



**Julio Ernesto Macías Alvarenga**

**MODELAGEM NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE VÍRUS EM  
AQÜÍFEROS FRATURADOS - POROSOS**

**Tese de Doutorado**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil.

Orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Rio de Janeiro

Abril de 2008

# **Livros Grátis**

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

Milhares de livros grátis para download.



**Julio Ernesto Macías Alvarenga**

**Modelagem Numérica do Transporte de Vírus em  
Aqüíferos Fraturados - Porosos**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

**Eurípedes do Amaral Vargas Jr.**

Orientador

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

**Luiz Fernando Campos Ramos Martha**

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

**Denise Maria Mano Pessoa**

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

**Roberto Francisco de Azevedo**

Departamento de Engenharia Civil – UFV

**João Luiz Elias Campos**

Consultor

**José Eugênio Leal**

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 07 de Abril de 2008

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

### **Julio Ernesto Macías Alvarenga**

Geólogo graduado pela Universidade da Costa Rica. Mestrado em Engenharia Civil na área de geotecnia pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

#### Ficha Catalográfica

Macías, Julio E.

Modelagem Numérica do Transporte de Vírus em aquíferos fraturados – porosos / Julio E. Macías Alvarenga; orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr. – Rio de Janeiro: PUC, Departamento de Engenharia Civil, 2008.

257 f.: il. ; 29,7 cm

Tese (doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Civil – Teses. 2. Transporte de vírus. 3. Aquífero fraturado – poroso. 4. Fluxo saturado-não saturado. 5. Modelagem numérica. I. Vargas júnior, Eurípedes do Amaral. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. III. Título.

CDD : 624

*Dedicatória:*

*A mis padres, por el dón de la vida y por la lucha constante de buscar lo mejor para sus hijos, especialmente em los tiempos de guerra.*

## **AGRADECIMENTOS**

Ao professor Eurípedes Vargas pela amizade e pela orientação durante a realização desta pesquisa.

A Olga pelo amor e carinho.

Aos colegas da PUC, Tiago, Favio, Luciana, Wagner, Roberto, Marcelo, Juan Pablo, Marlesu, pela amizade e pelos ensinamentos de vida.

Aos amigos Daniel, Johanna, Sergio, pelo convívio.

As instituições que financiaram esta pesquisa, CAPES, CNPq e TECGRAF.

Ao povo brasileiro pela oportunidade de desenvolver uma pesquisa que era do meu interesse fazia um bom tempo. Muito Obrigado!

## Resumo

Macías, Julio E.; Vargas Jr, Eurípedes do Amaral. **Modelagem Numérica do Transporte de Vírus em Aquíferos Fraturados - Porosos**. Rio de Janeiro, 2008. 252p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A avaliação do potencial de contaminação de capatações de água, por causa das águas residuais provenientes dos sistemas de tanque séptico, é feita a partir da definição da distância de separação mínima que deve existir entre a captação e o local de infiltração do efluente. A determinação dessa distância define a zona de proteção da captação. Existem três metodologias para definir o tamanho dessa zona de proteção: metodologias baseadas em distâncias fixas e tempos de trânsito, metodologias baseadas na vulnerabilidade e metodologias baseadas no risco de infecção.

No caso da Costa Rica, as avaliações são feitas através do uso da metodologia baseada no tempo de trânsito. O tempo de trânsito empregado corresponde ao tempo de sobrevivência dos vírus. Nesta análise determina-se a distância máxima percorrida pelos vírus durante esse tempo, e essa distância define a separação mínima. Esse método considera que o transporte ocorre por percolação vertical saturada através da zona não saturada, e por transporte ao longo da interface água-ar na zona saturada segundo o gradiente natural.

Neste trabalho apresenta-se um novo procedimento, baseado no risco de infecção, para a determinação da distância de separação considerando os efeitos da saturação variável e o fraturamento. Este procedimento determina a distância máxima percorrida, a partir do cálculo das concentrações de vírus. A distância de separação mínima corresponde à distância entre a fonte de injeção e o ponto aonde a concentração atinge o valor máximo de concentração permitida. Para o desenvolvimento deste novo procedimento foi implementado um código de programação que inclui: fluxo saturado-não saturado e transporte explícito nos poros e nas fraturas, advecção, dispersão, decaimento, sorção na superfície dos sólidos, sorção nas interfaces água-ar e água-sólido, filtração mecânica e exclusão de poros.

Foi realizada uma análise comparativa entre as metodologias acima descritas para três geometrias tipo representativas das condições estratigráficas de algumas áreas do Vale Central da Costa Rica. Os resultados obtidos indicaram que a metodologia normalmente empregada na Costa Rica pode ser inadequada para prever na maioria dos casos a possibilidade de contaminação.

### **Palavras-chave**

Transporte de vírus, Aquífero fraturado – poroso, Modelagem numérica, Fluxo saturado-não saturado.

## Abstract

Macías, Julio E.; Vargas Jr, Eurípedes do Amaral. **Numerical Modeling of Virus Transport in Fractured-Porous Media**. Rio de Janeiro, 2008. 252p. Ph.D. Thesis – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Setback distances of wellhead and catchments from septic tanks are established by three approaches: methods based on fixed setback distances or fixed travel times; methods based on vulnerability analysis and methods based on infection risk.

In Costa Rica, the determination of setback distances is based on fixed travel times. This approach considers that during a specified travel time all microorganisms will be inactivated, and that the distance traveled during this time defines the minimum safe separation. In this approach a unitary hydraulic gradient and saturated hydraulic conductivity are considered for transport in the unsaturated zone and the natural hydraulic gradient and saturated conductivity for transport in the saturated zone. Only advection is considered as the responsible mechanism for virus transport.

A new procedure is presented in this document to define the setback distance. This procedure is based on the infection risk approach. According to this approach the minimum required setback distance is defined as the distance between the injection point and the location where the contaminant reaches a maximum allowable concentration. This procedure was implemented in a computer code that considers variable saturated water flow, fractured-porous media, advection, dispersion, dynamic sorption, inactivation and mechanical filtration.

A comparative analysis was performed for three hypothetical geometries using the two approaches described. The results indicate the approach normally used in Costa Rica may not reproduce adequately the possibility of catchments and wellhead contamination.

## Keywords

Virus transport, fractured-porous aquifers, numerical modeling, variably saturated water flow.

## Sumário

Resumo	1
Palavras-chave	2
Abstract	3
Keywords	3
1 Apresentação	13
1.1. Motivação	13
1.2. Metodologia de Trabalho	14
1.3. Estrutura do Documento	16
2 Introdução	19
2.1. Zonas de Proteção	26
2.2. Aquíferos	28
2.3. Modelos Conceituais	31
2.3.1. Modelos Conceituais para o Fluxo em Saturação Variável	31
2.3.2. Modelos Conceituais para o transporte de poluentes	37
2.4. Modelos Matemáticos	38
2.5. Revisão da aplicação dos Modelos para Fluxo e Transporte	42
2.5.1. Contínuo - Contínuo Equivalente	43
2.5.2. Contínuo - Contínuo Equivalente com porosidade composta	45
2.5.3. Dupla Porosidade e Dupla Permeabilidade	45
2.5.4. Fraturado Discreto	47
2.5.5. Fraturado Poroso	47
2.6. Revisão dos modelos de transporte de vírus	48
2.7. Literatura Nacional	50
2.8. Objetivos	51

3 Vírus	54
3.1. Vírus	57
3.2. Fatores que regulam a sobrevivência	60
3.3. Transporte de Vírus	63
3.3.1. Adveção – Dispersão	63
3.3.2. Inativação	67
3.3.3. Sorção	68
3.3.4. Filtração (Straining)	73
4 Equações do Problema e Solução Numérica	85
4.1. Equações do Fluxo	85
4.2. Equações do Transporte de Vírus	86
4.3. Discretização das Equações	89
4.4. Programa VirTran-3D	91
5 Validação Numérica	97
5.1. Validação Numérica do Fluxo	98
5.1.1. Fluxo em Regime Saturado	99
5.1.2. Fluxo em Regime Não Saturado	99
5.2. Validação Numérica do Transporte	100
5.2.1. Transporte em Regime Saturado	100
5.2.2. Transporte em Regime Não Saturado	107
5.3. Outras verificações numéricas	110
6 Análise Comparativa: Aquíferos do Vale Central	113
6.1. Aquíferos na Grande Área Metropolitana	118
6.2. Geometrias Tipo	120
6.3. Análise do Transporte – MTA <sub>v</sub>	125
6.4. Análise do Transporte – Programa VirTran-3D	127
6.5. Análise dos Resultados e Comparação das Metodologias	135
7 Conclusões e Sugestões	141
7.1. Conclusões	141

7.2. Sugestões	146
8 Referências Bibliográficas	148
APÊNDICE A: Equações Governantes do Problema	163
A.1. Equações que descrevem o Fluxo	163
A.1.1. Fluxo na Matriz	163
A.1.2. Fluxo na Fratura	169
A.2. Equações que descrevem o transporte de vírus	172
A.2.1. Transporte na Matriz	172
A.2.2. Transporte na Fratura	178
APÊNDICE B: Método dos Volumes Finitos (MVF)	184
B.1. Generalidades do MVF	184
B.2. Interpolação e Fluxos nas Interfaces	191
B.3. Condições de Contorno	193
APÊNDICE C: Solução Numérica – Equação de Fluxo na Matriz	194
C.1. Construção do Volume de Controle	194
C.2. Discretização Espacial	196
C.3. Efeito do Contorno	200
C.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	203
C.5. Discretização Temporal	203
APÊNDICE D: Solução Numérica – Equação de Fluxo na Fratura	205
D.1. Construção do Volume de Controle	205
D.2. Discretização Espacial	207
D.3. Efeito do Contorno	210
D.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	212
D.5. Discretização Temporal	213
APÊNDICE E: Solução Numérica – Equação de Transporte na Matriz	215
E.1. Construção do Volume de Controle	215
E.2. Discretização Espacial	217

E.3. Efeito do Contorno	223
E.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	226
E.5. Discretização Temporal	226
APÊNDICE F: Solução Numérica – Equação de Transporte na Fratura	228
F.1. Construção do Volume de Controle	228
F.2. Discretização Espacial	230
F.3. Efeito do Contorno	234
F.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	236
F.5. Discretização Temporal	237
APÊNDICE G: Solução Numérica – Equações Complementares	239
G.1. Equações da Matriz	239
G.2. Equações da Fratura	240
APÊNDICE H: Função de Interpolação Exponencial	243
Anexo 1: Soluções Analíticas	249
An.1. Fluxo Saturado Unidimensional em Regime Transiente	249
An.2. Transporte unidimensional de vírus no meio poroso saturado	249
An.3. Transporte unidimensional de colóides numa fratura saturada com abertura constante	251

## Lista de figuras

Figura 2.1. Esquema do Sistema de Tratamento por Tanque Séptico.	22
Figura 2.2. Esquema gráfico para o cálculo da distância de separação.	25
Figura 2.3. Tipos de vazios: poros e fraturas	29
Figura 2.4. Perfil Esquemático dos Aqüíferos Livre e Confinado	30
Figura 2.5. Efeito da Saturação na Fratura.	33
Figura 2.6. Modelo do Fluxo Pelicular na Fratura	33
Figura 2.7. Modelos Conceituais para Aqüíferos Porosos e Fraturados.	36
Figura 2.8. Esquema gráfico da função composta para a permeabilidade do meio equivalente.	39
Figura 3.1. Tamanhos Característicos de Partículas e Poros	58
Figura 3.2 Estrutura de um Vírus Bacteriófago	58
Figura 3.3. Esquema conceitual do fenômeno de exclusão	64
Figura 3.4. Mecanismos de Sorção e Filtração.	69
Figura 3.5. Mecanismos de Colisão da Teoria da Filtração Coloidal	70
Figura 5.1. Geometria para a validação bidimensional.	98
Figura 5.2. Geometria para a validação tridimensional.	98
Figura 5.3 Fluxo Transiente Saturado - Comparação dos Resultados.	99
Figura 5.4 Fluxo Transiente não Saturado - Comparação dos Resultados.	100
Figura 5.5 Transporte Caso I com condição de Tipo Dirichlet	102
Figura 5.6 Transporte Caso I com condição de Tipo Neuman	102
Figura 5.7 Transporte Caso II com condição de Tipo Dirichlet	103
Figura 5.8 Transporte Caso II com condição de Tipo Neuman	103
Figura 5.9 Transporte na Fratura com condição de Tipo Dirichlet	105
Figura 5.10 Transporte na Fratura com condição de Tipo Neuman	105
Figura 5.11 Geometria do Meio Fraturado – Poroso.	106
Figura 5.12 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Dirichlet	106
Figura 5.13 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Neuman.	107

Figura 5.14 Transporte no Meio Poroso em condição de fluxo permanente não saturado.	108
Figura 5.15 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da carga de pressão no ponto de observação.	109
Figura 5.16 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da concentração no ponto de observação.	110
Figura 5.17 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com exclusão e sem exclusão	111
Figura 5.18 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com sorção e sem sorção na interface água-ar.	112
Figura 6.1 Variação da Concentração Segundo o MTA <sub>v</sub>	114
Figura 6.2 Variação da Concentração Segundo a Metodologia Baseada no Risco	114
Figura 6.3 Localização do Vale Central da Costa Rica	118
Figura 6.4 Estratigrafia dos Aqüíferos do Vale Central da Costa Rica	120
Figura 6.5 Geometrias Tipo.	121
Figura 6.6 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 1.	122
Figura 6.7 Modelo Hidrogeológico da Geometria 1.	122
Figura 6.8 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 2	123
Figura 6.9 Modelo Hidrogeológico da Geometria 2.	123
Figura 6.10 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 3.	124
Figura 6.11 Modelo Hidrogeológico da Geometria 3.	124
Figura 6.12. Resultados das Análises da Geometria 1.	132
Figura 6.13. Resultados das Análises da Geometria 2.	133
Figura 6.14. Resultados das Análises da Geometria 3.	134
Figura A1. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Unidimensional	163
Figura A2. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Tridimensional	164
Figura A3. Volume de Referência na Fratura. Fluxo Tridimensional	170

Figura A4. Volume de Referência no meio poroso.	
Transporte Unidimensional	173
Figura A5. Volume de Referência no Meio Poroso.	
Transporte Tridimensional	174
Figura A6. Volume de Referência na Fratura.	
Transporte Tridimensiona	1179
Figura B1. Esquema de armazenamento (modificado de Barth T. e Ohlberger, 2004)	186
Figura B2. Volume de Controle e subvolumes de controle para o nó 1.	187
Figura C1. Subvolume de controle para o nó i, planos internos.	195
Figura C2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.	195
Figura D1. Volume de controle para o nó i.	206
Figura E2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.	217
Figura F1. Volume de controle para o nó i.	229
Figura H1. Sistemas de Coordenadas para a aplicação da função de interpolação exponencial.	245
Figura H2. Exemplo de Aplicação.	247

## Lista de tabelas

Tabela 3.1. Concentrações médias em efluentes domésticos	54
Tabela 3.2 Remoção de vírus e bactérias para diferentes sistemas de tratamento	55
Tabela 3.3. Concentrações de microorganismos em águas residuais domésticas cruas e no efluente secundário	56
Tabela 3.4 Tamanhos característicos de alguns microorganismos	57
Tabela 3.5. Doenças e organismos geradores	60
Tabela 3.6 Fatores que influenciam na sobrevivência das bactérias no solo	61
Tabela 3.7. Fatores que influenciam na sobrevivência e transporte dos vírus no solo.	61
Tabela 3.8. Tempos de sobrevivência dos organismos patogênicos	62
Tabela 3.9 Taxas de Inativação para as fases líquida ( $\mu_i$ ) e sorvida ( $\mu_s$ ), valores de Campo.	75
Tabela 3.9 Taxas de Inativação para as fases líquida ( $\mu_i$ ) e sorvida ( $\mu_s$ ), valores de Laboratório.	76
Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de campo.	77
Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de laboratório.	78
Tabela 3.11 Taxas de adsorção de colóides em fraturas, valores para condições de laboratório.	79
Tabela 3.12 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de laboratório.	80
Tabela 3.13 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de campo.	82
Tabela 3.14 Taxas de adsorção e desorção para meios porosos não saturados sob condições de laboratório.	83

Tabela 3.15 Taxas de filtração em meios porosos sob condições de campo e laboratório.	84
Tabela 6.1 Velocidades de Percolação – MTAv.	126
Tabela 6.2 Cálculos Intermediários – MTAv.	126
Tabela 6.3 Distâncias Percorridas – MTAv.	127
Tabela 6.4 Informações sobre as malhas geradas.	127
Tabela 6.5 Condições de contorno para a simulação do fluxo.	129
Tabela 6.6 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 1.	130
Tabela 6.7 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 2.	130
Tabela 6.8 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 3.	130
Tabela 6.9 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 1.	131
Tabela 6.10 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 2.	131
Tabela 6.11 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 3.	131
Tabela 6.12. Distâncias percorridas normalizadas com os valores do método MTAv.	135
Tabela 6.13. Distâncias percorridas normalizadas com os valores do método MTAv.	138

# 1 Apresentação

São apresentadas a seguir: a motivação para a escolha do tema da investigação, a metodologia de trabalho e a descrição do conteúdo deste documento.

## 1.1. Motivação

Como parte do procedimento de licenciamento ambiental de qualquer obra civil é necessária a avaliação dos possíveis impactos sobre os elementos ambientais com os quais a obra virá ou poderá vir interagir. Na Costa Rica, onde uma boa parte da água para consumo humano é obtida através de captações de águas subterrâneas, é sempre necessário avaliar os possíveis impactos dos projetos civis sobre essas fontes de água. De especial interesse são os projetos urbanísticos habitacionais onde são geradas águas residuais de maneira contínua e prolongada. Essas águas residuais podem conter substâncias químicas e organismos patogênicos nocivos para a saúde.

Na Costa Rica todo projeto urbanístico deve avaliar o potencial de contaminação das fontes de água para consumo humano, por causa dos possíveis organismos patogênicos presentes nas águas residuais nele geradas. O procedimento de avaliação empregado na Costa Rica consiste na verificação da distância máxima percorrida pelos organismos a partir da fonte de injeção durante um tempo predeterminado. Essa distância máxima é conhecida como distância de separação e dentro dela não deve existir nenhum sistema de captação de água. O valor do tempo empregado na análise é chamado de tempo de trânsito, e é definido como o tempo para o qual é prevista a inativação de todos os organismos injetados no terreno. A distância de separação é calculada a partir do transporte advectivo dos vírus na condição saturada. Esse procedimento de cálculo é denominado neste documento como Método de Transporte Advectivo (MTAv).

Na prática profissional, o autor deste trabalho teve a oportunidade de participar de diversos projetos em diferentes regiões da Costa Rica. Em muitas ocasiões resultava claro que a modelagem feita com o MTAv não representava as condições encontradas no local, como a presença de fraturas e a não saturação do terreno, condições comuns na maior parte do território da Costa Rica. Além disso o MTAv não incorpora o efeito de outros mecanismos normalmente relacionados com o transporte de poluentes como a dispersão e a sorção em equilíbrio, e também não considera outros mecanismos de transporte (que antes do início desta pesquisa não eram conhecidos pelo autor como mecanismos importantes no transporte dos patógenos e que viriam a ser descobertos durante a mesma), como a sorção dinâmica nas superfícies dos sólidos e na interface água-ar, a filtração mecânica e a exclusão de poros. (A sorção dinâmica acontece quando as taxas de adsorção e desorção não estão equilibradas. Ao longo deste trabalho o nome sorção dinâmica será empregado para representar sorção nas superfícies sólidas).

Devido ao impacto direto nas economias das pessoas e dos projetos, é importante que na determinação das distâncias de separação sejam consideradas as condições reais de fluxo e de transporte. Devido a essa importância, surgiu como iniciativa do autor a possibilidade de pesquisar formalmente sobre o assunto com o intuito de entender os mecanismos envolvidos no transporte dos patógenos, desenvolver uma metodologia que incorporasse esses mecanismos para ser aplicada nas condições da Costa Rica, e comparar os resultados assim obtidos com aqueles dados pelo MTAv.

## **1.2. Metodologia de Trabalho**

O desenvolvimento desta pesquisa incluiu diferentes etapas. Inicialmente, foi feita uma revisão geral da literatura nacional e internacional sobre o tema, com o objetivo de reconhecer os fenômenos envolvidos no transporte dos patógenos e também com o objetivo de verificar as ferramentas disponíveis na PUC-Rio para o desenvolvimento de uma metodologia que incorporasse esses fenômenos. A partir dessa revisão inicial foram definidos os objetivos gerais e específicos da pesquisa (apresentados no Capítulo 2), e também foi definida a proposta formal da tese de doutorado. Após esta revisão bibliográfica foi decidido tratar apenas do transporte

de vírus, principalmente por causa do tempo disponível para a pesquisa. A metodologia desenvolvida, no entanto, poderia (com poucas modificações) simular o transporte de outros microrganismos como bactérias, protozoários e ovos de helmintos. A revisão da bibliografia foi uma atividade contínua durante o tempo de pesquisa.

A partir desta revisão bibliográfica foram obtidas as equações diferenciais que descrevem o fluxo e o transporte de vírus na fratura e no meio poroso. Essas equações foram discretizadas através do Método dos Volumes Finitos (MVF) para posteriormente serem incorporadas num código de programação. A discretização foi feita com o MVF porque a conservação é garantida no volume de integração, propriedade importante se tratando do transporte de massa. A utilização do MVF respondeu também ao fato de não se ter experiência no Departamento de Engenharia Civil no desenvolvimento de ferramentas de grande porte baseadas nesse método. Isto permitiria comparar o desempenho do MVF com o desempenho das outras ferramentas de grande porte já desenvolvidas e baseadas na discretização pelo Método dos Elementos Finitos (MEF). Esta etapa de discretização das equações do problema consumiu alguns meses de trabalho enquanto o MVF era plenamente compreendido. No total foram discretizados cinco sistemas de equações:

- Sistema para simular o fluxo numa fratura
- Sistema para simular o fluxo na matriz porosa
- Sistema para simular o transporte de vírus na fratura
- Sistema para simular o transporte de vírus na matriz porosa
- Sistema para simular as concentrações sorvidas de vírus nas fraturas e na matriz porosa

A partir da revisão das diferentes ferramentas computacionais disponíveis na PUC-Rio para a simulação do fluxo e transporte de solutos, decidiu-se por motivos técnicos, programar as equações discretizadas num código independente dos módulos já existentes. Todas as rotinas de análise para este código foram desenvolvidas integralmente pelo autor deste trabalho, a exceção da rotina de impressão dos resultados para o processador gráfico POS3D, que foi modificada do trabalho de Telles (2006). O código foi implementado na linguagem FORTRAN 90 num programa modulado com mais de 6000 linhas em 70 sub-

rotinas. A programação desse código e os posteriores testes de validação da resposta numérica consumiram a maior parte do tempo da pesquisa e se estenderam além do tempo previsto.

Como referido na motivação, a idéia principal desta pesquisa é a de aplicar uma nova metodologia de análise às condições de fluxo e transporte reais da Costa Rica. Foi considerada inicialmente dentro do escopo da pesquisa, a realização de trabalhos de campo num local específico do “Valle Central da Costa Rica” (doravante denominado Vale Central). Porém, devido ao consumo inesperado do tempo durante a fase de programação e ao prazo imposto pelo programa de Doutorado, o escopo desta aplicação foi alterado. Foram definidas então três Geometrias Tipo representativas da estratigrafia de algumas áreas do Vale Central. As condições de fluxo nesses locais foram definidas a partir dos dados disponíveis pelo autor de consultorias nas quais teve participação. Os parâmetros de transporte dos vírus foram obtidos da literatura. A metodologia desenvolvida nesta pesquisa foi então aplicada na análise dessas três Geometrias Tipo e os resultados comparados como os obtidos com o MTAv. Embora os valores numéricos absolutos obtidos nesta análise não representem fielmente as condições reais de transporte no Vale Central, é possível de forma comparativa analisar a influência dos mecanismos não incorporados no MTAv na distribuição dos vírus no terreno e portanto nas distâncias máximas percorridas.

### **1.3. Estrutura do Documento**

O documento foi estruturado em oito capítulos, oito apêndices e um anexo. O conteúdo de cada uma destas partes é descrito a seguir.

Capítulo 2. Neste capítulo é feita uma introdução ao tema da pesquisa e são revisados os modelos conceituais para o fluxo e transporte em meios fraturados e porosos. A revisão bibliográfica da literatura internacional e nacional é também apresentada. Neste capítulo ainda são colocados os objetivos que nortearam este trabalho.

Capítulo 3. Neste capítulo são descritos os diferentes fenômenos ou mecanismos físicos até agora reconhecidos na literatura especializada como os fatores que controlam o transporte dos vírus através dos materiais geológicos. Uma breve introdução aos vírus é também apresentada junto ao conceito de tempo de sobrevivência.

Capítulo 4. São apresentadas neste capítulo as equações governantes do problema, a discretização resultante da aplicação do MVF e uma descrição geral das rotinas do código de programação desenvolvido.

Capítulo 5. Neste capítulo são mostradas as verificações numéricas dos resultados obtidos com o programa desenvolvido.

Capítulo 6. Neste capítulo é feita uma aplicação da metodologia desenvolvida na análise do transporte dos vírus em três geometrias do Vale Central. A comparação com os resultados do MTA<sub>v</sub> é também apresentada.

Capítulo 7. São apresentadas as conclusões e sugestões.

Capítulo 8. Neste capítulo é mostrada a lista das referências bibliográficas citadas no documento.

As informações dos capítulos acima referidos foram complementadas e ampliadas em oito apêndices e um anexo. Os apêndices foram redigidos de maneira tal que cada um deles pode ser consultado de forma independente. Cada apêndice constitui um documento técnico sobre cada tema abordado. A informação colocada nos apêndices é parte integral do trabalho desenvolvido nesta pesquisa e foi colocada nos apêndices para premiar o foco principal da tese que é o de entender os mecanismos do transporte e especialmente a aplicação destes mecanismos na análise de casos na Costa Rica. O conteúdo de cada apêndice é descrito a seguir.

- Apêndice A. São mostradas as deduções das equações de continuidade governantes do problema.
- Apêndice B. Neste apêndice é descrito o Método dos Volumes Finitos (MVF).
- Apêndice C. Neste apêndice é mostrada a discretização da equação que descreve o fluxo na matriz porosa.
- Apêndice D. Neste apêndice é mostrada a discretização da equação que descreve o fluxo na fratura.
- Apêndice E. Neste apêndice é mostrada a discretização da equação que descreve o transporte dos vírus na matriz porosa.
- Apêndice F. Neste apêndice é mostrada a discretização da equação que descreve o transporte dos vírus na fratura.
- Apêndice G. Neste apêndice é mostrada a discretização das equações que descrevem as concentrações nas fases sorvidas e filtradas tanto na fratura quanto na matriz.
- Apêndice H. Neste apêndice é descrita a função de interpolação exponencial empregada para aproximar o termo advectivo na equação de transporte.
- Anexo 1. Neste anexo são apresentadas as soluções analíticas utilizadas na validação numérica dos resultados.

## 2 Introdução

A água é um elemento essencial para a sobrevivência do homem e para o desenvolvimento da agricultura e da indústria. A água é também um elemento abundante na superfície da terra. Cerca de 97% dessa água se localiza nos oceanos sob a forma de água salgada e apenas um 3% nos continentes sob a forma de água doce (Fetter, 1994). Grande parte dessa água doce está concentrada nas calotas polares. Apenas 0,62% do total da água existente na superfície da terra apresenta condições apropriadas para o consumo humano, desde o ponto de vista da qualidade e da facilidade para ser captada. Dessa água própria para consumo, um 98% está armazenada nos mantos aquíferos. As águas subterrâneas constituem as maiores e as mais importantes fontes de abastecimento de água para as populações. Por causa da pouca abundância, as águas subterrâneas são um recurso valioso que deve ser utilizado de maneira racional.

O aumento da população, o crescimento da indústria e a expansão agrícola demandam a cada dia de maiores quantidades de água. No entanto, a quantidade disponível desse recurso é limitada. A procura por um balanço entre o crescimento populacional, o desenvolvimento econômico e o uso racional das fontes de água é um dos grandes desafios que enfrentam as sociedades modernas. Os problemas ambientais relativos às águas subterrâneas disponíveis para consumo humano podem ser divididos em dois grandes grupos: aqueles problemas relativos à poluição direta e aqueles problemas relativos à exploração desmedida. Os problemas relativos à poluição direta estão relacionados às atividades desenvolvidas na superfície e que geram resíduos líquidos que podem percolar através do terreno até os reservatórios de água ou até as captações. Exemplos desses resíduos líquidos são as descargas industriais, os licores provenientes dos aterros sanitários e “lixões”, as águas residuais provenientes de sistemas de tratamento primário como tanques sépticos. Os problemas relativos à exploração desmedida das águas subterrâneas entre outros são: falha no abastecimento,

principalmente nos grandes centros urbanos, subsidência do terreno e intrusão salina nas zonas costeiras.

Na Costa Rica, uma boa parte da água para consumo humano é obtida através de captações das águas subterrâneas, e por isto, é sempre necessário avaliar os possíveis problemas e impactos ambientais que as atividades desenvolvidas na superfície podem provocar nos mantos aquíferos e nas captações. De especial interesse são os projetos urbanísticos habitacionais onde são geradas águas residuais de maneira contínua e prolongada. Muitos projetos urbanísticos habitacionais são construídos em terrenos localizados acima dos aquíferos que abastecem à própria população. As águas residuais geradas nestes projetos podem conter substâncias químicas e organismos patogênicos nocivos para a saúde.

Alguns dados sobre a estatística populacional da Costa Rica são apresentados a seguir para ilustrar a dimensão do impacto ambiental potencial que as águas residuais representam para os mantos aquíferos. Segundo Astorga (2005), no *XI Informe Del Estado de la Nación de Costa Rica*, 92% da população é abastecida a partir de uma fonte de água subterrânea (72% a partir de mananciais e 20% a partir de poços). Rosales e Vargas (2001) indicam que 72% da população trata as águas residuais através de tanque séptico ou fossa séptica. O tratamento primário é então a principal forma de tratamento das águas residuais na Costa Rica, e as águas subterrâneas são a principal fonte de abastecimento. Denyer e Kussmaul (1994) indicam que mais de um 60% da população e quase todas as indústrias se concentram no Vale Central da Costa Rica, numa zona denominada *Grande Área Metropolitana* (GAM) que representa cerca de 11% da área total do país. O maior crescimento populacional ocorre nesta zona, e a cada ano cresce a procura por novos sítios para moradia. Isto é traduzido em novos projetos habitacionais, muitos dos quais são construídos em zonas de recarga ou acima dos aquíferos que abastecem à própria população. Este quadro demonstra o possível impacto ambiental que o desenvolvimento habitacional representa para os mantos aquíferos do país e especialmente para os aquíferos localizados na zona do Vale Central especialmente na GAM. Este quadro também reforça a importância de se realizarem estudos para analisar o potencial de contaminação dos mantos aquíferos por águas residuais provenientes dos sistemas de tratamento primário (tanque séptico, fossa séptica).

Para conseguir o balanço entre crescimento econômico e preservação das fontes de água, foram criados na Costa Rica leis e procedimentos com o objetivo de regular o impacto ambiental. Parte fundamental dessas leis é a criação da Secretaria Técnica Nacional Ambiental (SETENA), sendo que todo projeto de desenvolvimento deve solicitar o licenciamento ambiental na SETENA. O procedimento para obter o licenciamento tem basicamente duas etapas:

- Formulário de Avaliação Ambiental Preliminar (FEAP): A primeira etapa consiste, na apresentação do FEAP. O FEAP é um documento tipo formulário onde são solicitados os dados básicos do projeto (localização, tamanho, atividade, custo, etc). Dependendo do tipo de atividade a ser desenvolvida são estabelecidos requisitos *a priori*. Estes requisitos são na sua maioria estudos complementares como, estudos do terreno, estabilidade de encostas, águas subterrâneas, condições biológicas, entre outros.

- Estudo de Impacto Ambiental (EIA): Na segunda etapa, dependendo do tipo de projeto e do resultado da análise do FEAP, a SETENA pode solicitar a realização de um Estudo de Impacto Ambiental. Neste estudo novos requisitos são estabelecidos e são específicos para cada projeto. Nem todos os projetos necessitam realizar o EIA.

Para todos os projetos de desenvolvimento urbano (residências, urbanizações, hotéis), a SETENA solicita através do FEAP, a realização de uma análise sobre o impacto potencial das atividades do projeto sobre as águas superficiais e subterrâneas e sobre as captações próximas. Esta análise visa definir se o projeto afetará ou não aqueles elementos. No caso de afetar de maneira negativa, medidas preventivas ou de mitigação devem ser indicadas. A SETENA dedica especial atenção ao possível efeito das águas residuais geradas nesses projetos, particularmente à ameaça potencial de contaminação por organismos patogênicos.

Na Figura 2.1 é mostrado um esquema conceitual da relação entre o sistema de tratamento, as fontes de água e as captações. Nessa figura é mostrado um sistema de tratamento por tanque séptico. Um sistema desse tipo tem duas componentes, um tanque de sedimentação fabricado com materiais resistentes à

corrosão, e um campo de infiltração, composto por tubos perfurados e soterrados a uma profundidade variável entre 40 e 60 centímetros e apoiados sobre uma camada de pedregulho. As águas residuais são direcionadas para o tanque de sedimentação onde permanecem por vários dias. Durante esse tempo são sedimentadas as partículas sólidas e a matéria orgânica é degradada por ação bacteriana. O líquido remanescente (também conhecido como efluente) é direcionado para o campo de infiltração no qual virá percolar através da camada de pedregulho. A vazão injetada no terreno varia entre 189 e 265 litros / pessoa / dia (EPA,2002) dependendo do tipo de atividade geradora do efluente.

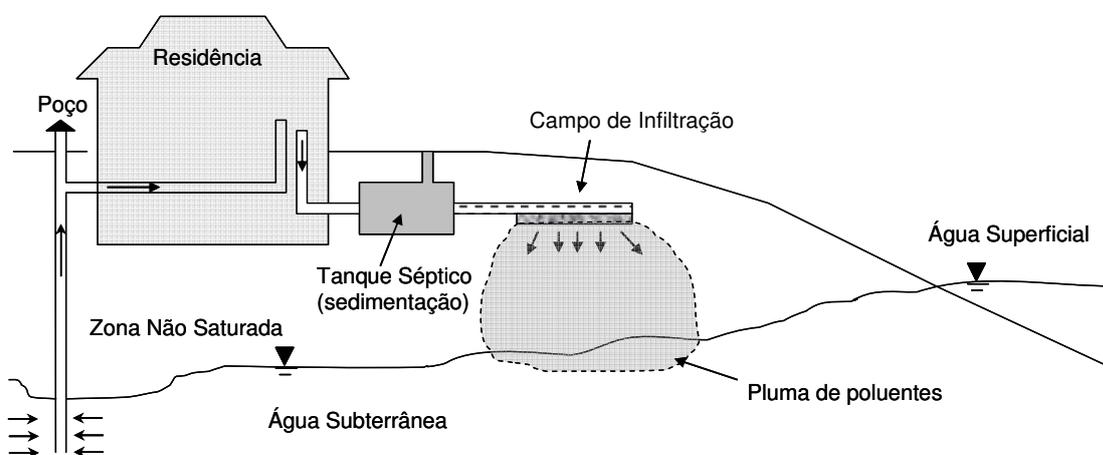


Figura 2.1. Esquema do Sistema de Tratamento por Tanque Séptico (baseado em Schwartz et al, 2004).

O procedimento de análise empregado na Costa Rica para avaliar o potencial de contaminação consiste na verificação da distância máxima percorrida pelos organismos a partir da zona de injeção (campo de infiltração) durante um tempo predeterminado. Essa distância máxima é conhecida como distância de separação e dentro dela não deve existir nenhum sistema de captação de água. O tempo empregado no cálculo dessa distância é chamado de tempo de trânsito e é definido como o tempo para o qual é prevista a inativação de todos os organismos injetados no terreno. O tempo de trânsito sugerido na Costa Rica é de 70 dias. O cálculo da distância de separação é feito a partir da velocidade de percolação saturada e do tempo de trânsito. A distância assim calculada considera apenas o transporte advectivo em condição saturada. Como indicado no Capítulo 1, esse procedimento de cálculo é denominado neste documento como Método de Transporte Advectivo (MTAv) e é descrito a seguir.

- A primeira etapa do MTAv consiste na investigação de campo. Nesta primeira etapa são realizados ensaios para determinar a permeabilidade saturada das camadas superficiais do terreno e também é feito um levantamento da zona de projeto para definir os limites físicos dessa zona, e a possível presença de captações e cursos de rios próximos. São coletadas amostras do solo para definir a porosidade.

- A segunda etapa do MATv consiste basicamente na compilação da informação existente sobre a zona de projeto. Essa compilação é usualmente feita a partir das informações do Cadastro Nacional de Poços. Com essas informações são definidas a estratigrafia do terreno, a geometria dos aquíferos presentes, e especialmente a permeabilidade das camadas mais profundas. Com esses dados é construído o modelo hidrogeológico da área. Na Costa Rica, os modelos hidrogeológicos desenvolvidos para este tipo de análise consideram os aquíferos como meios contínuos ou contínuos equivalentes.

- A terceira etapa consiste no cálculo da distância de separação. Na Figura 2.2 é apresentado um sistema simples de três camadas para explicar como essa distância é calculada. Considera-se inicialmente um gradiente hidráulico vertical unitário na zona não saturada. Isto é, existe fluxo apenas no sentido vertical dentro da zona não saturada. Seguidamente são definidas as velocidades de percolação para cada camada dentro da zona não saturada da seguinte maneira:

$$v_{n\acute{o}sat} = \frac{K_{sat}}{\theta} \quad (2.1)$$

Onde  $K_{sat}$  é o valor da permeabilidade saturada dos materiais presentes na zona não saturada e  $\theta$  a porosidade de cada material. No caso da Figura 2.2 interessam as velocidades de percolação vertical das três camadas. O método supõe que os vírus serão deslocados verticalmente com essa velocidade. A partir das velocidades de percolação vertical e das espessuras não saturadas, é calculado o tempo requerido para o vírus percolar através de cada material. A soma destes tempos define o tempo total necessário para o vírus chegar até o nível d'água subterrânea. Uma vez na zona saturada, o vírus será deslocado com a velocidade de percolação dada por (2.2).

$$v_{sat} = \frac{K_{sat}}{\theta} i \quad (2.2)$$

onde  $K_{sat}$  é o valor da permeabilidade saturada do material onde o nível d' água está formado  $\theta$ , a porosidade desse material e  $i$ , o gradiente hidráulico natural. Com este valor de velocidade e com o tempo resultante da diferença entre os tempos de trânsito e de chegada ao nível da água, é calculada a distância máxima ou de separação (projetada na horizontal) até a qual os vírus serão deslocados na zona saturada. O método MTAV ao não considerar dispersão, supõe que o deslocamento acontece na interface água-ar.

Se o tempo necessário para os vírus chegarem ao nível d' água for superior ou igual ao tempo de trânsito, então não haverá transporte na zona saturada e a distância de separação é nula. Neste caso o projeto não representa risco para as águas subterrâneas nem para as captações próximas, porém, a separação mínima entre o campo de infiltração e qualquer captação deve respeitar as distâncias mínimas estabelecidas na legislação ambiental.

Por outro lado, se o tempo de chegada até o nível de água for inferior ao tempo de trânsito, então existirá transporte na zona saturada e será necessário calcular a distância de separação até completar o tempo de trânsito. Se dentro da distância de separação calculada existir alguma captação ou se essa distância superar o limite da área do projeto, então a geometria do projeto deverá ser modificada. Essa modificação se faz necessária para garantir uma separação maior entre a zona de infiltração e a captação. Alternativamente, o projeto deverá procurar outro sistema de tratamento. Se dentro daquela distância de separação não existir nenhuma captação, o projeto tem viabilidade ambiental, mas deverá respeitar as distâncias de separação mínimas estabelecidas na lei no caso de serem construídas captações no futuro.

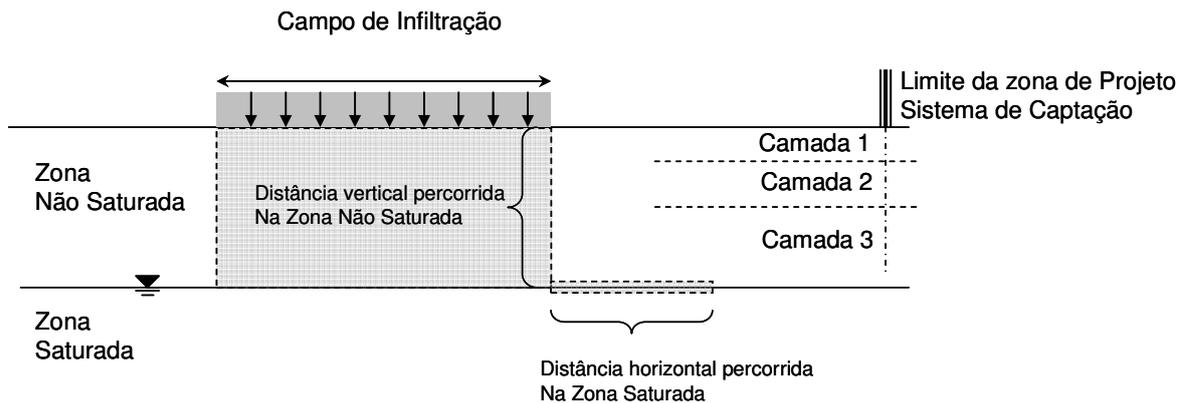


Figura 2.2. Esquema gráfico para o cálculo da distância de separação.

O procedimento de cálculo acima descrito apresenta sérias limitações para modelar outros processos físicos relacionados com o transporte de vírus, tais como: dispersão, difusão, inativação, sorção e filtração. Adicionalmente, a modelagem do fluxo como um problema de meio contínuo saturado não permite a incorporação do efeito explícito das fissuras ou fraturas e das condições de não saturação. O fraturamento e a não saturação são condições presentes na maior parte do território costarriquenho. O autor não tem conhecimento da existência na Costa Rica de um modelo de transporte de microrganismos que considere os efeitos da não saturação em meios fraturados e/ou porosos nem os mecanismos físicos citados. Para construir uma metodologia de análise que incorpore todos os aspectos não incorporados no MTA<sub>v</sub> é necessário responder a várias perguntas.

Quais são os modelos conceituais existentes para explicar o fluxo em meios fraturados e fraturados-porosos?

Quais são os modelos conceituais existentes para explicar o transporte de massa em meios fraturados e fraturados-porosos?

Quais são os modelos conceituais existentes para explicar o transporte de vírus nos meios porosos e fraturados?

Existe uma formulação matemática para descrever esses processos?

É possível simular sistemas complexos de fraturas em três dimensões?

É possível acoplar o fluxo e o transporte dos vírus em sistemas compostos por poros e fraturas?

Quais são as ferramentas disponíveis para construir uma metodologia do tipo procurada? Existem outras metodologias?

Para responder a essas e outras perguntas, foi feita uma revisão bibliográfica nacional e internacional. A partir desta revisão foi obtido um marco teórico que é apresentado neste capítulo e no Capítulo 3. Conceitos relevantes ao desenvolvimento desta pesquisa são desenvolvidos a seguir.

## 2.1. Zonas de Proteção

Zona de proteção é definida como aquela área ao redor da captação na qual são impostas restrições de uso com o objetivo de evitar a contaminação. Essa zona de proteção pode estar dividida em duas ou mais subzonas. O grau de restrição para cada subzona varia. A subzona adjacente à captação, normalmente referida como *zona de proteção da cabeça do poço/captação*, é a subzona onde as maiores restrições são impostas, justamente para evitar a contaminação direta da captação. As restrições para o uso do terreno diminuem na medida em que as subzonas se distanciam.

Chave et al (2006) apresentam um resumo das metodologias atualmente utilizadas no mundo para definir o tamanho das zonas de proteção. Essas metodologias podem ser agrupadas em três tipos.

- Metodologias baseadas em distâncias fixas e tempos de trânsito: Neste caso existem dois critérios para se definir a distância de separação. Um primeiro critério é baseado no uso de uma distância de separação fixa. Esta distância fixa supõe-se válida para qualquer condição de terreno e sua determinação baseia-se na experiência e o bom juízo. Esta distância de separação é em geral colocada nos regulamentos e leis ambientais como a distância mínima que deve existir entre a zona de infiltração e a captação. Essa distância define o tamanho da *zona de proteção da cabeça do poço/captação*. Na Costa Rica foi estabelecida uma separação mínima de 15 metros. Uma limitante séria das metodologias baseadas em distâncias fixas, é a não consideração das condições hidrogeológicas de cada local.

Um segundo critério para se definir a distância de separação baseia-se num cálculo simples a partir do tempo de trânsito. O tempo de trânsito a ser empregado corresponde ao tempo necessário para a degradação do poluente em análise. Tanto

os tempos de trânsito quanto as distâncias fixas são valores normalmente estipulados na legislação e regulamentos ambientais e variam de país a país. Segundo este critério, a distância percorrida pelo poluente naquele tempo definirá a separação que deve existir entre a zona de infiltração e a captação. É esta a metodologia empregada na Costa Rica como critério para avaliar o potencial de contaminação por águas residuais provenientes de tanques sépticos. Diferentemente do critério baseado na distância fixa, o critério baseado no tempo de trânsito, considera as condições hidrogeológicas de cada lugar. Chave et al (2006) resumem os valores de tempo de trânsito para vários países. Esses valores em geral variam entre 50 e 100 dias. Em alguns países dependendo das condições locais o tempo de trânsito pode ser 1 ou 10 anos. No caso da Costa Rica o tempo de trânsito sugerido é de 70 dias.

- Metodologias baseadas em estudos de vulnerabilidade: Estas metodologias definem zonas de proteção a partir da análise da vulnerabilidade das águas subterrâneas e das captações. Neste caso são feitas análises a nível regional na qual são considerados vários fatores, tais como tipo de solo, espessura da zona não saturada, geologia, tipo de poluente, tamanho das possíveis zonas de descarga, etc. A partir da ponderação de cada fator, são definidas zonas com vulnerabilidades alta, média e baixa. Para cada grau de vulnerabilidade são definidas restrições ao uso do terreno.

-Metodologias baseadas no risco de infecção: A partir de 2001 começou a ser empregada na Holanda uma metodologia baseada no risco de infecção da população (empregando os rotavírus como o pior caso). O risco de infecção máximo aceitável foi definido de 1 para cada 10000 pessoas durante um ano. Em termos da concentração, esse risco é traduzido para um valor de concentração máxima permitida de  $1.8 \times 10^{-7}$  vírus/litro. Claramente, para utilizar esta metodologia é necessário o emprego de métodos refinados de simulação e de um bom conhecimento das propriedades do local.

Chave et al (2006) resumem também os resultados da uma comparação feita na Holanda entre os resultados das metodologias baseadas no risco e as baseadas no tempo de trânsito. No caso da Holanda o tempo de trânsito é de 60 dias. A

comparação pretendia definir se esse tempo é um valor adequado para prevenir a contaminação de um poço num local hipotético. Para as condições do local estudado, foi concluído que para se atingir a concentração máxima permissível, seria necessária a utilização de um tempo de trânsito entre 8 e 15 vezes o tempo de 60 dias. Isto indica a importância das condições locais no transporte dos vírus e a necessidade de se definirem zonas de proteção a partir de análises mais refinadas.

## **2.2. Aqüíferos**

Um aqüífero é definido como aquela formação geológica ou grupo de formações com a capacidade de armazenar água e transmiti-la em quantidade suficiente para ser aproveitada pelo homem. Aquitardo é aquela formação que armazena água e a transmite em quantidade não aproveitável.

Os aqüíferos podem ser classificados sob dois critérios.

- Segundo as características dos vazios que armazenam e transmitem a água.
- Segundo o grau de confinamento.

Em relação às características dos vazios, os aqüíferos são classificados em fraturados e porosos. Quando os vazios estão constituídos por fraturas, fissuras ou planos de dissolução, o aqüífero é classificado do tipo fraturado. Os vazios no caso, são espaços que separam pedaços da formação geológica. São descontinuidades na formação. Quando os vazios estão constituídos pelos espaços entre os grãos ou dentro dos grãos da formação, se diz que o meio apresenta poros e o aqüífero é poroso. Neste caso os vazios separam grãos e não pedaços da formação. Esta classificação facilita a compreensão física do movimento da água dentro do aqüífero (seja nas fraturas e/ou poros) e permite decidir qual é o modelo conceitual e/ou matemático mais adequado para descrever o fluxo e o transporte. Na Figura 2.3 é apresentado o esquema conceitual dos tipos de vazios mencionados.

