j]] * \sqrt{\frac{Rd[[i]]}{Dz[[i]]}}$$

$$\psi z[z_, i_, j_] := \frac{\psi[[j]][[i]]}{\text{sqrtNorm}[[j]]} * \frac{\text{Sin}[\omega[i, j] (zz[[i+1]] - z)]}{\text{Sin}[\omega[i, j] (zz[[i+1]] - zz[[i]])]} + \frac{\psi[[j]][[i+1]]}{\text{sqrtNorm}[[j]]} * \frac{\text{Sin}[\omega[i, j] (z - zz[[i]])]}{\text{Sin}[\omega[i, j] (zz[[i+1]] - zz[[i]])]}$$

Anr[n\_, r\_] :=

$$\sum_{i=1}^{Nc} (\text{Csc}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) \omega[i, n]] \text{Csc}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) \omega[i, r]] \\ v[[i]] \in [[i]] \omega[i, r] \\ (\psi[[n]][[i]] \\ (2 (-\text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) \omega[i, n]] + \\ \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) \omega[i, r]]) \psi[[r]][[1+i]] \omega[i, n] + \\ \psi[[r]][[i]] \\ ((-2 + \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] - \omega[i, r])]) + \\ \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] + \omega[i, r])]) \omega[i, n] + \\ (\text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] - \omega[i, r])]) - \\ \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] + \omega[i, r])]) \omega[i, r])) + \\ \psi[[n]][[1+i]] \\ (2 (\text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) \omega[i, n]] - \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) \omega[i, r]]) \\ \psi[[r]][[i]] \omega[i, n] - \\ \psi[[r]][[1+i]] \\ ((-2 + \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] - \omega[i, r])]) + \\ \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] + \omega[i, r])]) \omega[i, n] + \\ (\text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] - \omega[i, r])]) - \\ \text{Cos}[(zz[[i]] - zz[[1+i]]) (\omega[i, n] + \omega[i, r])]) \omega[i, r])))) / \\ (2 \text{sqrtNorm}[[n]] \text{sqrtNorm}[[r]] (\omega[i, n] - \omega[i, r]) (\omega[i, n] + \omega[i, r])))$$

$$\begin{aligned}
& \text{Ann}[n, n] := \\
& \beta[n]^2 + \\
& \sum_{i=1}^3 \left( \frac{1}{\text{sqrtNorm}[n]^2} \right. \\
& \quad \left( 1. \text{Csc}[-zz[i] + zz[1+i]] \omega[i, n] \right)^2 v[i] \in [i] \\
& \quad \left( \frac{1}{4} \text{Cos}[2zz[i] \omega[i, n]] \right. \\
& \quad \quad \left( \text{Cos}[2zz[1+i] \omega[i, n]] \psi[n][i]^2 - \right. \\
& \quad \quad \quad 2 \text{Cos}[zz[i] \omega[i, n] + zz[1+i] \omega[i, n]] \psi[n][i] \psi[n][1+i] + \\
& \quad \quad \quad \left. \text{Cos}[2zz[i] \omega[i, n]] \psi[n][1+i]^2 \right) - \\
& \quad \quad \frac{1}{4} \text{Cos}[2zz[1+i] \omega[i, n]] \\
& \quad \quad \left( \text{Cos}[2zz[1+i] \omega[i, n]] \psi[n][i]^2 - \right. \\
& \quad \quad \quad 2 \text{Cos}[zz[i] \omega[i, n] + zz[1+i] \omega[i, n]] \psi[n][i] \psi[n][1+i] + \\
& \quad \quad \quad \left. \text{Cos}[2zz[i] \omega[i, n]] \psi[n][1+i]^2 \right) - \\
& \quad \quad \frac{1}{4} \text{Sin}[2zz[i] \omega[i, n]] \\
& \quad \quad \left( -\psi[n][1+i]^2 \text{Sin}[2zz[i] \omega[i, n]] - \right. \\
& \quad \quad \quad \psi[n][i]^2 \text{Sin}[2zz[1+i] \omega[i, n]] + \\
& \quad \quad \quad \left. 2 \psi[n][i] \psi[n][1+i] \text{Sin}[zz[i] \omega[i, n] + zz[1+i] \omega[i, n]] \right) + \\
& \quad \quad \frac{1}{4} \text{Sin}[2zz[1+i] \omega[i, n]] \\
& \quad \quad \left( -\psi[n][1+i]^2 \text{Sin}[2zz[i] \omega[i, n]] - \right. \\
& \quad \quad \quad \psi[n][i]^2 \text{Sin}[2zz[1+i] \omega[i, n]] + \\
& \quad \quad \quad \left. 2 \psi[n][i] \psi[n][1+i] \text{Sin}[zz[i] \omega[i, n] + zz[1+i] \omega[i, n]] \right) \left. \right) \left. \right)
\end{aligned}$$

# Livros Grátis

( <http://www.livrosgratis.com.br> )

Milhares de Livros para Download:

[Baixar livros de Administração](#)

[Baixar livros de Agronomia](#)

[Baixar livros de Arquitetura](#)

[Baixar livros de Artes](#)

[Baixar livros de Astronomia](#)

[Baixar livros de Biologia Geral](#)

[Baixar livros de Ciência da Computação](#)

[Baixar livros de Ciência da Informação](#)

[Baixar livros de Ciência Política](#)

[Baixar livros de Ciências da Saúde](#)

[Baixar livros de Comunicação](#)

[Baixar livros do Conselho Nacional de Educação - CNE](#)

[Baixar livros de Defesa civil](#)

[Baixar livros de Direito](#)

[Baixar livros de Direitos humanos](#)

[Baixar livros de Economia](#)

[Baixar livros de Economia Doméstica](#)

[Baixar livros de Educação](#)

[Baixar livros de Educação - Trânsito](#)

[Baixar livros de Educação Física](#)

[Baixar livros de Engenharia Aeroespacial](#)

[Baixar livros de Farmácia](#)

[Baixar livros de Filosofia](#)

[Baixar livros de Física](#)

[Baixar livros de Geociências](#)

[Baixar livros de Geografia](#)

[Baixar livros de História](#)

[Baixar livros de Línguas](#)

[Baixar livros de Literatura](#)  
[Baixar livros de Literatura de Cordel](#)  
[Baixar livros de Literatura Infantil](#)  
[Baixar livros de Matemática](#)  
[Baixar livros de Medicina](#)  
[Baixar livros de Medicina Veterinária](#)  
[Baixar livros de Meio Ambiente](#)  
[Baixar livros de Meteorologia](#)  
[Baixar Monografias e TCC](#)  
[Baixar livros Multidisciplinar](#)  
[Baixar livros de Música](#)  
[Baixar livros de Psicologia](#)  
[Baixar livros de Química](#)  
[Baixar livros de Saúde Coletiva](#)  
[Baixar livros de Serviço Social](#)  
[Baixar livros de Sociologia](#)  
[Baixar livros de Teologia](#)  
[Baixar livros de Trabalho](#)  
[Baixar livros de Turismo](#)