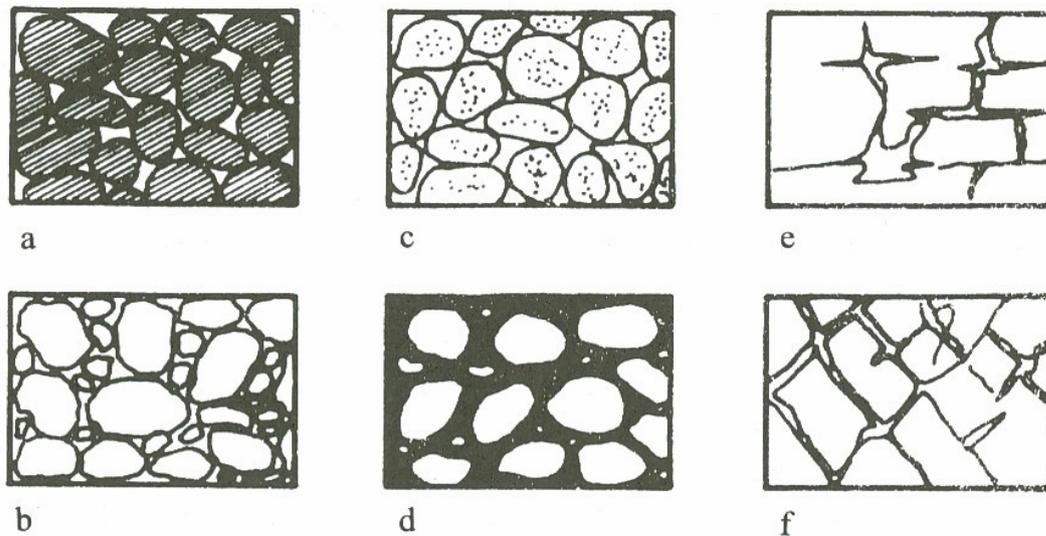


Figura 2.3. Tipos de vazios: poros<sup>a,b,c,d</sup> e fraturas<sup>e,f</sup> (modificado de Pérez, 1995)

Em relação ao grau de confinamento os aquíferos são classificados em dois grupos: livres e confinados.

Aquífero livre é aquele formado num material permeável que se encontra acima de outro impermeável ou de baixa permeabilidade. O acúmulo de água no material permeável gera uma superfície de contato entre a água e o ar, que separa uma zona saturada de outra não saturada. O nome dado a esta superfície é superfície freática ou nível freático. A água na superfície freática está sujeita a uma pressão igual à pressão atmosférica. Nos aquíferos livres nem todo o material permeável está saturado.

Aquífero confinado é aquele formado num material permeável que se encontra entre duas camadas impermeáveis. O material permeável chega a saturar em toda sua espessura devido à presença da camada impermeável superior (confinante) que impede o avanço da água. Isto gera pressão no aquífero. A superfície da água neste tipo de aquífero está sujeita a uma pressão superior à pressão atmosférica e se localiza no contato entre o material permeável e a camada confinante. Quando um poço é perfurado, o nível d'água dentro do poço é mais alto que o nível d'água no topo do aquífero. A diferença entre esses níveis dependerá da pressão existente no aquífero. Neste tipo de aquífero em algumas ocasiões a camada superior pode transmitir água e se constituir numa fonte de recarga.

Esta classificação dos aquíferos é útil para a definição das zonas de recarga. No caso dos aquíferos livres, a recarga acontece de maneira direta a partir da

superfície do terreno por percolação. Estes aquíferos estão expostos à infiltração de líquidos derramados na superfície ou nos cursos dos rios. No caso dos aquíferos confinados, a recarga acontece principalmente nas zonas altas das montanhas onde o aquífero se comporta como do tipo livre. A recarga também pode acontecer em menor quantia pela infiltração através da camada confinante superior. A presença desta camada confinante superior, de baixa permeabilidade ou impermeável, garante uma maior proteção contra a contaminação. Quando esta camada permite a transmissão de água, pode acontecer a migração de poluentes para o interior do aquífero.

Na Figura 2.4 é mostrado um perfil conceitual representativo dos aquíferos livres e confinados.

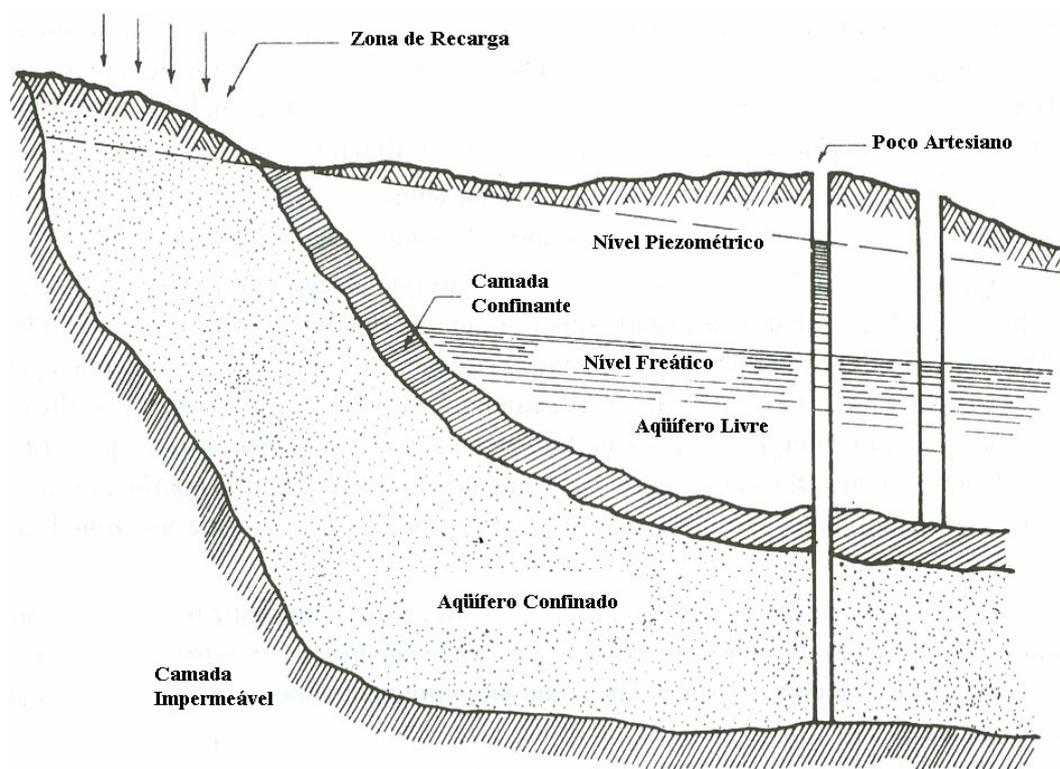


Figura 2.4. Perfil Esquemático dos Aquíferos Livre e Confinado (modificado do Pérez, 1995).

A existência de sistemas complexos compostos por aquíferos livres e confinados é possível. Estes aquíferos podem estar ou não interligados. Isto é uma condição bastante comum no Vale Central.

As classificações anteriores têm por objetivo, permitir a modelagem conceitual dos processos físicos e condições de contorno que regulam o fluxo e

transporte de solutos dentro dos aquíferos. O objetivo final procurado é o de representar da maneira mais precisa o comportamento natural (real) do sistema.

### **2.3. Modelos Conceituais**

A modelagem dos sistemas naturais tem duas componentes básicas: o modelo conceitual e o modelo matemático. O modelo conceitual é a representação simbólica qualitativa do sistema através de idéias, palavras, figuras, esquemas, etc. O modelo matemático é a representação do modelo conceitual através de equações.

O modelo conceitual pode ser definido como aquela hipótese que inclui as características, processos e eventos que controlam o fluxo e transporte num local específico. Para a construção do modelo conceitual é necessário considerar a geologia, a escala do problema e o objetivo da modelagem (Committee on Fracture Characterization and Fluid Flow, 1996).

#### **2.3.1. Modelos Conceituais para o Fluxo em Saturação Variável**

O fluxo em saturação variável nos meios porosos pode ser explicado conceitualmente a partir da Teoria do Fluxo Capilar. Essa teoria substitui o meio poroso por uma série de tubos capilares, onde os tamanhos dos raios desses tubos pretendem aproximar os tamanhos dos poros. Nessa teoria, a altura da coluna do fluido dentro do tubo, é o resultado da combinação das propriedades do fluido, da tensão à qual o fluido está sujeito e do raio do tubo. Esta aproximação do meio poroso tem permitido obter relações entre a distribuição dos tamanhos dos poros e a carga pressão, relações que permitem explicar os fenômenos observados no fluxo em condição não saturada. Segundo essas relações, para solos secos com altas cargas de pressão negativas, o fluido ocupa os poros de menor tamanho e, portanto o fluxo estará restrito a esses poros. Na medida em que o solo é umedecido e em que as cargas de pressão se aproximam do zero, o fluido ocupa poros de maior tamanho, com isto existe uma maior área para o fluxo e a permeabilidade aumenta. Na medida em que a saturação aumenta e o peso do

fluido é maior às forças capilares, as cargas de pressão passam a ser reguladas pela gravidade.

No caso do fluxo em fraturas, a teoria capilar tem sido também empregada como explicação válida. Neste caso a hipótese básica é de que o fluido está em contato com as duas paredes que definem a fratura. Quando a fratura está seca, o fluxo fica restrito às zonas onde a abertura é menor. Na medida em que a saturação aumenta, a água ocupa as zonas com abertura maior como mostrado na Figura 2.5. O fluxo na fratura, neste caso é tratado de maneira similar ao fluxo no meio poroso.

Por outra perspectiva, o fluxo nas fraturas também tem sido explicado através do modelo de fluxo tipo película, esquematizado na Figura 2.6. Neste caso o fluxo é tratado como uma película de água que não necessariamente está em contato com as duas paredes da fratura. Neste modelo, a película de fluido flui pela força da gravidade e não é afetado pelas forças capilares. Diferentemente do fluxo capilar, o fluxo pelicular ocorre em fraturas de grande ou pequena abertura, e a película não necessariamente é contínua ao longo do plano da fratura. Experimentalmente tem sido observado que este modelo permite explicar o transporte de ondas massa de fluido de um local para outro da fratura. Essa transferência de massa pode acelerar a migração de poluentes. Embora este fenômeno resulte interessante, não será tratado como parte deste projeto de pesquisa. Detalhes sobre esse modelo podem ser encontrados em Dragila e Wheatcraft (2003).

Os modelos conceituais usados para descrever o fluxo e o transporte em meios porosos e fraturados baseiam-se nos conceitos de meio contínuo e de meio descontínuo. Um problema de meio contínuo considera que para descrever o comportamento de um sistema não é necessário descrever o comportamento de cada componente e sim apenas entender a resposta do sistema como um todo. Um problema de meio descontínuo é aquele no qual se faz necessário descrever o comportamento de cada componente para entender o comportamento do sistema. A separação entre meio contínuo e meio descontínuo é também função da escala do problema.

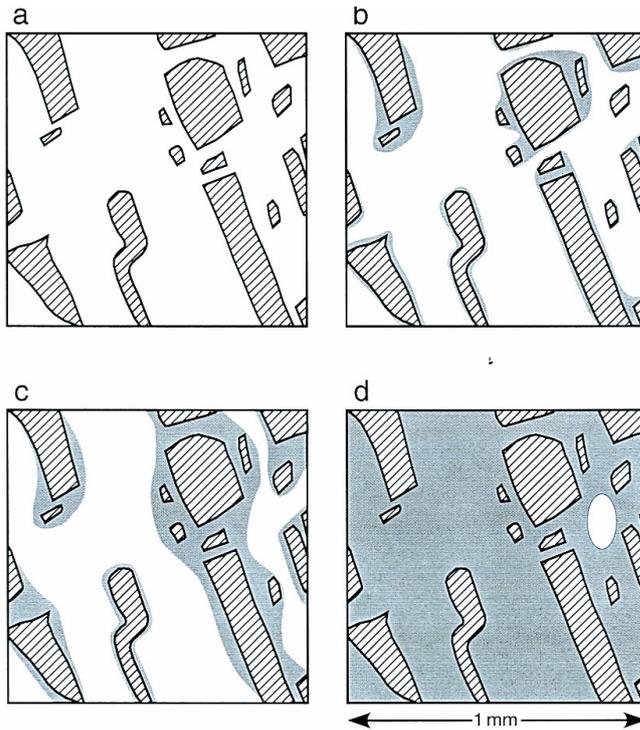


Figura 2.5. Efeito da Saturação na Fratura. a) menor saturação e d) maior saturação. As zonas delineadas indicam contato entre as paredes da fratura e as zonas escuras indicam água (Panel on Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone, 2003).

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0321281/CA

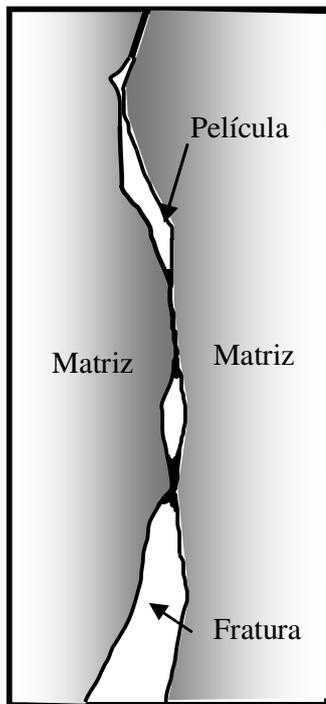


Figura 2.6. Modelo do Fluxo Pelicular na Fratura (Panel on Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone,2003).

Para problemas de fluxo e transporte em meios porosos, na escala da prática da engenharia, não é necessário descrever o que se passa em cada um dos poros. O material poroso é idealizado como um meio contínuo, onde as propriedades de fluxo e transporte estão distribuídas de maneira homogênea em todo o domínio. Quando o meio é fraturado, se nenhuma fratura apresentar fluxo ou transporte preferencial, então, para simplificar o entendimento do problema, pode-se construir um material contínuo equivalente com propriedades resultantes da distribuição homogênea no domínio das propriedades individuais de todas as fraturas. Neste caso, as propriedades do meio equivalente são uma média das propriedades das fraturas. Por outro lado, se existir fluxo preferencial em alguma das fraturas, para descrever o comportamento desse sistema será necessário descrever o comportamento individual daquela fratura considerando as suas propriedades de maneira independente das propriedades do resto do sistema. Neste caso o meio é considerado descontínuo.

Os modelos conceituais que permitem descrever o fluxo em meios porosos e fraturados estão resumidos na Figura 2.7 e são descritos a seguir.

- Contínuo Simples ou Contínuo Equivalente (7a): este modelo é empregado para representar meios porosos e meios com alto grau de fraturamento. Neste caso o material é substituído por um meio contínuo ou contínuo equivalente. Para descrever o fluxo é necessário apenas da curva característica do material equivalente.

- Contínuo Equivalente com porosidade composta (7b): este modelo é uma extensão do modelo anterior, e considera de maneira conjunta os efeitos do fluxo na matriz e nas fraturas. Neste modelo o material poroso e as fraturas são substituídos por um único meio contínuo equivalente que representa a resposta conjunta das fraturas e dos poros. A hipótese básica é de que a carga hidráulica é a mesma na fratura e nos poros a nível local. O fluxo é regulado por uma função de permeabilidade composta que leva em conta o efeito das permeabilidades da matriz e das fraturas. Neste modelo, quando a saturação é baixa, o fluxo ocorre na matriz, quando a saturação é alta o fluxo ocorre na matriz e nas fraturas. De maneira similar ao modelo anterior, para descrever o fluxo é necessário apenas da curva característica do material equivalente e não de cada componente.

- Contínuo Equivalente de Dupla Porosidade e Permeabilidade Simples (7c):

neste modelo, a matriz e a fraturas são representadas por dois meios contínuos independentes. Neste caso é assumido que o fluxo ocorre apenas nas fraturas. Na matriz ocorre apenas armazenamento. A interação entre os dois meios contínuos ocorre pelo intercâmbio de fluido entre a matriz e as fraturas. Este intercâmbio é modelado através de uma função de transferência. Esse modelo é útil para representar materiais com matrizes de baixa permeabilidade e com fraturas permeáveis. Para descrever o fluxo é necessário apenas da curva característica do contínuo equivalente das fraturas.

- Contínuo Equivalente de Dupla Porosidade e Dupla Permeabilidade(7d):

similarmente ao modelo anterior, a matriz e a fraturas são representadas por dois meios contínuos independentes. Neste modelo, é assumido que o fluxo acontece nas fraturas e na matriz. Neste caso são necessárias as curvas características equivalentes da rede de fraturas e da matriz, e de um termo de transferência entre a matriz e as fraturas. Esse termo de transferência é normalmente expresso em função da diferença das cargas hidráulicas entre os dois meios.

- Descontínuo com Fraturas Discretas (7e): neste modelo o efeito da fratura é explicitamente representado. Isto significa que para modelar o fluxo através da rede de fraturas, não é construído um meio contínuo equivalente, mas cada fratura é representada como um meio contínuo. Neste caso o fluxo é calculado em cada fratura de maneira independente, para isto é necessário obter os parâmetros hidráulicos de cada fratura. Neste modelo a matriz é considerada impermeável.

- Descontínuo Fraturado –Poroso (7f): este modelo combina a representação explícita de cada fratura, junto com a representação explícita da matriz. Neste modelo para cada fratura e para a matriz deverão se obter as curvas características. Assume-se ainda que no contato entre as fraturas e o meio poroso, as cargas hidráulicas são iguais, isto automaticamente gera transferência de fluido entre as fraturas e os poros, não sendo necessária a definição de um termo de transferência.

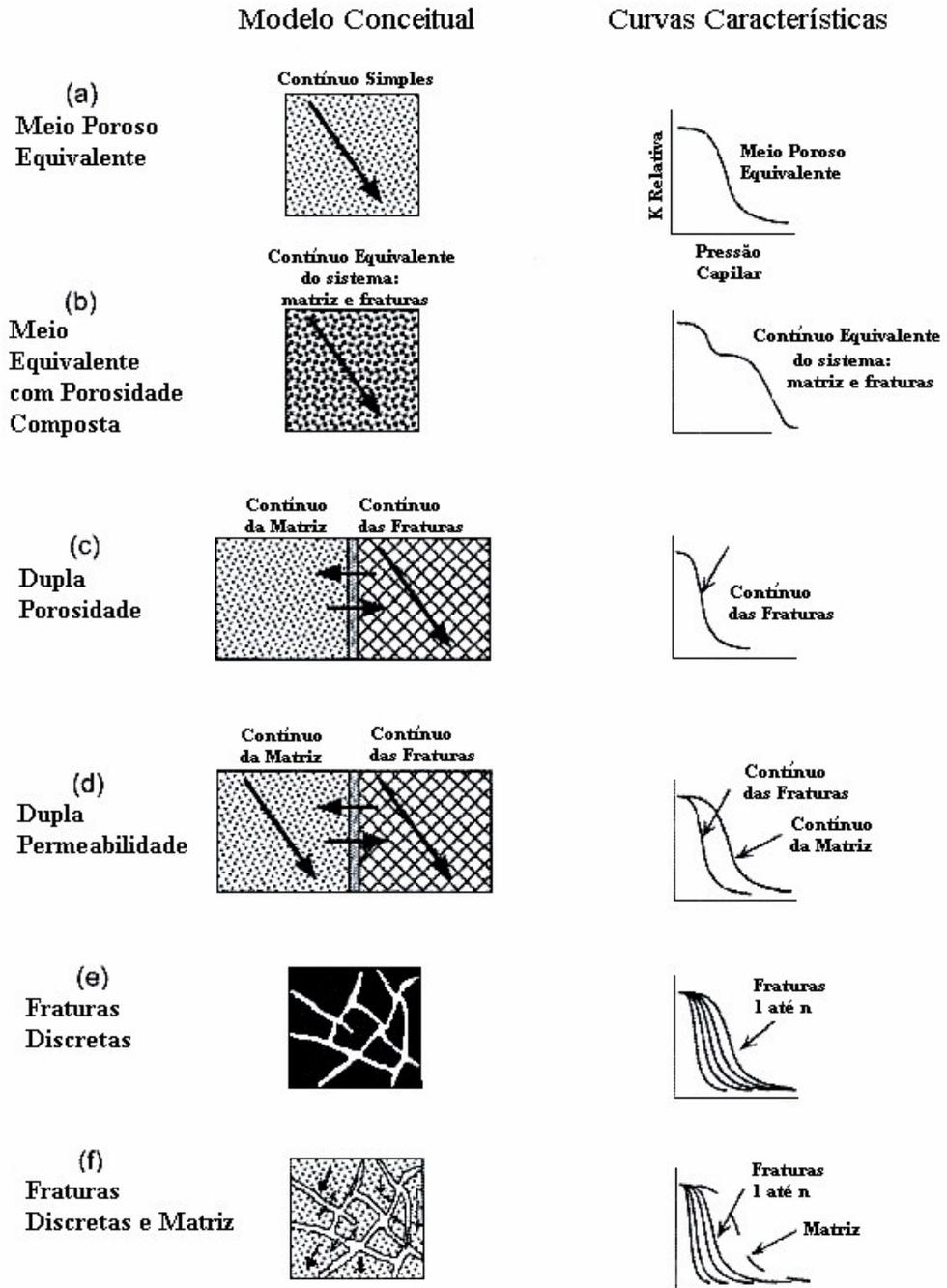


Figura 2.7. Modelos Conceituais para Aquíferos Porosos e Fraturados (Panel on Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone, 2003).

### 2.3.2.

#### **Modelos Conceituais para o transporte de poluentes**

Os modelos conceituais existentes para descrever o transporte de poluentes em meios porosos e fraturados são os mesmos modelos mostrados na Figura 2.7. As mesmas considerações são feitas para representar o transporte.

No caso do transporte de poluentes em maciços fraturados-porosos e saturados, o modelo conceitual mais empregado é o de dupla porosidade com permeabilidade simples. Considera-se nesta modelagem que os processos de transporte atuam no contínuo equivalente da rede de fraturas. Também é considerada a transferência de soluto entre a matriz porosa e as fraturas, produto da difusão do soluto. Este modelo tem sido empregado para explicar as caudas compridas observadas nas curvas de chegada em ensaios de traçadores realizados em aquíferos fraturados (Nowakowski et al, 1995). O maior problema desta formulação é a dificuldade de definir os parâmetros representativos do meio equivalente.

No caso de maciços fraturados-porosos e não saturados, o modelo conceitual mais empregado é o de dupla porosidade com permeabilidade dupla. Neste caso, duas equações são definidas e acopladas por um termo de transferência. A transferência pode ocorrer por advecção e difusão entre a matriz e as fraturas.

Os modelos discretos também podem ser empregados para estudar o transporte de poluentes. Similarmente ao caso do fluxo, a quantidade de parâmetros e informações requerida aumenta na medida em que aumenta o número de fraturas. Neste tipo de modelo a transferência entre a matriz e a fratura é garantida quando mantida a continuidade da concentração através dos pontos de contato entre a matriz e as fraturas.

## 2.4. Modelos Matemáticos

Foi feita uma compilação dos modelos matemáticos propostos para cada um dos modelos conceituais acima descritos. A seguir são colocadas as equações respectivas para cada modelo. Nas equações do transporte considera-se transporte advectivo, dispersão, decaimento de primeira ordem e sorção. Detalhes destes modelos são apresentados em Šimůnek et al (2003) e Therrien e Sudicky (1996).

- Contínuo Simples ou Contínuo Equivalente (7a):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_r k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (2.3)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} - q_i c) - (\theta C \mu_l + \rho S \mu_{eq}) = \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho S)}{\partial t} \quad (2.4)$$

onde (simbologia para todos os modelos),

$k_r$  a permeabilidade relativa em função do grau de saturação

$K_{ij}$  as componentes do tensor de anisotropia da permeabilidade

$i$  e  $j$  índices com valor 1, 2 ou 3 para indicar o eixo do sistema de coordenadas ( $x$ )

$t$  tempo

$\psi$  carga de pressão

$z$  carga de elevação

$Q$  termos fonte

$\theta$  teor de umidade volumétrico

$D_{ij}$  as componentes do tensor de dispersão

$q_i$  velocidade de percolação ou vazão específica na direção  $x_i$

$C$  concentração na fase líquida

$S$  concentração da fase sorvida

$\rho$  massa específica

$\mu_l$  e  $\mu_{eq}$  taxas de decaimento de primeira ordem nas fases líquida e sorvida

A Equação 2.3 é a equação de Richards. A Equação 2.4 é a equação tradicional de advecção-dispersão amplamente difundida na literatura.

- Contínuo Equivalente com porosidade composta (7b): As mesmas equações do modelo anterior são aplicáveis a este modelo. Neste caso os parâmetros estão representados por funções compostas que descrevem a resposta conjunta dos efeitos do fluxo na matriz e nas fraturas. Na Figura 2.8 é mostrado um esquema gráfico desta função composta.

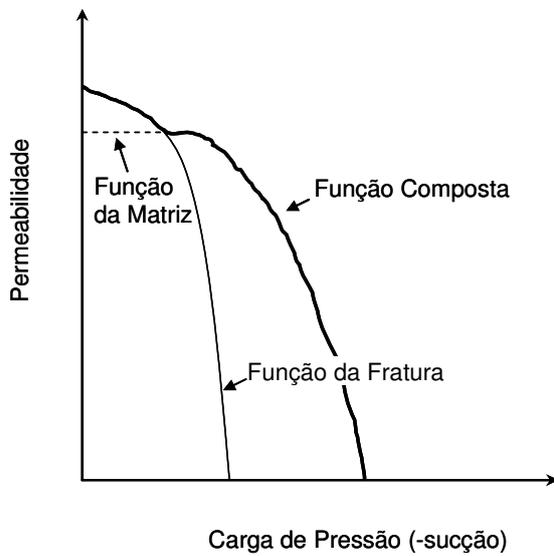


Figura 2.8. Esquema gráfico da função composta para a permeabilidade do meio equivalente.

- Contínuo Equivalente de Dupla Porosidade e Permeabilidade Simples (7c):

Neste modelo é necessário definir uma função de transferência entre os contínuos equivalentes das fraturas e da matriz.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rf} k_{ij} \frac{\partial(\psi_f + z)}{\partial x_j}) \pm Q_f - T = \frac{\partial \theta_f}{\partial t} \tag{2.5}$$

$$\pm Q_m + T = \frac{\partial \theta_m}{\partial t} \tag{2.6}$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_f D_{ij} \frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_i c_f) - (\theta_f C_f \mu_l + \omega \rho S_f \mu_{eq}) \pm Q_f - T_s =$$

$$\frac{\partial(\theta_f C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\omega \rho S_f)}{\partial t} \quad (2.7)$$

$$\pm Q_m + T_s = \frac{\partial(\theta_m C_m)}{\partial t} + \frac{\partial((1-\omega)\rho S_m)}{\partial t} \quad (2.8)$$

aqui  $\omega$  corresponde com a fração que representa a área das superfícies das fraturas onde pode ocorrer sorção em relação à área total das superfícies do domínio (matriz e fraturas) onde pode ocorrer sorção. Os índices  $f$  e  $m$  referem-se à fratura e à matriz respectivamente. Os símbolos  $T$  e  $T_s$  são os termos de transferência do fluido e do soluto respectivamente.

- Contínuo Equivalente de Dupla Porosidade e Dupla Permeabilidade(7d): a seguir são mostradas as equações para este modelo. Neste caso é necessário definir a fração do volume de vazios das fraturas em relação ao volume total dos vazios. Essa fração é indicada pelo símbolo  $W$ .

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rf} k_{ij} \frac{\partial(\psi_f + z)}{\partial x_j}) \pm Q_f - \frac{T}{W} = \frac{\partial \theta_f}{\partial t} \quad (2.9)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rm} k_{ij} \frac{\partial(\psi_m + z)}{\partial x_j}) \pm Q_m + \frac{T}{(1-W)} = \frac{\partial \theta_m}{\partial t} \quad (2.10)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_f D_{ij} \frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_i c_f) - (\theta_f C_f \mu_l + \omega \rho S_f \mu_{eq}) \pm Q_f - \frac{T_s}{W} =$$

$$\frac{\partial(\theta_f C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(\omega \rho S_f)}{\partial t} \quad (2.11)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m D_{ij} \frac{\partial c_m}{\partial x_j} - q_i c_m) - (\theta_m C_m \mu_l + \omega \rho S_m \mu_{eq}) \pm Q_m - \frac{T_s}{1-W} =$$

$$\frac{\partial(\theta_m C_m)}{\partial t} + \frac{\partial((1-\omega)\rho S_m)}{\partial t} \quad (2.12)$$

- Descontínuo com Fraturas Discretas (7e): são apresentadas a seguir as equações de fluxo e transporte para este modelo. Neste caso deve ser montada uma equação para cada fratura a ser analisada. Possíveis transferências de fluido e soluto através das paredes das fraturas são incorporadas. As paredes da fratura são denominadas  $\Gamma^+$  e  $\Gamma^-$ .

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{rf}k_{iff} \frac{\partial(\psi_f + z)}{\partial x_j}) + q_{n/I^+} - q_{n/I^-} \pm 2bQ_f = 2b(\frac{\partial\theta_f}{\partial t}) \quad (2.13)$$

$$2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_f D_{fij} \frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_{if} c_f) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-} - 2b(\theta_f C_f \mu_{lf} + S_f A_s \mu_{eqf}) \pm Q_f = 2b(\frac{\partial(\theta_f C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_f)}{\partial t}) \quad (2.14)$$

sendo

2b a abertura da fratura

$A_s$  a área dos sítios onde pode ocorrer sorção por volume unitário da fratura.

A transferência de fluido é simbolizada pelos termos  $q_{n/I^+}$  e  $q_{n/I^-}$ .

A transferência de soluto é simbolizada pelos termos  $\Omega_{n/I^+}$  e  $\Omega_{n/I^-}$ .

- Descontínuo Fraturado – Poroso (7f): este modelo emprega as mesmas equações do modelo anterior e também incorpora as equações de fluxo e transporte para a matriz. As equações são mostradas a seguir.

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{rf}k_{iff} \frac{\partial(\psi_f + z)}{\partial x_j}) + q_{n/I^+} - q_{n/I^-} \pm 2bQ_f = 2b(\frac{\partial\theta_f}{\partial t}) \quad (2.15)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rm}k_{ijm} \frac{\partial(\psi_m + z)}{\partial x_j}) \pm Q_m = \frac{\partial\theta_m}{\partial t} \quad (2.16)$$

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_m D_{mij} \frac{\partial c_m}{\partial x_j} - q_{im} c_m) - (\theta_m C_m \mu_l + \rho S_m \mu_{eq}) \pm Q_m =$$

$$\frac{\partial(\theta_m C_m)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho S_m)}{\partial t} \quad (2.17)$$

$$2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta_f D_{fij} \frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_{if} c_f) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-} - 2b(\theta_f C_f \mu_{lf} + S_f A_s \mu_{eqf}) \pm Q_f =$$

$$2b \left( \frac{\partial(\theta_f C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_f)}{\partial t} \right) \quad (2.18)$$

## 2.5.

### Revisão da aplicação dos Modelos para Fluxo e Transporte

Todos os modelos anteriormente descritos têm sido estudados por vários autores ao longo do tempo. Na medida em que o volume dos conhecimentos sobre a aplicação dos modelos conceituais e matemáticos foi aumentando, surgiram publicações que resumiram o estado da arte naquele momento ou que apresentaram uma visão geral dos modelos existentes. Publicações interessantes nesse sentido são: Schmelling e Ross (1989) que apresentam uma série de considerações conceituais sobre o uso dos modelos numéricos na modelagem de transporte em meios fraturados visando, sobretudo esclarecer esses conceitos para os políticos e administradores tomadores de decisão. De um ponto de vista mais técnico, as publicações interessantes são: Berkowitz (2002) onde apresenta uma análise conceitual detalhada dos modelos existentes e especialmente das vantagens e limitações de cada um deles para serem aplicados na modelagem do fluxo e na modelagem do transporte em meios fraturados. Šimůnek et al (2003) revisam os diferentes modelos conceituais e matemáticos para meios contínuos e contínuos equivalentes. van Dam et al (2004) apresentam uma análise comparativa tipo SWOT (do inglês, Strength, Weaknesses, Opportunities, Threats) das diferentes abordagens que descrevem o transporte e fluxo em meios não saturados. Bodin et al (2003a, 2003b) descrevem os diferentes fenômenos que regulam o transporte de solutos em sistemas fraturados com matriz impermeável. Mais recentemente Hopmans e van Genuchten (2005) apresentam uma análise

conceitual e descritiva dos diferentes processos físicos, químicos e biológicos que ocorrem na zona vadosa.

Antes de continuar com a revisão dos modelos numéricos, é importante ressaltar que o modelo conceitual definido para um local específico não deve ser visto como uma descrição definitiva e imutável. Um modelo conceitual é uma idéia que pode se refinada e melhorada na medida em que novos conhecimentos são adquiridos e as investigações no local são aprofundadas. Um exemplo prático disso é o desenvolvimento do modelo conceitual do sítio de disposição de rejeitos radioativos em Yucca Mountain (Nevada, EUA). A descrição da evolução histórica do modelo conceitual nesse local é apresentada por Flint et al (2001a, 2001b).

### **2.5.1. Contínuo - Contínuo Equivalente**

O modelo mais simples corresponde com aquele representado por um contínuo simples ou um contínuo equivalente simples. É o modelo mais amplamente utilizado e mais difundido na literatura. O maior desafio deste modelo é o de definir as propriedades do meio contínuo equivalente, sobretudo no caso de meios altamente fraturados. Long et al (1982) e Lee et al (1995) descrevem procedimentos para transformar uma série de fraturas num meio contínuo equivalente. Berkowitz et al (1988) analisam o emprego do conceito de meio equivalente para estudar materiais altamente fraturados, especialmente a respeito do transporte de solutos, e indicam que o modelo contínuo pode fornecer valores bem próximos dos reais desde que obtidos os parâmetros representativos do comportamento do sistema. Além disso, indicam que este modelo apresenta dificuldades para representar as concentrações perto da fonte do soluto. Pankow et al (1986) aplicaram o conceito de meio contínuo equivalente para o estudo dos padrões de migração dos poluentes em dois locais fraturados. Eles indicam que quando a taxa de difusão do soluto dentro da matriz é comparável com a velocidade do fluxo nas fraturas, o modelo contínuo apresenta resultados satisfatórios, no entanto, quando a taxa de difusão é baixa os resultados não são satisfatórios. Liu et al (2003) a partir de ensaios de infiltração em campo, concluíram que o conceito do meio contínuo equivalente consegue reproduzir

satisfatoriamente o fluxo e o transporte em condição não saturada para materiais altamente fraturados. Entretanto, indicam que os efeitos de difusão na matriz podem alterar a resposta. Robinson et al (2005) analisaram ensaios de traçadores em tufa fraturada aplicando diferentes modelos conceituais. A partir dessa análise, concluíram que a aproximação como meio contínuo equivalente simples forneceu os resultados mais satisfatórios. Indicam que esse resultado satisfatório responde à alta permeabilidade da matriz porosa que impede o desenvolvimento de fluxo preferencial nas fraturas.

Como descrito anteriormente para entender o fluxo em meios com saturação variável, duas abordagens têm sido empregadas: a teoria do fluxo capilar e a teoria do fluxo laminar. Do ponto de vista da teoria capilar, dois modelos têm sido amplamente utilizados para obter as curvas características de meios porosos: o modelo de Brooks e Corey (1964) e o modelo conhecido como Mualem – van Genuchten e apresentado em van Genuchten (1980). Em relação aos meios fraturados, Reitsma e Kueper (1994) apresentam resultados de laboratório para curvas de saturação-pressão capilar em fraturas rugosas. Os resultados obtidos concordam bem com as previsões do modelo de Brooks e Corey. Liu e Bodvarsson (2001) a partir de análises numéricas indicam que uma combinação dos dois modelos é o mais adequado para simular o comportamento de meios fraturados como contínuos equivalentes.

Do ponto de vista da teoria de fluxo laminar, um trabalho interessante é o apresentado por Tuller e Or (2001). Neste trabalho são obtidas curvas características para diferentes geometrias de poro, incluindo planos paralelos. Os resultados destas curvas foram comparados com as previsões do modelo de Mualem - van Genuchten para solos porosos com diferentes granulometrias. Os resultados mostraram bastante concordância indicando que a abordagem do fluxo laminar pode aproximar de maneira adequada o fluxo em saturação variável. Detalhes da fundamentação teórica deste modelo são apresentados em Dragila e Wheatcraft (2003).

Do ponto de vista numérico, várias técnicas têm sido empregadas para a análise do fluxo e transporte em meios contínuos. Uma dessas é o Método dos Volumes Finitos. Publicações relevantes para esta pesquisa são as seguintes: Fung et al (1992) e Fung et al (1994) que apresentam a discretização com o MVF das equações de fluxo multifásico para malhas triangulares com interpolação linear

(deve ser lembrado que as aplicações do MVF para malhas triangulares foram iniciadas por Winslow,1967); Abbasi et al (2003) analisam a aplicação de funções de interpolação exponencial para malhas triangulares no estudo de fluxo incompressível. Considerações teóricas sobre a aplicação do MVF para problemas advectivos-dispersivos em meios contínuos são apresentadas em Lazarov et al (1996) e Ahmad e Boybeyi (2005).

### **2.5.2.**

#### **Contínuo - Contínuo Equivalente com porosidade composta**

O contínuo equivalente com função de permeabilidade composta foi aplicado por Mohanty et al (1997) de maneira bem sucedida para simular fluxo preferencial em campos de cultura. Esses autores apresentam uma formulação para se obter a curva de permeabilidade composta para terrenos fraturados a partir do conceito de fluxo capilar. Por outro lado, Flint et al (2001) não obtiveram resultados satisfatórios quando aplicaram este conceito no estudo de fluxo em zonas áridas. Šimůnek et al (2003) indicam que a maior desvantagem deste modelo está na limitação para reproduzir o fluxo preferencial observado nas fraturas.

A aplicação da teoria do fluxo laminar para a obtenção da curva de permeabilidade composta para meios contínuos equivalente pode ser encontrada em Tuller e Or (2002) e Or e Tuller (2003).

### **2.5.3.**

#### **Dupla Porosidade e Dupla Permeabilidade**

O modelo de dupla porosidade e permeabilidade simples foi proposto por Barenblatt et al (1960) considerando as fraturas como dutos condutores do fluido e a matriz como uma zona de armazenamento. Este modelo é amplamente usado na atualidade para modelar fluxo e transporte em zonas saturadas e foi muito popular nos anos 70. Publicações relevantes sobre este modelo são os trabalhos de Phillip (1968) e van Genuchten e Wierenga (1976), onde é colocada a formulação matemática. Este modelo tem sido empregado para analisar o transporte de sais em solos agregados (van Genuchten e Dalton, 1986) e para representar aquíferos fraturados com matriz de baixa permeabilidade (Bibby 1981, Dershowitz e Miller,

1995). Maloszewski e Zuber (1993), a partir da análise de ensaios de traçadores publicados na literatura propuseram um modelo baseado no conceito de dupla porosidade para explicar os resultados desses ensaios. Neste caso o meio rochoso fraturado é representado por uma única fratura e o traçador pode penetrar na matriz por difusão. A conclusão desse trabalho é de que em meios altamente fraturados o transporte está mais regulado pela difusão e sorção na matriz do que pelo sistema de fraturamento. Hokr e Maryška (2002) realizaram uma análise da aplicação do MVF para resolver as equações empregadas no modelo de dupla porosidade para problemas unidimensionais. As comparações dos resultados numéricos com os resultados analíticos indicaram que o MVF pode ser empregado para resolver este tipo de equações.

Os modelos de dupla porosidade e dupla permeabilidade são atualmente os mais populares na classe de modelos contínuos. Alguns autores que têm trabalhado nesta área são Duguid e Lee (1977), que estudaram fluxo em meios fraturados porosos em regime transiente discretizando as equações através do MEF (Galerkin), Pruess e Wang (1987), Gerke e van Genuchten (1993a), Jarvis (1994) e Dykhuizen (1987). A diferença entre os diferentes modelos de dupla permeabilidade propostos está na maneira como é definido o termo de transferência entre a matriz e as fraturas. Gerke e van Genuchten (1993a, 1993b) apresentam um modelo matemático de fluxo e transporte de dupla permeabilidade junto à análise do termo de transferência. Dykhuizen (1987) apresenta a aplicação do conceito para o estudo de problemas de transporte unidimensional em meios fraturados não saturados.

Abdel-Salam e Chrysikopoulos (1996) aplicam o conceito de dupla permeabilidade para investigar no problema de fluxo não saturado a interação entre uma fratura e matriz porosa. A análise é feita numericamente a partir do MEF em duas dimensões. Concluíram que quando não considerado o intercâmbio de umidade entre a matriz e as fraturas, a frente de saturação segue caminhos preferenciais nas fraturas, e quando considerado esse intercâmbio a frente de saturação reduz o movimento.

Os conceitos dos modelos de dupla porosidade e dupla permeabilidade têm sido aplicados também na análise do problema de fluxo acoplado com deformação. Trabalhos nesta linha são os apresentados por Zhang et al (2002) e Berryman (2002).

A partir do modelo de dupla porosidade e dupla permeabilidade, visto como produto da interação de dois meios contínuos, tem se desenvolvido o conceito de meios multicontínuos. Neste caso são vários meios contínuos interagindo. Esse conceito tem sido empregado para o estudo de fluxo não saturado em formações permeáveis e fraturadas (Legendijk et al, 1998), para o estudo de transporte de solutos (Bai e Roegiers, 1997 e Gwo et al,1995) e para o estudo de fluxo de calor (Pruess e Narasimahan, 1985). Bai et al (1993) aplicaram o conceito de multiporosidade - multipermeabilidade no estudo de fluxo e deformação de sistemas de fraturas.

#### **2.5.4. Fraturado Discreto**

Os modelos discretos com matriz impermeável têm sido usados por vários autores, entre eles, Smith e Schwartz (1984) e Cacas et al (1990). Eles estudaram o fluxo e transporte em fraturas simples sem considerar difusão na matriz. Huyakorn et al (1987), Berkowitz et al (1988) e Sudicky e McLaren (1992) estudaram a difusão na matriz através da superposição de elementos unidimensionais representando as fraturas sobre elementos bidimensionais representando a matriz.

Uma aplicação deste modelo a partir do MVF é apresentada em Mezentsev et al (2004), onde é analisado o fluxo multifásico em dois sistemas de fraturas verticais. A discretização das fraturas é feita tridimensionalmente a partir de tetraedros e hexaedros.

#### **2.5.5. Fraturado Poroso**

Kennedy e Lennox (1995) aplicaram este conceito na análise da interação de uma fratura com a matriz no problema de transporte de solutos. Neste caso a discretização foi feita com o MVF. A fratura é modelada como um elemento unidimensional em contato com elementos bidimensionais que representam a matriz. Comparações dos resultados numéricos com resultados analíticos indicam que MVF pode ser empregado para resolver problemas com este tipo de configuração.

Os modelos tridimensionais para meios fraturados porosos iniciam-se com Rasmussen e Evans (1989). Therrien e Sudicky (1996) apresentam um modelo tridimensional que incorpora a discretização das equações do fluxo através do MVF e a discretização das equações de transporte através do MEF (Galerkin). Wang et al (2004) empregaram este conceito para analisar o fluxo em projetos hidroelétricos, com discretização baseada no MEF.

Fard et al (2003) apresentam um modelo para o estudo de fluxo em reservatórios a partir do MVF. Monteagudo e Firoozabadi (2004) apresentam um modelo tridimensional para resolver o fluxo bifásico através do MVF. Neste caso, as fraturas são discretizadas com elementos triangulares e a matriz com elementos tetraédricos. Reichenberger et al (2006) apresentam um modelo similar ao anterior para simular fluxo multifásico.

## 2.6.

### **Revisão dos modelos de transporte de vírus**

O transporte de vírus através do subsolo tem sido estudado intensamente nos últimos anos. Os sistemas microbiológicos são modelados conceitualmente como sistemas contínuos ou como sistemas discretos (Wimpenny,1998). Os sistemas discretos são aqueles que permitem simular o comportamento de cada indivíduo dentro de uma comunidade. A idéia básica para a aplicação deste conceito é a de reproduzir padrões vistos numa escala maior a partir da interação de todos os indivíduos a um nível de escala menor (escala celular). Um exemplo deste conceito é o modelo da célula autômata. Por outro lado, o conceito do sistema contínuo responde à idéia de entender o comportamento de uma comunidade numa escala maior a partir do comportamento global da comunidade e não a partir do comportamento de cada indivíduo. Neste caso, equações matemáticas podem ser propostas para simular este comportamento. Exemplos de sistemas possíveis de serem estudados como contínuos são: ecologia marina microbiana, transmissão de micróbios na rizosfera, crescimentos celulares in vitro. Na escala de interesse da engenharia, é aplicável o conceito de sistemas contínuos.

Na modelagem do transporte de vírus, Gerba (1984) é uma referência clássica sobre os fatores que influenciam a inativação e a adsorção. Yates et al (1987) e Yates e Yates (1987) apresentam uma revisão qualitativa dos efeitos dos diferentes processos envolvidos no transporte dos vírus. Já em 1989, Bales e outros estudaram quantitativamente o transporte de bacteriófagos em meios porosos e fraturados aplicando os conceitos de fratura discreta e de dupla porosidade, mas considerando apenas advecção, dispersão e transferência entre a matriz e a fratura (Bales et al, 1989). Revisões dos conceitos de sobrevivência e transporte dos vírus nas águas subterrâneas são apresentadas também em EPA (1999), Schijven e Hassanizadeh (2000), Ginn et al (2002), Bradford et al (2003), John e Rose (2005) e Pedley et al (2006). De especial interesse são os trabalhos de Schijven e Hassanizadeh (2000), Ginn et al (2002) e Bradford et al (2003). No trabalho de Ginn et al (2002) são revisados os processos físicos, químicos e biológicos que governam o transporte de micróbios nas águas subterrâneas, junto aos modelos matemáticos que simulam esses processos. No trabalho de Schijven e Hassanizadeh (2000) é mostrada uma revisão detalhada dos processos físicos que governam o transporte em meios porosos saturados. Nesta publicação é também mostrada a formulação matemática para descrever o transporte considerando sorção dinâmica e inativação. No trabalho de Bradford et al (2003) é apresentado o modelo de transporte para condições saturadas num meio poroso considerando sorção dinâmica, inativação, exclusão de poros e filtração mecânica.

Modelos de transporte para condições de saturação variável são apresentados por Yanjie et al (2001), Šimůnek et al (2006) e Bradford et al (2006). Nestes casos o problema é resolvido unidimensionalmente a partir do conceito de meio poroso. Mais recentemente van Genuchten e Šimůnek (2005) apresentaram um modelo integrado dos diferentes processos envolvidos no transporte de solutos na zona vadosa. Também mostram as equações para o transporte dos vírus.

Condições de campo têm sido também estudadas por Schijven et al (1999) e Schijven e Šimůnek (2002).

Soluções analíticas para o transporte dos vírus têm sido apresentadas por Sim e Chrysikopoulos (1995), Chrysikopoulos e Sim (1996), Sim e Chrysikopoulos (1998) e Chrysikopoulos (2000) para problemas unidimensionais e tridimensionais em meios saturados. Azadpour-Keeley et al (2003) realizaram

uma compilação dos códigos disponíveis naquele momento para modelar o transporte de vírus. Nessa compilação pode-se observar que os códigos são para problemas uni e bidimensionais, para condições saturadas e não saturadas e tratam o problema como um problema do meio contínuo.

O transporte dos vírus tem sido também estudado desde a perspectiva do transporte de colóides. Aproximações do problema como meio contínuo são dadas por Toran e Palumbo (1992), e de Novio et al (2004). Aplicações do conceito de dupla porosidade são apresentadas por Ginrod (1993) e de Novio et al (2004). Os conceitos de transporte de colóides em fraturas discretas têm sido estudados por Reimus (1995a, 1995b). Soluções analíticas para este problema são apresentadas por Abdel-Salam e Chrysikopoulos (1994), James e Chrysikopoulos (2003a) e James et al (2005). O conceito de meio fraturado-poroso foi aplicado por Ibaraki e Sudicky (1995a, 1995b) na análise de transporte de colóides numa fratura. Mais recentemente Oswald e Ibaraki (2001) apresentaram a formulação matemática para o transporte de colóides na matriz e nas fraturas, e desenvolveram um código para problemas bidimensionais a partir da aplicação do MEF.

## 2.7.

### Literatura Nacional

Foi feita uma revisão da literatura nacional para definir se existem publicações sobre a modelagem de fluxo e transporte através do emprego do MEF. Mesmo não sendo uma revisão exaustiva foram obtidas publicações relevantes para o desenvolvimento deste projeto de pesquisa. De interesse foram as publicações de Schneider e Maliska (2000), Cordazzo et al (2004a, 2004b, 2004d) e Lyra et al (2004) que apresentam as formulações para a análise de fluxo bifásico empregando malhas triangulares. Schneider e Maliska (1999) incorporam uma função de interpolação exponencial para os termos advectivos em malhas triangulares. Cordazzo et al (2004c) apresentam uma formulação bidimensional baseada no elemento para problemas de fluxo considerando falhas dentro do domínio. Neste caso, as falhas são modeladas com espessura reduzida e discretizadas dentro do domínio bidimensional com elementos triangulares e quadrilaterais. Em relação ao transporte de solutos, duas publicações foram de interesse, as apresentadas por Cordazzo (2000) e por Góis et al (2005). Nestas

publicações é mostrada a aplicação do MVF na discretização das equações de transporte. No caso de Góis et al (2000) a aplicação é feita para malhas triangulares com interpolação linear.

Adicionalmente foi feita uma revisão da documentação existente na PUC-Rio, visando definir as ferramentas disponíveis para a modelagem. Na PUC-Rio tradicionalmente os problemas de fluxo e transporte têm sido tratados a partir de discretizações em elementos finitos. Trabalhos nesta linha são as pesquisas desenvolvidas por Silva (1991), Gerscovich (1994), Campos (1999), Borges (2002) e da Silva (2004). Nestes trabalhos o meio é modelado como contínuo ou contínuo equivalente para duas e três dimensões. Já Telles (2006) desenvolveu uma ferramenta 2D/3D para modelagem de fluxo e transporte baseada no MEF para meios faturados porosos. Neste caso as fraturas são discretizadas com elementos triangulares e a matriz com elementos tetraédricos. Adicionalmente desenvolveu um gerador de fraturas. Os dados da geometria para geração da malha foram tratados com o programa MG, e os resultados do programa foram visualizados no processador gráfico POS3D, ambos os programas desenvolvidos pelo TECGRAF. Adicionalmente a PUC-Rio dispõe de licença para o uso do gerador de malhas GID 8.0.9.

## 2.8. Objetivos

A partir das informações obtidas da revisão da bibliografia nacional e internacional, é possível responder às perguntas e dúvidas anteriormente colocadas. As respostas são:

Existem diferentes modelos conceituais para explicar o fluxo e o transporte de solutos em meios fraturados e porosos em condição de saturação variável. Adicionalmente para cada modelo conceitual existe um modelo matemático. O transporte de vírus em meios fraturados e porosos também tem sido abordado e as equações correspondentes colocadas. Todos os modelos revisados já foram empregados para a análise de problemas na escala de laboratório ou de campo. O conhecimento teórico e prático até agora adquirido a partir da aplicação desses modelos no estudo de problemas reais constitui então o marco teórico para o desenvolvimento desta pesquisa.

Adicionalmente foi observado que sim existem outras metodologias para a determinação das distâncias de separação.

Foi constatado a partir desta revisão que no Brasil e no exterior existem modelos numéricos (baseados no MEF) para modelar o fluxo e o transporte de solutos em sistemas tridimensionais que consideram o efeito explícito das fraturas, da matriz e da não saturação. Os resultados desta aplicação demonstram que é possível acoplar o fluxo e o transporte das fraturas e dos poros a partir do emprego do modelo conceitual do meio fraturado poroso.

Foi constatado também que o MVF tem sido empregado para discretizar as equações de fluxo e transporte de solutos e colóides para meios idealizados como fraturados porosos. Para simulações tridimensionais de fluxo com elementos triangulares e tetraédricos, foram encontradas apenas as formulações para problemas bifásicos e multifásicos propostas Monteagudo e Firoozabadi (2004) e Reichenberger et al (2006), respectivamente. Em relação ao transporte, foram encontrados os trabalhos de Kennedy e Lennox (1995), Ibaraki e Sudicky (1995a, 1995b) e Oswald e Ibaraki (2001), mas para simulações bidimensionais.

A partir da revisão bibliográfica foi constatado que na PUC-Rio se conta com ferramentas computacionais para a modelagem geométrica tridimensional das fraturas e da matriz, e também com ferramentas de processamento gráfico dos resultados.

Não foi encontrada uma publicação com o desenvolvimento da formulação fraturada porosa para modelos tridimensionais de problemas acoplados de fluxo e transporte de vírus, baseada no MVF. Também não foi encontrada na literatura uma comparação detalhada do método MTA<sub>v</sub> com o Modelo baseado no Risco de Infecção. A partir destas observações anteriores propõem-se os seguintes objetivos. A consecução desses objetivos representa um aporte real desta pesquisa nesta área do conhecimento.

#### Objetivo Geral:

A construção de um modelo numérico tridimensional para o transporte de vírus em meios idealizados como fraturados-porosos sob condições de saturação variável, para ser incorporado numa nova metodologia (baseada no risco) de avaliação do potencial de contaminação das captações de água subterrânea por vírus provenientes de tanques sépticos.

Os objetivos específicos propostos para esta pesquisa são:

- Desenvolvimento de um modelo numérico para simular fluxo em saturação variável através da discretização pelo MVF para malhas triangulares e tetraédricas.
- Desenvolvimento de um modelo numérico para transporte de vírus em regime de saturação variável através da discretização pelo MVF para malhas triangulares e tetraédricas.
- Acoplamento dos dois modelos numéricos.
- Construção de um modelo conceitual para o fluxo e transporte de perfis representativos das condições hidrogeológicas da zona central norte da Grande Área Metropolitana (GAM).
- Análise dos perfis representativos com a ferramenta numérica desenvolvida
- Comparação dos resultados da análise numérica com o procedimento MTA<sub>v</sub>.

### 3 Transporte de Vírus

Os tanques sépticos são dispositivos de tratamento primário das águas residuais, empregados sob o princípio de que o solo funciona como um filtro ou depurador natural. Os maiores problemas relacionados com a contaminação por águas residuais provenientes de tanques sépticos são os organismos patogênicos e a formação de nitratos. A redução dos nitratos está relacionada com doenças tais como a metemoglobinemia e o câncer gástrico (Lewis et al, 1988).

Nos efluentes dos tanques sépticos domésticos têm sido detectadas diversas substâncias, desde sólidos em suspensão até metais pesados. Concentrações médias desses compostos são mostradas na Tabela 3.1. Cada substância é infiltrada no terreno onde estará sujeita aos processos químicos e físicos de transformação e transporte. Não é objetivo deste trabalho tratar sobre o destino de cada um destes compostos e sim apenas do transporte dos vírus. Revisões detalhadas dessas transformações são encontradas em EPA (1999) e Darnault et al (2005).

Tabela 3.1. Concentrações médias em efluentes domésticos (EPA, 2002)

Substância/ Composto	Unidades de Concentração	Concentração média	Remoção 1,5 m de profundidade
DBO	DBO <sub>5</sub> (mg/l)	140-200	> 90 %
Sólidos	TSS (mg/l)	50-100	> 90 %
Nitrogênio	N Total (mg/l)	40-100	10 – 20 %
Fósforo	P Total (mg/l)	5-15	85-95%
Bactérias	Coliformes Fecais (organismos/100ml)	10 <sup>6</sup> -10 <sup>8</sup>	> 99,99%
Vírus	(Unidades Formadoras de Placa/ml)	0-10 <sup>5</sup>	> 99,99%
Substâncias Orgânicas	(µg/l)	0-traços	>99%
Metais Pesados	(µg/l)	0-traços	> 99%

Na Tabela 3.1 é também mostrada a porcentagem de remoção dos compostos a uma profundidade de 1,5 metros, para um tanque séptico localizado num local adequado e trabalhando em condições ótimas. Os resultados indicam que esse sistema de tratamento pode dar resultados satisfatórios em relação à remoção dos organismos patogênicos. Por outro lado, se comparado o tanque séptico com outros sistemas de tratamento como mostrado na Tabela 3.2 é claro que os sistemas primários são menos efetivos na remoção destes microrganismos, pelo que deixam essa função ao terreno. Isto ressalta a importância de se construírem tanques sépticos apenas nos locais com condições adequadas.

Tabela 3.2 Remoção de vírus e bactérias para diferentes sistemas de tratamento (Godfree e Farrel, 2005)

Tratamento	Remoção (%)		
	Coliformes Fecais	Salmonela	Vírus Entéricos
Primário / Sedimentação	50-90	50-90	0-30
Filtro Biológico	90-95	90-95	90-95
Lodos Ativados	90-99	90-99	90-99
Trincheiras de oxidação	90-99	90-99	90-99
Lagoas de Estabilização	4-7 log	99,99 -100	99,99-100

Os microrganismos patogênicos possivelmente presentes nos efluentes são:

- ovos de helmintos
- protozoários
- bactérias
- vírus

Na Tabela 3.3 são mostradas concentrações de referência para diferentes microrganismos encontrados nos efluentes domésticos.

Tabela 3.3. Concentrações de microrganismos em águas residuais domésticas cruas e no efluente secundário (Medema et al, 2003)

Microrganismo	Águas Residuais cruas (número / litro)	Efluente Secundário (número / litro)
Protozoários		
<i>Cryptosporidium</i>	$10^3 - 10^4$	$10 - 10^3$
<i>Giardia lamblia</i>	$5 \times 10^3 - 5 \times 10^4$	$5 \times 10^1 - 5 \times 10^2$
Vírus		
Enterovírus	$10 - 10^2$	$1 - 10$
Norwalk	$10 - 10^3$	$1 - 10^2$
Rotavírus	$10 - 10^2$	$1 - 10$
Bactérias		
<i>Salmonella</i>	$10^2 - 10^4$	$10 - 10^4$
Indicadores		
Coliformes	$10^7 - 10^9$	$10^6 - 10^8$
Coliformes termotolerantes	$10^6 - 10^8$	$10^5 - 10^7$
Enterococos	$10^6 - 10^7$	$10^4 - 10^6$
F-RNA	$10^6 - 10^7$	$10^5 - 10^6$
Fagos bacteróides	$10^4 - 10^5$	$10^3 - 10^4$

Os helmintos e protozoários são organismos que pelo seu tamanho relativo aos poros são filtrados pela maioria dos solos. Na Figura 3.1 é mostrada a relação entre o tamanho dos microrganismos e as dimensões dos poros para diversos materiais. Bradford e Bettahar (2005) através de ensaios de colunas saturadas concluíram que os dois mecanismos mais importantes que regulam o transporte do *Cryptosporidium* são a filtração mecânica e a sorção dinâmica. Neste caso os microrganismos ficam retidos na estrutura porosa do material. Por outro lado, as bactérias e vírus se encontram na faixa de tamanho dos poros do silte e da argila (Tabela 3.4, Figura 3.1). Isto permite que sejam transportados pela água. O tamanho das bactérias e vírus corresponde à faixa de tamanhos das partículas coloidais. Por esse motivo considera-se que o transporte dos vírus e bactérias no subsolo é regulado pelos mesmos fenômenos que regulam o transporte dos colóides.

Tabela 3.4 Tamanhos característicos de alguns microrganismos (Lewis et al, 1988, Pedley et al, 2006)

Microrganismo	Tamanho (µm)	
Vírus	Vírus da Psitacose	0,25 (diâmetro)
	Bacteriófago	0,02 – 0,2 (diâmetro)
	Vírus da poliomielite	0,01 – 0,03 (diâmetro)
Bactéria	Esporos	1
	<i>E. Coli</i>	0,5 x 1,0 x 2,0
	<i>Salmonella typhi</i>	0,6 x 0,7 x 2,5
	<i>Shigella spp.</i>	0,4 x 0,6 x 2,5
Protozoários	<i>Cryptosporidium</i>	4,0 – 6,0 (diâmetros dos oocistos)
	<i>Giárdia</i>	7,0 – 14,0 (diâmetro)
	<i>Entamoeba histolytica</i>	20,0 – 25,0 (diâmetro)

### 3.1. Vírus

O vírus é um agente microscópico infeccioso que não tem a capacidade de se reproduzir fora de uma célula. Por isto deve ingressar (infectar) dentro de uma célula específica, e uma vez dentro dela aproveitar as funções enzimáticas para realizar cópias do seu material genético. Todo vírus carrega uma pequena quantidade de ácido nucléico (DNA ou RNA) cercada por uma estrutura protetora consistente de proteína, também conhecida como envelope protético ou capsídeo (Fig. 3.2). Em alguns vírus, o capsídeo está recoberto por um envelope ou membrana viral formada por lipídio e normalmente derivada da membrana celular do hospedeiro anterior. A porção periférica dos vírus permite identificar as células que ele pode infectar e em certos vírus facilita a penetração nas mesmas (Lewis et al, 1988 e Wikipedia, 2007). Embora o interesse desta tese seja o de modelar o transporte dos vírus patogênicos, os modelos de transporte a seguir descritos são baseados em informações obtidas de estudos realizados com bacteriófagos.

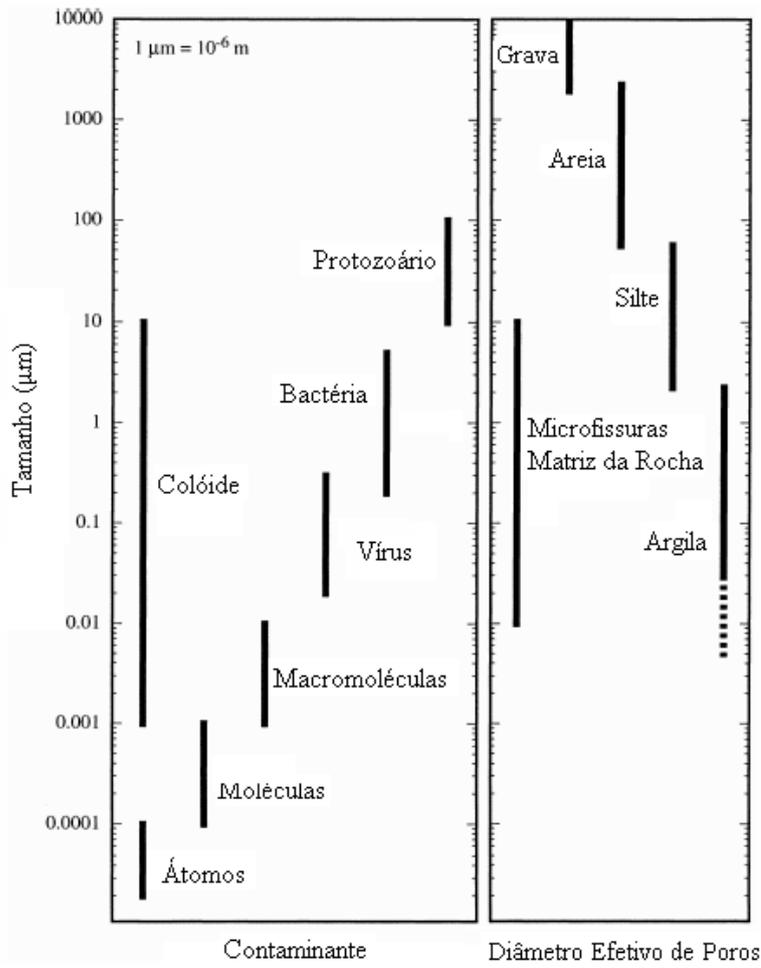


Figura 3.1. Tamanhos Característicos de Partículas e Poros (modificado de Sim e Chrysikopoulos, 1998)

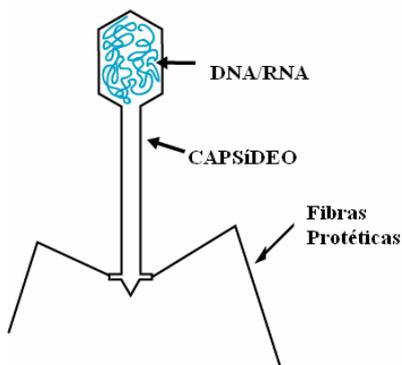


Figura 3.2 Estrutura de um Vírus Bacteriófago (modificado de Wikipedia, 2007)

Quando fora da célula, o vírus é transportado como uma partícula inerte, mas com a capacidade para infectar (penetrar em outro organismo). Uma vez exposto às condições ambientais o capsídeo sofre alterações (degradação) que podem chegar a anular a capacidade do vírus para infectar outros organismos. Quando isto acontece é dito que o vírus foi inativado. Isto não necessariamente significa que o vírus foi destruído, senão que perdeu a capacidade para ingressar nas células do organismo receptor. A sobrevivência do vírus é definida então como o tempo que leva para ser inativado. Ao contrário dos vírus, as bactérias têm a capacidade de se multiplicar no ambiente externo.

A persistência de uma substância é definida como a capacidade de permanecer inalterada na sua composição química e no estado físico ao longo do tempo. A mobilidade é definida como a habilidade para se deslocar no solo ou na água (EPA, 1999). Desta forma, vírus com alta persistência (alta sobrevivência) e alta mobilidade podem ser transportados até zonas de captação de água e serem consumidos pela população. A habilidade de um vírus para provocar danos no hospedeiro dependerá da combinação dos seguintes fatores (Pedley et al, 2006):

- a virulência e infectividade: a virulência é a capacidade do vírus de gerar doença e é definida em forma genérica em termos da severidade dos sintomas que provoca. A infectividade está relacionada com a habilidade do microrganismo para se estabelecer no tecido do hospedeiro.
- a susceptibilidade do hospedeiro: a susceptibilidade depende da idade, estado nutricional e imunidade.

Desta forma, adquirir uma doença dependerá das condições de saúde do receptor, a concentração ingerida do organismo e da dose infecciosa mínima requerida para o início da doença. Pachepsky et al (2006) colocam como referência, as seguintes como doses infecciosas para vários microrganismos:

<i>E. coli enterohemorrágica</i>	10	células
<i>Campylobacter</i>	500	células
<i>Salmonella</i>	10 <sup>5</sup>	células
<i>E. Coli</i> algumas cepas patogênicas	10 <sup>8</sup>	células
<i>C. parvum e Giardia</i>	10	e 10-25 organismos respectivamente

Doenças potencialmente transmissíveis através das águas subterrâneas são apresentadas na Tabela 3.5, junto com os microrganismos associados.

Tabela 3.5. Doenças e organismos geradores (Lewis et al, 1988)

<b>Doença</b>	<b>Microrganismo associado</b>
Disenteria amebiana	<i>Entamoeba histolytica</i>
Gastrenterites	<i>Giardia lamblia e Cryptosporidium</i>
Cólera	<i>Vibrio cholera</i>
Febre tifóide	<i>Salmonella typhi</i>
Febre paratifóide	<i>Salmonella paratyphi A e B</i>
Disenteria bacilar	<i>Shigella spp.</i>
Gastrenterites agudas e diarréicas	<i>Escherichia coli enterotóxicogênica, Campylobacter, Yersinia enterocolítica, Salmonella spp. e Shigella spp.</i>
Hepatite infecciosa	Vírus da hepatite A
Poliomielite	Vírus da poliomielite
Gastrenterites agudas e Diarréicas, sintomas diversos (vomito).	Rotavírus, Norwalk, Echovírus, Coxsackievírus e outros

Listas completas de doenças relacionadas com os organismos patogênicos junto aos sintomas provocados podem ser consultadas em Rolim (2000), EPA(2002) e Pedley et al (2006).

### **3.2. Fatores que regulam a sobrevivência**

Fatores que regulam o transporte e sobrevivência de microrganismos têm sido estudados por diversos autores. Nas Tabelas 3.6 e 3.7 são mostrados esses fatores para bactérias e vírus, respectivamente.

Tabela 3.6 Fatores que influenciam na sobrevivência das bactérias no solo. (Gerba et al, 1975 e Medema et al,2003)

<b>Fator</b>	<b>Efeito</b>
Saturação	Sobrevivência maior em solos úmidos e durante a temporada de chuvas
Capacidade de retenção da água	Sobrevivência menor em solos granulares
Temperatura (T)	Sobrevivência maior para T maior
pH	Sobrevivência menor em solos ácidos (pH 3-5)
Radiação Solar	Sobrevivência menor na superfície do terreno
Matéria Orgânica	Sobrevivência aumenta e possivelmente ocorre crescimento quando presente matéria orgânica em quantidade suficiente
Microflora no solo	Sobrevivência é maior em solos estéreis

Tabela 3.7. Fatores que influenciam na sobrevivência e transporte dos vírus no solo. (Yates e Yates (1988), Medema et al (2003))

<b>Fator</b>	<b>Efeito na sobrevivência</b>	<b>Efeito no transporte</b>
Temperatura	Sobrevivência maior para T menor	Desconhecido
Atividade Microbiana	Alguns vírus são desativados mais rapidamente na presença de certos microrganismos. Por outro lado, a adsorção na superfície da bactéria pode ser uma proteção.	Desconhecido
Saturação	Sobrevivência maior em condições de maior saturação.	Em geral aumenta com o grau de saturação. A adsorção aumenta em solos não saturados
pH	Os vírus entéricos são estáveis para pH de 3 a 9. A sobrevivência pode ser prolongada em solos neutros.	Em geral pH baixo favorece adsorção e pH alto favorece a desorção.
Concentração de sais	Pode proteger ou não contra a inativação dependendo do tipo de vírus	A adsorção aumenta nas sais
Associação com o solo	Em geral a sobrevivência aumenta quando adsorvido.	A migração é retardada.

Agregação do vírus	Aumenta a sobrevivência	Retarda o movimento
Propriedades do solo	Afeta basicamente a adsorção	A migração é maior em solos granulares. Solos argilosos filtram os vírus em alto grau. Solos fraturados retêm menos os vírus.
Tipo de vírus	A inativação dependendo do tipo de vírus	A adsorção no solo depende das características do capsídeo
Matéria orgânica	A presença de matéria orgânica pode proteger os vírus contra a inativação.	A matéria orgânica solúvel compete com os vírus por sítios de adsorção no solo
Condições hidráulicas	Desconhecido	Em geral a migração aumenta com a velocidade de percolação

Tempos de sobrevivência para vários microrganismos são mostrados na Tabela 3.8.

Tabela 3.8. Tempos de sobrevivência dos organismos patogênicos (Feachem et al,1983)

<b>Microrganismo</b>	<b>Esgoto (20-30) °C (dias)</b>	<b>Solo (20-30) °C (dias)</b>
Vírus	50 -120	20-100
Bactérias	10 -60	20-70
Protozoários (oocistos)	15 -30 > 12 meses	10-20 > 12 meses
ovos de helminto	Vários meses	Vários meses

### 3.3. Transporte de Vírus

Se considerarmos os fatores apontados nas Tabelas 3.6 e 3.7 resulta claro que a modelagem do transporte e sobrevivência dos vírus no solo é uma tarefa complexa. Pesquisas de campo e especialmente a aplicação de técnicas especializadas de visualização no nível de laboratório (Keller e Auset, 2007) têm permitido definir os diferentes processos físicos que regulam o transporte dos vírus. Esses processos físicos são descritos a seguir.

#### 3.3.1. Adveção – Dispersão

De maneira similar ao transporte de solutos, a adveção e a dispersão são mecanismos que regulam o transporte de vírus no solo. A adveção e a dispersão não removem os vírus, apenas atenuam a concentração.

Resultados experimentais indicam que para alguns vírus, as curvas de chegada em ensaios de coluna apresentam uma dispersão e um tempo de chegada do pico de concentração menores aos valores obtidos para solutos conservativos injetados juntos com os vírus. Isto significa que os vírus são deslocados com uma velocidade maior e com menor dispersão que os solutos. Esse fenômeno é explicado a partir do princípio de exclusão. Segundo esse princípio, por causa do tamanho do vírus em relação ao tamanho dos poros, alguns vírus são excluídos das zonas de menor velocidade e concentrados ou direcionados para as zonas de maior velocidade. Neste caso, o vírus chega mais rápido e com menor dispersão, embora que em concentrações menores do que um soluto conservativo (Flynn, 2003). Na Figura 3.2 é mostrado o esquema conceitual do fenômeno de exclusão e a forma das curvas de chegada.

Ginn et al (2002) descrevem os diferentes fenômenos de exclusão até agora identificados e os classificam em dois tipos: exclusão pelo tamanho e exclusão de poros. *Exclusão pelo tamanho* é o fenômeno em que as partículas apenas experimentam as velocidades maiores na região central dos poros em virtude do seu tamanho. Isto é, apenas uma fração do diâmetro da partícula pode se aproximar da parede do poro, e só essa fração experimentará as velocidades menores perto da parede. Claramente a fração restante experimentará velocidades

maiores. Os solutos por outro lado, em virtude da dimensão molecular das partículas, podem se aproximar por completo das paredes. A velocidade média experimentada pelo soluto será menor à velocidade média experimentada pelo vírus. Para a ocorrência da exclusão pelo tamanho, a partícula deve ter um tamanho menor a 1% do tamanho médio dos grãos da formação. *Exclusão de poros* é um fenômeno que acontece quando as partículas têm um tamanho parecido com o tamanho de uma fração dos poros. Algumas partículas ficam retidas nesses poros. Neste caso nem todos os poros são acessíveis. Por isto, as partículas são direcionadas por rotas alternativas por onde elas possam ser transportadas, essas rotas coincidem com zonas onde a velocidade é maior.

Nos meios porosos de granulometria mais grossa, a exclusão por tamanho é maior do que a exclusão por poro. Demonstração experimental da existência deste fenômeno foi obtida por Sirivithayapakorn e Keller (2003) a partir da observação direta no nível do poro.

Uma maneira de verificar a ocorrência dos fenômenos de exclusão é a partir do ajuste da curva de chegada do vírus com os valores da velocidade e dispersão de um soluto conservativo ensaiado no mesmo local. Se aqueles parâmetros não reproduzirem a curva de concentração dos vírus, uma explicação plausível é a ocorrência de algum tipo de exclusão (Flynn, 2003). Um método alternativo baseado na comparação geométrica das curvas de chegada do vírus e do soluto conservativo é apresentado por Zang et al (2001).

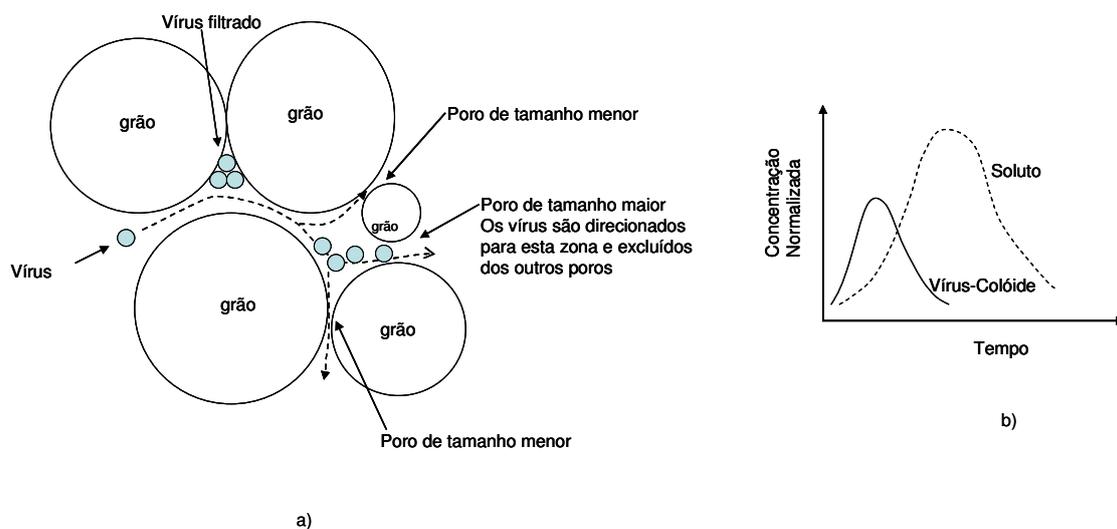


Figura 3.3. a) Esquema conceitual do fenômeno de exclusão; b) Comparação das curvas de chegada

### Modelagem Matemática

Para incorporar a exclusão na modelagem numérica, basicamente três aproximações têm sido empregadas:

- Modificação dos coeficientes de adsorção e desorção.
- Redução da porosidade através da exclusão de parte da porosidade não acessível aos vírus
- Através de correlações empíricas (Shukla et al. 2003, Reimus et al. 2007). Ginrod et al (1996) apresentam uma relação simples entre as velocidades e dispersões das partículas coloidais e dos solutos conservativos. As relações são:

$$v_{colóide} = \frac{3}{2} v_{soluto} \quad (3.1)$$

$$D_{colóide} = \frac{4}{5} D_{soluto} \quad (3.2)$$

Neste trabalho de pesquisa foi seguida a aproximação baseada na redução da porosidade. A seguir são mostradas as aproximações para a determinação da velocidade e dispersão para uma fratura e para um meio poroso.

Para uma fratura de abertura constante constituída por planos paralelos, James e Chrysikopoulos (2003b) apresentaram uma solução analítica para determinar a velocidade e dispersão efetiva para colóides considerando o efeito da exclusão. As relações analíticas obtidas pelos autores são:

$$v_f = \frac{2}{3} v_{\max} \left[ 1 + \frac{d_p}{2b} - \frac{1}{2} \left( \frac{d_p}{2b} \right)^2 \right] \quad (3.3)$$

$$D_f = D + \frac{2}{945} \frac{v_{\max}^2}{D} (2b)^2 \left( 1 - \frac{d_p}{2b} \right)^6 \quad (3.4)$$

$v_f$  velocidade efetiva (L/T)

$v_{\max}$  velocidade máxima na fratura (L/T)

$d_p$  tamanho da partícula (L)

$2b$  abertura da fratura (L)

$D_f$  dispersão hidrodinâmica efetiva ( $L^2/T$ )

$D$  difusão do colóide, dada pela equação de Stokes-Einstein ( $L^2/T$ )

$$D = \frac{kT}{3\pi\mu_w d_p} \quad (3.5)$$

$k$  constante de Boltzmann (J/K)

$T$  temperatura absoluta (K)

$\mu_w$  viscosidade dinâmica do fluido (M/LT)

Para meios porosos, Bradford et al (2003) incorporaram a exclusão a partir da correção do teor de umidade volumétrica e da permeabilidade relativa. A umidade volumétrica da equação de transporte passará a ser a nova umidade corrigida. As correções propostas são colocadas a seguir.

$$\theta_{cw} = \theta_w - n\gamma \quad (3.6)$$

$$q_{cw} = q_w \frac{k_{rcw}}{k_{rw}} \quad (3.7)$$

onde:

$\theta_{cw}$  teor de umidade volumétrica acessível aos colóides ( $L^3/L^3$ )

$\theta_w$  teor de umidade volumétrica do meio granular ( $L^3/L^3$ )

$n$  porosidade do meio granular ( $L^3/L^3$ )

$\gamma$  saturação não acessível aos colóides ( $L^3/L^3$ )

$q_{cw}$  velocidade de Darcy dos colóides ( $L^3/L^2T$ )

$q_w$  velocidade de Darcy do fluido ( $L^3/L^2T$ )

$k_{rw}$  coeficiente de permeabilidade relativa do fluido (adimensional)

$k_{rcw}$  coeficiente de permeabilidade relativa dos colóides (adimensional)

o valor de  $k_{rcw}$  é obtido a partir da distribuição dos poros como indicado na

Equação 3.8

$$k_{rcw}(S_w) = S_w^2 \frac{\int_1^{S_w} R(x)^2 dx}{\int_0^1 R(x)^2 dx} \quad \text{para } S_w > \gamma \quad (3.8)$$

$R$  tamanho do poro (L)

$S_w$  saturação de água ((L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>))

$x$  constante de integração

para valores  $S_w < \gamma$  o valor  $k_{rcw} = 0$

### Valores de Referência

Normalmente, a dispersão hidrodinâmica é relacionada com a velocidade do fluido através do parâmetro de dispersividade. Esse parâmetro é função da escala do problema. Alguns valores de referência são indicados por Matthess e Pekdeger (1981).

Na escala do laboratório: dispersividade 1 cm - 1m

Na escala de campo: dispersividade 10 cm - 100 m

Na escala de rochas fraturadas ou cársticas: dispersividade 10 m – 1000 m

### 3.3.2. Inativação

Os vírus precisam de outras células para se reproduzir. Quando expostos ao ambiente, a sua capacidade de infectar diminui. Neste caso ocorre a inativação do vírus. A inativação pode ocorrer por processos químicos ou biológicos. Esse processo de inativação é modelado matematicamente como um decaimento de primeira ordem.

A inativação atua nos vírus em suspensão e também nos vírus sorvidos. A rapidez com que a inativação ocorre depende dos seguintes fatores (Schijven e Hassanizadeh, 2000):

- Partículas em suspensão: observações experimentais demonstram que vírus sorvidos nas partículas argilosas são inativados numa taxa menor. Outros

estudos indicam que a taxa de inativação é maior em vírus sorvidos em superfícies constituídas de óxidos metálicos.

- Temperatura: a temperatura é o fator mais importante na inativação. A taxa de inativação aumenta na medida em que a temperatura aumenta, tanto para a fase líquida quanto para a fase sorvida.

- Atividade microbiana: os resultados experimentais neste sentido são divergentes, mas em geral tem sido observado que sob condições aeróbicas em águas não estéreis a taxa de inativação aumenta, provavelmente associada à atividade microbiana.

- Condições de não saturação: Em condições de não saturação a remoção dos vírus é maior. Isto tem sido associado à retenção e/ou inativação nas interfaces água-ar e água-ar-sólido.

### Valores de Referência

Na Tabela 3.9 é apresentada uma lista de valores de taxas de inativação para diferentes condições. Tabelas similares podem ser consultadas em Schijven e Hassanizadeh (2000), Medema et al (2003) e Pedley et al (2006).

### 3.3.3. Sorção

#### a) Sorção na superfície dos sólidos

A sorção é um mecanismo importante na remoção dos vírus. A evidencia experimental indica que a remoção dos vírus é regulada pela sorção dinâmica (taxas de adsorção e desorção diferentes). Na Figura 3.4 é mostrado o esquema gráfico deste mecanismo. Desse ponto de vista, a sorção é tida como um processo reversível, e em geral o coeficiente de adsorção ( $K_{att}$ ) é maior do que o coeficiente de desorção ( $K_{det}$ ), como mostram os valores a seguir (Flynn, 2003).

$$K_{att}/K_{det} = 8.5 \quad \text{para } E. coli$$

$$K_{att}/K_{det} = 18 \text{ a } 49 \quad \text{para } P. putida$$

$$K_{att}/K_{det} = 50 \quad \text{para bacteriófago H40/1}$$

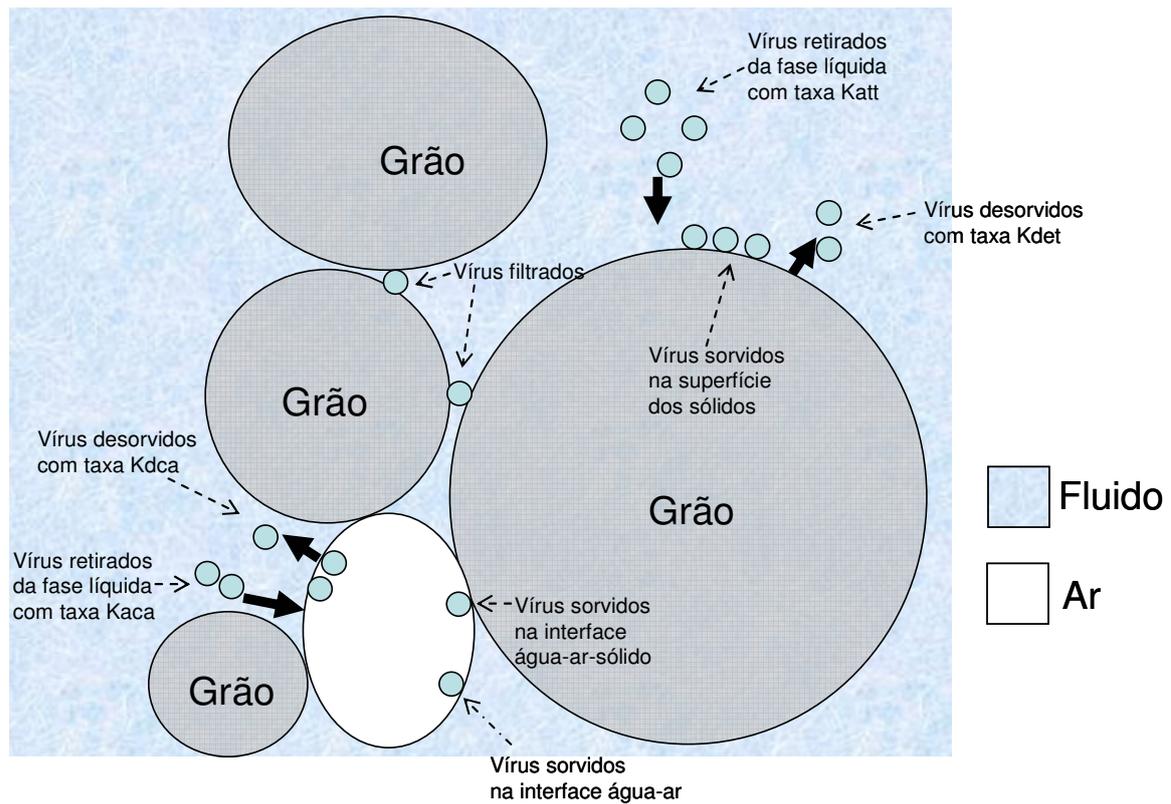


Figura 3.4. Mecanismos de Sorção e Filtração.

Os coeficientes de adsorção e desorção podem ser obtidos a partir de ensaios de coluna e batelada. O coeficiente de adsorção pode alternativamente ser obtido através da Teoria de Filtração Coloidal.

Na Teoria de Filtração Coloidal modela-se a captura dos colóides nas superfícies das partículas coletoras como regulada por dois processos: transporte da partícula coloidal até a superfície do coletor e a interação do colóide com a superfície do coletor. Desta maneira, a adsorção é regulada pelas características de fluxo e difusão na microescala e também pelas propriedades dos vírus e dos grãos de solo. Na Teoria de Filtração Coloidal, a taxa de adsorção ( $K_{att}$ ) é expressa em termos de dois parâmetros: a eficiência da colisão ( $\eta$ ) e a eficiência da captura ( $\alpha$ ). Segundo esta teoria, a partícula suspensa pode chegar a ter contato com o coletor através de três mecanismos (Fig. 3.5):

- a) Interceptação: isto ocorre quando o colóide se desloca numa linha de corrente e por causa do seu tamanho virá a ter contato com o coletor.

- b) Sedimentação: quando a partícula é mais pesada do que a água, a trajetória não segue as linhas de corrente e pode vir a colidir com o coletor.
- c) Difusão: devido às colisões com outras partículas suspensas, as trajetórias das partículas mudam de maneira irregular.

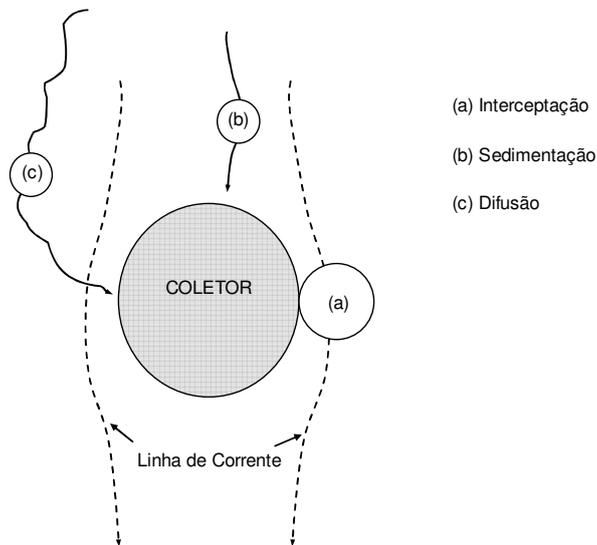


Figura 3.5. Mecanismos de Colisão da Teoria da Filtração Coloidal (Yao et al, 1971)

O coeficiente de adsorção resultante dos efeitos difusivos é dado pela expressão seguinte (Yao et al, 1971 e Schijven e Hassanizadeh, 2000).

$$K_{att} = \frac{3(1-n)}{2d_c} \alpha \eta v \quad (3.9)$$

onde:

$K_{att}$  coeficiente de adsorção (1/T)

$n$  porosidade do meio ( $(L^3/L^3)$ )

$d_c$  diâmetro do coletor (L)

$v$  velocidade da partícula coloidal (L/T)

$\eta$  eficiência das colisões (adimensional)

$\alpha$  eficiência da captura (adimensional)

A eficiência das colisões é dada por (desconsiderando interceptação e sedimentação):

$$\eta = 4A_s^{1/3} N_{Pe}^{-2/3} \quad (3.10)$$

$N_{Pe}$  numero de Peclet para a difusão molecular

$A_s$  parâmetro de Happel

$$N_{Pe} = \frac{d_c n v}{D} \quad (3.11)$$

onde:

D difusão molecular dada pela Equação 3.5

$$A_s = \frac{2(1 - \gamma^5)}{(2 - 3\gamma + 3\gamma^5 - 2\gamma^6)} \quad , \text{ para } \gamma = (1 - n)^{1/3} \quad (3.12)$$

### Modelagem Matemática: Sorção na superfície dos sólidos

A equação diferencial que descreve a variação da concentração considerando a sorção dinâmica é mostrada em Schijven e Hassanizadeh (2000) e Bradford et al ( 2003), e colocada a seguir.

$$\rho \frac{\partial S_{din}}{\partial t} = \theta K_{att} \psi_{att} C - \rho K_{det} S_{din} \quad (3.13)$$

onde:

$S_{din}$  concentração da fase sorvida nos sólidos (Vírus/M)

C concentração na fase líquida (Vírus/L<sup>3</sup>)

$\rho$  massa específica do meio granular (M/L<sup>3</sup>)

$\theta$  teor de umidade volumétrica da água (L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>)

$K_{att}$  coeficiente de adsorção (1/T)

$K_{det}$  coeficiente de desorção (1/T)

$\psi_{att}$  função de correção da área disponível para sorção, dada por (3.14)

$$\psi_{att} = \left(1 - \frac{S_{din}}{S_{din}^{max}}\right) \quad (3.14)$$

$S_{din}^{max}$  máxima concentração possível (Vírus/M)

### b) Sorção na interface água-ar

A sorção na interface água-ar foi observada inicialmente por Wan et al (1994). Evidência experimental posterior indicou que este é um mecanismo de remoção em solos não saturados (Keller e Sirivithayapakorn, 2004). Na medida em que a saturação diminui a remoção aumenta. Os resultados experimentais também indicaram que na medida em que o solo vai sendo saturado mais vírus são liberados. Isto é, a sorção na interface água-ar é um processo reversível (Torkzaban et al, 2006).

Crist et al (2004) e Zevi et al (2005a, 2005b) indicam que partículas hidrofílicas são retidas na interface água-ar-sólido. No caso de colóides hidrofóbicos a retenção ocorre principalmente na interface água-ar.

#### Modelagem Matemática: Sorção na interface água-ar

A sorção na interface água-ar é modelada de maneira similar à sorção na superfície dos sólidos. A equação que descreve a concentração nessa interface é mostrada em van Genuchten e Šimůnek (2005), e colocada a seguir.

$$\frac{\partial A_{aw}\Gamma}{\partial t} = \theta K_{aca} \psi_{aca} C - A_{aw} K_{dca} \Gamma \quad (3.15)$$

onde:

$\Gamma$  concentração na interface água-ar (Vírus/L<sup>2</sup>)

$C$  concentração na fase líquida (Vírus/L<sup>3</sup>)

$A_{aw}$  área da interface água-ar (L<sup>2</sup>)

$\theta$  teor de umidade volumétrica da água (L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>)

$K_{aca}$  coeficiente de sorção (1/T)

$K_{dca}$  coeficiente de desorção (1/T)

$\psi_{aca}$  função de correção da área disponível para sorção, dada por (3.16)

$$\psi_{aca} = \left(1 - \frac{\Gamma}{\Gamma_{max}}\right) \quad (3.16)$$

$\Gamma_{max}$  máxima concentração possível (vírus/L<sup>2</sup>)

### **Valores de Referência**

Na Tabela 3.10 são colocados valores das taxas de adsorção e desorção para meios porosos e na Tabela 3.11 alguns valores para fraturas. Nas Tabelas 3.12 e 3.13 são mostrados os valores da eficiência da captura obtidos a partir de Teoria de Filtração Coloidal.

Na Tabela 3.14 são mostrados valores das taxas de sorção sob condições de não saturação.

#### **3.3.4. Filtração (Straining)**

Este fenômeno consiste na remoção física dos vírus por obstrução nas gargantas dos poros de menor tamanho (Fig.3.3). A filtração é um fenômeno irreversível. Observações experimentais indicam que este fenômeno ocorre nos poros que são gerados pela interseção de ao menos duas superfícies sólidas ou de duas interfaces água-sólido (Bradford et al, 2006).

Este fenômeno ocorre normalmente nos primeiros 50 centímetros abaixo do local de descarga dos vírus. Bradford et al (2005) explicam essa observação indicando que na zona de injeção as partículas encontram poros de menor tamanho com maior frequência e por isto os poros são obstruídos. Na medida em que as partículas são transportadas, o processo de exclusão de poros leva essas partículas para zonas onde a filtração é menor.

Estimações experimentais indicam que este mecanismo de remoção não ocorre quando o tamanho dos vírus é menor a 5% do tamanho médio dos grãos (Ginn et al., 2002).

### **Modelagem Matemática**

A filtração é modelada matematicamente como um processo irreversível. A equação que descreve a concentração na fase filtrada é mostrada em Bradford et al (2005), e colocada a seguir.

$$\rho \frac{\partial S_{str}}{\partial t} = \theta K_{str} \psi_{str} C \quad (3.17)$$

onde:

$S_{str}$  concentração da fase filtrada (vírus/M)

$C$  concentração na fase líquida (vírus/L<sup>3</sup>)

$\rho$  massa específica do meio granular (M/L<sup>3</sup>)

$\theta$  teor de umidade volumétrica da água (L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>)

$K_{str}$  coeficiente de filtração (1/T)

$\psi_{str}$  função de correção por distância e concentração dada pela Equação 3.18.

$$\psi_{str} = H(z - z_o) \left(1 - \frac{S_{str}}{S_{str}^{max}}\right) \left(\frac{d_{50} + z - z_o}{d_{50}}\right)^{-\beta} \quad (3.18)$$

$S_{str}^{max}$  máxima concentração possível (vírus/M)

$d_{50}$  diâmetro representativo do 50% dos grãos (L)

$z$  profundidade (L)

$z_o$  profundidade da interface de injeção dos vírus (L)

$\beta$  constante com valor sugerido de 0,43 (adimensional)

$H(z-z_o)$  a função de Heaviside com valor:

$$H(z-z_o) = 0 \quad \text{para } z < z_o$$

$$H(z-z_o) = 1 \quad \text{para } z \geq z_o$$

### Valores de Referência

Na Tabelas 3.15 são apresentados valores das taxas de filtração para materiais porosos sob condições de campo e laboratório.

Tabela 3.9 Taxas de Inativação para as fases líquida ( $\mu_l$ ) e sorvida ( $\mu_s$ ), valores de Campo.

Vírus	Tamanho (nm)	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	Distância(m)	pH	Temperatura Celsius	$\mu_l$ (dia-1)	$\mu_s$ (dia-1)	Referência
MS2	25	Areia	Saturada	Dunas Calcárias	2,4	7,3-8,3	2-5	0,03	0,085	Schijven et al (1999)
				Castricum-Holanda	3,8	7,3-8,3	2-5		0,092	
					6,4	7,3-8,3	2-5		0,092	
		Saturada	Someren/Holanda	0		11,8 ± 0,5	0,081	Schijven et al (2000)		
				8		11,8 ± 0,5	0,039			
Saturada	Cape Cod	1	6-7	5	0,052 ± 0,022	Ryan et al (2002)				
PRD1	62	Areia	Saturada	Dunas Calcárias	2,4	7,3-8,3	2-5	0,12	0,071	Schijven et al (1999)
				Castricum-Holanda	3,8	7,3-8,3	2-5		0,067	
					6,4	7,3-8,3	2-5		0,067	
					10	7,3-8,3	2-5		0,067	
		Saturada	Someren/Holanda	0		11,8 ± 0,5	0,060	Schijven et al (2000)		
		Saturada	Cape Cod	1	6-7	5	0,022 ± 0,012	Ryan et al (2002)		
WR1		Areia	Saturada	Someren/Holanda	0		11,8 ± 0,5	0,083		Schijven et al (2000)

Tabela 3.9 Taxas de Inativação para as fases líquida ( $\mu_l$ ) e sorvida ( $\mu_s$ ), valores de Laboratório.

Vírus	Tamanho (nm)	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	pH	Temperatura Celsius	$\mu_l$ (dia-1)	$\mu_s$ (dia-1)	Referência
MS2	27	Areia	Saturada	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda		5 ± 3	0,044-0,064		Schijven et al (1999)
		Areia	Saturada	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	7,5-8,0	5 ± 3	0,068-0,096		Schijven et al (2002)
		Areia	Saturada	-	5,5 - 7,5	5	0,042		Torkzaban et al (2006)
PRD1		Areia		Dunas Calcáreas Castricum-Holanda		5 ± 3	0,0074-0,0094		Schijven et al (1999)
		Areia	Saturada	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	7,5-8,	5 ± 3	0,038-0,049		Schijven et al (2002)
φX174	27	Areia	Saturada	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	7,5-8,0	5 ± 3	0,0072-0,016		Schijven et al (2002)
		Areia	Saturada	-	5,5 - 7,5	5	0,015		Torkzaban et al (2006)

Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de campo.

Vírus/Colóide	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	Distância(m)	pH	Temperatura	Katt (dia-1)	Kdet (dia-1)	Referência
MS2	Areia	Saturado	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	2,4	7,3-8,3	2-5	4,1	0,00087	Schijven et al (1999)
				3,8	7,3-8,3	2-5	3,2	0,0016	
				6,4	7,3-8,3	2-5	2,8	0,0026	
				10	7,3-8,3	2-5	2,0	0,0018	
				17	7,3-8,3	2-5	1,3	0,00052	
				30	7,3-8,3	2-5	0,8	0,003	
	Saturado	Someren/Holanda	8	-	12	6,7	Schijven et al (2000)		
			12	-	12	3,4			
			22	-	12	0,95			
			38	-	12	0,65			
PRD1	Areia	saturado	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	2,4	7,3-8,3	2-5	4	0,00077	Schijven et al (1999)
				3,8	7,3-8,3	2-5	3,1	0,0011	
				6,4	7,3-8,3	2-5	2,2	0,0018	
				10	7,3-8,3	2-5	1,5	0,0025	
				17	7,3-8,3	2-5	1,3	0,0021	
				30	7,3-8,3	2-5	0,7	0,0034	
	Areia	-	-	-	6,1-11	0,0003-15	Bales et al (1997)		
	R5 (Clostridium Bifermentans)	Areia	Saturado	Someren/Holanda	8	-	12	5,1	Schijven et al (2000)
					12	-	12	1,9	
					22	-	12	0,55	
38					-	12	0,33		

Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de laboratório.

Vírus/Colóide	Tamanho	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	pH	Temperatura	Katt (dia-1)	Kdet (dia-1)	Referência	
MS2	25 nm 27 nm	Areia Areia Areia	Saturado	d50 =0,35 mm d50=0,14 mm	7,5-8,0	5 ± 3	0,4-4,5	13,68 9,36 7,34 0,144	Schijven et al (2002) Keller et al (2004) Torkzaban et al (2006)	
			Saturado		7,5	5 ± 3	0,072			
			Saturado		6,2	5 ± 3	0,086			
			Saturado		5,5	5 ± 3	0,288			
	27 nm			Saturado	d50=0,14 mm	5	5 ± 3	14,4	17,28 12,24 13,68 10,08	Torkzaban et al (2006)
				Sat = 50%		7,5	5 ± 3	0,173		
				Sat = 68%		6,2	5 ± 3	0,23		
				Sat = 50%		6,2	5 ± 3	0,288		
				Sat = 50%		5,5	5 ± 3	0,620		
				Sat = 50%		5,5	5 ± 3	0,620		
PRD1		Areia	Saturado	Dunas/Castricum/Holanda	7,5-8,0	5 ± 3	0,48-5,5	Schijven et al (2002)		
φX174	27 nm	Areia Areia	Saturado	Dunas/Castricum/Holanda d50=0,14 mm	7,5-8,0	5 ± 3	0,52-34,5	9,36 7,2 0,72 0,00014	Schijven et al (2002) Torkzaban et al (2006)	
			Saturado		7,5	5 ± 3	0,30			
			Saturado		6,2	5 ± 3	1,30			
			Saturado		5,5	5 ± 3	30,2			
	27 nm			Saturado	d50=0,14 mm	5	5 ± 3	266	13,0 8,40 9,65 1,0	Torkzaban et al (2006)
				Sat = 50%		7,5	5 ± 3	0,43		
				Sat = 68%		6,2	5 ± 3	1,8		
				Sat = 50%		6,2	5 ± 3	2,64		
				Sat = 50%		5,5	5 ± 3	73		
				Sat = 50%		5,5	5 ± 3	73		
Microesferas de Latex	330 nm 45-320 nm	Aluvião Areia	Saturado	Yucca Mountain Ottawa d50 = 0,71 mm d50 = 0,36 mm d50 = 0,24 mm d50 = 0,15 mm			9,12 -21,8	0,065 - 0,46	Viswanathan & Reimus (2003)	
			Saturado		6,73		5,4 - 28,9			
			Saturado		6,73		1,08 - 43,5			
	45-320 nm	Contos de Vidro	Saturado	-			18,4 -190,3	4,1 -31,0 5,4 -65,4 10,2 - 34,5	Bradford et al (2002)	
						6,73				5,4 -65,4
						6,73				10,2 - 34,5
			d50 = 0,26 mm	6,73		21,5 -335,3	0,03 -28,9	Bradford et al (2002)		

Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de laboratório (Continuação).

Vírus/Colóide	Tamanho	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	pH	Temperatura	Katt (dia-1)	Kdet (dia-1)	Referência
Microesferas de Sílica	100 nm	Aluvião	Saturado	Yucca Mountain	-	-	3,1 - 17,5	0,05 - 0,37	Viswanathan & Rismus (2003)
	360 nm	Areia	Não Saturado	d = 300 -355 µm	7,4		1,9 -3,8		Lenhart e Saiers (2002)
Microesferas de Poliestireno	5 nm 300 nm	Areia	Saturado	-	-	-	1,11-1,43 2,17-3,12	-	Keller et al (2004)
Oocyst C. Parvum	400 - 600 nm	Areia	Não saturado	Sílica (d = 1,1 mm)	-	-	14,4 - 43,2	-	Darnault et al (2004)

Tabela 3.11 Taxas de adsorção de colóides em fraturas, valores para condições de laboratório.

Colóide	Tamanho (nm)	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	Katt (dia-1)	Referência
Microesferas de Latex	330	Tufa Fraturada	Saturada	Colico Hills	0,5 - 1,9	Viswanathan & Reimus (2003)
	280	Tufa Fraturada	Saturada	Paintbrush Tuff	9,6 x 10 <sup>-7</sup> 10 - 168	Kessler (1999)
Microesferas de Sílica	100	Tufa Fraturada	Saturada	Colico Hills	1,2 - 4,8	Viswanathan & Reimus (2003)

Tabela 3.12 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de laboratório.

Vírus/Colóide	Tamanho (nm)	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	pH	$\alpha$	Referência
MS2	25	Esferas de Vidro	Saturada	CapeCod	5	0,0015-0,0028	Bales et al (1991)
		Esferas de Sílice			5 7	0,018 0,0022	Bales et al (1993)
		Areia			5,7 7 8,2	0,007 0,01 0	Kinoshita et al (1993)
		Quartzo			-	0,0026 - 0,0008	Keller et al (2004)
					3,5 5	0,12-0,16 0,009-0,09	Penrod et al (1996)
PRD1		Esferas de Vidro		Borden	5,5	0,0015-0,0033	Bales et al (1991)
		Areia			6,5 7 7,5	0,17 0,14 0,15	Kinoshita et al (1993)
					7	1,11	
					5,7 7 8,2	0,62-0,94 0,63-0,82 0,58	
POLIO		Esferas de Vidro			5,5 7	0,014 0,0040-0,0072	Bales et al (1993)
$\lambda$		Quartzo			3,9 5	1,25 0,045-0,65	Penrod et al (1996)

Tabela 3.12 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de laboratório (Continuação).

Vírus/Colóide	Tamanho (nm)	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	pH	$\alpha$	Referência
Microesferas de Latex	100 - 320	Areia		Ottawa	6,73	0,160 - 0,173	Bradford et al (2004)
	45-320	Areia	Saturada	Ottawa			Bradford et al (2002)
				d50 = 0,71 mm	6,73	0,0359 - 0,298	
				d50 = 0,36 mm	6,73	0,0143 - 0,174	
d50 = 0,24 mm	6,73	0,0037 - 0,157					
d50 = 0,15 mm	6,73	0,0075 - 0,129					
45-320	Contos de Vidro	Saturada	- d50 = 0,26 mm	6,73	0,0251 - 0,599	Bradford et al (2002)	
Microesferas de Poliestireno	5 300	Areia	Saturada	-	-	0,0041 - 0,0015 0,1026 - 0,0306	Keller et al (2004)
Oocistos Cryptosporidium Parvum	4,3 $\mu$ m	Contos de Vidro	Saturada	d = 0,328 mm	8	0,063 - 0,55	Tufenkji e Elimelech (2005)

Tabela 3.13 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de campo.

Vírus/Colóide	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	Distância (m)	pH	Temperatura	$\alpha$	Referência			
MS2	Areia/Grava		Missoula	7,5	7,2		0,004-0,182	DeBorde et al (1999)			
				19,4	7,2		0,004-0,202				
	Areia	Saturada	Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	2,4	7,3-8,3	2-5	0,0014	Schijven et al (1999)			
				3,8	7,3-8,3	2-5	0,0010				
				6,4	7,3-8,3	2-5	0,00092				
				10	7,3-8,3	2-5	0,00065				
				17	7,3-8,3	2-5	0,00043				
				30	7,3-8,3	2-5	0,00027				
				Saturada	Someren/Holanda	8	-		12	1,4 x10-3	Schijven et al (2000)
						12	-		12	8,0x10-4	
PRD1	Areia		Borden	,94	7,4		0,0028-0,0030	Bales et al (1997)			
				,94	8,4		0,00085-0,0016				
			Cape Cod	1,0	5-5,7		0,009 - 0,013	Pieper et al (1997)			
				1,0	6-6,7		0,0014-0,0026				
			Cape Cod	,9-1,0	5,4-5,6		0,032	Ryan et al (1999)			
				,9-1,0	5,8-6,0		0,016				
			Dunas Calcáreas Castricum-Holanda	2,4	7,3-8,3		2-5	0,0024	Schijven et al (1999)		
				3,8	7,3-8,3		2-5	0,0018			
				6,4	7,3-8,3		2-5	0,0013			
				10	7,3-8,3		2-5	0,00086			
17	7,3-8,3	2-5		0,00075							
Areia/Grava	Missoula	30	7,3-8,3	2-5	0,00043	DeBorde et al (1999)					
		7,5	7,2	0,014-0,632							
		19,4	7,2	0,005-0,385							

Tabela 3.13 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de campo (Continuação).

Vírus/Colóide	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	Distância (m)	pH	Temperatura	$\alpha$	Referência
φX174	Areia/Grava		Missoula	7,5	7,2		0,006-0,311	DeBorde et al (1999)
				19,4	7,2		0,007-0,319	
POLIO 1	Areia/Grava		Missoula	7,5	7,2		0,047-2,108	DeBorde et al (1999)
				19,4	7,2		0,019-0,866	
FENAPH's	Areia		Dunas Calcáreas	2	7,3-8,3		0,0020	Schijven et al (1999)
			Castricum-Holanda	4	7,3-8,3		0,00078	
R5 (Clostridium Bifermentans)	Areia	Saturada	Someren/Holanda	8	-	12	8x10 <sup>-3</sup>	Schijven et al (2000)
				12	-	12	3,2x10 <sup>-3</sup>	
				22	-	12	1x10 <sup>-3</sup>	
				38	-	12	6,1x10 <sup>-4</sup>	

Tabela 3.14 Taxas de adsorção e desorção para meios porosos não saturados sob condições de laboratório.

Vírus/Coloide	Tamanho	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	pH	Temperatura	Kaca (dia-1)	Kdca (dia-1)	Referência
MS2	27 nm	Areia	Sat = 50%	d50=0,14 mm	7,5	5 ± 3	0,86	0,024	Torkzaban et al (2006)
			Sat = 68%		6,2	5 ± 3	1,58	0,029	
			Sat = 50%		6,2	5 ± 3	2,16	0,0091	
			Sat = 50%		5	5 ± 3	14,0	0,0072	
φX174	27 nm	Areia	Sat = 50%	d50=0,14 mm	7,5	5 ± 3	1,58	0,014	Torkzaban et al (2006)
			Sat = 68%		6,2	5 ± 3	11,66	0,0070	
			Sat = 50%		6,2	5 ± 3	21,6	0,0084	
			Sat = 50%		5	5 ± 3	115,2	0,0043	
Microesferas de Sílica	360 nm	Areia	Não Sat	Sílica (300 -355 μm)	7,4		3,85 - 11,6		Lenhart e Saiers (2002)
Microesferas de Poliestireno	0,8 - 5,2 μm	Areia hidrofílica	Não Sat	Sílica d = 0,8 - 1,7 mm	5,7		640		Zevi et al (2005b)

Tabela 3.15 Taxas de filtração em meios porosos sob condições de campo e laboratório.

	Vírus/Colóide	Tipo de Solo	Condição	Localidade Formação Geológica	Tamanho	D50	Dp/D50	pH	Kstr (dia-1)	$\beta$	Referência
Campo	Microesferas de Latex	Colúvio Silte-Grava	Saturado	Fry Canyon, Utah	0,98 ( $\mu\text{m}$ )	-	-	-	8,64	-	Zhang et al (2001)
		Barreira Reativa (de aluminossilicatos)	Saturado	Fry Canyon, Utah	0,98 ( $\mu\text{m}$ )	2 mm	0,0005		5,35 - 11,2		Zhang et al (2001)
Laboratório	E. Coli	Areia	Saturado	Ottawa	116 nm	0,71 mm	0,0016	6,73	2,88 - 17,30	0,432	Bradford et al (2006b)
					116 nm	0,36 mm	0,0032		10,1 - 33,12 (334,1)		
116 nm					0,24 mm	0,0048	252 - 1196 (1005 - 14385)				
116 nm					0,150 mm	0,0077	367,2 - 1814 (85 - 3168)				
	Microesferas de Latex	Areia	Saturado	Ottawa	1,0 ( $\mu\text{m}$ )	360,0 ( $\mu\text{m}$ )	0,0028	6,73	2880 $\pm$ 1516	0,432	Bradford et al (2004)
						710,0 ( $\mu\text{m}$ )	0,0014		93,6 $\pm$ 7,2		
					3,2 ( $\mu\text{m}$ )	360,0 ( $\mu\text{m}$ )	0,0089		635 $\pm$ 351		
						710,0 ( $\mu\text{m}$ )	0,0045		155,5 $\pm$ 10		

## 4 Equações do Problema e Solução Numérica

Neste capítulo são apresentadas as equações diferenciais que descrevem o problema de fluxo e o transporte de vírus em meios fraturados e porosos. As equações resultantes da discretização com o Método dos Volumes Finitos são também apresentadas.

### 4.1. Equações do Fluxo

As equações que descrevem o fluxo na matriz e nas fraturas estão baseadas no conceito da continuidade da massa do fluido num volume de referência. No Apêndice A é mostrada a obtenção dessas equações de continuidade. As equações resultantes são mostradas a seguir.

Fluxo na Matriz:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q = \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (4.1)$$

onde:

$k_{rw}$  permeabilidade relativa da água na matriz (adimensional)

$k_{ij}$  tensor de permeabilidade da matriz (L/T)

$\psi$  carga de pressão na matriz (L)

$z$  carga de elevação na matriz (L)

$Q$  termos fontes na matriz (L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>T)

$\theta$  teor volumétrico de umidade na matriz (L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>)

$S_w$  grau saturação na matriz (L<sup>3</sup>/L<sup>3</sup>)

$S_s$  armazenamento específico da matriz (1/L)

Para a fratura:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{r_{wf}} k_{ijf} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f = 2b \left( \frac{\partial \theta_f}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right) \quad (4.2)$$

$2b$  abertura da fratura (L)

$q_{n/I+}$  vazão de entrada ou saída através do plano  $I^+$  da fratura ( $L^3/L^2T$ )

$q_{n/I-}$  vazão de entrada ou saída através do plano  $I^-$  da fratura ( $L^3/L^2T$ )

O subíndice  $f$  refere-se à fratura. Os parâmetros restantes mantêm o significado acima descrito. As equações 4.1 e 4.2 são as mesmas equações colocadas por Therrien e Sudicky (1996) para modelar fluxo na matriz e na fratura. Foram empregadas as funções do modelo Mualem – van Genuchten para descrever as curvas características e de permeabilidade relativa para a matriz.

Se considerarmos o caso particular da Equação 4.2 com o valor  $2b = 1$  e o armazenamento específico como representativo do meio poroso obtém-se a equação de fluxo bidimensional para o meio poroso. Desta forma, a Equação 4.2 pode ser empregada também para representar o fluxo no plano para um meio poroso e o fluxo numa fratura com abertura  $2b$ .

## 4.2. Equações do Transporte de Vírus

As equações que descrevem o transporte de vírus na matriz e nas fraturas estão baseadas no conceito da continuidade da massa do fluido num volume de referência. No Apêndice A é mostrada a obtenção dessas equações de continuidade. As equações resultantes são mostradas a seguir.

Transporte de vírus na Matriz:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) - Q_\mu \quad (4.3)$$

$$Q_\mu = \theta C \mu_l + \rho_b S_{eq} \mu_{eq} + \rho_b S_{din} \mu_{din} + \rho_b S_{str} \mu_{str} + A_{aw} \Gamma \mu_{aw} \quad (4.4)$$

$$S_{eq} = K_d C \quad (4.5)$$

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} = \theta C K_{att} \psi_{att} - S_{din} \rho_b K_{det} - S_{din} \rho_b \mu_{din} \quad (4.6)$$

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} = \theta C K_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str} \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} = \theta C K_{aw} \psi_{aw} - A_{aw} \Gamma K_{daw} - A_{aw} \Gamma \mu_{aw} \quad (4.8)$$

$\theta$  teor de umidade volumétrico ( $L^3/L^3$ )

$C$  concentração na fase líquida (vírus/ $L^3$ )

$S_{eq}$  concentração na fase em sorção em equilíbrio (vírus/M)

$S_{din}$  concentração na fase em sorção dinâmica (vírus/M)

$S_{str}$  concentração na fase filtrada (vírus/M)

$\Gamma$  concentração na interface água-ar (vírus/ $L^2$ )

$D_{ij}$  tensor de dispersão hidrodinâmica da matriz ( $L^2/T$ )

$q_i$  vazão específica de Darcy ( $L^3/L^2T$ )

$\mu_l, \mu_{eq}, \mu_{din}, \mu_{str}, \mu_{aw}$  taxas de inativação (1/T)

$K_d$  coeficiente de partição água-sólido ( $L^3/M$ )

$K_{att}$  taxa de adsorção nas superfícies sólidas (1/T)

$K_{det}$  taxa de desorção nas superfícies sólidas (1/T)

$\psi_{att}$  correção por concentração (adimensional)

- $K_{str}$  taxa de filtração (1/T)  
 $\psi_{str}$  correção por distância e concentração (adimensional)  
 $K_{aw}$  taxa de adsorção na interface água-ar (1/T)  
 $K_{daw}$  taxa de desorção na interface água-ar (1/T)  
 $A_{aw}$  área da superfície água-ar por volume unitário ( $L^2/L^3$ )  
 $\rho_b$  massa específica do meio poroso seco ( $M/L^3$ )

Transporte na fratura:

$$2b\left(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t}\right) = \quad (4.9)$$

$$2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-} - 2b Q_{\mu f}$$

$$Q_{\mu f} = \theta C_f \mu_{lf} + S_{eqf} A_s \mu_{eqf} + S_{din f} A_s \mu_{din f} + S_{strf} A_s \mu_{strf} + A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf} \quad (4.10)$$

$$S_{eqf} = K_{df} C_f \quad (4.11)$$

$$\frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} = \theta C_f K_{atf} \psi_{atf} - S_{din f} A_s K_{det f} - S_{din f} A_s \mu_{din f} \quad (4.12)$$

$$\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} = \theta C_f K_{strf} \psi_{strf} - A_s S_{strf} \mu_{strf} \quad (4.13)$$

$$\frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} = \theta C_f K_{awf} \psi_{awf} - A_{awf} \Gamma_f K_{dawf} - A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf} \quad (4.14)$$

$\Omega_{n/I^+}$  fluxo de vírus de entrada ou saída através do plano  $I^+$  da fratura  
 (vírus/ $L^2T$ )

$\Omega_{n/I^-}$  fluxo de vírus de entrada ou saída através do plano  $I^-$  da fratura  
 (vírus/ $L^2T$ )

O subíndice  $f$  refere-se novamente referido à fratura. Os parâmetros restantes mantêm o significado acima descrito. As equações 4.3 a 4.14 foram obtidas a partir dos trabalhos de Therrien e Sudicky (1996), Schijven e Hassanizadeh (2000), Bradford et al (2005), van Genuchten e Šimůnek (2005).

A modelagem do fenômeno de exclusão foi baseada nas Equações 3.6, 3.7 e 3.8. A mesma formulação foi empregada para a matriz e a fratura. Isto é, as Equações 3.3, 3.4 e 3.5 não foram empregadas para modelar a exclusão nas fraturas. A função da permeabilidade relativa dos colóides empregada nesta pesquisa é uma modificação da função de permeabilidade do modelo Mualem-van Genuchten, onde a saturação residual foi trocada pelo valor da saturação não acessível aos colóides.

### **4.3. Discretização das Equações**

As equações do problema foram discretizadas através do Método dos Volumes Finitos (MVF) para serem posteriormente incorporadas num código de programação para resolver o problema numericamente. A idéia básica do MVF é descrita a seguir: sobre o domínio do problema é construída inicialmente uma malha de nós que definirão os pontos nos quais os valores da solução numérica serão obtidos. O domínio do problema é a seguir dividido num determinado número de volumes de controle não sobrepostos, de maneira tal que cada volume de controle esteja localizado ao redor de cada nó da malha. A equação diferencial é integrada sobre cada volume de controle de forma tal que o princípio de conservação é garantido dentro do volume. Desta forma, o balanço da quantidade física em estudo (seja, massa, quantidade de movimento, energia) é satisfeito de maneira exata individualmente para cada volume e portanto para todo o domínio. No Apêndice B é apresentado um resumo do MVF. Os volumes de controle empregados nesta pesquisa foram construídos a partir dos elementos de discretização do domínio empregando o método dos baricentros. Os elementos de discretização empregados são: triângulo e tetraedro de interpolação linear para as fraturas e a matriz, respectivamente.

A discretização das equações de fluxo é mostrada nos Apêndices C e D, para a matriz e para a fratura, respectivamente. No caso do problema de fluxo, a não linearidade foi resolvida empregando o esquema iterativo de Picard Modificado, e o sistema de equações resultante foi resolvido através dos métodos Gauss-Seidel e/ou Gradiente Conjugado. Nesta formulação numérica, a continuidade das cargas entre a matriz e a fratura é assegurada a partir da compatibilidade das malhas triangulares como as malhas tetraédricas. Isto é, um nó que pertença a um plano de fratura, também pertencerá aos elementos tetraédricos adjacentes ao plano. Desta forma esses nós, apesar de representarem dois sistemas diferentes, compartilham as mesmas coordenadas e numeração. Quando considerado isto, automaticamente está se considerando transferência de fluido entre a fratura e a matriz e não é necessário definir de maneira explícita tais termos de transferência.

A discretização das equações de transporte é mostrada nos Apêndices E e F, para a matriz e para a fratura, respectivamente. No caso do problema de transporte, foi programado um esquema iterativo tipo Picard para a determinação da concentração na fase líquida (C). São definidos inicialmente valores arbitrários de (C). Esses valores são seguidamente utilizados na solução das equações para as fases sorvidas (S). Com os novos valores de (S), é resolvida a equação para a fase líquida. As novas concentrações (C) são comparadas com os valores iniciais. Se as diferenças entre esses valores forem superiores à tolerância estipulada, então o processo é repetido (iterativamente) até a convergência. Nos exemplos resolvidos nesta pesquisa, o número de iterações não foi superior a 4. O sistema de equações resultante para o problema de transporte foi resolvido através do método Gauss-Seidel. De maneira similar ao problema de fluxo, a continuidade na concentração é garantida a partir da compatibilidade das malhas.

As equações das fases sorvidas também foram discretizadas através do MVF como mostrado no Apêndice G.

#### 4.4. Programa VirTran-3D

As equações diferenciais discretizadas foram incorporadas num código de programação denominado VirTran-3D e escrito na linguagem Fortran 90 através do compilador Compaq Visual Fortran versão profissional 6.6C. As implementações foram feitas num computador com processador Intel Pentium(R) 4 1.71 GHZ e 768 MB de RAM do departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio. O programa desenvolvido segue a programação estruturada convencional. As unidades do programa são descritas a seguir.

##### a) Unidade Principal: “Program FluxColoid2d3D”

Esta unidade regula o fluxo global do programa. Inicialmente são lidos os endereços dos arquivos de entrada. Seguidamente são iniciados os valores das variáveis globais do problema: número de nós, número de elementos, número de materiais, etc. Posteriormente inicia-se a chamada às rotinas de:

- leitura e processamento dos dados de entrada
- gerenciamento da seqüência de cálculo do problema (GerenciaPicard.for)
- comandos para a liberação da memória alocada

##### b) Unidades Relativas à Leitura e Processamento dos Dados de Entrada.

As rotinas relacionadas com a leitura dos dados de entrada são.

NodeInf.for : são lidos os números dos nós e as coordenadas.

ElemInf.for: são lidas as informações dos elementos. Conectividade e tipo de material. No caso dos elementos triangulares é lido também o rumo da fratura à qual o elemento pertence.

StrikeDat.for: são lidos os rumos das fraturas em termos azimutais e transformados para termos vetoriais.

MatInf.for: são lidas as informações dos materiais.

SourceQ.for: são lidas as informações dos termos fontes para o problema de fluxo.

SourceC.for: são lidas as informações dos termos fontes para o problema de transporte.

LeeInici.for: são lidas as condições iniciais do problema.

LeeContornoCarga: são lidas as condições de contorno para o problema de fluxo.

LeeContornoSoluta: são lidas as condições de contorno para o problema de transporte.

ProfileDat.for: são lidos os tempos e as coordenadas dos pontos extremos para a construção de um perfil de resultados.

Balcodat.for: são lidos os tempos nos quais o balanço do problema será calculado.

NobsDat.for: É lido o número do nó de observação a ser monitorado.

SolControl.for: nesta rotina são lidos valores que definem o tipo de análise no transporte e os processos físicos que serão ativados.

Rotinas relacionadas com o processamento dos dados de entrada são:

Incidencia.for: nesta rotina é definida a incidência dos nós através da construção de uma matriz auxiliar armazenada sob o esquema SKYLINE.

ElemInci.for: neste rotina é calculado o número de elementos aos quais pertence cada nó. A informação é armazenada em forma matricial para ser usada posteriormente na determinação das velocidades do fluxo a nível nodal.

## b) Unidades Relativas à Solução do Problema

A rotina `GerenciaPicard.for` é a rotina principal que gerencia as integrações no espaço e no tempo. Esta rotina também gerencia a impressão dos resultados. As rotinas mais relevantes desta unidade são:

`VelocidadeNovaT3.for`: determina as velocidades nodais nos elementos triangulares para cada plano de fratura.

`VelocidadeNovaT4.for`: determina as velocidades nodais nos elementos tetraédricos.

`BalancoT3Fluxo.for`: realiza o balanço da massa de fluido nos planos de fratura.

`BalancoT4Fluxo.for`: realiza o balanço da massa do fluido nos tetraedros.

`BalancoNewT3.for`: realiza o balanço da massa dos vírus nos planos de fratura.

`BalancoNewT4.for`: realiza o balanço da massa dos vírus nos tetraedros.

`Profile.for`: escreve os valores ao longo do perfil selecionado.

`WritersultPos3D.for`: rotina baseada no trabalho de (Telles,2006).  
Escreve os resultados no formato do processador Pos3D.

`AtualizarH.for`: nesta rotina são definidos os valores iniciais da carga de pressão para o passo de tempo atual.

`AtualiazarC.for`: nesta rotina são definidos os valores iniciais da concentração para o passo de tempo atual.

`PicardCarga.for`: rotina que resolve o problema de fluxo usando o processo iterativo de Picard.

`PicardSolutio.for`: rotina que resolve o problema de transporte usando o processo iterativo de Picard.

As duas últimas rotinas acima referidas são descritas a seguir.

### c) Unidades Relativas à Solução Iterativa do Problema de Fluxo

Como dito acima a rotina PicardCarga.for é a responsável pela seqüência de cálculo do processo iterativo de Picard para o problema de fluxo. As rotinas mais relevantes neste processo são as seguintes:

MontakT4Fluxo.for: rotina que define os coeficientes na matriz de permeabilidade devido aos efeitos do fluxo nos poros.

MontakT3Fluxo.for: rotina que define os coeficientes na matriz de permeabilidade devido aos efeitos do fluxo nos planos de fratura.

CondNeumanT4fluxo.for: rotina que define os coeficientes na matriz de permeabilidade e no vetor das vazões devido aos efeitos das condições de contorno (Neuman e Face Livre) impostas nos materiais porosos.

CondNeumanT3fluxo.for: rotina que define os coeficientes na matriz de permeabilidade e no vetor das vazões devidas aos efeitos das condições de contorno (Neuman e Face Livre) impostas nos planos de fratura.

ConDirichlet.for: rotina que incorpora as condições de contorno tipo Dirichlet.

Mglobal.for: rotina que monta a matriz global.

KHF.for: rotina que monta o sistema final de equações a ser resolvido.

GaussSeidel.for: Rotina de solução do sistema de equações pelo método de Gauss –Seidel.

Conjugate.for: Rotina de solução do sistema de equações pelo método do gradiente conjugado.

#### **d) Unidades Relativas à Solução Iterativa do Problema de Transporte**

Como referido anteriormente a rotina PicardSoluti.for é a responsável pela seqüência do cálculo iterativo de Picard no problema de transporte. As rotinas mais relevantes neste processo são as seguintes:

MontakT4.for: rotina que define os coeficientes na matriz de transporte devidos aos efeitos do transporte nos poros.

MontakT3.for: rotina que define os coeficientes na matriz de transporte devidos aos efeitos do transporte nos planos de fratura.

CondNeumanT4.for: rotina que define os coeficientes na matriz de transporte e no vetor dos fluxos de vírus devido aos efeitos das condições de contorno (Neuman,Cauchy ou Gradiente Nulo) impostas nos materiais porosos.

CondNeumanT3.for: rotina que define os coeficientes na matriz de transporte e no vetor dos fluxos de vírus devido aos efeitos das condições de contorno (Neuman,Cauchy ou Gradiente Nulo) impostas nos planos de fratura.

ConDirichlet.for: rotina que incorpora as condições de contorno tipo Dirichlet.

Mglobal.for: rotina que monta a matriz global.

KHF.for: rotina que monta o sistema final de equações a ser resolvido.

GaussSeidel.for: rotina de solução do sistema de equações pelo método de Gauss –Seidel.

SolutoInicialT4.for e SolutoInicialT3.for: São rotinas que calculam o valor inicial das concentrações dos vírus nas fases sorvidas a partir do valor inicial arbitrário da concentração na fase líquida.

CproxT4.for e CproxT3.for: São rotinas que calculam as concentrações nas fases sorvidas a partir dos valores da concentração na fase líquida calculado nas iterações do processo de Picard.

### **Outras Unidades Relativas à Solução do Problema de Transporte.**

Para a solução do sistema de equações montado pelas rotinas SolutoInicialT4.for, SolutoInicialT3.for, CproxT4.for e CproxT3.for, é utilizado o procedimento iterativo de Gauss-Seidel implementado na rotina GaussSoluto.for.

Os valores das funções de interpolação dos termos advectivos são calculados pelas rotinas seguintes: ExponencialT4.for, ExponencialT3.for, ExpoNeumanT4.for e ExpoNeumanT3.for.

## 5 Validação Numérica

Neste capítulo são mostradas as comparações das respostas numéricas e analíticas para várias condições de contorno, com o objetivo de validar numericamente a resposta do programa VirTran-3D. Inicialmente são apresentadas as comparações para a simulação do fluxo em regime saturado e não saturado. Posteriormente são mostradas as comparações para as simulações do transporte de vírus para fluxo saturado e fluxo parcialmente saturado.

Para as validações bidimensionais foi definida a geometria mostrada na Figura 5.1. A geometria consiste num plano de 8 x 4 m com espessura unitária, de rumo leste e com inclinação vertical. Na mesma figura são mostrados os parâmetros do modelo Mualem - van Genuchten do material. A geometria empregada para validar a resposta tridimensional é mostrada na Figura 5.2. Neste caso foi construído um paralelepípedo de dimensões 8 x 4 x 1 m. Os mesmos parâmetros empregados no caso bidimensional para descrever o fluxo foram empregados para a geometria tridimensional.

As mesmas condições de contorno foram empregadas nas geometrias bidimensional e tridimensional, como mostrado nas Figuras 5.1 e 5.2. Foram impostas condições de Dirichlet nos extremos do domínio gerando um gradiente hidráulico no sentido do comprimento. Duas condições iniciais foram testadas: na primeira considerou-se o domínio saturado com carga de pressão constante nula, na segunda condição, considerou-se uma carga de pressão constante negativa (-5 m) em todo o domínio.

A seguir são apresentados os casos analisados e as comparações com as soluções analíticas e/ou numéricas disponíveis para a validação dos cálculos.

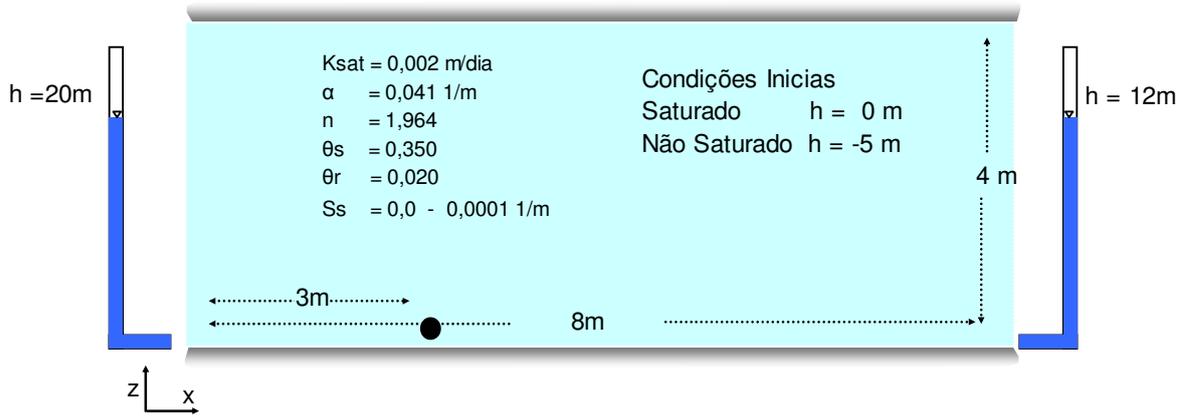


Figura 5.1. Geometria para a validação bidimensional.

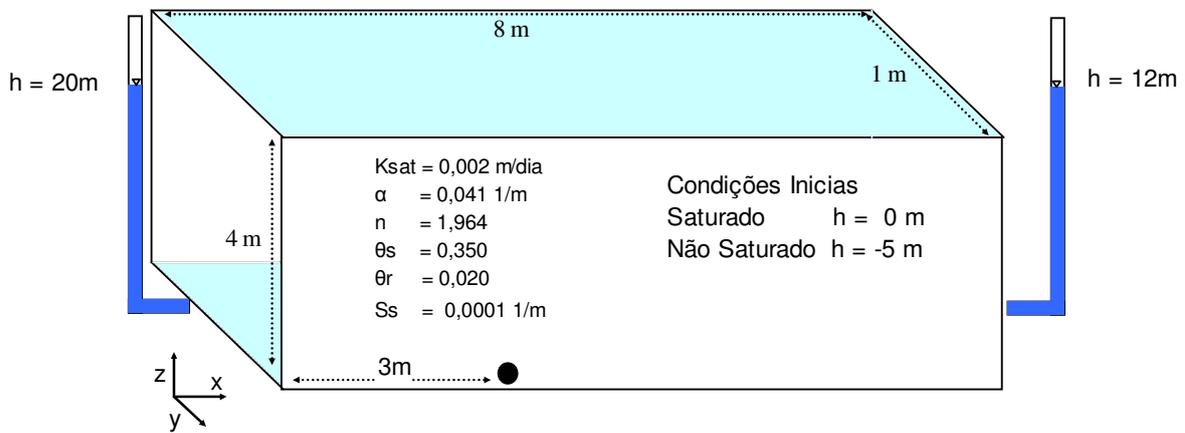


Figura 5.2. Geometria para a validação tridimensional.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0321281/CA

### 5.1. Validação Numérica do Fluxo

Para a validação do cálculo do fluxo foram discretizadas as geometrias mostradas nas Figuras 5.1 e 5.2 em triângulos e tetraedros, respectivamente. Para o problema bidimensional foram definidos 200 elementos triangulares e 125 nós. Para o problema tridimensional foram definidos 2415 elementos tetraédricos e 645 nós. Em ambas as geometrias foram monitoradas as cargas de pressão no ponto localizado na base do domínio em  $x = 3 \text{ m}$ , como indicado nas figuras.

### 5.1.1. Fluxo em Regime Saturado

Para a validação numérica do cálculo do fluxo saturado foi considerada uma carga de pressão nula e constante em todos os pontos do domínio. Neste caso considera-se que existe fluxo transiente devido ao efeito do armazenamento específico. A solução numérica foi comparada com a solução analítica proposta por Carslaw e Jaeger (1946). Esta solução analítica pode ser revisada no Anexo 1. Na Figura 5.3 é mostrada a comparação da variação da carga de pressão no ponto de monitoramento. Os resultados mostram serem satisfatórios.

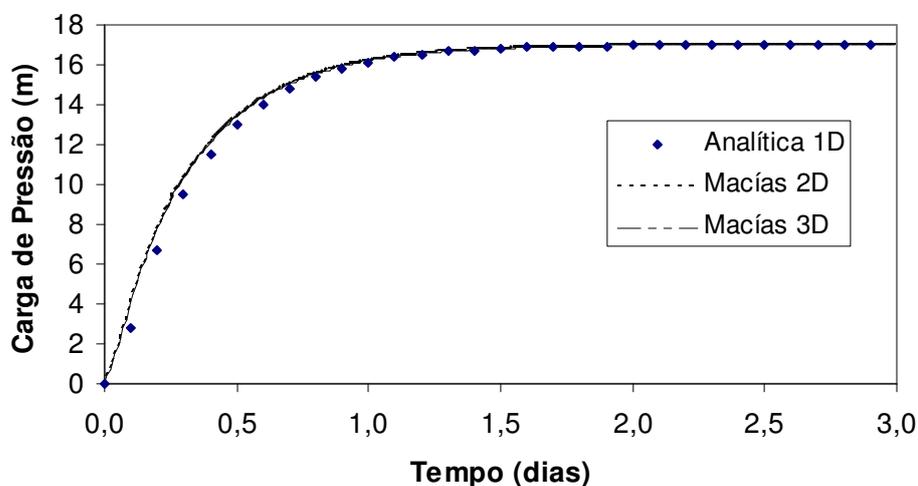


Figura 5.3 Fluxo Transiente Saturado - Comparação dos Resultados.

### 5.1.2. Fluxo em Regime Não Saturado

Para a validação numérica do cálculo do fluxo não saturado foram consideradas as mesmas malhas e condições de contorno do caso anterior. Neste caso as condições iniciais correspondem à carga de pressão negativa ( $h = -5$  m) constante em todo o domínio. A solução numérica foi comparada com a solução numérica fornecida pelo programa SWMS2D. Na Figura 5.4 é mostrada a comparação. Os resultados mostram serem satisfatórios.

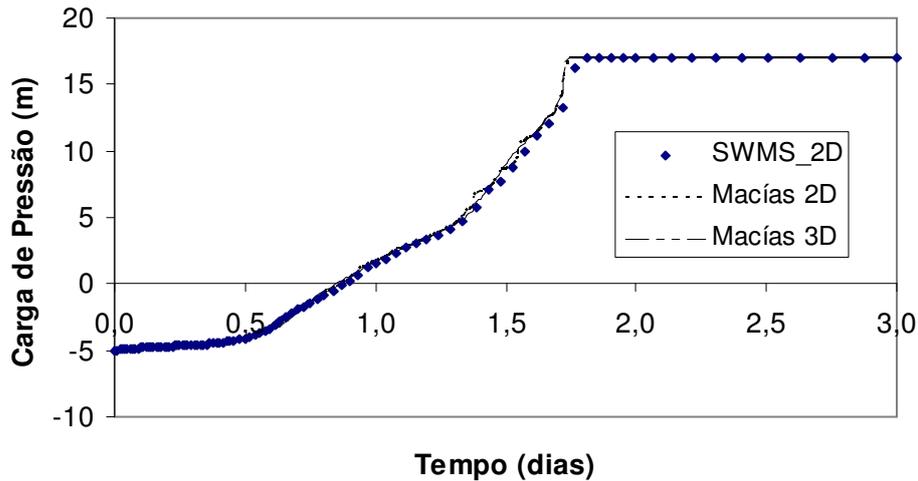


Figura 5.4 Fluxo Transiente não Saturado - Comparação dos Resultados.

A partir dos resultados anteriores conclui-se que o programa desenvolvido resolve de maneira satisfatória o fluxo transiente com saturação variável para problemas tridimensionais e bidimensionais.

## 5.2. Validação Numérica do Transporte

São apresentadas a seguir as comparações das simulações do transporte de vírus com as respostas analíticas e/ou numéricas disponíveis. As comparações foram feitas em termos das curvas de concentração dos vírus na fase líquida.

### 5.2.1. Transporte em Regime Saturado

Neste item são mostradas as comparações para as simulações do transporte de vírus sob condições de fluxo saturado em regime permanente. Foram empregadas as mesmas geometrias e malhas dos exemplos anteriores. Para a simulação do transporte foi utilizada uma permeabilidade saturada com valor  $K_{sat} = 0,167$  m/dia. As condições de contorno para o fluxo são as mesmas indicadas nas Figuras 5.1 e 5.2. Os parâmetros de transporte empregados na simulação são:

$$\alpha_l = 1\text{m} \quad \alpha_t = \alpha_w = 0 \text{ m (isto é, existe apenas dispersão longitudinal)}$$

$$K_d = 0 \quad \text{(não existe sorção em equilíbrio)}$$

$$\begin{aligned}K_{att} &= 0,8 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\K_{det} &= 0,0008 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\K_{str} &= 0,5 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \quad (\text{para a matriz porosa}) \\K_{str} &= 0,334 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \quad (\text{para a fratura}) \\\mu_l &= 0,03 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\\mu_{din} &= 0,09 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\\rho &= 1550 \text{ kg/m}^3\end{aligned}$$

Todas as simulações do transporte foram realizadas considerando as duas configurações seguintes.

- No primeiro caso foi colocada a condição de Dirichlet com concentração unitária constante ( $C_o = 1 \text{ vírus/m}^3$ ) no extremo esquerdo do domínio ( $x = 0$ ), e a condição de Cauchy no extremo direito ( $x = 8$ ). As análises feitas com esta condição foram denominadas Análises Tipo Dirichlet.
- No segundo caso foi colocada a condição de Neuman com valor  $0,167 \text{ vírus/m}^2/\text{dia}$  no extremo esquerdo do domínio ( $x = 0$ ), e a condição de Cauchy no extremo direito ( $x = 8$ ). As análises feitas com esta condição foram denominadas Análises Tipo Neuman.

São apresentados a seguir os resultados das comparações para transporte no meio poroso, na fratura e no meio fraturado-poroso.

a. Meio Poroso

Considera-se neste exemplo apenas transporte no meio poroso. As análises foram feitas em duas e três dimensões, e foram avaliados dois casos de simulação:

- Caso I: Transporte considerando advecção, dispersão, sorção dinâmica e decaimento nas fases líquida e sorvida.
- Caso II: Transporte considerando advecção, dispersão e filtração mecânica.

Para o Caso I, as comparações dos resultados das análises para as condições de contorno Tipo Dirichlet e Tipo Neuman, são mostradas nas Figuras 5.5 e 5.6. Os valores numéricos foram comparados com as soluções analíticas propostas por Sim e Chrysikopoulos (1995) para o transporte unidimensional de vírus para os dois tipos de condição de contorno mencionados. Estas soluções analíticas podem ser revisadas no Anexo 1. Nas Figuras 5.5 e 5.6 são apresentados perfis de concentração ao longo do comprimento do domínio (eixo x, em  $y=z=0$ ), para 0,5 e 5,0 dias de simulação.

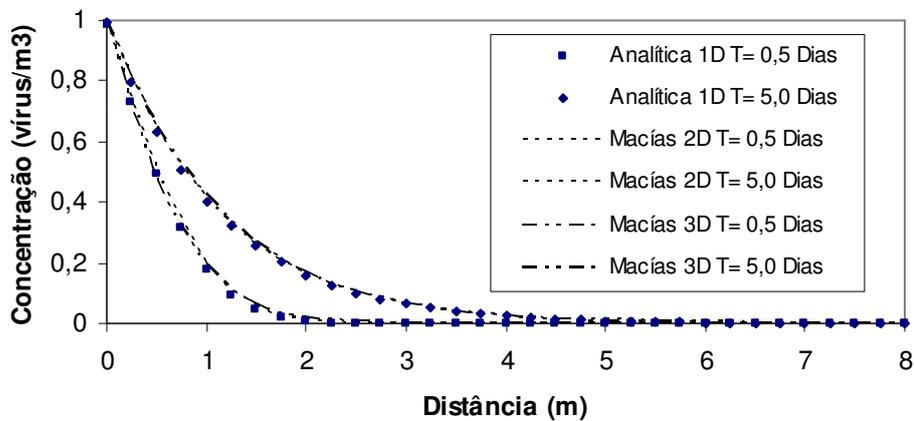


Figura 5.5 Transporte Caso I com condição de Tipo Dirichlet

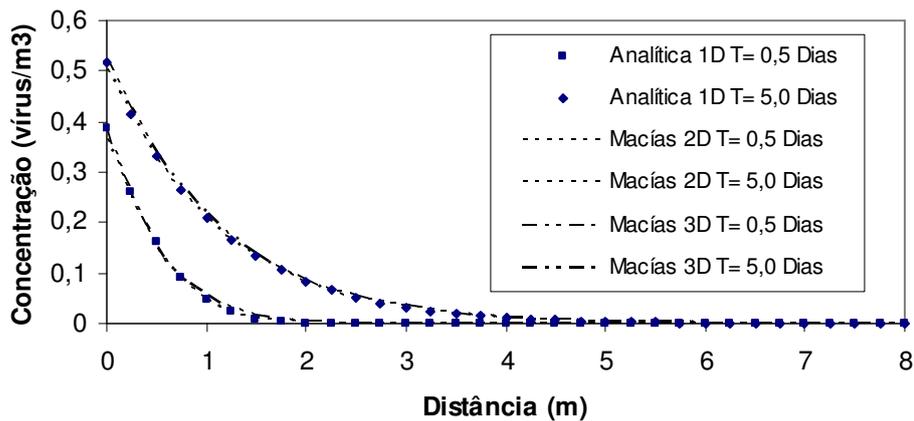


Figura 5.6 Transporte Caso I com condição de Tipo Neuman

Para o Caso II, as comparações dos resultados das análises para as condições de contorno Tipo Dirichlet e Tipo Neuman, são mostradas nas Figuras 5.7 e 5.8. Os valores numéricos foram comparados com as soluções analíticas propostas por Sim e Chrysikopoulos (1995) para o transporte unidimensional de vírus para os dois tipos de condição de contorno mencionados. Estas soluções analíticas podem ser revisadas no Anexo 1. Nas Figuras 5.7 e 5.8 são apresentados perfis de concentração ao longo comprimento do domínio (eixo x, em  $y=z=0$ ), para 0,5 e 5,0 dias de simulação.

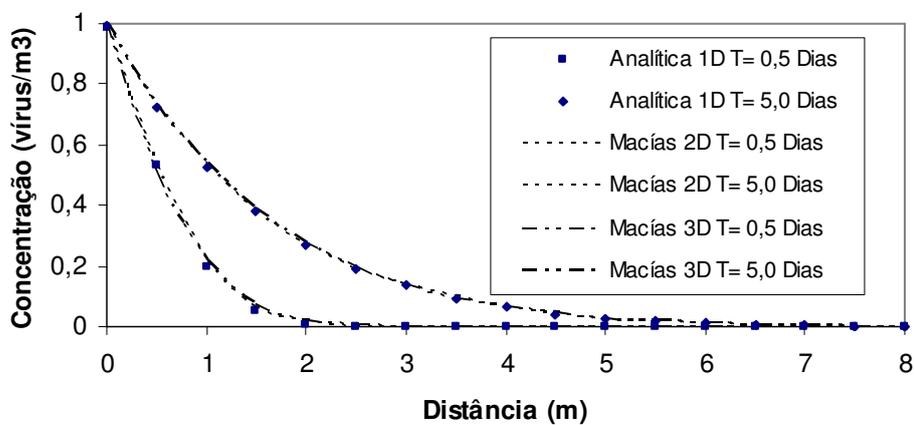


Figura 5.7 Transporte Caso II com condição de Tipo Dirichlet

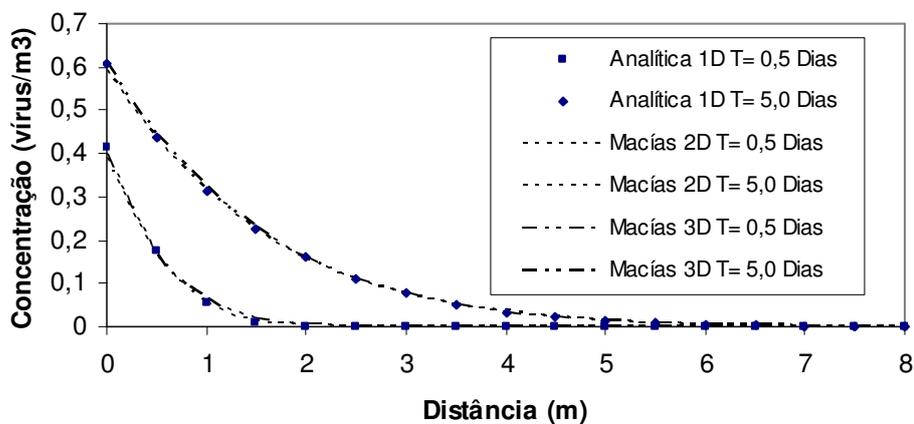


Figura 5.8 Transporte Caso II com condição de Tipo Neuman

b. Fratura

Considera-se neste exemplo transporte de vírus apenas numa fratura. Neste caso, os fenômenos simulados são a advecção, a dispersão e a sorção irreversível. Os resultados foram comparados com a solução analítica proposta por Abdel-Salam e Chrysikopoulos (1994) para o transporte de colóides em fraturas saturadas com abertura constante. Esta solução analítica pode ser revisada no Anexo 1. Embora a solução analítica apresentada não esteja em termos do parâmetro  $K_{atf}$  da Equação 4.12, existe uma relação entre este parâmetro e os parâmetros da formulação de Abdel-Salam e Chrysikopoulos (1994). Essa relação é apresentada a seguir.

$$K_{atf} = \frac{2kU}{(2b)^2} \quad (5.1)$$

onde  $U$  é a velocidade intersticial,  $2b$  a abertura da fratura e  $k$  o coeficiente de deposição das partículas na superfície da fratura (dimensão de comprimento).

Neste exemplo foram empregadas a mesma malha e geometria da Figura 5.1. Foi considerada uma abertura  $2b = 0.1$  m. Para os valores  $k = 0,01$  m, velocidade  $U = 0,167$  m/dia, a taxa de filtração resultante é  $K_{atf} = 0,334$  (dia<sup>-1</sup>). De maneira similar ao tratamento do meio poroso, as análises foram feitas considerando as condições de contorno Tipo Dirichlet e Tipo Neuman com os mesmos valores acima indicados.

Nas Figuras 5.9 e 5.10 são mostradas as comparações das respostas numéricas com a solução analítica. Nessa figuras são apresentados perfis de concentração ao longo do comprimento do domínio (eixo  $x$ , em  $y=z=0$ ), para 0,5 e 5,0 dias de simulação.

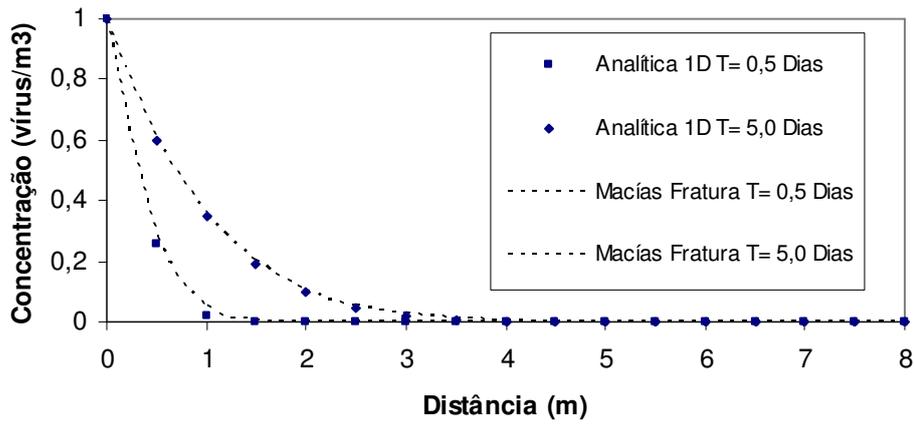


Figura 5.9 Transporte na Fratura com condição de Tipo Dirichlet

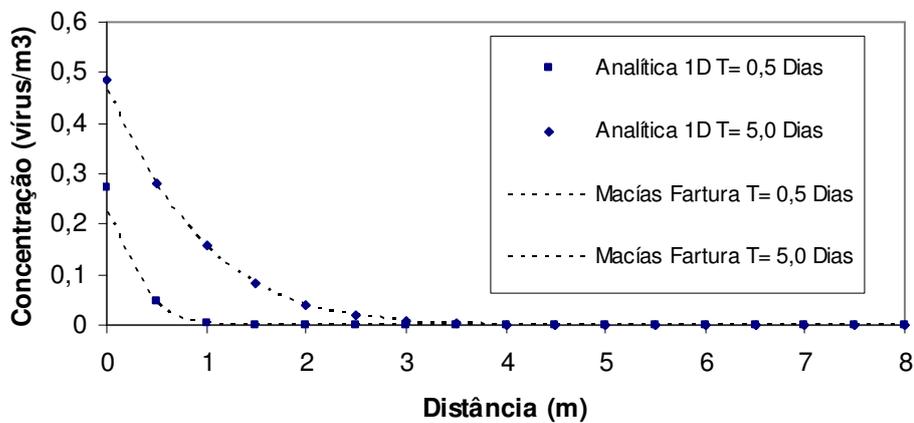


Figura 5.10 Transporte na Fratura com condição de Tipo Neuman

c. Meio Fraturado-Poroso

Embora não exista uma solução analítica para comparar a solução de um sistema fraturado-poroso, foi testada uma geometria simples para validar a resposta numérica. Considere a mesma geometria da Figura 5.2, e seja que existe uma fatura vertical paralela ao comprimento do paralelepípedo e com abertura  $2b = 0,001$  m. A fratura está localizada no ponto médio da largura ( $y = 0,5$  m). Esta geometria é mostrada na Figura 5.11. Se definirmos as propriedades da fratura e matriz, e as condições de contorno como sendo as mesmas empregadas na validação do Caso I do item (a), então os mesmos resultados obtidos com a solução de Sim e Chrysikopoulos (1995) deverão permitir validar a solução

numérica para o sistema acoplado matriz-fratura. Isto é, deverão se obter os mesmos valores mostrados nas Figuras 5.5 e 5.6.

Para esta geometria, foi construída uma malha conjunta acoplada de tetraedros e triângulos. Neste caso, a quantidade total de nós resultante foi de 27643, isto condizente com 122880 tetraedros e 2048 triângulos.

Como no Caso I do item (a), foram empregadas as condições de contorno de Tipo Dirichlet e Neuman. As comparações são mostradas nas Figuras 5.12 e 5.13. Nessas figuras são apresentados perfis de concentração ao longo do comprimento do domínio para a fratura e para a matriz porosa. O perfil da matriz porosa foi monitorado nas coordenadas  $y=z=0$ . O perfil na fratura foi monitorado nas coordenadas  $y = 0,5 z = 0$ .

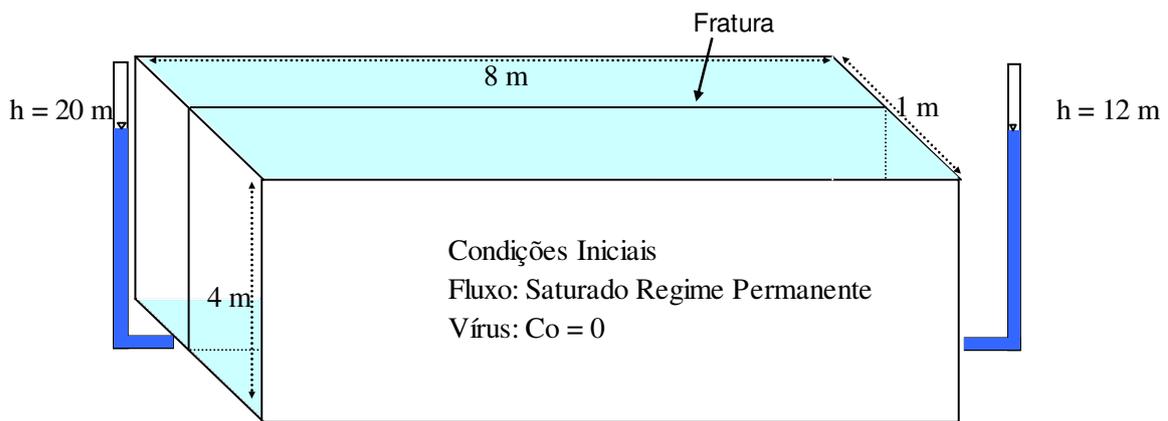


Figura 5.11 Geometria do Meio Fraturado – Poroso.

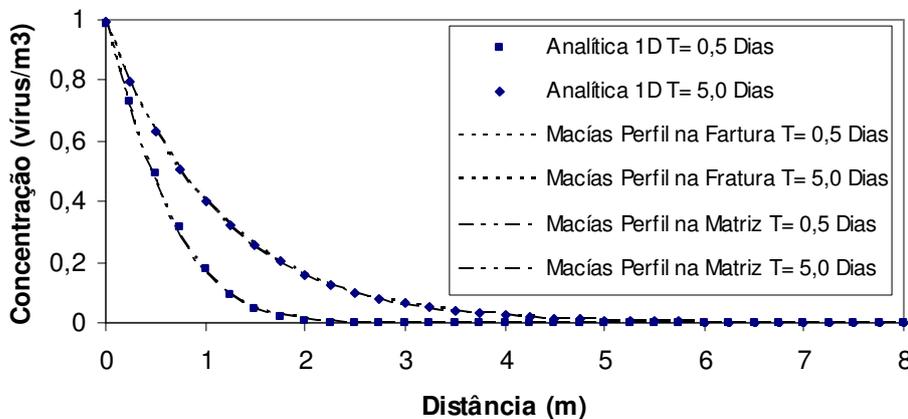


Figura 5.12 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Dirichlet

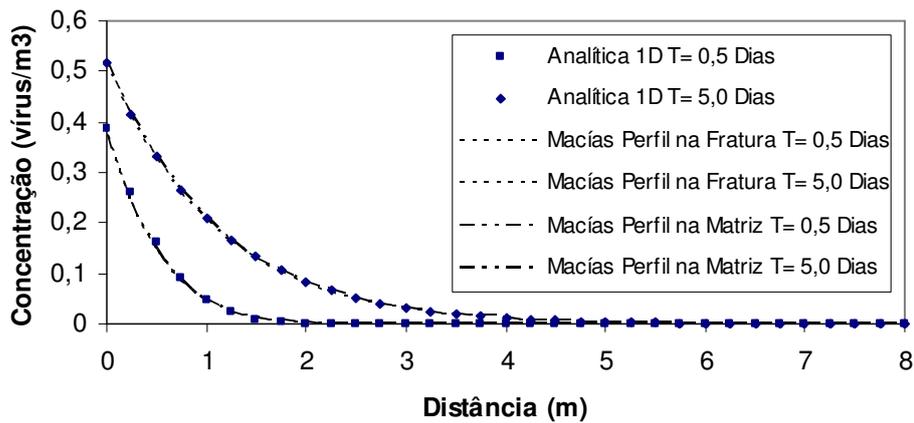


Figura 5.13 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Neuman.

### 5.2.2. Transporte em Regime Não Saturado

Nesta seção são mostradas as comparações para exemplos de transporte em condição de saturação parcial. Duas condições foram estudadas, saturação constante e saturação variável. As análises foram feitas somente para transporte no meio poroso, para duas e três dimensões. No caso bidimensional, a geometria testada foi um plano vertical de 1 m de largura por 5 m de altura e discretizado com 956 nós e 1800 elementos triangulares. Para o caso tridimensional, a geometria testada foi um paralelepípedo com base 1 x 1 m e 5m de altura. A discretização foi feita com 54321 nós e 24000 elementos tetraédricos.

Os parâmetros empregados nas análises são:

$$\theta_r = 0,02$$

$$\theta_s = 0,5$$

$$\alpha = 0,041$$

$$m = 0,491$$

$$n = 1,964$$

$$\alpha_l = \alpha_t = \alpha_w = 1 \text{ m (dispersão isotrópica)}$$

Para estes exemplos foram considerados apenas os processo advectivos e dispersivos no transporte. Os resultados obtidos com o programa VirTran-3D foram comparados com os resultados do programa SWMS2D. As análises feitas são descritas a seguir.

a. Saturação Constante

Neste caso o meio poroso foi considerado parcialmente saturado e com saturação homogênea em todo o domínio. A permeabilidade saturada utilizada foi  $K_{sat} = 100$  m/dia. As condições iniciais e de contorno para o fluxo consistiram na aplicação de uma carga de pressão constante em todo o domínio com valor  $h = -110$  m, equivalente a uma saturação de 26% ou alternativamente a um teor de umidade volumétrico de  $\theta = 0,13$ . Devido à carga de elevação, existe fluxo vertical descendente, com gradiente unitário e velocidade 0,0288 m/dia constante. As condições de contorno para o problema de transporte consistiram na aplicação de uma concentração unitária constante na parte superior da coluna e gradiente nulo na parte inferior. Foi monitorado um ponto localizado no centro da coluna a 1,2 m de profundidade. Na Figura 5.14 é mostrada a comparação dos resultados.

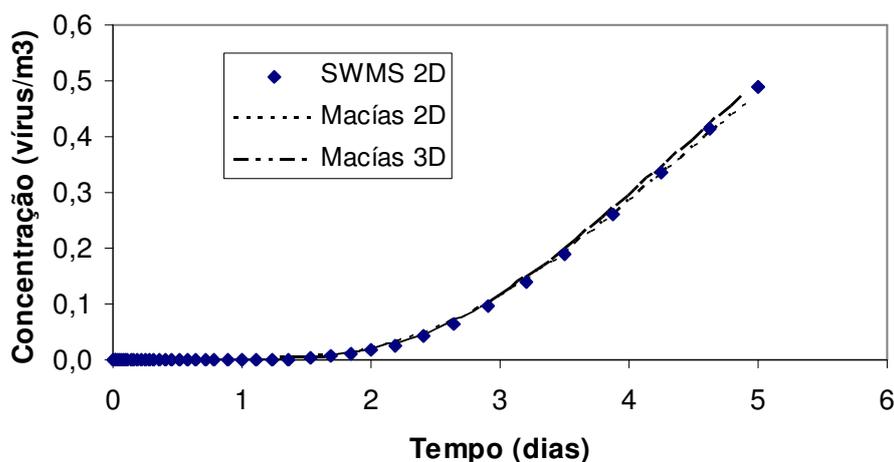


Figura 5.14 Transporte no Meio Poroso em condição de fluxo permanente não saturado.

b. Saturação variável

Neste exemplo, o transporte foi simulado em regime de fluxo com saturação variável. Foram empregadas as mesmas malhas e geometrias do caso anterior. A permeabilidade saturada utilizada foi  $K_{sat} = 0,1$  m/dia. Foi colocada uma carga de pressão constante  $h = -110$  m como condição inicial em todo o domínio. Para provocar fluxo com saturação variável foi colocada uma carga de pressão  $h = 1$  m no topo da coluna e no extremo inferior foi colocada uma condição de tipo superfície livre. As condições de contorno para o problema de transporte consistiram na aplicação de uma concentração unitária constante na parte superior da coluna e gradiente nulo na parte inferior. Como no caso anterior foi monitorado um ponto localizado no centro da coluna a 1,2 m de profundidade. Na Figura 5.15 é mostrada a comparação das cargas de pressão e na Figura 5.16 as concentrações.

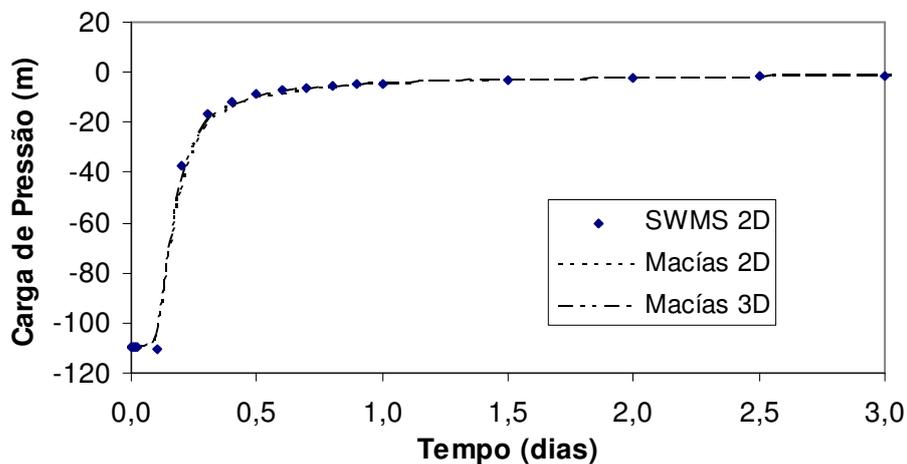


Figura 5.15 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da carga de pressão no ponto de observação.

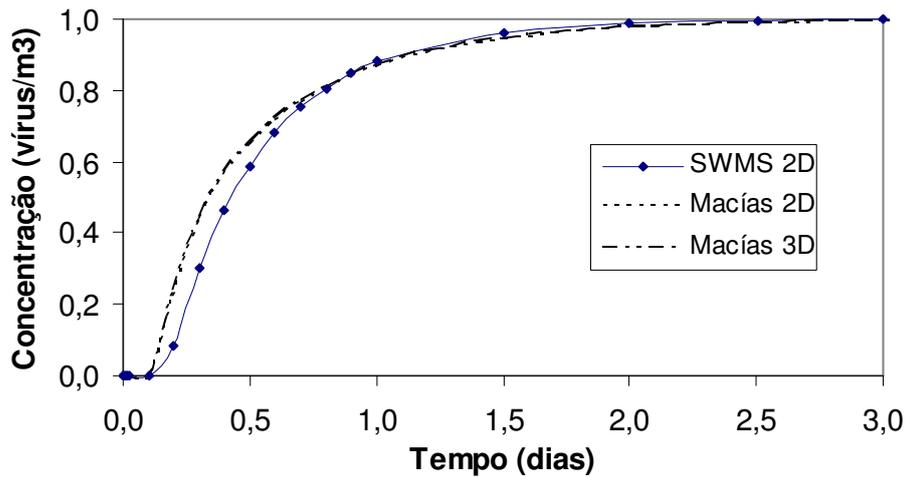


Figura 5.16 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da concentração no ponto de observação.

No caso da Figura 5.16, existe uma diferença entre as respostas do programa VirTran-3D e o SWMS 2D. Essa diferença pode estar relacionada à:

- diferenças na interpolação dos termos advectivos e dispersivos
- diferença no balanço de massa entre os dois programas. No SWMS 2D o erro indicado no balanço de massa é de 5 a 9 %.
- diferenças na discretização espacial do MEF e do MVF

### 5.3. Outras verificações numéricas

Nesta seção é verificada a consistência física e numérica da resposta do programa VirTran-3D quando considerados os efeitos da exclusão e da sorção na interface água-ar. Não foi obtida uma solução analítica para esses dois fenômenos, pelo que optou-se por comparar as concentrações obtidas apenas com os processos advectivos-dispersivos com as concentrações obtidas considerando os fenômenos mencionados, para verificar se a ferramenta numérica consegue reproduzir o efeito desejado.

Para simular a exclusão de poros foi considerada a geometria da Figura 5.1. O fluxo foi simulado em regime permanente e saturado. A permeabilidade saturada utilizada foi  $K_{\text{sat}} = 0,167$  m/dia. Foi definido um valor de dispersividade longitudinal  $\alpha_l = 1$ m. Os parâmetros restantes como indicados na Figura 5.1. Neste exemplo foi definido arbitrariamente um teor de umidade volumétrico não acessível aos colóides  $\theta_{\text{col}} = 0,2$ , valor superior ao valor residual  $\theta_r = 0,02$ . Foi escolhido o nó de coordenadas  $x = 8$  e  $z = 2$ , localizado no extremo direito do domínio, para monitorar a variação da concentração no tempo. Para este exemplo, é esperado que a concentração com o efeito da exclusão aumente mais rapidamente no tempo e apresente uma dispersão menor. As condições de contorno para o fluxo são as mesmas mostradas na Figura 5.1. Para o transporte foi definida uma concentração unitária constante no extremo esquerdo do domínio ( $x = 0$ ) e condição de Cauchy no extremo direito ( $x = 8$ ). A condição constante garante entrada de vírus no sistema pelo que a concentração na saída tenderá a aumentar com o tempo até atingir a concentração da entrada. Na Figura 5.17 são mostradas as curvas de concentração no ponto monitorado. Desta figura é claro que quando considerado o efeito da exclusão, a curva de concentração apresenta uma chegada mais rápida e com menor dispersão.

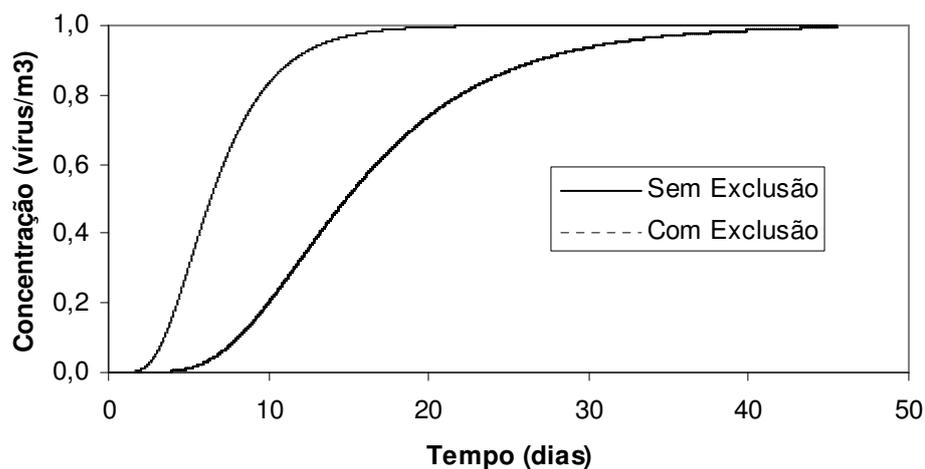


Figura 5.17 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com exclusão e sem exclusão

Para simular o efeito da sorção na interface água-ar, foi escolhido o mesmo caso analisado no item 5.2.2 (a). Foram comparadas as concentrações sem e com sorção. Os parâmetros empregados para a sorção foram  $K_{aw} = 0,1$  ( $\text{dia}^{-1}$ ) e  $K_{daw} = 0,01$  ( $\text{dia}^{-1}$ ). O programa VirTran-3D determina automaticamente a relação da área da interface água-ar por volume unitário do meio poroso. Neste caso, sendo que a saturação é constante, então esse valor é constante e igual a  $A_{aw} = 14,6$  ( $\text{m}^2/\text{m}^3$ ). Se compararmos as Equações 4.6 e 4.8 é possível observar que morfologicamente essas equações são idênticas. A diferença fundamental está nos parâmetros  $A_{aw}$  e  $\rho_b$ . Isto é, se trocarmos um pelo outro é possível reproduzir a outra equação. Aproveitando essa propriedade, foi simulada a sorção dinâmica na interface água-sólido para este exemplo, considerando os parâmetros  $K_{att} = 0,1$  ( $\text{dia}^{-1}$ ),  $K_{det} = 0,01$  ( $\text{dia}^{-1}$ ) e  $\rho_b = 14,6$  ( $\text{kg}/\text{m}^3$ ). Os resultados obtidos são mostrados na Figura 5.18. O ajuste dos valores indica que numericamente a rotina para a determinação da sorção na interface água-ar está correta. Resulta também claro desta figura, que quando considerada a sorção na interface água-ar, a concentração na fase líquida diminui se comparada com a concentração dada pelo transporte advectivo-dispersivo puro.

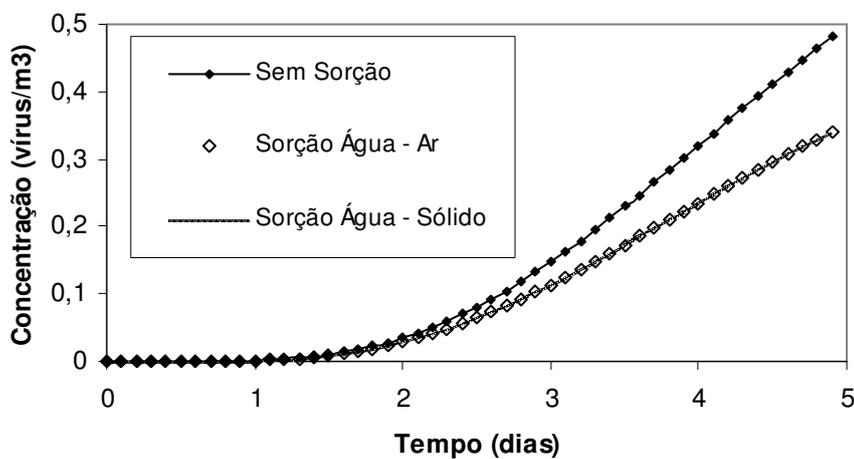


Figura 5.18 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com sorção e sem sorção na interface água-ar.

## 6 Análise Comparativa: Aquíferos do Vale Central

Como estabelecido no Capítulo 1, a motivação principal para a realização desta pesquisa foi a de aplicar uma nova metodologia de análise no transporte de vírus para as condições do Vale Central da Costa Rica. Foi considerada inicialmente dentro do escopo da pesquisa, a realização de trabalhos de campo num local específico do Vale Central. Porém, devido ao consumo inesperado de tempo durante a fase de programação e ao prazo imposto pelo programa de Doutorado, o escopo desta aplicação foi alterado. Foram definidas então três Geometrias Tipo representativas da estratigrafia de algumas áreas do Vale Central. As condições de fluxo nesses locais foram definidas a partir dos dados disponíveis pelo autor de consultorias nas que teve participação. Foram empregados para todas as camadas os mesmos parâmetros ( $\alpha$  e  $n$ ) do modelo Mualem – van Genuchten utilizados nas validações numéricas. Os valores utilizados não necessariamente representam as propriedades dos materiais do Vale Central. Os parâmetros de transporte foram obtidos dos valores da literatura mostrados no Capítulo 3. As três Geometrias Tipo foram analisadas com o programa VirTran-3D, e os resultados comparados como os valores fornecidos pelo MTAv. Embora os valores numéricos absolutos obtidos nestas análises não representem fielmente as condições reais de transporte no Vale Central, é possível de forma comparativa analisar a influência dos mecanismos não incorporados no MTAv na distribuição dos vírus no terreno e portanto nas distâncias máximas percorridas.

O MTAv empregado na Costa Rica, é um Método Baseado no Tempo de Trânsito dos microorganismos durante 70 dias. Essa metodologia considera que os vírus são transportados por advecção, e que são inativados na sua totalidade durante esse tempo de transporte. No fundo, essa metodologia está considerando que a pluma dos vírus é transportada por um mecanismo do tipo pistão. Essa metodologia também considera que a concentração dos vírus no terreno vai diminuindo a partir da zona de injeção (devido à inativação), até ser zero na

distância em que os 70 dias de transporte são completados, como mostrado na Figura 6.1. Resulta claro então, que a taxa de inativação dos vírus neste método é dada pela relação: #total de vírus injetados /70 dias. Se o MTA<sub>v</sub> fosse visto como um Método Baseado no Risco, seria um método no qual a concentração máxima permitida é nula.

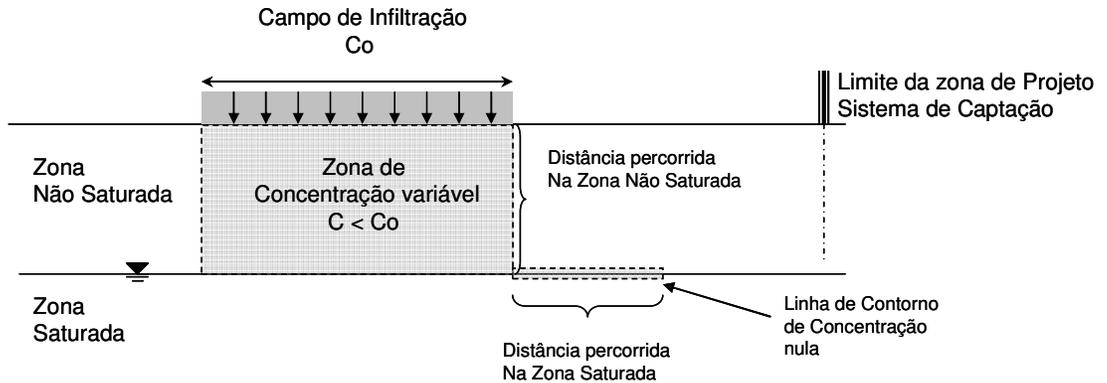


Figura 6.1 Variação da Concentração Segundo o MTA<sub>v</sub>

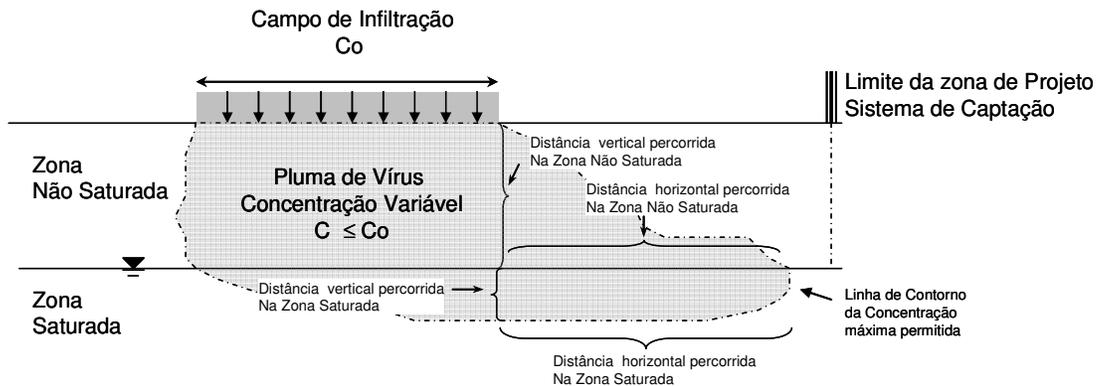


Figura 6.2 Variação da Concentração Segundo a Metodologia Baseada no Risco

A Metodologia Baseada no Risco parte do princípio que, junto à advecção existem outros mecanismos físicos que influenciam no transporte dos vírus e que podem ou não atuar de maneira simultânea. Nessa metodologia, a concentração dos vírus varia na distância e no tempo, definindo uma pluma cuja geometria dependerá das condições locais de transporte. Esse método usa como critério para a definição da zona de proteção, um valor de concentração máxima permitida e portanto interessa conhecer a extensão da pluma dos vírus até o valor desta concentração limite. Um exemplo esquemático é mostrado na Figura 6.2. Como indicado no Capítulo 2, a concentração máxima permitida na Holanda é  $1,8 \times 10^{-4}$

vírus/m<sup>3</sup>. Devido à falta de outros valores, essa concentração foi utilizada como referência nas análises comparativas.

A partir dos comentários anteriores resulta claro que o MTA<sub>v</sub> e o Método Baseado no Risco empregam critérios diferentes para definir o tamanho da zona de proteção, e portanto é de esperar que esses tamanhos sejam diferentes. Então, como comparar os resultados dessas duas metodologias se usam critérios diferentes? Para comparar os resultados é necessário definir critérios de igualdade entre as duas metodologias. Os critérios de igualdade definidos neste trabalho são descritos a seguir.

- Definir uma geometria única do problema.
- Definir as mesmas condições iniciais: Para a concentração foi definido um valor inicial nulo para todo o domínio. Para o fluxo foi definida uma condição inicial em termos da carga total. Os valores de carga total foram escolhidos de forma tal a reproduzir o valor e sentido do gradiente hidráulico natural. Desta forma, tanto na zona saturada quanto na zona não saturada, inicialmente existe fluxo apenas na direção do gradiente hidráulico natural. A imposição das cargas totais na zona não saturada gera uma distribuição na carga de pressão negativa que diminui linearmente desde a superfície do terreno até ser nula no ponto em que a carga de elevação é igual à carga total imposta.
- Definir condições de contorno claras e equivalentes para as duas metodologias: para o fluxo na zona saturada foram definidas condições de contorno do tipo Dirichlet em termos da carga total. Foram mantidos os mesmos valores das condições iniciais acima descritas, e essas condições foram impostas apenas nos planos do contorno localizados a jusante e a montante no sentido do gradiente hidráulico natural. Os planos restantes foram considerados impermeáveis (sem condição de contorno explícita). Com isto, o fluxo na zona saturada ocorre apenas na direção do gradiente hidráulico natural. Esta é uma condição válida para as duas

metodologias. No MTAv não é considerado o fluxo não saturado, mas sim o fluxo saturado em regime permanente na zona não saturada. Nessa metodologia então, para qualquer valor de vazão do efluente, o fluxo saturado permanente é estabelecido de forma imediata a partir do momento em que a injeção se inicia. Essa metodologia não analisa a condição transiente. Para reproduzir com o programa VirTran-3D o regime de fluxo permanente considerando o efeito da não saturação (uma das motivações desta tese), foram definidas as seguintes condições de contorno: vazão constante na zona de infiltração e contornos impermeáveis nos planos que definem as zonas não saturadas. Em todos os casos analisados, foram feitas simulações apenas do fluxo antes de realizar as simulações do transporte. Nessas análises, para as vazões do efluente empregadas, apenas o regime permanente em condição não saturada foi atingido. Não foi atingido o regime saturado. As distribuições de carga obtidas destas simulações serviram como condições iniciais para as simulações do transporte. Durante as simulações de transporte, as condições de contorno acima descritas para o fluxo foram mantidas.

Em relação ao problema de transporte, o MTAv considera que a injeção dos vírus é mantida contínua (não necessariamente constante) durante todo o tempo de trânsito. O MTAv também considera (embora de maneira implícita) que no contorno do domínio o gradiente da concentração é nulo. Para reproduzir as mesmas condições com o programa VirTran-3D, foram definidas as seguintes condições de contorno para o problema de transporte: concentração constante unitária e contínua na zona de infiltração, e condição de Cauchy no plano do contorno localizado a jusante no sentido do fluxo. Os planos restantes do contorno foram considerados impermeáveis (sem condição de contorno explícita).

- Definir os mesmos parâmetros para descrever o fluxo e o transporte.

- Realizar as análises para o mesmo intervalo de tempo: neste trabalho foi definido um tempo de simulação de 120 dias coincidente com o caso mais crítico de sobrevivência dos vírus, segundo os dados da Tabela 3.8. Para as análises com o MTAv foi empregado um tempo de trânsito também de 120 dias para comparar os resultados.
- Determinar as distâncias percorridas a partir dos mesmos pontos de referência. As distâncias de interesse (mostradas nas Figuras 6.1 e 6.2.) são: a distância vertical na zona não saturada (medida a partir do centro do campo de infiltração), e a distância horizontal na zona saturada (medida a partir da borda do campo de infiltração). As duas distâncias anteriores podem ser calculadas através das duas metodologias de análise e portanto podem ser comparadas diretamente. Na Figura 6.2 são mostradas outras distâncias de interesse que não são calculadas com o MTAv, mas que ajudam no entendimento do fenômeno de transporte. Neste caso são determinadas as distâncias: horizontal na zona não saturada (medida a partir da borda do campo de infiltração) e vertical na zona saturada (medida a partir do centro do campo de infiltração). Essas distâncias permitem quantificar os efeitos da dispersão no transporte dos vírus, é sobretudo permitem verificar se esses efeitos são importantes em relação à localização das captações vizinhas.

Neste capítulo é apresentada uma descrição dos aquíferos conhecidos e de importância comercial da zona central da Costa Rica. Seguidamente é apresentada uma comparação dos resultados das análises como o MTAv e o programa VirTran-3D. As análises comparativas foram feitas para três geometrias diferentes. Essas geometrias representam configurações estratigráficas presentes em algumas zonas do Vale Central. As configurações geométricas não pretendem abarcar todas as estratigrafias presentes e sim algumas geometrias de maior relevância. Dever ser dito novamente que os resultados das análises numéricas não devem ser avaliados em termos absolutos, sobre o que acontece nos aquíferos

do Vale Central, e sim como valores relativos da importância dos efeitos dos diversos fenômenos físicos que influenciam no transporte dos vírus.

### 6.1. Aqüíferos na Grande Área Metropolitana

A Grande Área Metropolitana da Costa Rica está localizada no Vale central do país (Figura 6.3). Mais dos 60% da população e quase toda a indústria estão concentrados nesta área, que representa menos de 11% do território nacional. (Denyer & Kussmaul, 1994).

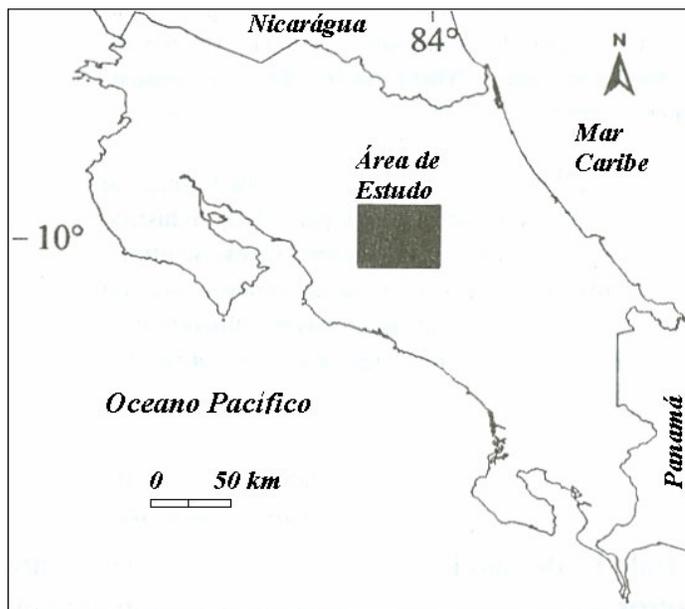


Figura 6.3 Localização do Vale Central da Costa Rica

Os aqüíferos mais importantes do Vale Central estão constituídos por materiais vulcânicos porosos e fraturados-porosos. Na Figura 6.4 apresenta-se o resumo estratigráfico destes aqüíferos. A descrição resumida de cada aqüífero é apresentada a seguir (baseada em Arredondo, 1994).

Aqüífero Barva: é dividido em dois aqüíferos. O superior "Aqüífero Los Angeles" é encontrado nas partes altas da zona norte do Vale Central. É um aqüífero de pouca extensão e com porosidade por fissuras e poros. O aqüífero inferior é conhecido como "Aqüífero Barva Inferior". Está formado por

intercalações de lavas fraturadas e porosas com alta permeabilidade. A espessura destas camadas de lava varia entre 10 e 80 metros. A separação entre os aquíferos superior e inferior ocorre através de uma seqüência de aquíferos arenosos de origem vulcânica. O aquífero Barva é do tipo livre, e a recarga acontece por infiltração direta da chuva ou por rios influentes. A permeabilidade saturada deste aquífero varia entre 1–10 m/dia e o coeficiente de armazenamento apresenta um valor médio de 0,1.

O aquífero Barva está separado do aquífero Colima por uma seqüência vulcânica denominada “Depósitos de Avalancha Ardiente” com espessura de 45 a 150 metros. Os “Depósitos de Avalancha Ardiente” estão caracterizados por tufas e piroclastos porosos e fraturados. Desde o ponto de vista hidrogeológico, esta formação é considerada como aquífero. Os valores da permeabilidade saturada variam de  $1,16 \times 10^{-4}$  a  $2,72 \times 10^{-4}$  m/dia. Fraturas verticais que permitem o fluxo de água são comuns nesta formação.

O aquífero Colima é o mais importante do Vale Central. Está formado por intercalações de camadas de lava de espessura variável entre 10 e 30 metros. São reconhecidos três aquíferos. O superior denominado “Aquífero La Libertad” é do tipo suspenso e de baixo rendimento. Uma camada de tufa alterada com 10 m de espessura separa o “Aquífero La Libertad” do “Aquífero Colima Superior”. Esta camada de tufa é um aquífero. O “Aquífero Colima Superior” é de alto rendimento e está caracterizado por lavas fraturadas com matriz impermeável e lavas com textura tipo brecha. A espessura saturada máxima deste aquífero é de 55 metros, e a recarga acontece por percolação vertical a partir de outros aquíferos. Uma seqüência de camadas de tufas e ignimbritos colunares com 35 metros de espessura separa os aquíferos “Colima Superior” e “Colima Inferior”. Esta seqüência é um aquífero e em algumas zonas funciona como camada confinante do aquífero “Colima Inferior”. O “Aquífero Colima Inferior” está localizado a uma profundidade superior aos 100m. É formado por várias camadas de lava intercaladas com tufas, e a permeabilidade acontece principalmente nas fraturas. A recarga deste aquífero é por percolação vertical. As permeabilidades saturadas do aquífero Colima são bastante superiores aos valores do aquífero Barva, neste caso a permeabilidade varia entre 5 e 50 m/dia, gerando transmissividades da ordem de 500 ou superior a  $5000 \text{ m}^2/\text{dia}$ . O coeficiente de armazenamento varia de  $1,5 \times 10^{-3}$  a 0,1.

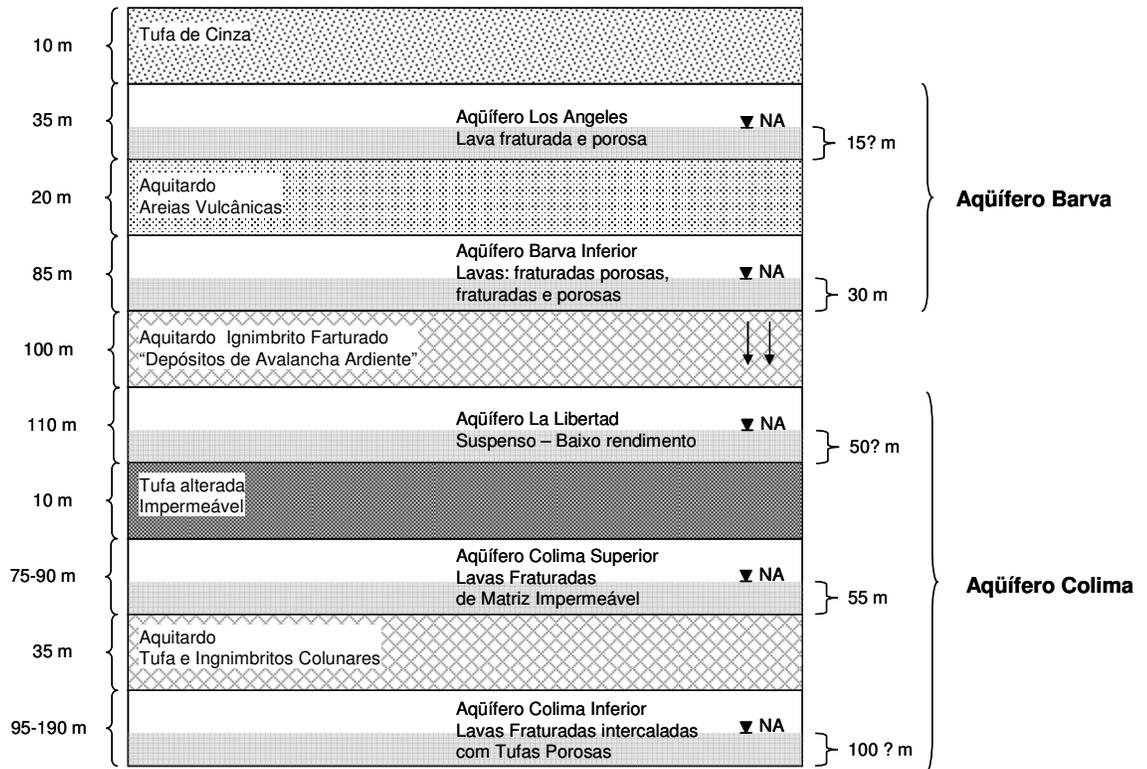


Figura 6.4 Estratigrafia dos Aquíferos do Vale Central da Costa Rica (Baseada em BGS-SENARA, 1985; Ramírez e Alfaro, 2002; Vargas, 2002)

## 6.2. Geometrias Tipo

A partir das informações na literatura sobre os aquíferos da Costa Rica e das informações disponíveis pelo autor sobre a estratigrafia e condições hidrogeológicas de algumas áreas do Vale Central, foram definidas três geometrias tipo que reproduzem a critério do autor as condições estratigráficas gerais do Vale Central. Essas geometrias tipo foram analisadas com o método MTA<sub>v</sub> e com o programa VirTran-3D. As geometrias tipo foram denominadas Geometria 1, Geometria 2 e Geometria 3 e são mostradas na Figura 6.5. Nas figuras 6.6, 6.8 e 6.10 são mostradas as estratigrafias e parâmetros para cada geometria, e nas Figuras 6.7, 6.9 e 6.11 são mostrados os modelos hidrogeológicos respectivos.

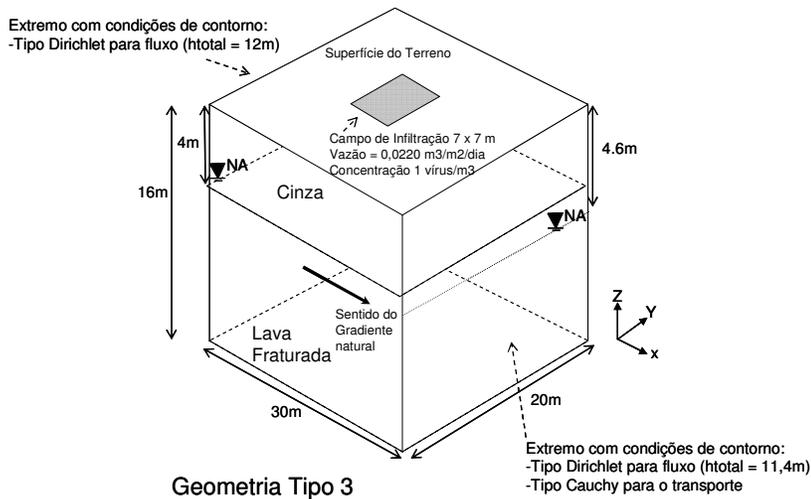
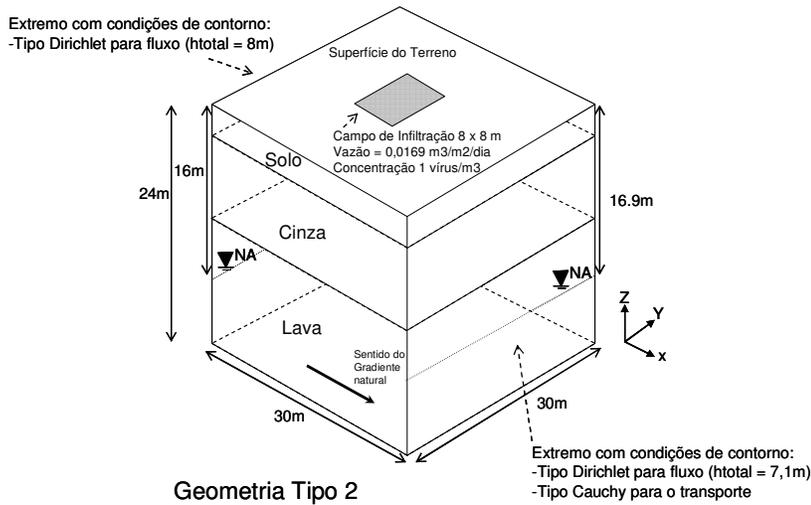
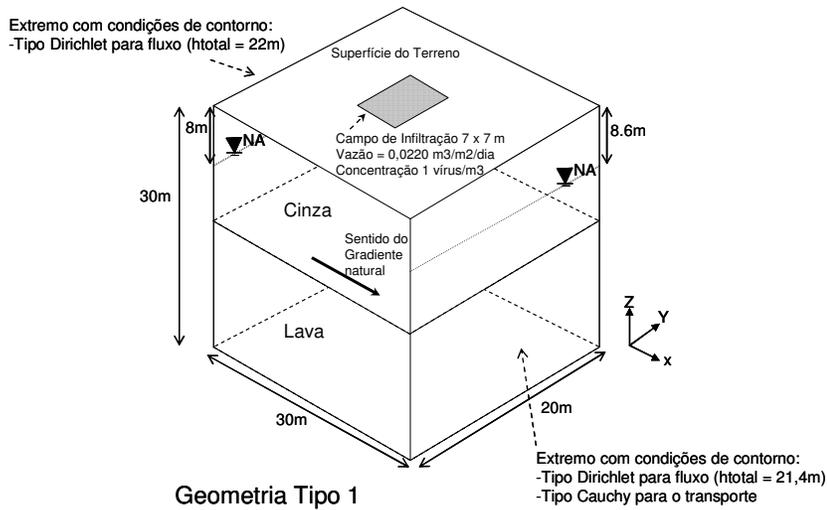


Figura 6.5 Geometrias Tipo. (obs. Nos planos sem condição de contorno especificada, considerou-se que são impermeáveis ao fluxo e aos vírus, isto é, não foi colocada explicitamente nenhuma condição de contorno).

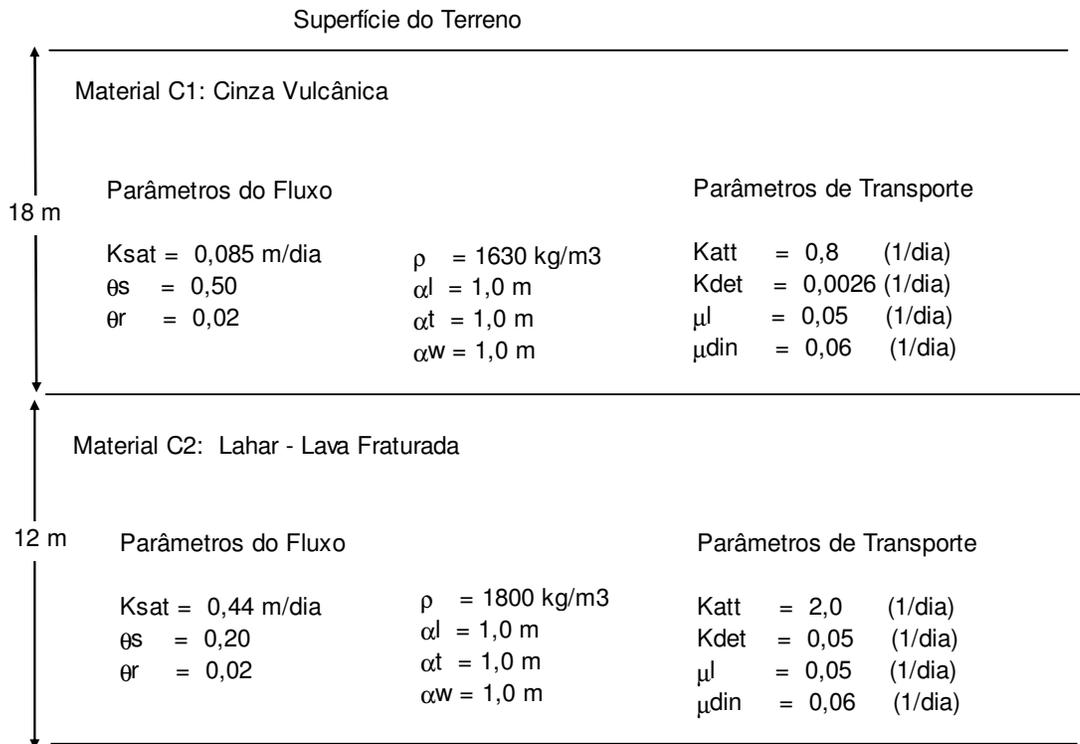


Figura 6.6 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 1.



Figura 6.7 Modelo Hidrogeológico da Geometria 1.

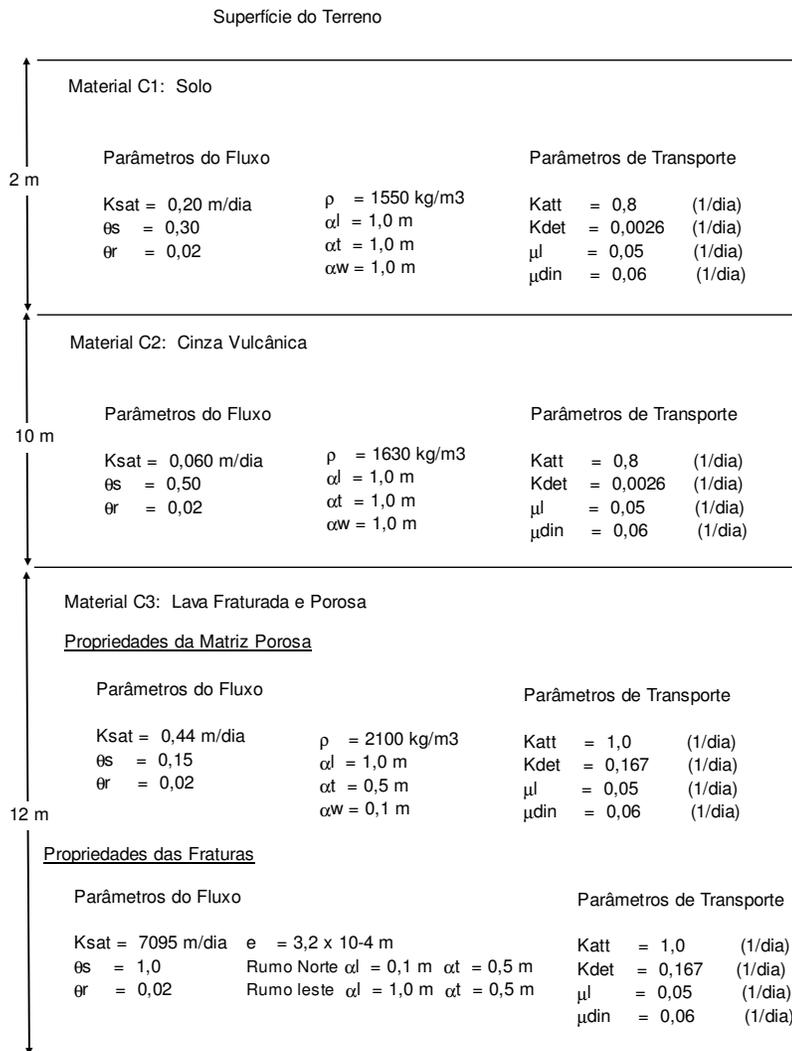


Figura 6.8 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 2.

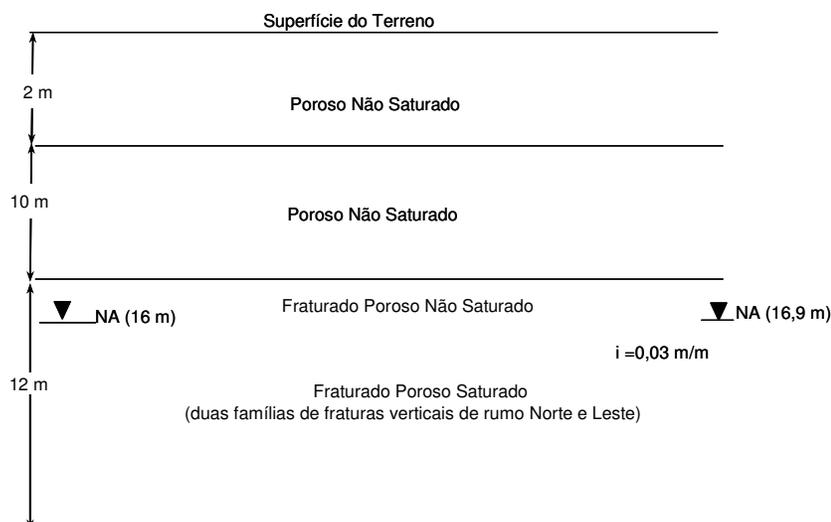


Figura 6.9 Modelo Hidrogeológico da Geometria 2.

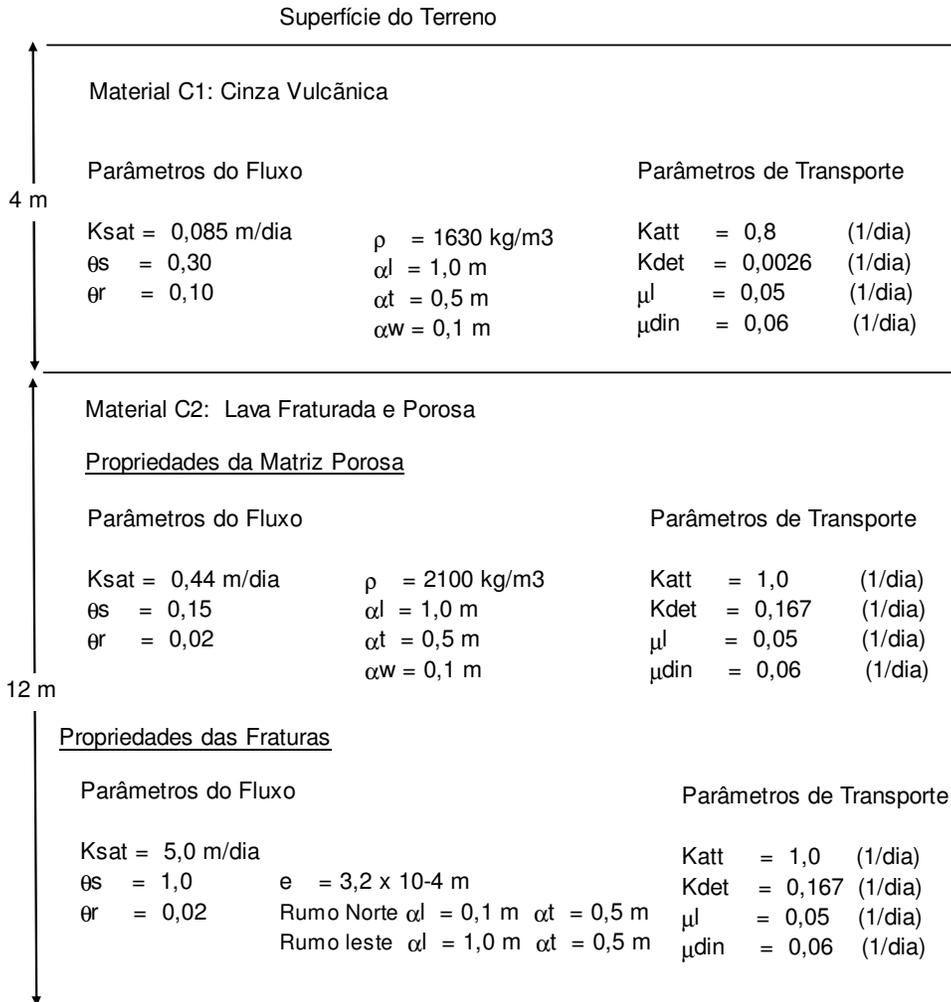


Figura 6.10 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 3.

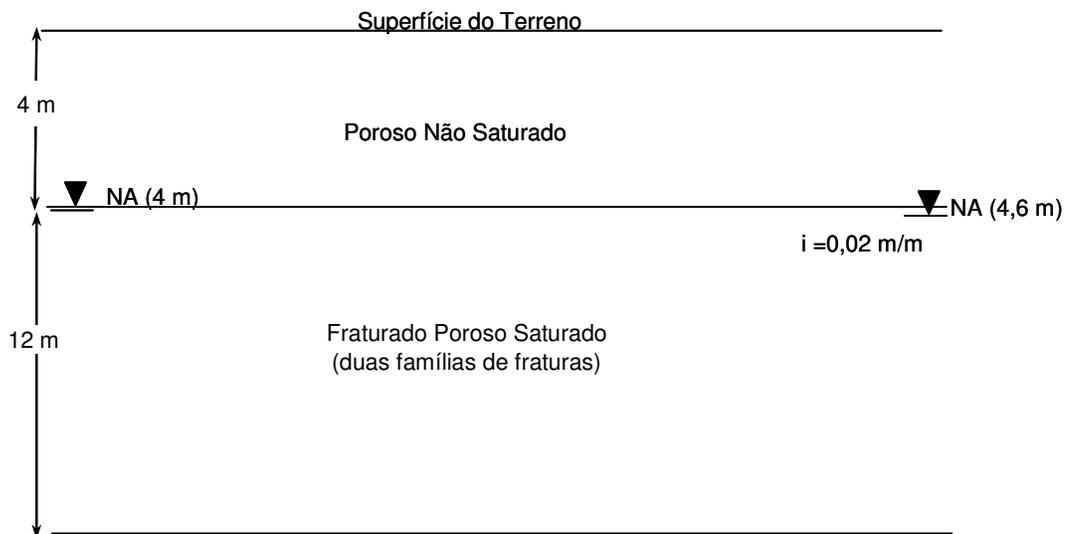


Figura 6.11 Modelo Hidrogeológico da Geometria 3.

### Geometria 1

Na Geometria 1 é mostrada uma seqüência de duas camadas porosas. A camada superior corresponde à cinza vulcânica e a camada inferior à lahar – lava fraturada. A camada superior corresponde à tufa de cinzas mostrada na coluna estratigráfica da Figura 6.4. A camada inferior corresponde aos materiais do aquífero “Los Angeles”.

### Geometria 2

Na Geometria 2 é mostrada uma seqüência similar à mostrada na Geometria 1, mas considerando que a camada superior apresenta um solo com permeabilidade maior que o da cinza vulcânica. Também nesta geometria são consideradas as fraturas e a porosidade da matriz da camada inferior.

### Geometria 3

Nesta geometria apresenta-se novamente uma seqüência de duas camadas. A camada superior corresponde à cinza vulcânica e a camada inferior à lava fraturada porosa. Nesta geometria a espessura da camada superior é menor do que nas geometrias anteriores, e com isto se pretende verificar a possível influência do sistema de fraturas da camada inferior.

## **6.3. Análise do Transporte – MTAv**

Neste item são apresentados os resultados do cálculo das distâncias percorridas empregando o método MTAv para um tempo de trânsito de 120 dias. Na Tabela 6.1 são apresentados os valores das permeabilidades e gradientes empregados para a determinação das velocidades de percolação (velocidade intersticial). Os valores mostrados na tabela são os mesmos das Figuras 6.6, 6.8 e 6.10.

Tabela 6.1 Velocidades de Percolação – MTA<sub>v</sub>.

Geometria	Zona	Camada	Porosidade (m <sup>3</sup> /m <sup>3</sup> )	Ksat (m/dia)	Gradiente (m/m)	Velocidade (m/dia)
1	Não Saturada	C1	0,50	0,085	1,00	0,170
	Saturada	C1	0,50	0,085	0,02	0,0034
		C2	0,20	0,440	0,02	0,0440
2	Não saturada	C1	0,30	0,200	1,00	0,667
		C2	0,50	0,060	1,00	0,120
		C3	0,15	0,440	1,00	2,940
	Saturada	C3	0,15	0,440	0,03	0,088
3	Não Saturada	C1	0,30	0,085	1,00	0,283
	Saturada	C2	0,15	0,440	0,02	0,059
		Fartura	1,00	5,000	0,02	0,100

Tabela 6.2 Cálculos Intermediários – MTA<sub>v</sub>.

Geometria	Zona	Camada	Velocidade (m/dia)	EnS (m)	TnS (dias)	TtnS (dias)	Tr120 (dias)	DzS (m)
1	Não Saturada	C1	0,170	8,2	48	48		
	Saturada	C1	0,0034				72	0,25
2	Não Saturada	C1	0,667	2	3	87,4		
		C2	0,120	10	83			
		C3	2,940	4	1,4			
	Saturada	C3	0,088				32,6	2,90
3	Não Saturada	C1	0,283	4,3	15,2	15,2		
	Saturada	C2	0,059				104,8	6,20
		Fratu	0,100					10,50

EnS: Espessura não saturada de cada camada

TnS: Tempo necessário para o vírus transitar verticalmente pela camada não saturada

TtnS: Tempo total necessário para o vírus percorrer a zona na saturada

Tr120: Tempo necessário para completar 120 dias ( Tr120 = 120-TtnS)

DzS: Distância percorrida pelo vírus na zona saturada sob o gradiente natural durante o tempo Tr120

Na Tabela 6.2 são mostrados os cálculos dos tempos necessários para os vírus percorrerem a zona não saturada e para completar os 120 dias de transporte. Na mesma tabela são mostradas as distâncias percorridas na zona saturada. O resumo dos valores das distâncias percorridas nas zonas não saturadas e saturadas é mostrado na Tabela 6.3. São estes valores os que serão comparados com os valores do programa VirTran-3D.

Tabela 6.3 Distâncias Percorridas – MTAv.

<b>Geometria</b>	<b>Distância percorrida na zona não saturada (m)</b>	<b>Distância percorrida na zona saturada (m)</b>
1	8,2	0,25
2	16,0	2,90
3	4,3	6,20 (na matriz) 10,5 (na fratura)

#### 6.4.

#### Análise do Transporte – Programa VirTran-3D

Foi feita uma análise das geometrias acima descritas empregando o programa VirTran-3D. As geometrias foram discretizadas através de elementos tetraédricos e triangulares com a versão profissional do Programa GID 8.0.9, desenvolvido pelo *International Center for Numerical Methods in Engineering CIMNE*. Na Tabela 6.4 são mostradas algumas informações sobre as malhas geradas.

Tabela 6.4 Informações sobre as malhas geradas.

<b>Geometria</b>	<b>Dimensões xyz (m)</b>	<b>Número de nós</b>	<b>Número de elementos: tetraedros</b>	<b>Número de elementos: triângulos</b>
1	30x20x30	152 561	864 000	-
2	30x30x12	117 386	540 000	-
3	30x20x16	50 867	230 400	12 480

No caso da Geometria 2, a camada inferior não foi discretizada, pois uma tentativa inicial indicou que os vírus não chegariam até essa profundidade.

As análises foram realizadas segundo a seqüência a seguir:

- a. Foram inicialmente realizadas simulações apenas do fluxo de água. Neste caso considerou-se uma zona de injeção coincidente com o campo de infiltração do sistema do tanque séptico. Isto é, foi injetada apenas água sem vírus. As condições de contorno foram estabelecidas de maneira tal a reproduzir o gradiente hidráulico do aquífero. A água foi injetada com uma vazão tal que permitisse a infiltração diária de 1080 litros. A dimensão do campo de infiltração foi obtida a partir do projeto desse campo segundo a metodologia do Ministério de Saúde da Costa Rica, para os valores de taxa de infiltração disponíveis para cada geometria. Na Tabela 6.5 são mostradas as condições de contorno para o problema de fluxo e os tempos de simulação. Os tempos de simulação foram escolhidos de maneira arbitrária a fim de representar injeções para sistemas de tratamento com pouco tempo de uso (Geometrias 1 e 2) e para sistemas com vários anos de antiguidade (Geometria 3). Sendo que nestas análises a direção do fluxo é conhecida, optou-se por definir o eixo X das coordenadas para representar essa direção, com valores crescentes na direção do fluxo. Desta forma,  $X_0$  representa a coordenada no contorno (a montante) em  $x = 0$ , e  $X_L$  representa a coordenada no contorno (a jusante) em  $x = L$  onde L é o comprimento do domínio na direção do fluxo (dimensão x da Tabela 6.4). As cargas iniciais foram definidas a partir da interpolação linear ao longo do eixo x das cargas impostas no contorno.

Tabela 6.5 Condições de contorno para a simulação do fluxo.

Geometria	Carga em $X_0$ (m)	Carga em $X_L$ (m)	Gradiente Resultante	Dimensões do campo de Infiltração (m x m)	Vazão injetada ( $m^3/m^2/dia$ )	Tempo de simulação
1	22	21,4	0,02	7x7	0,0220	30 dias
2	8	7,1	0,03	8x8	0,0169	40 dias
3	12	11,4	0,02	7x7	0,0220	25 anos

- b. Seguidamente foram feitas as análises do transporte de vírus. Nestas análises foram mantidas as mesmas condições de contorno mostradas na Tabela 6.5. As condições iniciais para as cargas foram definidas a partir das distribuições obtidas nas análises do item anterior (a). Em relação à concentração, foi definido um valor unitário constante imposto no campo de infiltração. No plano do contorno em  $X_L$  foi imposta uma condição Tipo Cauchy, e nos planos restantes não foi imposta condição explícita. Foi definida uma concentração inicial nula em todo o domínio.

Para cada geometria foram analisados três casos e para todos eles o tempo de simulação foi de 120 dias. Os casos analisados são:

- Caso I: Transporte considerando Advecção e Dispersão
- Caso II: Transporte considerando Advecção, Dispersão e Inativação.
- Caso III: Transporte considerando Advecção, Dispersão, Inativação e Sorção Dinâmica

Nas Tabelas 6.6, 6.7 e 6.8 são mostrados os tempos de processamento computacional requerido durante às análises, para cada geometria.

Tabela 6.6 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 1.

Casos: Geometria 1	Passo de tempo (dias)	Tempo de simulação (dias)	Tempo de Processamento (horas)	Tipo de Processador
I. Adv.+Disp.	0,1	120	42,5	P1
II. Adv. + Disp. + Inat.	0,1	120	42,5	P1
III. Adv. + Disp. + Inat. + S.Din.	0,1	120	69,5	P1
Fluxo	0,1	30	5,25	P1

Tipos de processadores utilizados: P1 = Pentium (R) 4 1.71 GHz 768 MB de RAM,

P2 = Pentium (R) D 3.40 GHz 3.25 GB de RAM

Tabela 6.7 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 2.

Casos: Geometria 2	Passo de tempo (dias)	Tempo de simulação (dias)	Tempo de Processamento (horas)	Tipo de Processador
I. Adv.+Disp.	1	120	12,5	P1
II. Adv. + Disp. + Inat.	1	120	6,6	P2
III. Adv. + Disp. + Inat. + S.Din.	1	120	8,6	P2
Fluxo	1	40	1,4	P2

Tabela 6.8 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 3.

Casos: Geometria 3	Passo de tempo (dias)	Tempo de simulação (dias)	Tempo de Processamento (horas)	Tipo de Processador
I. Adv.+Disp.	0,1	120	15,7	P1
II. Adv. + Disp. + Inat.	0,1	120	8,2	P2
III. Adv. + Disp. + Inat. + S.Din.	0,1	120	13,8	P2
Fluxo	9125 (25 anos)	25 (anos)	1,8 (minutos)	P1

- c. Os resultados das análises do item (b) foram graficados no Processador gráfico POS-3D 2.24. Nesse processador foram desenhados os isovolumes de concentração considerando o valor mínimo da concentração a ser graficado de  $C = 0,0002 \text{ virus/m}^3$ . Esse valor define a dimensão da pluma de dispersão para a concentração máxima permitida ( $1,8 \times 10^{-4} \approx 2 \times 10^{-4} \text{ vírus/m}^3$ ). Nas plumas obtidas, foram medidas as distâncias de interesse descritas no início deste capítulo. Nas Figuras 6.12, 6.13 e 6.14 são apresentados os resultados obtidos, e em cada uma delas são mostradas as formas e dimensões das plumas resultantes, também

vistas de cima e uma seção paralela ao sentido do gradiente natural no ponto médio do domínio. Na Tabelas 6.9, 6.10 e 6.11 são mostradas as distâncias de interesse para cada caso analisado. Nessas tabelas, a soma das distâncias verticais nas zonas saturadas e não saturadas corresponde com o valor da distância vertical mostrada nas seções das Figuras 6.12, 6.13 e 6.14.

Tabela 6.9 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 1.

<b>Casos: Geometria 1</b>	<b>Distâncias Percorridas (m)</b>			
	<b>Zona Não Saturada</b>		<b>Zona Saturada</b>	
	<b>Na Vertical</b>	<b>Na Horizontal</b>	<b>Na Vertical</b>	<b>Na Horizontal</b>
I. Adv.+Disp.	8,2	6,3	0,2	0,0
II. Adv. + Disp. + Inat.	6,4	4,5	0,0	0,0
III. Adv. + Disp. + Inat. + S.Din.	2,4	1,9	0,0	0,0

Profundidade média do NA = 8,2 m

Tabela 6.10 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 2.

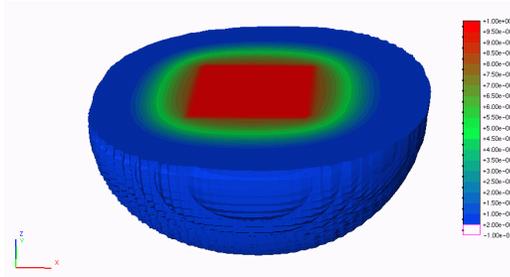
<b>Casos: Geometria 2</b>	<b>Distâncias Percorridas (m)</b>			
	<b>Zona Não Saturada</b>		<b>Zona Saturada</b>	
	<b>Na Vertical</b>	<b>Na Horizontal</b>	<b>Na Vertical</b>	<b>Na Horizontal</b>
I. Adv.+Disp.	7,5	8,7	0,0	0,0
II. Adv. + Disp. + Inat.	5,9	6,6	0,0	0,0
III. Adv. + Disp. + Inat. + S.Din.	2,3	2,4	0,0	0,0

Profundidade média do NA = 16,45 m

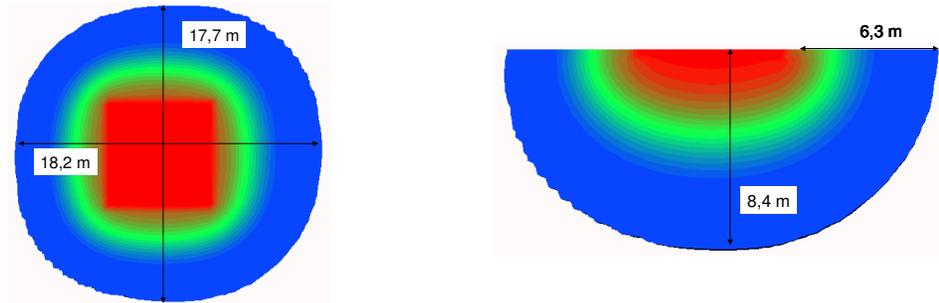
Tabela 6.11 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 3.

<b>Casos: Geometria 3</b>	<b>Distâncias Percorridas (m)</b>			
	<b>Zona Não Saturada</b>		<b>Zona Saturada</b>	
	<b>Na Vertical</b>	<b>Na Horizontal</b>	<b>Na Vertical</b>	<b>Na Horizontal</b>
I. Adv.+Disp.	4,3	7,7	7,9	15,2
II. Adv. + Disp. + Inat.	4,3	6,1	3,9	6,8
III. Adv. + Disp. + Inat. + S.Din.	3,3	2,7	0,0	0,0

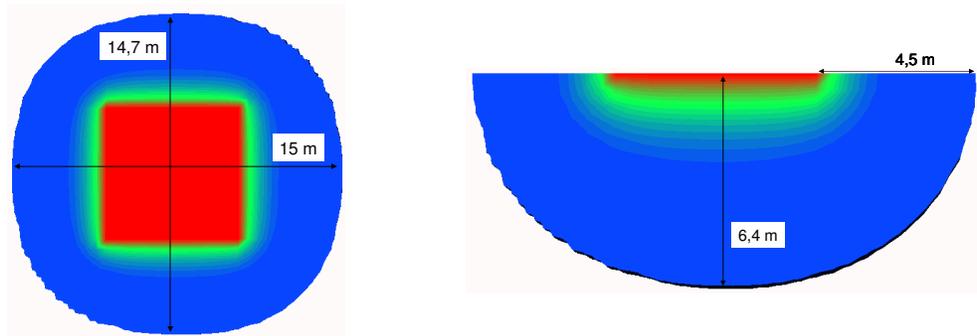
Profundidade média do NA = 4,3 m



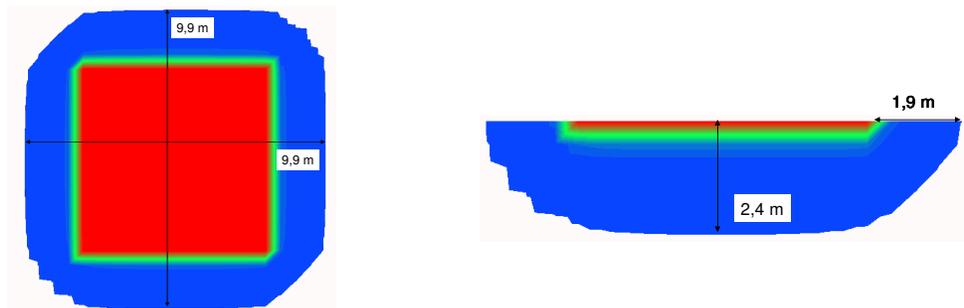
(a) Forma da Pluma



(b) Caso I: Dimensões da Pluma para Advecção e Dispersão

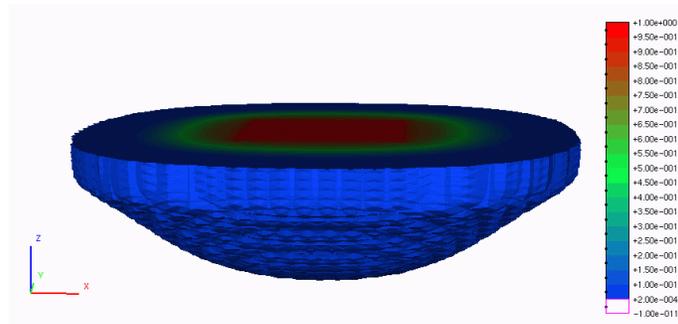


(c) Caso II: Dimensões da Pluma para Advecção , Dispersão e Inativação

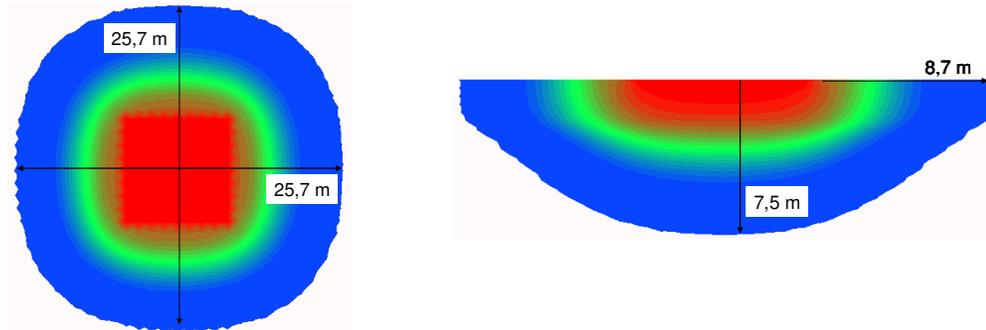


(d) Caso III: Dimensões da Pluma para Advecção, Dispersão, Inativação e Sorção Dinâmica

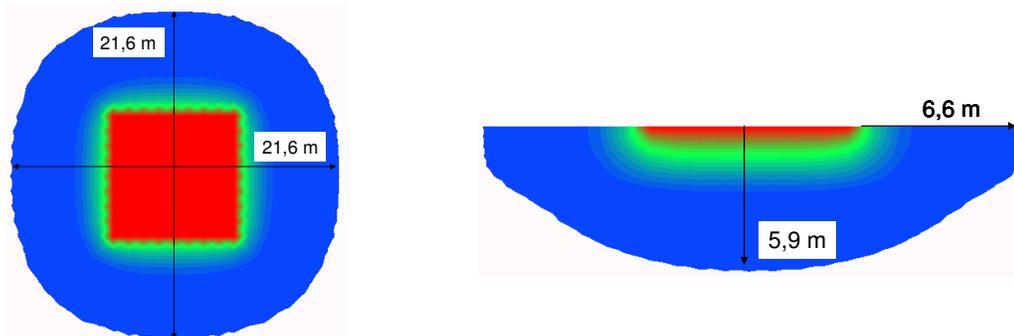
Figura 6.12. Resultados das Análises da Geometria 1.



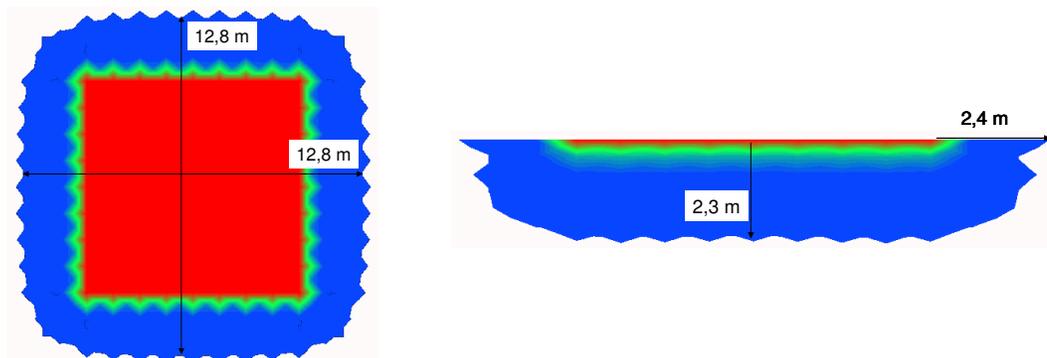
(a) Forma da Pluma



(b) Caso I: Dimensões da Pluma para Advecção e Dispersão



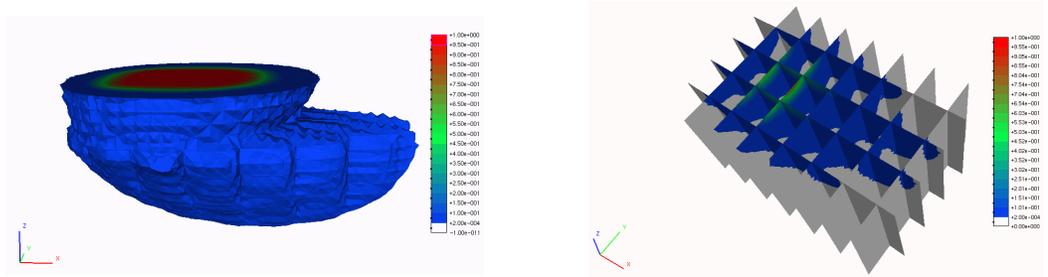
(c) Caso II: Dimensões da Pluma para Advecção, Dispersão e Inativação



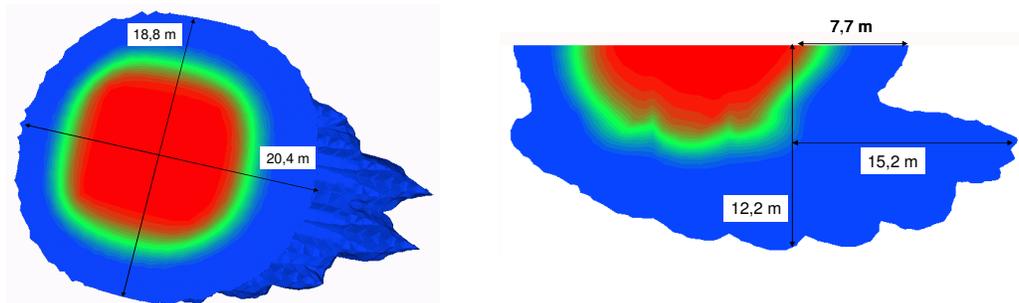
(d) Caso III: Dimensões da Pluma para Advecção, Dispersão, Inativação e Sorção Dinâmica

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0321281/CA

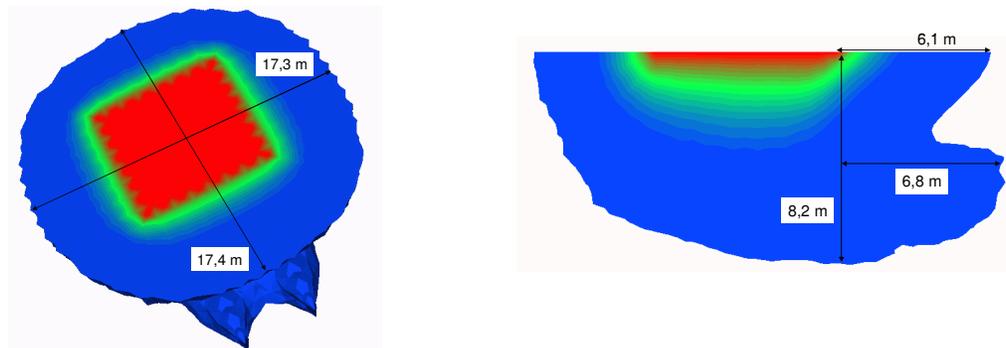
Figura 6.13. Resultados das Análises da Geometria 2.



(a) Forma da Pluma na Matriz e nas Fraturas



(b) Caso I: Dimensões da Pluma para Advecção e Dispersão



(c) Caso II: Dimensões da Pluma para Advecção, Dispersão e Inativação



(d) Caso III: Dimensões da Pluma para Advecção, Dispersão, Inativação e Sorção Dinâmica

Figura 6.14. Resultados das Análises da Geometria 3.

### 6.5. Análise dos Resultados e Comparação das Metodologias

- a. Na Tabela 6.12 são mostradas as comparações das distâncias percorridas pelos vírus segundo o método MTAv e o programa VirTran-3D. Os valores mostrados na tabela resultam da normalização dos valores das Tabelas 6.9 a 6.11 com os valores da Tabela 6.3. Foram comparadas as distâncias verticais na zona não saturada e as distâncias horizontais na zona saturada. Como indicado no início deste capítulo, essas distâncias calculadas com as duas metodologias podem ser comparadas de forma direta. Os valores normalizados mostrados na Tabela 6.12 permitem observar a relação direta entre as distâncias obtidas com o MTAv e as distâncias obtidas considerando outros fenômenos físicos durante o transporte dos vírus.

Tabela 6.12. Distâncias percorridas normalizadas com os valores do método MTAv.

Geometria	Distâncias Percorridas Normalizadas			
	Zona	Caso I	Caso II	Caso III
1	Não Saturada	1,00	0,78	0,29
	Saturada	0,00	0,00	0,00
2	Não Saturada	0,47	0,37	0,14
	Saturada	0,00	0,00	0,00
3	Não Saturada	1,00	1,00	0,77
	Saturada (Fratura)	1,45	0,65	0,00

Da Tabela 6.12 é possível observar que as distâncias diminuem sempre na seguinte ordem Caso I > Caso II > Caso III. Isto não é de surpreender devido ao fato dos casos II e III considerarem fenômenos que efetivamente removem vírus sendo que o Caso I incorpora fenômenos que atenuam as concentrações, mas não removem vírus.

Distâncias Verticais na Zona não Saturada: Os valores fornecidos pelo MTAv são em geral maiores aos valores obtidos com o programa VirTran-3D. Isto é claramente devido ao fato de considerar a permeabilidade saturada para determinar esta distância. As diferenças são maiores para a Geometria 2 onde a espessura da zona não saturada é maior e a permeabilidade menor. Para espessuras não saturadas menores (Geometria 3), o MTAv previu a chegada dos vírus no nível da água, como o programa VirTran-3D mesmo considerando fluxo não saturado. Em dependência dos parâmetros de transporte e especialmente das condições de fluxo, o MTAv pode fornecer distâncias muito conservadoras como indicam os valores para a Geometria 2, mas também pode indicar corretamente que os vírus chegarão no nível da água.

Distâncias na zona Saturada: Apenas na Geometria 3 foi atingido o nível saturado de maneira considerável. Isto é, embora no MTAv seja previsto o deslocamento horizontal dos vírus na zona saturada, nos resultados do programa VirTran-3D apenas na Geometria 3 foi previsto esse deslocamento (lembrar que esse deslocamento é medido a partir da borda do campo de infiltração e não dentro desse campo). No caso da Geometria 3, os valores obtidos com o programa foram diferentes dos calculados com o MTAv. A diferença nos valores é muito influenciada pelos fenômenos físicos envolvidos na simulação. No Caso I as distâncias normalizadas são maiores que 1, isto devido aos processos dispersivos ao longo das fraturas. Para os Casos II e III, os valores normalizados são menores que 1. Isto é, o MTAv forneceu valores superiores aos deslocamentos quando consideradas a inativação e a sorção dinâmica. No Caso III o nível da água não é atingido e por isto o deslocamento horizontal é nulo.

Das observações anteriores é possível concluir que mesmo se definindo critérios de igualdade para comparar as distâncias calculadas, as comparações mostraram uma alta variabilidade. No caso do transporte na zona não saturada, o MTAv pode prever corretamente a chegada de vírus no nível da água, mas dependendo especialmente da espessura da zona não saturada o MTAv pode fornecer resultados muito conservadores. No caso do transporte na zona saturada, com apenas um exemplo para comparação e devido à variabilidade dos resultados obtidos, não é possível concluir se o MTAv fornecerá valores corretos.

Em termos gerais, o MTAv se apresentou, para os exemplos aqui analisados, como bastante conservador quando considerados os casos III das Geometrias 1 e 3 e muito conservador para todos os casos da Geometria 2. Por outro lado a metodologia se mostrou pouco conservadora quando comparada com o caso I da Geometria III.

- b. Na Tabela 6.13 são apresentadas as comparações das distâncias percorridas nas zonas não saturada e saturada nos sentidos horizontal e vertical, respectivamente. Estes valores não são previstos no MTAv, mas foram calculados para verificar os efeitos da dispersão. Os valores foram normalizados da seguinte maneira: as distâncias horizontais na zona não saturada foram normalizadas com as distâncias horizontais na zona saturada da Tabela 6.3, e as distâncias verticais na zona saturada foram comparadas com as distâncias verticais na zona não saturada da mesma tabela.

Tabela 6.13. Distâncias percorridas normalizadas com os valores do método MTAv.

Geometria	Distâncias Percorridas Normalizadas			
	Zona	Caso I	Caso II	Caso III
1	Não Saturada (horizontal)	25,20	18,00	7,60
	Saturada (vertical)	0,03	0,00	0,00
2	Não Saturada (horizontal)	3,00	2,30	0,82
	Saturada (vertical)	0,00	0,00	0,00
3	Não Saturada (horizontal)	0,73	0,58	0,25
	Saturada (vertical, na Fratura)	1,80	0,90	0,00

Desta tabela é possível observar que o MTAv ao não considerar os efeitos dispersivos na zona não saturada, se mostra muito liberal na determinação da distância máxima horizontal percorrida, como mostram os resultados das Geometrias I e II. Isto é, a distância horizontal prevista pelo programa VirTran-3D na zona não saturada, é superior à distância horizontal prevista pelo MTAv na zona saturada, mesmo nos casos onde a sorção e o decaimento são considerados. A partir dos resultados para as Geometrias I e II (Tabelas 6.12 e 6.13) pode se dizer que é possível existir transporte horizontal na zona não saturada sem necessariamente existir transporte horizontal na zona saturada. No caso da Geometria III o MTAv mostra-se conservador, e isto provavelmente seja devido aos menores valores de dispersividade empregados nesta geometria.

Em relação ao trânsito vertical na zona saturada, apenas nos resultados da Geometria 3 foi possível observar penetração vertical no aquífero. Os deslocamentos verticais para os Casos I e II desta geometria, se comparados com a espessura do aquífero (12 m, Figura 6.11), representam penetrações verticais na ordem dos 65% e 30% da espessura, respectivamente. Se considerarmos a possibilidade de comunicação entre aquíferos, a dispersão pode ser um mecanismo importante de transmissão de vírus de um aquífero para outro. Esse risco não é previsto pelo MTAv.

- c. Se considerarmos que todos os Casos III das geometrias analisadas representam as condições reais de transporte dos vírus, pode se concluir que o MTAv se apresenta como conservador ou muito conservador para prever a chegada de vírus no nível da água. Por outro lado, essa mesma metodologia se apresenta como inadequada para determinar as distâncias horizontais máximas transitadas na zona não saturada podendo fornecer resultados muito liberais como na Geometria 1 ou muito conservadores como na Geometria III.
- d. Se pensarmos que os efeitos dispersivos estão sempre presentes no transporte de qualquer substância e considerarmos a inativação da mesma forma como é considerada no MTAv (isto é, a inativação não é colocada explicitamente dentro da formulação, mas define-se que ocorrerá durante o tempo de simulação), então os Casos I das geometrias analisadas seriam os casos representativos das condições de campo. Para estes casos, os resultados indicam que o MTAv pode prever de maneira correta a chegada de vírus ao nível da água, porém, quando a espessura da zona não saturada aumenta, o MTAv fornece resultados conservadores. Em relação às distâncias percorridas horizontalmente, dependendo dos parâmetros de dispersão, os resultados do MTAv podem ser conservadores ou muito liberais. Em relação às distâncias verticais na zona saturada, o MTAv não prevê o risco de forte penetração vertical no aquífero.

- e. Os pontos anteriores permitem concluir que, para os casos aqui analisados, o MTA<sub>v</sub> pôde prever de maneira correta a chegada dos vírus ao nível da água dependendo principalmente da espessura da zona não saturada e dos parâmetros de transporte, mas, em geral se apresentou como muito conservador para prever essa chegada. O MTA<sub>v</sub> se mostrou inadequado para definir as distâncias horizontais, pois dependendo das condições de campo, os resultados foram conservadores ou muito liberais. Isto é importante porque é essa distância horizontal a que define a distância de separação que deve existir em relação às captações vizinhas. O MTA<sub>v</sub> não previu a possibilidade de contaminação vertical do aquífero. Este pode ser um mecanismo importante de contaminação entre aquíferos comunicados.
- f. Devido ao caráter aproximado dos parâmetros e concentrações empregados para simular as condições de transporte e fluxo não saturado nos materiais do Vale Central, não foi possível generalizar as conclusões anteriores para casos reais de campo. Isto não significa que as observações anteriores não sejam fisicamente válidas para as condições de campo no Vale Central, mas significa que é necessário verificar a intensidade dos efeitos observados a partir do emprego de parâmetros específicos dos materiais daqueles locais. É necessário verificar a possibilidade de que os resultados do MTA<sub>v</sub> mostrem o mesmo comportamento observado nestes exemplos. Deve ser lembrado que nos exemplos aqui analisados, apesar de serem hipotéticos, foram empregados parâmetros reais embora não necessariamente representativos das condições locais da Costa Rica. Os resultados anteriores reforçam a idéia de se realizarem análises deste tipo para as condições de campo.

## 7 Conclusões e Sugestões

Neste documento foram apresentados os resultados da pesquisa de doutorado realizada sobre o tema de transporte de vírus nos meios geológicos. As motivações para a realização desta pesquisa foram: a necessidade de analisar o potencial de contaminação das captações de água para consumo humano por causa das águas residuais domésticas geradas em sistemas de tratamento por tanque séptico; a consideração dos fenômenos reais envolvidos no transporte destes microorganismos; e a aplicação destes conhecimentos na análise de casos representativos da estratigrafia do Vale Central da Costa Rica.

### 7.1. Conclusões

Os materiais geológicos contêm vazios dentro da sua estrutura. Quando estes vazios são espaços que separam pedaços da formação geológica, se diz que o vazio constitui uma fissura ou uma fratura; quando esses vazios são espaços que separam grãos da formação ou se estão localizados dentro dos grãos, se diz que o material apresenta poros. Quando os materiais geológicos acumulam e transmitem água em quantidade suficiente para ser aproveitada pelo homem, se diz que existe um aquífero. Se a água no aquífero estiver sob pressão hidrostática o aquífero é classificado do tipo livre. Se a água estiver sob uma pressão maior à pressão hidrostática o aquífero é classificado do tipo confinado. Os aquíferos então, podem ser classificados em aquíferos porosos ou fraturados e em aquíferos livres ou confinados. Em alguns tipos de materiais, especialmente nos vulcânicos e sedimentares, é possível a presença concomitante de poros e fraturas, pelo que são chamados de fraturados-porosos.

O fluxo e transporte de qualquer substância através do terreno podem ser descritos a partir de modelos conceituais ou de modelos matemáticos. O modelo conceitual é a explicação em forma de palavras e desenhos sobre o comportamento físico do sistema. O modelo matemático é aquele que representa o

comportamento do sistema através de equações. Os materiais geológicos podem ser descritos como porosos, fraturados ou fraturados-porosos. Para cada um destes tipos de materiais, têm sido propostos modelos conceituais para descrever o fluxo e o transporte. Esses modelos são: Contínuo Equivalente, Contínuo Equivalente de Porosidade Composta, Contínuo Equivalente de Dupla porosidade e Permeabilidade Simples, Contínuo Equivalente de Dupla Porosidade e Dupla Permeabilidade, Descontínuo com Fraturas Discretas e Descontínuo Fraturado-Poroso. O termo contínuo refere-se à descrição do comportamento do meio como um todo. O termo descontínuo refere-se à descrição do comportamento de cada uma das partes do sistema de maneira independente, neste caso os poros e as fraturas. Para cada modelo conceitual existe um modelo matemático associado. Neste trabalho de pesquisa, os meios foram modelados como descontínuos fraturados-porosos, onde as contribuições de cada fratura e de cada uma das matrizes porosas foram consideradas de maneira explícita e independente.

Um vírus é um agente infeccioso que precisa de uma célula para se multiplicar. Quando exposto ao ambiente, a sua capacidade de infeccionar (entrar na célula) é diminuída ou anulada, é dito então que o vírus foi inativado. O tempo de sobrevivência dos vírus é definido como o tempo necessário para sua inativação. São vários os fatores que influenciam na sobrevivência e no transporte dos vírus nos meios geológicos, pelo que a tarefa de simular esses processos é realmente um desafio. O volume de conhecimento nesta área tem aumentado nos últimos anos de maneira acentuada, o que tem permitido a definição de modelos matemáticos bastante precisos para descrever o comportamento destes microorganismos durante o transporte através dos meios geológicos. Conceitualmente, o transporte dos vírus é descrito pelos mesmos modelos conceituais acima mencionados. Os processos físicos até agora reconhecidos como atuantes durante o transporte dos vírus são: advecção, dispersão, decaimento, sorção dinâmica nas interfaces água-ar e água-sólido, filtração mecânica e exclusão de poros. A advecção e a dispersão apenas atenuam a concentração, os outros processos removem efetivamente os vírus. Interessante é o comportamento dos vírus sob os efeitos da exclusão, porque neste caso podem ser deslocados a distâncias maiores que os solutos conservativos, o que implica um risco maior para as populações. Em virtude do seu tamanho, os vírus também são modelados como partículas coloidais.

Foi constatado a partir da revisão da bibliografia nacional e internacional, que existem modelos numéricos baseados no Método dos Elementos Finitos para simular o fluxo e o transporte de solutos conservativos em sistemas tridimensionais em regime de saturação variável constituídos por fraturas e matrizes porosas. Os resultados das aplicações destes modelos numéricos demonstram que é possível acoplar o fluxo e o transporte das fraturas e dos poros a partir do emprego do modelo conceitual do meio fraturado-poroso.

Foi constatado também que o Método dos Volumes Finitos (MVF) tem sido empregado para discretizar às equações de fluxo e transporte para meios idealizados como fraturados-porosos com resultados satisfatórios. Os modelos referidos têm sido desenvolvidos para problemas de fluxo tridimensional e para problemas bidimensionais de fluxo acoplado com transporte de colóides ou solutos conservativos. Não foram encontradas publicações com o desenvolvimento da formulação fraturada-porosa através do MVF, para modelos tridimensionais acoplados de fluxo e transporte de vírus. Por isto, foi proposto como objetivo geral da pesquisa:

*A construção de um modelo numérico tridimensional para o transporte de vírus em meios idealizados como fraturados-porosos sob condições de saturação variável, para ser incorporado numa nova metodologia (baseada no risco) de avaliação do potencial de contaminação das captações de água subterrânea por vírus provenientes de tanques sépticos.*

Para atingir esse objetivo, foi desenvolvido nesta tese um programa de análise denominado VirTran-3D com a capacidade de simular as seguintes condições:

- Fluxo bidimensional e tridimensional em meios porosos em regime de saturação variável
- Fluxo bidimensional para fraturas com orientação qualquer em regime de saturação variável
- Transporte bidimensional e tridimensional de vírus em meios porosos em regime de saturação variável.
- Transporte bidimensional de vírus em fraturas com orientação qualquer em regime de saturação variável.

- Fluxo e transporte de vírus para sistemas tridimensionais acoplados de fraturas e matrizes porosas.

O programa desenvolvido tem a capacidade de incorporar as seguintes condições de contorno:

- Para o problema de fluxo: Condições de Dirichlet, Neuman e Face Livre.
- Para o problema de transporte: Condições de Dirichlet, Neuman, Cauchy e Gradiente Nulo.

A discretização numérica das equações de transporte de vírus para meios fraturados-porosos, e o programa VirTran-3D, constituem um aporte real desta tese para esta área do conhecimento.

A avaliação do potencial de contaminação de captações de água, por causa das águas residuais provenientes dos sistemas de tanque séptico, é feita a partir da definição de uma distância de separação mínima que deve existir entre a captação e o local de infiltração do efluente. A determinação dessa distância define a zona de proteção da captação. Existem três metodologias para a definição do tamanho destas zonas de proteção:

- Metodologias baseadas em distâncias fixas e tempos de trânsito.
- Metodologias baseadas na vulnerabilidade.
- Metodologias baseadas no risco de infecção.

No caso da Costa Rica, as avaliações do potencial de contaminação, são feitas através do uso de uma metodologia baseada no tempo de trânsito, metodologia que foi denominada nesta tese como Método de Transporte Advectivo (MTAv). O tempo de trânsito empregado neste método corresponde ao tempo de sobrevivência dos vírus. Nesta análise determina-se a distância máxima percorrida pelos vírus durante esse tempo. Essa distância define a separação mínima que deve existir entre a captação e o sistema de tratamento.

Neste método, considera-se que o transporte ocorre por percolação vertical saturada através da zona não saturada, e por transporte ao longo da interface água-ar na zona saturada segundo o gradiente natural. Este método apenas considera

transporte advectivo, e não considera os outros processos acima mencionados como atuantes durante o transporte dos vírus. Com o objetivo de incluir esses fenômenos na análise de casos para o Vale Central da Costa Rica, foi aplicado o programa VirTran-3D no estudo de três geometrias tipo representativas das condições estratigráficas de algumas áreas do Vale Central. Os resultados obtidos com estas análises foram comparados com os resultados obtidos com o MTAv. Esta comparação permitiu definir (para aos exemplos analisados) que:

- O MTAv pôde prever de maneira correta a chegada dos vírus ao nível da água dependendo principalmente da espessura da zona não saturada e dos parâmetros de transporte, mas, em geral se apresentou como muito conservador para prever essa chegada.
- O MTAv se mostrou inadequado para definir as distâncias horizontais percorridas pelos vírus, pois dependendo das condições de campo, os resultados foram conservadores ou muito liberais. Isto é de especial importância porque é essa distância horizontal a que define a distância de separação mínima que deve existir entre o sistema de tratamento e as captações vizinhas.
- O MTAv não previu a possibilidade de contaminação vertical do aquífero. Este pode ser um mecanismo importante de contaminação entre aquíferos comunicados.

Devido ao caráter aproximado dos parâmetros e concentrações empregados para simular as condições de transporte e fluxo não saturado nos materiais do Vale Central, não foi possível generalizar as conclusões anteriores para casos reais de campo. Isto não significa que as observações anteriores não sejam fisicamente válidas para as condições de campo no Vale Central, mas significa que é necessário verificar a intensidade dos efeitos observados a partir do emprego de parâmetros específicos dos materiais daqueles locais. É necessário verificar a possibilidade de que os resultados do MTAv mostrem o mesmo comportamento observado nos exemplos analisados nesta tese. Deve ser lembrado que nos exemplos aqui analisados, apesar de serem hipotéticos, foram empregados parâmetros reais embora não necessariamente representativos das condições locais

da Costa Rica. Os resultados anteriores reforçam a idéia de se realizarem análises deste tipo para as condições de campo.

A importância de se realizarem análises mais realistas para condições de campo radica na possibilidade do MTA<sub>v</sub> fornecer resultados conservadores, o que acarretaria o não licenciamento ambiental em projetos que não representam risco para as captações, ou na possibilidade do MTA<sub>v</sub> fornecer resultados liberais no transporte horizontal na zona não saturada, o que pode permitir o licenciamento ambiental de projetos que sim representam risco para as captações vizinhas.

## 7.2. Sugestões

*Sugestões de temas de pesquisa para continuar com o desenvolvimento do tema desta tese:*

- Estudar o problema de fluxo e transporte a partir da Teoria de Fluxo Laminar.
- Desenvolver procedimentos de laboratório para a determinação dos parâmetros de transporte de vírus.
- Analisar a possibilidade de se definir um critério de concentração máxima permissível para as condições da Costa Rica, isto com o intuito de oferecer aos consultores a possibilidade de utilizar o Método Baseado no Risco como alternativa para a realização das análises de potencial de contaminação por águas residuais.

*Sugestões para melhorar o desempenho do programa VirTran-3D:*

- Programar uma rotina para incorporar o passo dinâmico do tempo.
- Programar uma rotina para incorporar o método do Gradiente Biconjugado na solução do sistema de equações para o problema de transporte.
- Programar uma rotina para simular o fluxo não saturado na fratura com o modelo Brooks e Corey.

- Estudar a possibilidade de resolver os problemas de fluxo e transporte a partir de outros esquemas iterativos como os métodos Newton-Raphson e BFGS.

*Sugestões para complementar as análises de transporte de vírus nos materiais do Vale Central da Costa Rica:*

- Realizar uma análise de sensibilidade para as geometrias estudadas nesta tese, considerando a variação nas condições de saturação e especialmente a variabilidade dos parâmetros de transporte. Nesta análise pode-se analisar também o efeito do bombeamento em poços próximos.
- Realizar uma análise de campo para um ou vários locais do Vale Central e comparar os resultados do MTAv com os resultados do programa VirTran-3D. Para isto seria necessária a realização de ensaios de transporte para definir as propriedades reais dos materiais.

ABBASSI, H.; TURKI, S.; BEM NASRALLAH, S., **Interpolation Functions in Control Volume Finite Element Method**. Computational Mechanics 30, pp. 303-309, 2003.

ABDEL-SALAM, A.; CHRYSIKOPOULOS, C. V., **Analytical Solutions for One-Dimensional Colloid Transport in Saturated Fractures**. Advances in Water Resources 17, pp. 283-296, 1994.

ABDEL-SALAM, A.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Unsaturated flow in a Quasi-Three-Dimensional Fractured Medium with Spatially Variable Aperture**. Water Resources Research, Vol. 32, No. 6, pp. 1531-1540, 1996.

AHMAD, N.; BOYBEYI, Z., **Advection-Diffusion Equation on Unstructured Adaptive Grids**. NOAA/EPA Symposium on Air Quality Modeling and its Applications, pp. 20-21, Durham, North Carolina, 2005.

ARREDONDO, S., **Aguas Subterráneas y Fuentes Termales**. Atlas Geológico. Grande Área Metropolitana 1era ed. Editorial Tecnológica de Costa Rica, pp 197-210, 1994.

ASTORGA, Y., **Estado y Gestión del Recurso Hídrico en Costa Rica**. Undécimo Informe sobre El Estado de la Nación en Desarrollo Humano Sostenible, capítulo IV, 2005.

AZADPOUR-KEELEY, A; FAULKNER, B.R.; CHEN, J.S., **Movement and Longevity of Viruses in the Subsurface**. EPA/540/S-03/500 April 2003, pp.24, 2003

BAI, M.; ELSWORTH, D.; ROEGIERS, J. C., **Multiporosity/Multipermeability Approach to the Simulation of Naturally Fractured Reservoirs**. Water Resources Research 29 (6), pp. 1621-1633, 1993.

BAI, M.; ROEGIERS, J. C., **Triple-Porosity Analysis of Solute Transport**. Journal of contaminant Hydrology 28, pp. 247-266, 1997.

BALES, R.C.; GERBA, CH.; GRINDIN, G.; JENSEN S., **Bacteriophage Transport in Sandy Soil and Fractured Tuff**. Applied and Environmental Microbiology 55(8). pp 2061-2067. 1989.

BALES, R.C.; HINKLE, S.R.; KROEGER, T.W.; STOCKING, K.; GERBA, C.P., **Bacteriophage adsorption during transport through porous-media – chemical perturbations and reversibility**. Environmental Science & Technology 25, pp. 2088–2095, 1991.

BALES, R.C., LI, S.; MAGUIRE, K.M; YAHYA, M.T; GERBA, C.P., **MS-2 and Poliovirus transport in porous media: hydrophobic effects and chemical perturbations**. Water Resources Research. 29, pp. 957–963, 1993.

BALES, R.C.; LI, S.M.; YEH, T.C.J.; LENCZEWSKI, M.E.; GERBA, C.P., **Bacteriophage and Microsphere transport in saturated porous media: forced-gradient experiment at borden, ontario.** *Water Resources Research* 33, pp. 639–648, 1997.

BALIGA, B.R; PATANKAR, S.V., **A New Finite-Element Formulation for Convection-Diffusion Problems.** *Numerical Heat Transfer*, Vol. 3 pp. 393-409, 1980.

BARENBLATT, G.; ZHELTOV, I.; KOCHINA, I., **Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquids in Fissured Rocks (Strata).** *J. Appl. Math. Mech. Engl. Transl.* 24 (5), pp. 1286-1303, 1960.

BERKOWITZ B.; BEAR J.; BRAESTER C., **Continuum Models for Contaminant Transport in Fractured Porous Media.** *Water Resources Research* 24(8) pp. 1225-1236, 1988.

BERKOWITZ, B., **Characterizing Flow and Transport in Fractured Geological Media: A Review.** *Advances in Water Resources* 25, pp. 861-884, 2002.

BERRYMAN J., **Extension of Poroelastic Analysis to Double-Porosity Materials: New Technique in Microgeomechanics.** *Journal of Engineering Mechanics*. 128 (8), pp. 840-847, 2002.

BGS-SENARA, **Mapa Hidrogeológico del Valle Central de Costa Rica.** British Geological Survey – Servicio Nacional de Aguas Subterráneas, Riego y Avenamiento, 1985.

BIBBY, R., **Mass Transport of Solutes in Dual-Porosity Media.** *Water Resources Research* 17 (4), pp. 1075-1081, 1981.

BODIN, J.; DELAY, F; DE MARSILY, G., **Solute Transport in a Single Fracture with Negligible Matrix Permeability: 1. Fundamental Mechanisms.** *Hydrogeology Journal* 11, pp. 418–433, 2003(a).

BODIN, J.; DELAY, F; DE MARSILY, G., **Solute Transport in a Single Fracture with Negligible Matrix Permeability: 2. Mathematical Formalism.** *Hydrogeology Journal* 11, pp. 434-454, 2003(b).

BORGES, A., **Modelagem Numérica de Fluxo Bifásico e Transporte em Meios Porosos com Transferência de Massa e Co-solvência.** Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 2002.

BRADFORD, S.; YATES, S.; BETTAHAR, M.; ŠIMUNEK, J., **Physical factors affecting the transport and fate of colloids in saturated porous media.** *Water Resources Research* 38 (12), 1327. 2002.

BRADFORD, S.; ŠIMUNEK, J.; BETTAHAR, M.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; YATES, S., **Modelling Colloid Attachment, Straining, and Exclusion in Saturated Porous Media.** *Environ. Sci. Technol.* 37, pp. 2242-2250, 2003.

BRADFORD, S.; BETTAHAR, M.; ŠIMUNEK, J.; van GENUCHTEN, M.; BROWN, G., **Straining and Attachment of Colloids in Physically Heterogeneous Porous Media.** *Vadose Zone Journal* 3, pp. 384-394, 2004.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; BETTAHAR, M.; TADASSA, Y.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; YATES, S., **Straining of colloids at textural interfaces**. *Water Resources Research* 41, W10404, 2005.

BRADFORD, S.; BETTAHAR, M., **Straining, Attachment, and Detachment of *Cryptosporidium* Oocysts in Saturated Porous Media**. *J. Environ. Qual.* 34:469–478, 2005.

BRADFORD, S.; BETTAHAR, M., **Concentration dependent transport of colloids in saturated porous media**. *Journal of Contaminant Hydrology* 82, pp. 99-117, 2006.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; BETTAHAR, M.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; YATES, S., **Significance of straining in colloid deposition: Evidence and Implications**. *Water Resources Research* 42, W12S15, 2006.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; WALKER, SH., **Transport and straining of *E. Coli* O157:H7 in saturated porous media**. *Water Resources Research* 42, W12S12, 2006b.

BROOKS, R; COREY, T., **Hydraulic properties of porous media**. *Hydrology Paper No 3*. Civil Engineering Department. Colorado State Univ. Fort Collins. Colorado. 27 pp. (apud van Genuchten, 1980) 1964.

BRUNONE, B.; FERRANTE, M.; ROMANO, N.; SANTINI, A., **Numerical Simulations of One-Dimensional Infiltration into Layered Soils with the Richards Equation Using Different Estimates of the Interlayer Conductivity**. *Vadose Zone Journal* (2), pp. 193-200, 2003.

CACAS, M.C.; LEDOUX, E.; DE MARSILY, G.; TILLIE, B.; BARBEAU, A.; DURANS, E.; FEUGA, B.; PEAUDECREP, P., **Modelling Fractures flow with stochastic discrete fracture network: calibration and validation, I. The Flow Model**. *Water Resources Research* 26 (3), pp. 479-489, 1990.

CAMPOS, J.L., **Análise Numérica do Transporte de Contaminantes em Meios Porosos com Reações Químicas**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 1999.

CARSLAW, H. S.; JAEGER, J.C., **Conduction of Heat in Solids**. Oxford, University Press, 1946.

CÉLIA, M.; BOULOUTAS, E.; ZARBA, R., **A general mass-conservative numerical solution for the unsaturated flow equation**. *Water Resources Research* 26, pp. 1483-1496. 1990.

CHAVE P.; HOWARD, G.; SCHIJVEN, J.; APPLEYARD, S.; FLADERER F.; SCHIMON, W., **Groundwater protection zones**. Em *World Health Organization. Protecting Groundwater for Health: Managing the Quality of Drinking-water Sources*. Editado por O. Schmoll, G. Howard, J. Chilton and I. Chorus. London, UK. pp.465-492, 2006.

CHRYSIKOPOULOS, C.V., **Virus transport in the subsurface**, in *Groundwater Pollution Control*, Chapter 3, pp. 95-144, edited by K.L Katsifarakis, Computational Mechanics Publications, WIT Press, Ahurst, Southampton, UK, 2000.

CHRYSIKOPOULOS, C.; SIM, Y., **One-dimensional virus transport in homogeneous porous media with time-dependent distribution coefficient.** Journal of Hydrology 185, pp.199-219. 1996.

COMMITTEE ON FRACTURE CHARACTERIZATION AND FLUID FLOW, NATIONAL RESEARCH COUNCIL, **Rock Fractures and Fluid Flow, Contemporary Understanding and Applications.** National Academy Press, Washington, D.C. pp. 572, 1996.

CORDAZZO, J., **Solução Numérica do Problema de Derramamento de Gasolina Acrescida de Álcool no Solo e Contaminação de Aquíferos.** Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil. 2000.

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V., **The Element-Based Finite Volume Method Applied to Petroleum Reservoir Simulation.** Anais da Rio Oil & Gas Expo and Conference, Rio de Janeiro, 2004(d).

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V., **The Negative Transmissibility Issue When Using CVFEM in Petroleum Reservoir Simulation – 1. Theory,** Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering -- ENCIT 2004, Braz. Soc. of Mechanical Sciences and Engineering -- ABCM, Rio de Janeiro, Brazil, 2004(a).

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V., **The Negative Transmissibility Issue When Using CVFEM in Petroleum Reservoir Simulation – 2. Results,** Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering -- ENCIT 2004, Braz. Soc. of Mechanical Sciences and Engineering -- ABCM, Rio de Janeiro, Brazil, 2004(b).

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V., **Representação de Reservatórios Heterogêneos e com Falhas Geológicas em Malhas Não-Estruturadas,** CILAMCE – XXV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Recife, Pernambuco, Brasil, 2004(c).

CRIST, J.; MCCARTHY, J.; ZEVI, Y.; BAVEYE, PH.; THROOP, J.; STEENHUIS, T., **Pore-Scale Visualization of Colloid Transport and Retention in Partly Saturated Porous Media.** Vadose Zone Journal 3, pp.444–450, 2004.

DA SILVA, J.C., **Modelagem e Simulação Numérica do Fluxo Bifásico e do Transporte Multicomponente em Meios Porosos com Interação Termo-Química.** Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 2004.

DARNAULT, C.; ROCKNE, K.; STEVENS, A.; MANSOORI, A.; STURCHIO, N., **Fate of environmental pollutants.** Water Environment Research. [77\(6\), pp. 2576-2658](#), 2005.

DARNAULT, CH.; STEENHUIS, T.; GARNIER, P.; KIM, Y.; JENKINS, M.; GHIORSE, W.; BAVEYE, P.; PARLANGE J., **Preferential flow and transport of cryptosporidium parvum oocysts through the vadose zone: experiments and modelling.** Vadose Zone Journal 3, pp. 262-270, 2004.

DENOVIO, N.; SAIERS, J.; RYAN, J., **Colloid Movement in Unsaturated Porous Media: Recent Advances and Future Directions**. Vadose Zone Journal 3, pp.338–351, 2004.

DEBORDE, D.C.; WOESSNER, W.W.; KILEY, Q.T.; BALL, P., **Rapid transport of viruses in a floodplain aquifer**. Water Resources Research. 33, pp.2229–2238, 1999.

DENYER, P.; KUSSMAUL, S., **Introducción**. em, Atlas Geológico. Grande Área Metropolitana. 1era Ed. Editorial Tecnológica de Costa Rica, pp. 11-18, 1994.

DERSHOWITZ, W.; MILLER, I., **Dual Porosity Fracture Flow and Transport**. Geophysical Research Letters 22 (11), pp. 1441-1444, 1995.

DRAGILA, M.; WHEATCRAFT, S. W., **Free-Surface Films**. Em Panel on Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone, U.S. National Committee for Rock Mechanics, Board on Earth Sciences and Resources, National Research Council. National Academy Press, Washington, D.C. pp. 217-241, 2003.

DUGUID, J.; LEE, P. C., **Flow in Fractured Porous Media**. Water Resources Research 13 (3), pp. 558-566, 1977.

DYKHUIZEN, R. C., **Transport of solutes through unsaturated fractured media**. Water Resources Research. 21, pp. 1531-1539, 1987.

EPA, **APPENDIX E. CONTAMINANT PERSISTENCE AND MOBILITY FACTORS**. The Class V Underground Injection Control Study. EPA/816-R-99-014a. 1999.

EPA, **Onsite Wastewater Treatment Systems Manual**. EPA/625/R-00/008.2002.

FARD, M. K.; DURLOFSKY, L.J.; AZIZ, K., **An Efficient Discrete Fracture Model Applicable for General Purpose Reservoir Simulators**. SPE 79699, pp. 11, 2003.

FEACHEM, R.G.; BRADLEY, D.J.; GARELICK, H.; MARA D.D., **Sanitation and Disease: Health Aspects of Ewaste and Wastewater Management**. 1983. Consultado em: [http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafe/OSRAS\\_165-172.pdf](http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafe/OSRAS_165-172.pdf).

FETTER, C. W., **Applied Hydrogeology**. 3rd. Edition, Prentice Hall, New Jersey, USA, pp. 691, 1994.

FLINT, A.; FLINT, L.; BODVARSSON, G.; KWICKLIS, M.; FABRYKA-MARTIN, J., **Evolution of the Conceptual Model of Unsaturated Zone Hydrology at Yucca Mountain, Nevada**. Journal of Hydrology 247, pp.1-30, 2001a.

FLINT, A.; FLINT, L.; BODVARSSON, G.; KWICKLIS, M.; FABRYKA-MARTIN, J., **Development of the Conceptual Model of unsaturated hydrology at Yucca Mountain, Nevada**. Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone. National Research Council. National Academy Press. Pp. 47-85, 2001b.

FLYNN, R.M., **Virus transport and attenuation in perialpine gravel aquifers**. Tese de Doutorado. University of Neuchâtel (Switzerland) Faculty of Sciences. Pp.178, 2003.

FRIND E. O., **Groundwater Modelling (Numerical Methods)**. Lecture Notes. EARTH 456/656. Department of Earth Sciences. University of Waterloo, pp. 143, 1995.

FUNG, L.; BUCHANAN, LL; SHARMA, R., **Hybrid-CVFE Method for Flexible-Grid Reservoir Simulation**. SPE Reservoir Engineering, pp. 188-194, 1994.

FUNG, L.; HIEBERT, A.; NGHIEM, L. **Reservoir Simulation with Control-Volume Finite-Element Method**. SPE Reservoir Engineering, pp.1349-357, 1992.

GERBA, C.P., **Applied and Theoretical Aspects of Virus Adsorption to Surfaces**. Adv. Appl. Microbiol. 30, pp. 133-168, 1984.

GERBA, C.P.; WALLIS, C.; MELNICK, J.L., **Fate of wastewater bacteria and viruses in soil**. Journal of the Irrigation and Drainage Division 101, pp. 157-174, 1975. Citado em: [http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafe/OSRAS\\_165-172.pdf](http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafe/OSRAS_165-172.pdf).

GERKE, H. H.; VAN GENUCHTEN, M. TH., **A Dual-Porosity Model for Simulating the Preferential Movement of Water and Solutes in Structured Porous Media**. Water Resources Research 29, pp. 305–319, 1993a.

GERKE, H. H.; VAN GENUCHTEN, M. TH., **Evaluation of A First Order Water Transfer Term for Variably Saturated Dual-Porosity Flow Models**. Water Resources Research 29, pp. 1225–1238, 1993b.

GERSCOVICH, D. M., **Fluxo em Meios Porosos Saturados e Não Saturados Modelagem Numérica com Aplicações ao Estudo da Estabilidade de Encostas do Rio de Janeiro**. 1994.

GINN, T.R.; WOOD, B.D.; NELSON K.E.; SCHEIBE T.D.; MURPHY E.M.; CLEMENT T.P., **Processes in microbial transport in the natural subsurface**. Advances in Water Resources 25, pp.1017–1042, 2002.

GINROD P., **The impact of colloids on th migration and dispersal of radionuclides within fractured rock**. Journal of Contaminant Hydrology 13, pp. 167-181, 1993.

GODFREE, A.; FARRELL J., **Processes for Managing Pathogens**. J. Environ. Qual. 34, pp.105–113, 2005.

GOIS, J. P.; ESTACIO, K. C.; OISHI, C. M.; BERTONI, V.; BOTTA, V. A.; NAGAMINE, A.; KUROKAWA, F. A., **Aplicação de Volumes Finitos na Simulação Numérica de Contaminantes em Lençóis Freáticos**. Notas do ICMC - Série Computação, São Carlos, Vol. 87, pp. 1-33, <http://www.lcad.icmc.usp.br/~kemelli/publicacoes.htm>, 2005.

GRINROD, P.; EDWARDS, M.S.; HIGGO, J.; WILLIAMS, G.M., **Analysis of colloid and tracer breakthrough curves**. Journal of Contaminant Hydrology 21, pp. 243-253, 1996.

GWO, J. P.; JARDINE, P. M.; WILSON, G. V.; YEH, G.Y., **A Multiple-Pore Region Concept to Modeling Mass Transfer in Subsurface Media**. Journal of Hydrology 164, pp. 217-237, 1995.

HARVEY, R.; RYAN, J., **Use of PRD1 bacteriophage in groundwater viral transport, inactivation and attachment studies**. FEMS Microbiology Ecology 49, pp. 3-16, 2004.

HOKR, M.; J. MARYŠKA, J., **Numerical Solution of Two-Region Advection-Dispersion Transport and Comparison with Analytical Solution on Example Problems**. Proceedings of ALGORITMY 2002, 16th Conference on Scientific Computing, pp. 130-137, Slovakia, 2002.

HOPMANS, J. W.; VAN GENUCHTEN, M. Th., **Vadose Zone: Hydrological Processes**. Em Hillel D.(ed), Encyclopedia of soils in the Environment, pp. 209-216. Elsevier Ltd. Oxford, U.K, 2005.

HUYAKORN, P.; PINDER, G., **Computational Methods in Subsurface Flow**. Academic Press. London, pp. 472, 1983.

HUYAKORN, P.; WHITE, H.O.; WADSWORTH, T.D., **TRAFRAP-WT A two dimensional finite element code for simulating fluid flow and transport of radionuclides in fractured porous media with water table boundary consitions**. Hydrogeologic Inc. Herndon VA., pp.72, 1987.

IBARAKI M. E SUDICKY E., **Colloid-Facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media. 1. Numerical formulation and sensitivity analysis**. Water Resources Research 31(12), pp.2945-2960, 1995a.

IBARAKI M. E SUDICKY E., **Colloid-Facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media. 2. Fracture network examples**. Water Resources Research 31(12), pp.2961-2969,1995b.

JAMES, S.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Analytical solutions for monodisperse and polydisperse colloid transport in uniform fractures**. Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 226, pp101-118. 2003a.

JAMES, S.C.; BILEZIKJIAN, T.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Contaminant transport in a fracture with spatially variable aperture in the presence of monodisperse and polydisperse colloids**. Stoch. Environ. Res. Risk Assess 19, pp. 266-279, 2005.

JAMES, S.C.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Effective velocity and effective dispersion coefficient for finite-sized particles flowing in a uniform fracture**. Journal of Colloid and Interface Science 263, pp. 288–295, 2003b.

JARVIS, N. J., **The MACRO Model (Version 3.1). Technical Description and Sample Simulations**. Reports and Dissertations 19. Department of Soil Science, Swedish University of Agricultural Science, Uppsala, Sweden, pp. 51, 1994.

JOHN, D.; ROSE A., **Review of Factors Affecting Microbial Survival**. Groundwater 39 (19), pp 7345-7356, 2005.

KELLER, A.; SIRIVITHAYAPAKORN, S., **Transport of colloids in unsaturated porous media:Explaining large-scale behavior based on pore-scale mechanisms**. Water resources Research 40, W12403, 2004.

KELLER, A.; AUSET, M, **A review of visualization techniques of biocolloid transport processes at the pore scale under saturated and unsaturated conditions.** *Advances in Water Resources* 30, pp.1392–1407, 2007.

KELLER, A.; SIRIVITHAYAPAKORN S., CHRYSIKOPOULOS, C., **Early breakthrough of colloids and bacteriophage MS2 in a water-saturated sand column.** *Water Resources Research* 40, W08304, 2004.

KENNEDY, CH.; LENNOX, W., **A Control Volume Model of Solute Transport in a Single Fracture.** *Water Resources Research* 31 (2), pp. 313-322, 1995.

KESSLER, J., **Colloid transport and deposition in water-saturated and unsaturated sand and Yucca Mountain tuff. Effect of ionic strength and moisture saturation. TR-110546.** Electric Power research Institute, Califórnia, pp. 66,1999.

KINOSHITA, T.; BALES, R.C.; MAGUIRE, K.M.; GERBA, C.P., **Effect of Ph on bacteriophage transport through sandy soils.** *Journal of Contaminant Hydrology* 14, pp. 55-70, 1993.

LAGENDIJK, V.; JANSEN, D.; KÖNGETER, J., **Unsaturated Flow Phenomena Simulating Groundwater Flow within Fractured Permeable Formations Applying the Multi-Continuum Approach.** *Proceedings of Abstracts and Papers of the 3rd International Conference on Hydro-Science and -Engineering (ICHE): Brandenburg University of Technology at Cottbus, Berlin, Germany, Ed. by K.P. Holz [et al.]. Mississippi: Center for Computational Hydroscience and Engineering, Univ. of Mississippi (Advances in Hydro-Science and -Engineering; 3) (Paper on CD-ROM), pp. 1-19, 1998.*

LAZAROV, R. D.; MISHEV, I. D.; VASSILEVSKI, P. S., **Finite Volume Methods for Convection-Diffusion Problems,** *SIAM J. Numer. Anal.* 33 (1), pp. 31-55, 1996.

LEDAIN MUIR, B.; BALIGA, B., **Solution of Three-Dimensional Convection-Diffusion Problems Using Tetrahedral Elements and Flow-Oriented Upwind Interpolation Functions.** *Numerical Heat Transfer* 9, pp. 143-162, 1986.

LEE, CH.; DENG, B.; CHANG, J., **A Continuum Approach for Estimating Permeability in Naturally Fractured Rocks,** *Engineering Geology* 39, pp. 71-85, 1995.

LENHART, J.; SAIERS, J., **Transport of silica colloids through unsaturated porous media: experimental results and model comparisons.** *Environ. Sci. Technol.* 36, pp. 769-777, 2002.

LEWIS, J; FOSTER, S.; DRASAR, B., **The risk of groundwater pollution by on-site sanitation in developing countries. A literature review.** *IRCWD-Report No 01/82.* pp. 78, 1988.

LIU, H-H.; BODVARSSON, G., **Constitutive Relation for Unsaturated Flow in a Fracture Network.** *Journal of Contaminant Hydrology* 252, pp. 116-125, 2001.

LIU, H-H.; HAUKWA, C.; AHLERS, C. F.; BODVARSSON, G.; FLINT, A.; GUERTAL W., **Modeling flow and transport in unsaturated fractured rock: an evaluation of the continuum approach.** Journal of Contaminant Hydrology (62–63), pp. 173-188, 2003.

LONG, J. C. S.; REMER, J. S.; WILSON, C. R.; WITHERSPOON P. A., **Porous Media Equivalent for Networks of Discontinuous Fractures.** Water Resources Research 18 (3), pp. 645-658, 1982.

LOVELAND, J.; BHATTACHARJEE, S.; RYAN, J.; ELIMELECH, M., **Colloid transport in a geochemically heterogeneous porous medium: aquifer tank experiment and modeling.** Journal of Contaminant Hydrology 65, pp. 161-182, 2003.

LYRA, P.; WILLMERSDORF, R.; ARAÚJO, F.; DE CARVALHO, D., **An Adaptive Edge-Based Unstructured Finite Volume Formulation for the Solution of Biphasic Flows in Porous Media.** Neitaanmaki P. Rossi T., Majava K. e Pironneau O. (eds), European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECOMAS 17, 2004.

SHUKLA M.K., ELLSWORTH T.R., HUDSON R.J. E NIELSEN D.R., **Effect of Water Flux on Solute Velocity and Dispersion.** Soil Sci. Soc. Am. J. 67, pp. 449–457, 2003.

MALISKA, C. R., **Transferência de Calor e Mecânica de Fluidos Computacional.** 2da ed, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. Rio de Janeiro, pp. 453, 2004.

MALOSZWEVSKI, P.; ZUBER, A., **Tracer Experiments in Fractured Rocks: Matrix Diffusion and Validity of Models.** Water Resources Research 29(8), pp. 2723-2735, 1993.

TULLER, M.; OR, D., **Hydraulic Conductivity of Variably Saturated Porous Film and Corner Flow in Angular Pore Space.** Water Resources Research 37(5), pp. 1257-1276, 2001.

MATTHES, G.; PEKDEGER, A., **Concepts of a survival and transport model of pathogenic bacteria and viruses in groundwater.** The Science of the Total Environment 21, pp.149-159,1981.

MEDEMA, G.J.; SHAW, S.; WAITE, M.; SNOZZI, M.; MORREAU, A.; GRABOW, W., **Catchment characterisation and source water quality.** Assessing Microbial Safety of Drinking Water. WHO/OEDC, London. 2003.

MEZENTSEV, A.; MATTHAI, S.; PAIN, CH.; EATON, M., **A Bounded Control Volume Hybrid Finite Element Method for Subsurface Multiphase Flow Simulations.** Neitaanmaki P. Rossi T.,Majava K. e Pironneau O. (eds). European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECOMAS, pp. 20, 2004.

MISHEV, I., **Finite Volume Methods on Voronoi Meshes.** Disponível no site <http://www.isc.tamu.edu/publications-reports/tr/9609.pdf>, pp. 23, consultado em Nov 2007.

MOHANTY, B.P.; BOWMAN, R.S.; HENDRICKX, J.M.; VAN GENUCHTEN, M.TH., **New Piecewise-Continuous Hydraulic Functions for Modeling Preferential Flow in an Intermittent-Flood-Irrigated Field**, Water Resources Research 33 (9), pp. 2049–2063, 1997.

MONTEAGUDO, J. E.; FIROOZABADI, A., **Control-Volume Method for Numerical Simulation of Two-Phase Immiscible Flow in Two- And Three-Dimensional Discrete-Fractured Media**. Water Resources Research 40, W07405, 2004.

NOWAKOWSKI, K.; LAPCEVIC, P.; VORALEK, J.; BICKERTON, G., **Preliminary Interpretation of Tracer Experiments Conducted in A discrete Rock Fracture Under Conditions of Natural Flow**. Geophysical Research Letters 22 (11), pp. 1417-1420, 1995.

OR, D.; TULLER, M., **Hydraulic Conductivity of Partially Saturated Fractured Porous Media: Flow in a Cross-Section**. Advances in Groundwater 26(8), pp. 883-898, 2003.

OSWALD J.; IBARAKI M., **Migration of colloids in discretely fractured porous media; effect of colloidal matrix diffusion**. Journal of Contaminant Hydrology 52, pp. 213-244, 2001.

PACHEPSKY, Y.A.; SADEGHI, A.M.; BRADFORD, S.A.; SHELTON, D.R.; GUBER, A.K.; DAO, T., **Transport and fate of manure-borne pathogens. Modelling Perspective**. Agricultural Water Management 86, pp. 81-92, 2006.

PANEL ON CONCEPTUAL MODELS OF FLOW AND TRANSPORT IN THE FRACTURED VADOSE ZONE., **Conceptual Models of Flow and Transport in the Vadose Zone**. Us. National Committee for Rock Mechanics, Board on Earth Sciences and Resources, National Research Council. National Academy Press, Washington, D.C., pp. 372, 2003.

PANKOW, J. J.; JOHNSON, R.; HEWETSON, J.; CHERRY J., **An Evaluation of Contaminant Migration Patterns at Two Waste Disposal Sites on Fractured Porous Media in Terms of the Equivalent Porous Medium Model**. Journal of Contaminant Hydrology 1, pp. 65-76, 1986.

PATANKAR, S. V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Em Minkowycz e Sparrow (editores). Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Science, Taylor & Francis. U.S.A., pp. 197, 1980.

PEDLEY, S.; YATES, M.; SCHIJVEN, J.F.; WEST J.; HOWARD, G.; BARRETT, M., **Pathogens: Health relevance, transport and attenuation** Em: 2006 World Health Organization. Protecting Groundwater for Health: Managing the Quality of Drinking-water Sources. (Eds) O. Schmoll, G. Howard, J. Chilton e I. Chorus. IWA Publishing, London, UK, pp. 49-80, 2006.

PÉREZ, D., **La explotación del Agua Subterránea, Un Nuevo Enfoque**. Editorial Científico-Técnica, Habana, Cuba, pp. 500, 1995.

PENROD, S.L.; OLSON, T.M.; GRANT, S.B., **Deposition kinetics of two viruses in packed beds of quartz granular media**. Langmuir 12, pp. 5576–5587, 1996.

PIEPER, A.P.; RYAN, J.N.; HARVEY, R.W.; AMY, G.L.; ILLANGASEKARE, T.H.; METGE, D.W., **Transport and recovery of bacteriophage PRD1 in a sand and gravel aquifer: effect of sewage-derived organic matter.** Environmental Science & Technology 31, pp.1163–1170, 1997.

PHILLIP, J. R., **The Theory of Absorption in Aggregated Media.** Aust. J. Soil Res. 6, pp. 1–19, 1968.

PRAKASH, C., **An Improved Control Volume Finite-Element Method for Heat and Mass Transfer, and for Fluid Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation.** Numerical Heat Transfer 9, pp 253-276, 1986.

PRUESS, K.; NARASIMAHAN, T. N., **A Practical Method for Modeling Fluid and Heat Flow in Fractured Porous Media.** SPE 10509, pp. 14-26, 1985.

PRUESS, K.; WANG, J. S. Y., **Numerical Modeling of Isothermal and Non-Isothermal Flow in Unsaturated Fractured Rock - A Review.** Evans, D.D., Nicholson, T.J. (Eds.), Flow and Transport through Unsaturated Fractured Rock, Geophysics Monograph, vol. 42. American Geophysical Union, Washington,DC, pp. 11–22, 1987.

RAMÍREZ, R.; ALFARO, A., **Mapa de Vulnerabilidad Hidrogeológica de una parte Del Valle Central de Costa Rica.** Revista Geológica de América Central (27), Número Especial: HIDROGEOLOGIA. Editorial Universidad de Costa Rica, pp. 53-60, 2002.

RASMUSSEN, T.C.; EVANS, D.D., **Fluid flow and solute transport modeling in three dimensional networks of variably saturated discrete fractures.** U.S. Nucl. Regulat. Comm., Washington, D.C., Report NUREG/CR-5239, 1989.

REICHENBERGER, V.; JAKOBS, H.; BASTIAN, P.; HELMIG, R., **A Mixed-Dimensional Finite Volume Method for Multiphase Flow in Fractured Porous Media.** Advances in Water Resources 29(7), pp. 1020-1036, 2006.

REIMUS P.; CALLAHAN T.J.; WARE S.D.; HAGA M.; COUNCE D.A., **Matrix diffusion coefficients in volcanic rocks at the Nevada test site: Influence of matrix porosity, matrix permeability, and fracture coating minerals.** Journal of Contaminant Hydrology 93 (1-4), pp. 85-95, 2007.

REIMUS, P., **The use of synthetic colloids in tracer transport experiments in saturated rock fractures.** Los Alamos National Laboratory. New Mexico. Documento LA-130004-T Tese UC-802.1995(a).

REIMUS, P., **Transport of Synthetic Colloids through single saturated fractures: a literature review.** Los Alamos National Laboratory. New Mexico. Documento LA-12707-MS UC-802. pp 108. 1995(b).

REITSMA, S.; KUEPER, B., **Laboratory Measurement of Capillary Pressure - Saturation Relationship in a Rock Fracture.** Water Resources Research 30(4), pp. 865-878, 1994.

ROBINSON, B.; MCLIN, S.E; VISWANATHAN, H., **Hydrologic Behavior of Unsaturated, Fractured Tuff: Interpretation and Modeling of a Wellbore Injection Test.** Vadose Zone Journal 4, pp.694–707, 2005.

ROLIM, S., **Sistemas de Lagunas de Estabilización. Como utilizar aguas residuales tratadas em sistemas de regadío.** Mc Graw Hill Interamericana. Bogotá, Colômbia, pp. 370, 2000.

ROSALES, E.; VARGAS, S., **Diagnóstico Salud en la Vivienda en Costa Rica,** Organización Panamericana de la Salud, Red Interamericana de Centros de Salud em la Vivienda, <http://www.cepis.org.pe/bvsasv/e/diagnostico/costarica.pdf>. 2001.

RYAN, J.; HARVEY, R.; MEDGE, D.; ELIMELECH, M.; NAVIGATO, T.; PIEPER, A., **Field and Laboratory Investigation of Inactivation of Viruses (PRD1 and MS2) Attached to Iron Oxide-Coated Quartz Sand.** Environmental Science & Technology 36 (11), pp. 2403-2413, 2002.

SASIC KALAGASIDIS, BEDNAR, T.; HAGENTOFT, C., **Evaluation of the Interface Moisture Conductivity between Control Volumes - Comparison between Linear, Harmonic and Integral Averaging.** em "Performance of Exterior Envelopes of Whole Buildings IX International Conference", Vortrag: Buildings IX, Clearwater Beach; 05.12.2004 - 10.12.2004, pp. 1 – 7, 2004.

SCHIJVEN J. & ŠIMŮNEK J., **Kinetic modeling of virus transport at the field scale.** J. Contam. Hydrol. 55, pp. 113-135, 2002.

SCHIJVEN, J.; HASSANIZADEH, S., **Removal of Viruses by Soil Passage: Overview of Modeling, Processes and Parameters.** Critical Reviews in Environmental Science and Technology 30(1), pp. 49-127, 2000.

SCHIJVEN, J.F.; HOOGENBOEZEM, W.; MAJID HASSANIZADEH, S.; PETERS, J.H., **Modeling removal of bacteriophages MS2 and PRD1 by dune recharge at Castricum, Netherlands.** Water Resources Research 35(4), pp.1101-1111, 1999.

SCHMELLING, S; ROSS, R, **Contaminant Transport in Fractured Media: Models for Decision Makers.** EPA Superfund Groundwater Issue. Documento EPA/540/4-89/004, 1989.

SCHNEIDER, F. A.; MALISKA, C. R., **Acoplamento Pressão-Velocidade em Escoamentos Bidimensionais Incompressíveis Usando Malhas Não-Estruturadas.** XX CILAMCE – 20th Iberian Latin-American Computational Methods in Engineering, pp. 26, Novembro, 1999.

SCHNEIDER, F. A.; MALISKA, C. R., **Uma Formulação em Volumes Finitos Usando Malhas Não-Estruturadas,** VIII ENCIT – Encontro Nacional de Ciências Térmicas, CD-ROM edition, Porto Alegre, Brasil, 2000.

SCHWARTZ, J.; LEMLEY, A.; PRATAP, K., **Household Chemicals and Your Septic System.** Water treatment notes (16), Cornell Cooperative Extension, College of Human Ecology. Cornell University, New York, pp.5, <http://waterquality.cce.cornell.edu/publications.htm#notes>, 2004.

SILVA, S.G., **Um Estudo Numérico do Transporte de Poluentes em Meios Porosos Saturados.** Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro.1991.

SIM, Y.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Three-Dimensional Analytical Models for Virus Transport in Saturated Porous Media.** Transport in Porous Media 30, pp. 87–112, 1998.

SIM, Y.; CHRYSIKOPOULOS, C.V., **Analytical Models for One-Dimensional Virus Transport in Saturated Porous Media**. Water Resources Research 31 (5), pp. 1429-1437, 1995.

ŠIMŮNEK, J.; HE, CH.; PANG, L.; BRADFORD, S.A., **Colloid-Facilitated Solute Transport in Variably Saturated Porous Media: Numerical Model and Experimental Verification**. Vadose Zone Journal 5, pp.1035–1047, 2006.

ŠIMŮNEK, J.; JARVIS, N.; VAN GENUCHTEN, M.; GÄRDENÄS, A., **Review and Comparison of Models for Describing Non-Equilibrium and Preferential Flow and Transport in the Vadose Zone**. Journal of Hydrology 272, pp. 14–35, 2003.

SIRIVITHAYAPAKORN, S., KELLER, A., **Transport of colloids in saturated porous media: A pore-scale observation of the size exclusion effect and colloid acceleration**. Water Resources Research 39 (4), 1109, 2003.

SMITH, L.; SCHWARTZ, F.W., **Na analysis of the influence of fracture geometry on mass transport in fractured media**. Water Resources Research 20 (9), pp. 1241-1252, 1984.

SUDICKY, E.A.; MCLAREN, R.G., **The Laplace transform galerkin technique for large-scale simulation of mass transport in discretely-fractured porous formations**. Water Resources Research 28 (4), pp. 499-514, 1992.

TELLES, I., **Desenvolvimento de um Sistema Integrado para Modelagem de Fluxo e Transporte em Meios Porosos e Fraturados**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 2006.

TERRIEN, R.; SUDICKY, E. A., **Three Dimensional Analysis of Variable-Saturated Flow and Solute Transport in Discretely-Fractured Porous Media**. Jour. Cont. Hydrol. 23, pp. 1-44, 1996.

BARTH, T.; OHLBERGER, M., **Finite Volume Methods: Foundation and Analysis**. Encyclopedia of Computational Mechanics, (Eds) Erwin Stein, René de Borst e Thomas J.R. Hughes. John Wiley & Sons, Ltd. 2004.

TORAN, L.; PALUMBO, A.V., **Colloid Transport through fractured and unfractured laboratory sand columns**. Journal of Contaminant Hydrology 9, pp 289-303, 1992.

TORKZABAN, S.; HASSANIZADEH, S.; SCHIJVEN, J; van den BERG, H., **Role of air-water interfaces on retention of viruses under unsaturated conditions**. Water Resources Research 42, W12S14, 2006.

TUFENKJI, N.; ELIMELECH, M., **Spatial distribution of cryptosporidium oocysts in porous media: evidence for dual mode deposition**. Environ. Sci. Technol. 39, pp. 3620-3629, 2005.

TULLER, M.; OR, D., **Unsaturated Hydraulic Conductivity of Structured Porous Media. A Review of Liquid Configuration-Based Models**. Vadose Zone Journal 1, pp. 14-37, 2002.

VAN DAM, J. C.; ROOIJ, G. H.; HEINEN, M.; STAGNITTI, F., **Concepts and dimensionality in modeling unsaturated waterflow and solute transport**. pp. 1-36. Em, R A Feddes, G H de Rooij, J C van Dam (eds): Unsaturated-zone

Modeling - Progress, Challenges and Applications. Springer. pp. 364. revisado em [http://library.wur.nl/frontis/unsaturated/01\\_van\\_dam.pdf](http://library.wur.nl/frontis/unsaturated/01_van_dam.pdf), 2004.

VAN GENUCHTEN, M. TH.; DALTON, F., **Models for Simulating Salt Movement in Aggregated Field Soils**. Geoderma 38, pp. 165-183, 1986.

VAN GENUCHTEN, M. TH.; WIERENGA, P. J., **Mass Transfer Studies in Sorbing Porous Media**. I. Analytical Solutions. Soil Sci. Soc. Am. J. 40, pp. 473-481, 1976.

VAN GENUCHTEN, M. TH.; ŠIMŮNEK J., **Integrated modeling of vadose zone flow and transport processes**. Em: Unsaturated Zone Modeling: Progress, Challenges and Applications, Wageningen UR Frontis Series, Kluwe Academic Publishers, The Netherlands Vol. 6, Capítulo 2, pp. 37-69, 2005.

VAN GENUCHTEN, M. TH., **A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils**. Soil.Sci.Soc. Am. J. 44:892-898, 1980.

VARGAS A., **Manantiales de una parte del valle Central de Costa Rica**. Revista Geológica de América Central (27), Número Especial: HIDROGEOLOGIA. Editorial Universidad de Costa Rica, pp. 39-52, 2002.

VISWANATHAN, H.S.; REIMUS, P.W., **Saturated Zone Colloid Transport**. OCRWN.ANL-NBS-HS-000031 REV01, pp 82. 2003.

WAN, J.; WILSON, J.; KIEFT T., Influence of the Gas-Water Interface on Transport of Microorganisms through Unsaturated Porous Media. Applied and Environmental Microbiology, pp. 509-516, Feb, 1994.

WANG, H.; WANG, E.; TIAN, K., **A Model Coupling Discrete and Continuum Fracture Domains for Groundwater Flow in Fractured Media**. Journal of Hydraulic Research 42, pp. 45-52, 2004.

WIKIPEDIA, Revisado no site <http://en.wikipedia.org/wiki/Virus>, 2007.

WIMPENNY, J., **Modelling in microbiology**. 8th International Symposium on Microbial Ecology Halifax, Nova Scotia, Canada. August 9-14, pp.8, 1998.

WINSLOW, A., **Numerical Solution of the Quasilinear Poisson Equation in a Nonuniform Triangle Mesh**. Journal of Computational Physics 135, pp. 128-138, 1967.

YANJIE C.; YAN J.; FLUIR M.; YATES M., **Mechanisms of vírus removal during transport in unsaturated porous media**. Water Resources Research 37 (2), pp. 253-270, 2001.

YAO, K.; HABIBIAN, M.; O'MELIA, CH., **Water and Waste Water Filtration: Concepts and Applications**. Environmental Science & Technology 5 (11), pp. 1105-1112, 1971.

YATES, M.V.; YATES, S., **A comparison of geostatistical methods for estimating virus inactivation rates in groundwater**. Water Resources Research 21, pp. 1119-1125, 1987.

YATES, M.V.; YATES, S., **Modelling microbial fate in the subsurface environment**. Critical Reviews in Environmental Control 17 (4), pp. 307-344, 1988. citado em: <http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafw/OSRAS165-172.pdf>.

YATES, M.V.; YATES, S.; WAGNER, J.; GERBA, C., **Modelling virus survival and transport in the subsurface**. Journal of Contaminant Hydrology 1, pp 329-345, 1987.

ZEVI, Y.; DATHE, A.; McCARTHY, J.; RICHARDS, B.; STEENHUIST, T.S., **Distribution of Colloid Particles onto Interfaces in Partially Saturated Sand** Environ. Sci. Technol. 39, pp. 7055-7064, 2005b.

ZEVI, Y.; DATHE, A.; McCARTHY, J.; RICHARDS, B.; STEENHUIS, T., **Distribution of colloid particles onto interfaces in partially saturated sand**. Environ. Sci. Technol. 39, pp. 7055-7065, 2005a.

ZHANG, P.; JOHNSON, W.; PIANA, M.; FULLER, CH.; NAFTZ, D., **Potential artifacts in interpretation of differential breakthrough of colloids and dissolved tracers in the context of transport in a zero-valent iron permeable reactive barrier**. Groundwater 39(6), pp. 831-840, 2001.

ZHANG, X.; SANDERSON, D.; BARKER, A., **Numerical Study of Fluid Flow of Deforming Fractured Rocks Using Dual Permeability Model**. Geophys. J. Int. 151, pp. 452-468, 2002.

## APÊNDICE A: Equações Governantes do Problema

### A.1. Equações que descrevem o Fluxo

As equações que descrevem os fluxos na matriz e nas fraturas estão baseadas no conceito da continuidade da massa do fluido num volume de referência. A obtenção dessas equações é mostrada a seguir.

#### A.1.1. Fluxo na Matriz

Considere o volume de referência mostrado na Figura A1, com dimensões  $dx$ ,  $dy$  e  $dz$ . Agora considere o fluxo de água acontecendo paralelamente ao eixo X do sistema de coordenadas mostrado na mesma figura, fluindo no sentido indicado pelas setas. Imagine que o fluxo ingressa no volume de referência pelo lado esquerdo e sai pelo lado direito.

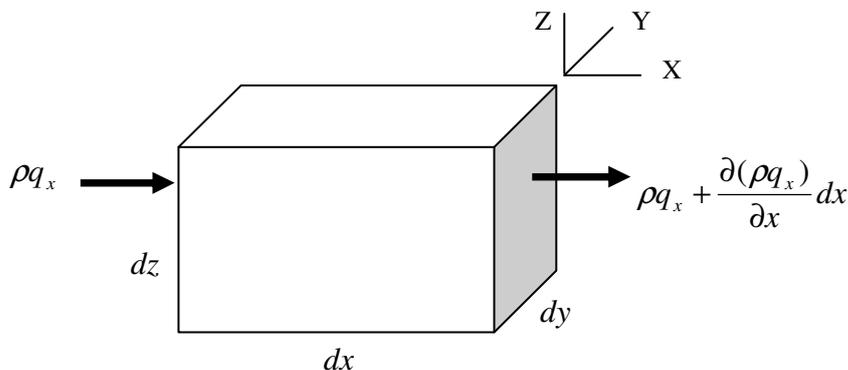


Figura A1. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Unidimensional

A quantidade de massa do fluido que ingressa no volume é dada pela vazão específica  $q_x$  na direção X multiplicada pela massa específica do fluido. A vazão  $q_x$  representa o volume de fluido por unidade de área por unidade de tempo que ingressa pela face esquerda do volume de referência. O produto  $\rho q_x$  representa

então o fluxo de massa do fluido que ingressa por unidade de área por unidade de tempo. No extremo direito do volume de referência, a quantidade de massa que sai, corresponde à massa que ingressou mais um termo adicional que reflete as mudanças dentro do volume de referência. Esse termo adicional pode significar acréscimo ou decréscimo na massa de fluido. Em termos matemáticos isto é representado através de um termo diferencial que reflete a variação da quantidade de massa ao longo da distância  $dx$ , e é representado simbolicamente pela expressão  $\frac{\partial \rho q_x}{\partial x} dx$ . O sinal da derivada indicará se a massa de fluido que sai é menor ou maior à massa de fluido que ingressou. Se considerarmos que o fluxo ocorre nas três direções do nosso sistema de coordenadas, o balanço no volume de referência terá as componentes mostradas na Figura A2.

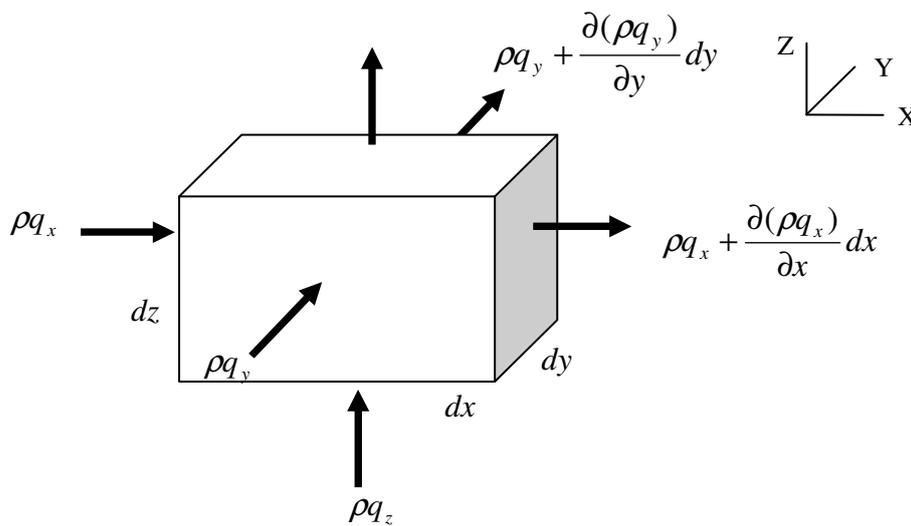


Figura A2. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Tridimensional

Neste caso existe fluxo de massa do fluido ingressando e saindo nas três direções do sistema de coordenadas. Por convenção define-se que o fluxo de massa que entra é positivo e o fluxo de massa que sai é negativo. Para realizar o balanço no volume de referência, simplesmente subtraímos os fluxos de massa que saem dos fluxos de massa que ingressam no sistema. A partir do balanço é obtida a quantidade de massa de fluido que entra ou sai do sistema por unidade de área por unidade de tempo. Bastará multiplicar esse valor pelas áreas e tempos correspondentes para obter a massa total de fluido que ingressou ou saiu do

sistema. O anteriormente anunciado é colocado em termos matemáticos no Quadro A1.

Quadro A1. Equações do balanço de fluido no meio poroso

Direção	Fluxo <sup>1</sup> Entra	Fluxo que Sai <sup>1</sup>	Balanço <sup>2</sup> (Fluxo entra-Fluxo sai)	Massa que entra ou sai <sup>3</sup>
X	$\rho q_x$	$\rho q_x + \frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} dx$	$(\rho q_x - \rho q_x - \frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} dx) dy dz$	$-\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x} dx dy dz dt$
Y	$\rho q_y$	$\rho q_y + \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} dy$	$(\rho q_y - \rho q_y - \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} dy) dx dz$	$-\frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y} dx dy dz dt$
Z	$\rho q_z$	$\rho q_z + \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z} dz$	$(\rho q_z - \rho q_z - \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z} dz) dx dy$	$-\frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z} dx dy dz dt$

1: massa por unidade de área por unidade de tempo

2: massa por unidade de tempo

3: massa (unidades de massa)

A quantidade total de massa de fluido que entra ou sai do sistema num determinado intervalo de tempo  $dt$  é dado pela Equação A1.

$$-\frac{\partial \rho q_x}{\partial x} dx dy dz dt - \frac{\partial \rho q_y}{\partial y} dx dy dz dt - \frac{\partial \rho q_z}{\partial z} dx dy dz dt \tag{A1}$$

Como acima colocado, o termo diferencial reflete as mudanças que ocorrem dentro do volume de referência. A Equação A1 deverá ser numericamente igual à variação da massa que ocorre dentro do volume. Essa variação de massa pode ser expressa em termos matemáticos da seguinte forma:

$$\frac{\partial M}{\partial t} dt \tag{A2}$$

em que M é a massa e t, o tempo. A massa pode ser expressa em função do volume total ( $V_t$ ) do volume de referência, da porosidade (n), do grau de saturação ( $S_w$ ) e da massa específica ( $\rho$ ) do fluido. A expressão resultante é,

$$\frac{\partial(\rho S_w n V_t)}{\partial t} dt \tag{A3}$$

O volume total  $V_t$  resulta do produto  $dx dy dz$ . Substituindo na Equação A3 resulta,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t} dx dy dz dt \tag{A4}$$

Equacionando A1 e A4, a equação de continuidade resultante é,

$$\left(-\frac{\partial \rho q_x}{\partial x} - \frac{\partial \rho q_y}{\partial y} - \frac{\partial \rho q_z}{\partial z}\right) dx dy dz dt = \frac{\partial(\rho S n)}{\partial t} dx dy dz dt \quad (A5)$$

No caso de se ter termos fontes (Q) definidos como volume de fluido injetado/retirado por volume unitário por tempo unitário, a equação de continuidade resultante é,

$$\left(-\frac{\partial \rho q_x}{\partial x} - \frac{\partial \rho q_y}{\partial y} - \frac{\partial \rho q_z}{\partial z} \pm \rho Q\right) dx dy dz dt = \frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t} dx dy dz dt \quad (A6)$$

Se expandirmos no tempo o lado direito da equação (A6) obtém-se,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t} dx dy dz dt = \left(\rho S_w \frac{\partial n}{\partial t} + \rho n \frac{\partial S_w}{\partial t} + S_w n \frac{\partial \rho}{\partial t}\right) dx dy dz dt \quad (A7)$$

A parcela  $\frac{\partial \rho}{\partial t}$  corresponde à compressibilidade do fluido e pode ser expressa da maneira seguinte:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t} = \beta \rho^2 g \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (A8)$$

onde  $\beta$  é o coeficiente de compressibilidade do fluido,  $g$  a gravidade e  $\psi$  a carga de pressão do fluido.

A parcela  $\frac{\partial n}{\partial t}$  corresponde com a compressibilidade do meio poroso e pode ser expressa da maneira seguinte:

$$\frac{\partial(n)}{\partial t} = \alpha \rho g \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (A9)$$

onde  $\alpha$  é o coeficiente de compressibilidade do meio poroso.

A parcela  $\frac{\partial S_w}{\partial t}$  corresponde à variação do grau de saturação no tempo, e se multiplicada pela porosidade pode ser expressa em termos do chamado teor de umidade volumétrico ( $\theta$ ). O segundo termo do lado direito da Equação A7, pode ser escrito da seguinte forma.

$$n \rho \frac{\partial(S_w)}{\partial t} = \rho \frac{\partial(n S_w)}{\partial t} = \rho \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (A10)$$

Substituindo as expressões A8, A9 e A10 na Equação A7, obtém-se,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t} dx dy dz dt = \left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_w \alpha \rho g \frac{\partial \psi}{\partial t} + S_w n \beta \rho^2 g \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) dx dy dz dt \quad (A11)$$

Arranjando termos, a Equação A11 é transformada para,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t} dx dy dz dt = \left( \rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_w \frac{\partial \psi}{\partial t} (\rho g (\alpha + n \beta)) \right) dx dy dz dt \quad (A12)$$

Onde o termo  $\rho g (\alpha + n \beta)$  é chamado de coeficiente de armazenamento específico e tem unidades ( $L^3 / L^3 L$ ), e representa o volume de fluido liberado por volume unitário do meio poroso por queda unitária na carga de pressão, e é normalmente representado pelo símbolo  $S_s$ . A Equação A12 modificada é,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t} dx dy dz dt = \left( \rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_w \frac{\partial \psi}{\partial t} S_s \right) dx dy dz dt \quad (A13)$$

O lado esquerdo da Equação A5 pode incorporar as equações de movimento do fluido. A equação de Darcy é a que descreve o movimento de um fluido num meio poroso. A equação de Darcy é da forma seguinte:

$$q_l = -k \frac{\partial(\psi + z)}{\partial l} \quad (A14)$$

onde  $q_l$  representa a vazão específica do fluido (volume por unidade de área por unidade de tempo) na direção  $l$ ,  $k$  corresponde à condutividade (permeabilidade) hidráulica saturada do meio poroso, e  $\frac{\partial(\psi + z)}{\partial l}$  representa a variação ou gradiente da carga total ao longo do comprimento  $l$ . Novamente  $\psi$  representa a carga de pressão e  $z$  a carga de elevação. A permeabilidade é na realidade uma propriedade tensorial, e pode ser decomposta nas direções do sistema de coordenadas escolhido. No caso de um sistema de coordenadas tridimensionais com eixos XYZ, o tensor de permeabilidades é dado por:

$$\begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (A15)$$

Para o caso específico de fluxo na direção X, a vazão específica é dada pela Equação A16.

$$q_x = - \left[ k_{xx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{xy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{xz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad (A16)$$

O fluxo na direção X é dado por três parcelas que dependem cada uma dos gradientes nas três direções dos eixos do sistema de coordenadas. A primeira parcela representa fisicamente o volume de água que é transmitido na direção X por causa da variação da carga nessa direção, a segunda parcela corresponde com

o volume de fluido transmitido na direção X por causa do gradiente na direção Y, e finalmente a terceira parcela corresponde com o volume de fluido transmitido na direção X por causa do gradiente na direção Z. As componentes do tensor de permeabilidade são interpretadas fisicamente como a facilidade com que o fluido é transmitido numa direção por conta da variação do gradiente numa direção determinada. Assim  $k_{xx}$  representa a facilidade com que o fluido é transmitido na direção X por conta do gradiente na direção X, e para  $k_{xy}$  e  $k_{xz}$  a interpretação física é, a facilidade de o fluido ser deslocado na direção X por causa dos gradientes nas direções Y e Z, respectivamente. Resumindo, os fluxos nas três direções do sistema de coordenadas XYZ são:

$$q_x = - \left[ k_{xx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{xy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{xz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad (A17)$$

$$q_y = - \left[ k_{yx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{yy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{yz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad (A18)$$

$$q_z = - \left[ k_{zx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{zy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{zz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad (A19)$$

Empregando a notação indicial, as Equações A17, A18 e A19 podem ser expressas da seguinte forma:

$$q_i = - \left[ k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j} \right] \quad (A20)$$

onde  $i, j = 1, 2, 3$ , sendo  $1=X, 2=Y, 3=Z$ , e  $x_j = X, Y, Z$  dependendo do valor de  $j$ .

Para se considerar o efeito da não saturação no meio poroso, o tensor de permeabilidade  $K_{ij}$  é multiplicado pelo valor  $K_{rw}$  que representa a função de permeabilidade relativa cujo valor varia entre zero e um dependendo do grau de saturação. Desta forma a Equação A20 é modificada para

$$q_i = - \left[ k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j} \right] \quad (A21)$$

Colocando as Equações A13 e A20 na Equação A6, obtém-se a equação diferencial governante do fluxo num meio poroso (contínuo) tridimensional.

$$\left( - \frac{\partial}{\partial x_i} \rho (-k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm \rho Q \right) dx dy dz dt = \left( \rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_w \frac{\partial \psi}{\partial t} S_s \right) dx dy dz dt \quad (A22)$$

Simplificando termos e considerando que a massa específica não varia no espaço, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q = \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (\text{A23})$$

Esta é a equação diferencial referida no Capítulo 4. No caso de considerar o valor de  $S_s$  igual a zero, a Equação A23 se reduz à clássica equação de Richards.

### A.1.2. Fluxo na Fratura

A equação de continuidade do fluido na fratura é obtida empregando o mesmo raciocínio utilizado para o meio poroso. Neste caso, a fratura é modelada como duas placas paralelas separadas por uma distância denominada abertura e simbolizada como  $2b$ . Na Figura A3 mostra-se o volume de referência da fratura e o sistema de coordenadas empregado. Neste caso o fluxo na direção  $Y$  está representado pelos valores  $q_{n/I+}$  e  $q_{n/I-}$ , que correspondem com as vazões específicas que ingressam ou saem do volume de referência (provenientes da matriz) através dos planos  $I^+$  e  $I^-$ .

No Quadro A2 são definidas as parcelas de fluxo para cada direção. No caso da direção  $Y$ , só é considerada a quantidade de fluido que ingressa no volume.

De maneira similar ao problema do meio poroso, a massa de fluido dentro da fratura é representada a partir da porosidade e do grau de saturação ( $n_f, S_{wf}$ ).

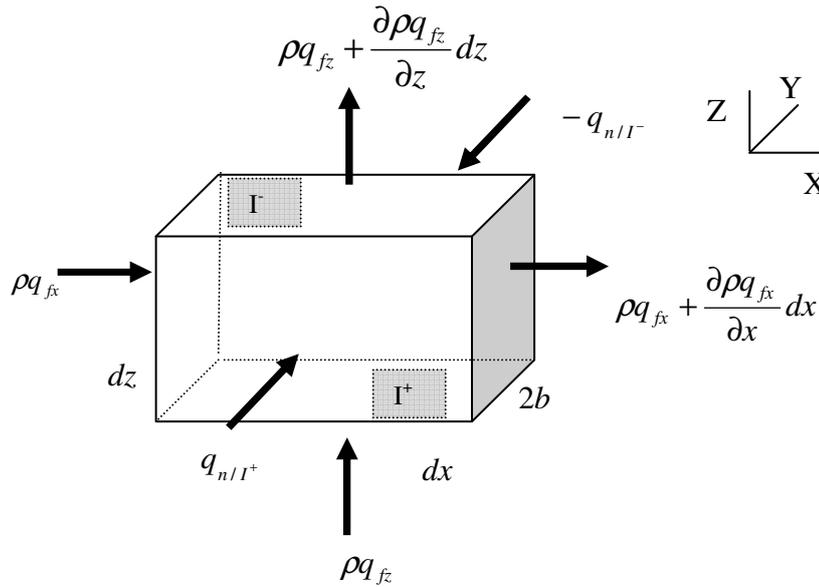


Figura A3. Volume de Referência na Fratura. Fluxo Tridimensional

Quadro A2. Equações do balanço de fluido na fratura

Direção	Fluxo que Entra <sup>1</sup>	Fluxo que Sai <sup>1</sup>	Balanço <sup>2</sup> (Fluxo entra-Fluxo sai)	Massa que entra ou sai <sup>3,4</sup>
X	$\rho q_{fx}$	$\rho q_{fx} + \frac{\partial \rho q_{fx}}{\partial x} dx$	$(\rho q_{fx} - \rho q_{fx} - \frac{\partial \rho q_{fx}}{\partial x} dx) 2bdz$	$-\frac{\partial 2b \rho q_{fx}}{\partial x} dx dz dt$
Y	$\rho q_{n/I^+} - \rho q_{n/I^-}$		$(\rho q_{n/I^+} - \rho q_{n/I^-}) dx dz$	$(\rho q_{n/I^+} - \rho q_{n/I^-}) dx dz dt$
Z	$\rho q_{fz}$	$\rho q_{fz} + \frac{\partial \rho q_{fz}}{\partial z} dz$	$(\rho q_{fz} - \rho q_{fz} - \frac{\partial \rho q_{fz}}{\partial z} dz) 2bdx$	$-\frac{\partial 2b \rho q_{fz}}{\partial z} dx dz dt$

1: massa por unidade de área por unidade de tempo

2: massa por unidade de tempo

3: massa (unidade de massa)

4: a abertura 2b foi incorporada dentro da variação diferencial do fluxo

Na equação A24 se apresenta a equação de continuidade da massa de fluido resultante para a fratura. Nessa equação também são considerados termos fontes  $Q_f$ , definidos como volume de fluido injetado por volume unitário da fratura por tempo.

$$\left(-\frac{\partial \rho 2b q_{fx}}{\partial x} - \frac{\partial \rho 2b q_{fz}}{\partial z} + \rho q_{n/l+} - \rho q_{n/l-} \pm \rho 2b Q_f\right) dx dz dt = 2b \frac{\partial(\rho S_{wf} n_f)}{\partial t} dx dz dt \quad (A24)$$

Desenvolvendo o lado direito da Equação A24, obtém-se uma expressão similar à Equação A12. Isto é mostrado na Equação A25.

$$2b \frac{\partial(\rho S_{wf} n_f)}{\partial t} dx dz dt = 2b \left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_{wf} \frac{\partial \psi}{\partial t} (\rho g (\alpha_f + n_f \beta))\right) dx dz dt \quad (A25)$$

Neste caso, o valor do armazenamento específico é dado pela expressão  $S_{sf} = \rho g \beta$  que resulta da consideração da fratura indeformável e com porosidade unitária ( $n_f = 1$ , e  $\alpha_f = 0$ ). A Equação A25 é reduzida para,

$$2b \frac{\partial(\rho S_{wf} n_f)}{\partial t} dx dz dt = 2b \left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) dx dz dt \quad (A26)$$

Os termos  $q_{fx}$  e  $q_{fz}$  da Equação A24 podem ser expressos a partir da Lei de Darcy. Neste trabalho de tese considera-se que para a fratura são aplicáveis os conceitos de capilaridade e meio contínuo. A mesma expressão da Equação A21 pode ser empregada para determinar os fluxos nas direções X e Z. No caso da fratura, o tensor de permeabilidade terá quatro componentes como mostradas na Equação A27.

$$\begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xz} \\ k_{zx} & k_{zz} \end{bmatrix} \quad (A27)$$

Incorporando a Equação A21 na Equação A24 e considerando que  $i, j = 1, 2$ , sendo  $1=X, 2=Z$ , e  $x_j=X, Z$  dependendo do valor de  $j$ , obtém-se a equação do balanço de massa para a fratura,

$$\left(-\frac{\partial}{\partial x_i} \rho 2b (-k_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + \rho q_{n/l+} - \rho q_{n/l-} \pm \rho 2b Q_f\right) dx dz dt = 2b \left(\rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi}{\partial t}\right) dx dz dt \quad (A28)$$

Simplificando termos e considerando que a massa específica não varia no espaço, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2b k_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/l+} - q_{n/l-} \pm 2b Q_f = 2b \left(\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t}\right) \quad (A29)$$

No caso da fratura, a permeabilidade saturada pode ser calculada a partir de chamada lei cúbica, que no caso de placas paralelas é expressa da seguinte forma:

$$k_f = \rho g \frac{(2b)^2}{12\mu} \quad (\text{A30})$$

onde  $\mu$  corresponde à viscosidade do fluido.

A Equação A29 é a mesma apresentada no Capítulo 4 para descrever o fluxo na fratura. Pode-se notar também que a Equação A29 pode ser vista como um caso particular da Equação A23. Se considerarmos em A29 a abertura unitária ( $2b = 1$ ) e trocarmos o valor do armazenamento específico da fratura pelo valor do meio poroso, obter-se-ia o caso particular de A23 para fluxo bidimensional de um meio poroso. Esta é uma propriedade importante porque permite empregar os algoritmos computacionais do fluxo na fratura, para representar também o fluxo bidimensional no meio poroso.

## **A.2. Equações que descrevem o transporte de vírus**

As equações que descrevem o transporte de vírus na matriz e nas fraturas estão baseadas no conceito da continuidade da quantidade de vírus num volume de referência. As deduções dessas equações são mostradas a seguir.

### **A.2.1. Transporte na Matriz**

Considere o volume de referência mostrado na Figura A4, com dimensões  $dx$ ,  $dy$  e  $dz$ . Agora considere o fluxo acontecendo paralelamente ao eixo X do sistema de coordenadas mostrado na mesma figura, e no sentido indicado pelas setas. Imagine que o fluxo ingressa no volume de referência pelo lado esquerdo e sai pelo lado direito.

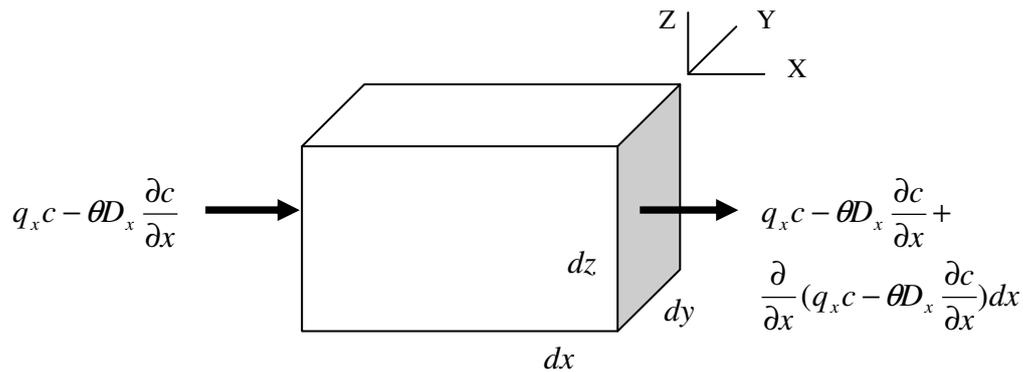


Figura A4. Volume de Referência no meio poroso. Transporte Unidimensional

A quantidade de vírus que ingressa no volume é dada pelo transporte advectivo e pelo transporte dispersivo. O transporte advectivo é dado pela vazão específica  $q_x$  na direção X multiplicada pela concentração dos vírus no fluido (número de vírus por volume unitário de fluido). O produto  $q_x c$  representa a quantidade de vírus que ingressa por unidade de área por unidade de tempo. O transporte dispersivo é dado pela Lei de Fick e representado simbolicamente como  $-\theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}$ , onde  $D_x$  [ $L^2/T$ ] corresponde à dispersão dos vírus no fluido e  $\frac{\partial c}{\partial x}$  à variação da concentração na direção X. O valor  $\theta$  corresponde com o teor de umidade volumétrica. No extremo direito do volume de referência, a quantidade de massa que sai corresponde à massa que ingressou mais um termo adicional que reflete as mudanças dentro do volume de referência. Esse termo adicional pode significar acréscimo ou decréscimo da quantidade de vírus. Em termos matemáticos isto é representado através de um termo diferencial que reflete a variação da quantidade de vírus ao longo da distância  $dx$ , e representado simbolicamente pela expressão  $\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) dx$ . O sinal da derivada indicará se a quantidade de vírus que sai é menor ou maior à quantidade que ingressou. Se considerarmos que o fluxo ocorre nas três direções do nosso sistema de coordenadas, o balanço no volume de referência terá as componentes mostradas na Figura A5.

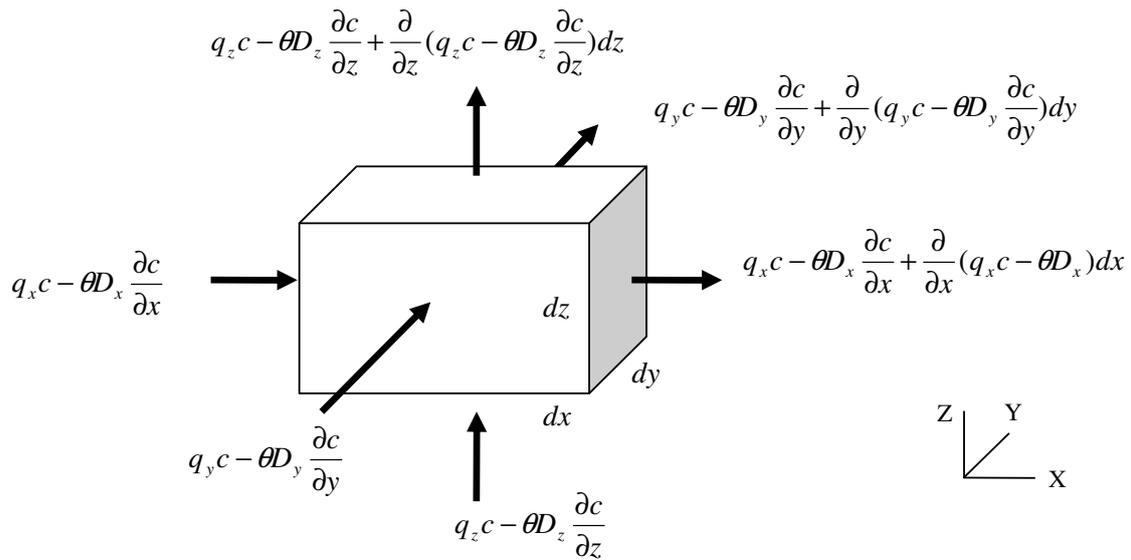


Figura A5. Volume de Referência no Meio Poroso. Transporte Tridimensional

Neste caso existe fluxo de vírus ingressando e saindo nas três direções. Por convenção define-se que a quantidade de vírus que entra é positiva e a que sai é negativa. Para realizar o balanço de massa no volume de referência, simplesmente subtraem-se os fluxos que saem dos fluxos que ingressam no sistema. Bastará multiplicar esse valor pelas áreas e tempos correspondentes para obter a quantidade total de vírus que ingressou ou saiu do sistema. O anunciado anteriormente é colocado em termos matemáticos no Quadro A3.

Quadro A3. Equações do balanço dos vírus na matriz porosa.

Direção	Fluxo <sup>1</sup> que Entra	Fluxo que Sai <sup>1</sup>	Balanço <sup>2</sup> (Fluxo entra-Fluxo sai)	N Vírus que entra ou sai <sup>3</sup>
X	$q_x c$ $- \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}$	$q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x} +$ $\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) dx$	$(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) -$ $\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) dx dy dz$	$-\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})$ $dx dy dz dt$
Y	$q_y c$ $- \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}$	$q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y} +$ $\frac{\partial}{\partial y} (q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}) dy$	$(q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}) -$ $\frac{\partial}{\partial y} (q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}) dy dx dz$	$-\frac{\partial}{\partial y} (q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y})$ $dx dy dz dt$
Z	$q_z c$ $- \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}$	$q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z} +$ $\frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) dz$	$(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) -$ $\frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) dz dx dy$	$-\frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})$ $dx dy dz dt$

1: número de vírus por unidade de área por unidade de tempo

2: número de vírus por unidade de tempo

3: número de vírus

Desta maneira, a quantidade total de vírus que entra ou sai do sistema num determinado intervalo de tempo dt, é dado pela Equação A31.

$$\left[ -\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y} (q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) \right] dx dy dz dt \tag{A31}$$

Se considerarmos o caráter tensorial da dispersão, teremos que essa propriedade pode ser escrita em termos matriciais nas componentes do sistema de coordenadas. Para o caso tridimensional são nove as componentes do tensor, como mostrados na Equação A32.

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (A32)$$

Empregando a notação indicial, a Equação A31 pode ser escrita da seguinte forma,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} - q_i c) dx dy dz dt \quad (A33)$$

As concentrações dos vírus dentro do volume de referência podem ser expressas em relação ao estado em que estes se encontram, isto é, em suspensão na fase líquida, sorvidos nas superfícies sólidas, retidos nos poros menores ou sorvidos na interface água-ar. As concentrações são mostradas a seguir.

Concentração na fase ....	Concentração expressa como: Número de vírus por...	Símbolo
Líquida	Volume unitário de fluido	C
Sólida em sorção em equilíbrio	Unidade de massa do sólido	S <sub>eq</sub>
Sólida em sorção dinâmica	Unidade de massa do sólido	S <sub>din</sub>
Poros menores por filtração mecânica	Unidade de massa do sólido	S <sub>str</sub> <sup>1</sup>
Interface água-ar	Área unitária da interface água-ar	Γ

1: do inglês straining

Se considerarmos adicionalmente que existe inativação de vírus nas diferentes fases acima mencionadas, é possível se definir uma expressão para quantificar o número total de vírus que são inativados. Essa expressão é mostrada na Equação A34.

$$Q_{\mu} dx dy dz dt = (\theta C \mu_l + \rho_b S_{eq} \mu_{eq} + \rho_b S_{din} \mu_{din} + \rho_b S_{str} \mu_{str} + A_{aw} \Gamma \mu_{aw}) dx dy dz dt \quad (A34)$$

Onde  $Q_{\mu}$  representa a soma de todas as parcelas da inativação,  $\rho_b$  [M/L<sup>3</sup>] a massa específica do meio poroso seco (bulk density),  $A_{aw}$  [L<sup>2</sup>/L<sup>3</sup>] a área da interface água-ar por volume unitário do meio poroso, e os coeficientes de inativação [1/T] para cada fase são:  $\mu_l, \mu_{eq}, \mu_{din}, \mu_{str}, \mu_{aw}$ .

A variação do número de vírus dentro do volume de referência pode ser expressa a partir das concentrações em cada fase, como mostrado na Equação A35.

$$\left( \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} \right) dx dy dz dt \quad (A35)$$

Acoplando as Equações A33, A34 e A35 obtém-se a equação de continuidade para os vírus no volume de referência. A equação resultante é:

$$\left[ \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} \right] dx dy dz dt = \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial c}{\partial x_j} - q_i c) - Q_\mu \right] dx dy dz dt \quad (A36)$$

onde  $Q_\mu$  é dado pela Equação A34.

Adicionalmente, para complementar a descrição do transporte dos vírus, se faz necessária a determinação das equações diferenciais auxiliares que descrevem as concentrações nas fases sorvidas e filtradas.

A concentração sorvida em equilíbrio é descrita por uma relação linear como mostrado na equação A37.

$$S_{eq} = K_d C \quad (A37)$$

A variação da concentração sorvida dinamicamente nas superfícies dos sólidos é dada pela diferença entre as quantidades dos vírus que são retirados da fase líquida, menos as quantidades que são liberadas da fase sólida e menos a inativação dos vírus sorvidos. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} dx dy dz dt = (\theta C K_{att} \psi_{att} - S_{din} \rho_b K_{det} - S_{din} \rho_b \mu_{din}) dx dy dz dt \quad (A38)$$

onde  $K_{att}$  [1/T] representa o coeficiente de sorção dinâmico,  $\psi_{att}$  o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção, e  $K_{det}$  [1/T] o coeficiente de desorção.

A variação da concentração filtrada mecanicamente é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (filtrados pelos poros menores) menos as quantidades inativadas dos vírus filtrados. Simbolicamente, o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} dx dy dz dt = (\theta CK_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str}) dx dy dz dt \quad (A39)$$

onde  $K_{str}$  [1/T] representa o coeficiente de filtração e  $\psi_{str}$  o coeficiente adimensional que representa a variação da filtração na distância a partir do ponto de injeção.

A variação da concentração sorvida na interface água-ar é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (retidos na interface), menos as quantidades que são liberadas e menos as quantidades de vírus inativados nessa interface. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} dx dy dz dt = (\theta CK_{aw} \psi_{aw} - A_{aw} \Gamma K_{daw} - A_{aw} \Gamma \mu_{aw}) dx dy dz dt \quad (A40)$$

onde  $K_{aw}$  e  $K_{daw}$  [1/T] representam os coeficientes de sorção e desorção dinâmicos na interface água-ar, e  $\psi_{aw}$  o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção.

Desta forma, o conjunto das Equações A36, A37, A38, A39 e A40 representa o sistema de equações que descrevem o transporte de vírus num meio poroso tridimensional.

### A.2.2. Transporte na Fratura

A equação de continuidade dos vírus na fratura é obtida empregando o mesmo raciocínio utilizado para o meio poroso. Neste caso, a fratura é modelada como duas placas paralelas separadas por uma distância denominada abertura e simbolizada como  $2b$ . Na Figura A6 mostra-se o volume de referência da fratura e o sistema de coordenadas empregado. Neste caso o fluxo na direção Y está representado pelos valores  $\Omega_{n/I^+}$  e  $\Omega_{n/I^-}$  que correspondem com os fluxos de vírus que ingressam ou saem do volume de referência (provenientes da matriz) através dos planos  $I^+$  e  $I^-$ .

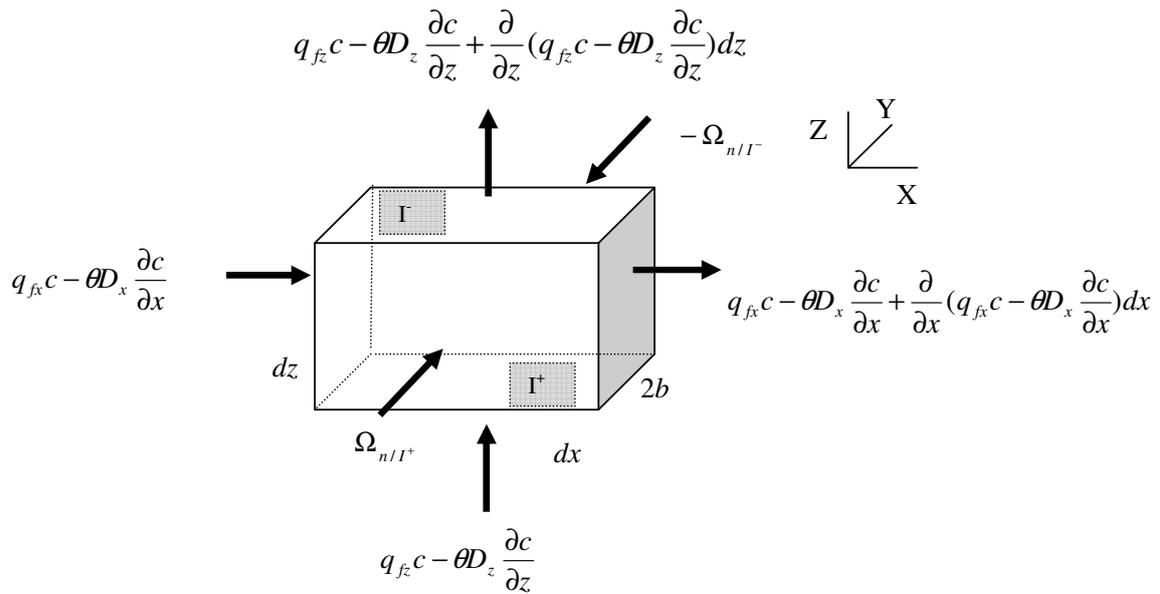


Figura A6. Volume de Referência na Fratura. Transporte Tridimensional

Neste caso existe fluxo de vírus ingressando e saindo nas três direções. Por convenção define-se que a quantidade de vírus que entra é positiva e a que sai é negativa. Para realizar o balanço de massa no volume de referência, simplesmente subtraem-se os fluxos que saem dos fluxos que ingressam. Com isto, é obtida a quantidade de vírus que entra ou sai do sistema por unidade de área por unidade de tempo. Bastará multiplicar esse valor pelas áreas e tempo correspondentes para obter a quantidade total de vírus que ingressou ou saiu do sistema. O anunciado anteriormente é colocado em termos matemáticos no Quadro A4. Nesse quadro são definidas as parcelas de fluxo de vírus para cada direção, e no caso da direção Y só é considerada a quantidade de vírus que ingressa no sistema.

Quadro A4. Equações do balanço dos vírus na fratura.

Direção	Fluxo que Entra <sup>1</sup>	Fluxo que Sai <sup>1</sup>	Balanço <sup>2</sup> (Fluxo entra-Fluxo sai)	Vírus que entra ou sai <sup>3</sup>
X	$q_x c$ $-\theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}$	$q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x} +$ $\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) dx$	$(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) -$ $(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) -$ $\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) dx$	$-\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})$ $2bdxdzdt$
Y	$\Omega_{n/I^+}$ $-\Omega_{n/I^-}$		$(\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}) dx dz$	$(\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-})$ $dx dz dt$
Z	$q_z c$ $-\theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}$	$q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z} +$ $\frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) dz$	$(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) -$ $(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) -$ $\frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) dz$	$-\frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})$ $2bdxdzdt$

1: número de vírus por unidade de área por unidade de tempo

2: número de vírus por unidade de tempo

3: número de vírus

A quantidade total de vírus que entra ou sai do sistema num determinado intervalo de tempo dt é dada pela Equação A41.

$$\left[ 2b \left( -\frac{\partial}{\partial x} (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial z} (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) \right) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-} \right] dx dz dt \quad (A41)$$

Se considerarmos o caráter tensorial da dispersão, essa propriedade pode ser escrita em termos matriciais nas componentes do sistema de coordenadas. Para o caso de uma fratura são quatro as componentes do tensor, como mostrado na Equação A42.

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xz} \\ D_{zx} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad (A42)$$

Empregando a notação indicial, a equação A41 pode ser escrita da seguinte forma:

$$\left[ 2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_{fi} c_f) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-} \right] dx dz dt \quad (A43)$$

com i,j=1,2, e o subíndice f refere-se à fratura.

As concentrações dos vírus dentro do volume de referência podem ser expressas em relação ao estado em que estes se encontram. Os vírus podem ser encontrados nas seguintes formas: em suspensão na fase líquida, sorvidos nas superfícies da fratura, retidos nos poros menores (isto representaria o caso de abertura variável), ou sorvidos na interface água-ar. As concentrações são mostradas a seguir.

Concentração na fase ...	Concentração expressa como: número de vírus por...	Símbolo
Líquida	Volume unitário de fluido	$C_f$
Sólida em sorção em equilíbrio	Área unitária da fratura	$S_{eqf}$
Sólida em sorção dinâmica	Área unitária da fratura	$S_{dinf}$
Poros menores por filtração mecânica	Área unitária da fratura	$S_{strf}^{-1}$
Interface água-ar	Área unitária da interface água-ar	$\Gamma_f$

1: do inglês straining

Se considerarmos adicionalmente que existe inativação dos vírus nas diferentes fases acima mencionadas, é possível se definir uma expressão para quantificar o número total de vírus inativados. Essa expressão é mostrada na Equação A44.

$$2bQ_{\mu f} dx dz dt = 2b(\theta C_f \mu_{lf} + S_{eqf} A_s \mu_{eqf} + S_{dinf} A_s \mu_{dinf} + S_{strf} A_s \mu_{strf} + A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf}) dx dz dt \tag{A44}$$

onde  $Q_{\mu f}$  representa a soma de todas as parcelas da inativação,  $A_s$  a área das superfícies sólidas por volume unitário da fratura (no caso de placas paralelas  $A_s = \frac{2}{2b}$ ),  $A_{awf}$  a área da interface água-ar por volume unitário da fratura, e os coeficientes de inativação [1/T] para cada fase são:  $\mu_{lf}, \mu_{eqf}, \mu_{dinf}, \mu_{strf}, \mu_{awf}$ .

A variação do número de vírus dentro do volume de referência pode ser expressa a partir das concentrações em cada fase, como mostrado na Equação A45.

$$2b\left(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t}\right) dx dz dt \quad (A45)$$

Acoplando as equações A43, A44 e A45, obtém-se a equação de continuidade para os vírus no volume de referência. A equação resultante é:

$$2b\left(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t}\right) dx dz dt = \left[ 2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_{fi} c_f) + \Omega_{n/l^+} - \Omega_{n/l^-} - 2b Q_{\mu f} \right] dx dz dt \quad (A46)$$

onde  $2b Q_{\mu f}$  é dado pela Equação A44.

Adicionalmente, para complementar a descrição do transporte de vírus, se faz necessária à determinação das equações diferenciais auxiliares que descrevem a variação da concentração nas fases sorvidas e filtradas.

A concentração sorvida em equilíbrio é descrita por uma relação linear como mostrado na equação A47.

$$S_{eqf} = K_{df} C_f \quad (A47)$$

No caso da fratura, o coeficiente  $K_{df}$  é definido como o coeficiente de distribuição na fratura com unidades  $[L^3 / L^2]$ .

A variação da concentração sorvida dinamicamente nas superfícies da fratura é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida, menos as quantidades liberadas das superfícies e menos a inativação dos vírus sorvidos. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma,

$$2b \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} dx dz dt = 2b(\theta C_f K_{atf} \psi_{atf} - S_{din f} A_s K_{def} - S_{din f} A_s \mu_{din f}) dx dz dt \quad (A48)$$

onde  $K_{atf}$  [1/T] representa o coeficiente de sorção dinâmico,  $\psi_{atf}$  o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção e  $K_{def}$  [1/T] o coeficiente de desorção dinâmico.

A variação da concentração filtrada mecanicamente é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (filtrados pelos

poros menores) menos as quantidades inativadas dos vírus filtrados. Simbolicamente, o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$2b \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} dx dz dt = 2b(\theta C_f K_{strf} \psi_{strf} - A_s S_{strf} \mu_{strf}) dx dz dt \quad (A49)$$

onde  $K_{str}$  [1/T] representa o coeficiente de filtração, e  $\psi_{str}$  o coeficiente adimensional que representa a variação da filtração na distância a partir do ponto de injeção.

A variação da concentração sorvida na interface água-ar é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (retidos na interface), menos as quantidades liberadas e menos as quantidades de vírus inativados nessa interface. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma,

$$2b \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} dx dz dt = 2b(\theta C_f K_{awf} \psi_{awf} - A_{awf} \Gamma_f K_{dawf} - A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf}) dx dz dt \quad (A50)$$

onde  $K_{awf}$  e  $K_{dawf}$  [1/T] representam os coeficientes de sorção e desorção dinâmicos na interface água-ar, e  $\psi_{awf}$  o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção.

Desta forma, o conjunto das equações A46, A47, A48, A49 e A50 representa o sistema de equações que descrevem o transporte de vírus numa fratura tridimensional, e são as mesmas apresentadas no Capítulo 4.

## **APÊNDICE B: Método dos Volumes Finitos (MVF)**

### **B.1. Generalidades do MVF**

As equações diferenciais podem ser resolvidas através de métodos analíticos ou através de métodos numéricos. A aplicação dos métodos analíticos permite obter a solução exata da equação. Porém, a aplicação dessas técnicas está restrita a geometrias simples e condições de contorno também simples. Os métodos numéricos por outro lado, fornecem soluções aproximadas das equações diferenciais, mas permitem a resolução de problemas com geometrias e condições de contorno mais complexas. A utilidade das soluções analíticas está na validação matemática das soluções numéricas e na análise dos problemas de baixa complexidade.

Os métodos numéricos tradicionalmente empregados na engenharia são: Método das Diferenças Finitas, Método dos Elementos Finitos e Método dos Volumes Finitos. A diferença entre eles está na maneira como o domínio do problema é discretizado. Existe ampla literatura sobre os diferentes métodos, e neste apêndice será descrito de maneira geral o Método dos Volumes Finitos (MVF) também conhecido como Método do Volume de Controle (MVC).

A idéia básica do MVF é descrita a seguir (baseado em Patankar, 1980): sobre o domínio do problema é construída inicialmente uma malha de nós que definem os pontos nos quais os valores da solução numérica são obtidos. O domínio do problema é a seguir dividido num determinado número de volumes de controle não sobrepostos, de maneira tal que cada volume de controle esteja localizado ao redor de cada nó da malha. A equação diferencial é integrada sobre cada volume de controle de maneira tal que o princípio de conservação seja garantido dentro do volume. Desta forma, o balanço da quantidade física sob estudo (seja, massa, quantidades de movimento, energia) é satisfeito de maneira exata individualmente para cada volume e portanto para todo o domínio.

Em dependência da maneira como os volumes de controle são construídos, três variantes do MVF são reconhecidas (como explica Maliska, 2004).

- Método Baseado em coordenadas curvilíneas (boundary-fitted coordinates ou body-fitted): este método utiliza o sistema de coordenadas para definir a forma do volume de controle. Neste caso o sistema de coordenadas coincide com a fronteira do domínio e os contornos dos volumes de controle coincidem com linhas de isovalores das coordenadas.

- Método Baseado em Elementos: Neste caso os volumes de controle são construídos a partir de elementos que discretizam o domínio, sejam triângulos, tetraedros, etc. Os contornos do volume de controle neste caso podem ser irregulares e não necessariamente serem paralelos aos eixos do sistema de coordenadas.

-Métodos Baseados em Diagramas de Voronoi: Neste caso os volumes de controle são construídos a partir de uma triangulação de Delaunay.

Nesta pesquisa foi empregado o Método baseado em Elementos. Este método é também conhecido na literatura como Volumes Finitos baseados em Elementos (element-based Finite Volume Methods) e também como Elementos Finitos Baseados no Volume de Controle (Control Volume-based Finite Element Methods). A associação com o MEF surge porque os volumes de controle são construídos a partir das malhas de elementos finitos, e especialmente porque os dois métodos empregam as mesmas funções de interpolação (exceção à interpolação dos termos advectivos). Isto é, a variação espacial da variável primária é descrita pelas funções de interpolação de cada elemento, e adicionalmente os contornos do volume de controle são definidos a partir da geometria dos elementos finitos. Quando o valor da variável primária é armazenado no centróide do elemento finito (ou célula de discretização) se diz que o esquema de discretização é baseado na célula (cell-based or cell centered scheme), neste caso o elemento finito é o próprio volume de controle. Quando o valor da variável primária é armazenado no nó, se diz que o esquema é baseado no nó ou no vértice (vertex-based or vertex centered scheme). Nesta pesquisa, o

esquema empregado foi baseado no vértice. Na Figura B1 se apresentam os esquemas mencionados.

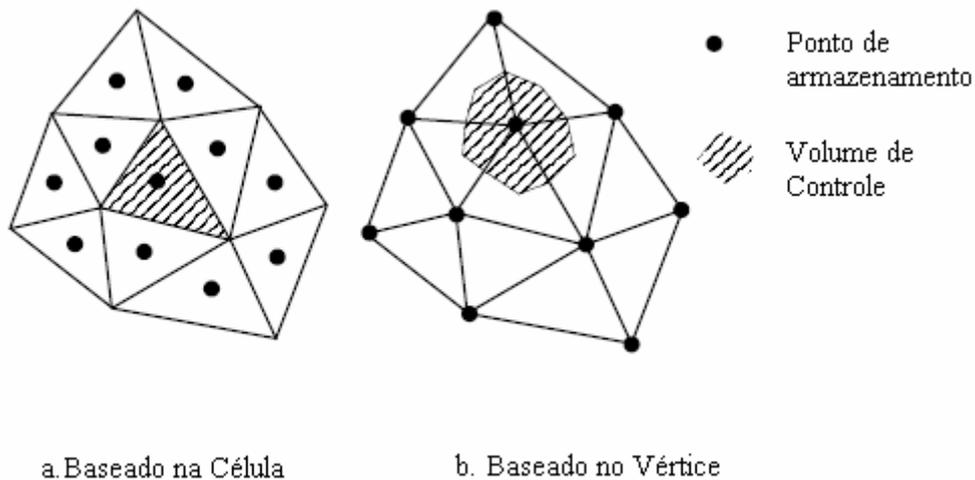


Figura B1. Esquema de armazenamento (modificado de Barth T. e Ohlberger, 2004)

Assim, o esquema a seguir descrito corresponde ao Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos empregando o esquema baseado no vértice.

Na Figura B2 é mostrado um domínio retangular discretizado em nove nós unidos por oito elementos triangulares. Na mesma figura é mostrada uma zona sombreada que representa o volume de controle para o nó 1. Esse volume de controle é construído a partir da soma das parcelas em cada elemento (subvolumes). A construção do volume de controle pode ser feita de diferentes maneiras. Nesta pesquisa, para problemas bidimensionais o domínio foi discretizado com elementos triangulares de três nós. Os volumes de controle foram construídos a partir da união do baricentro de cada triângulo com os pontos médios dos segmentos que definem o contorno do elemento. No caso de problemas tridimensionais foram empregados tetraedros de quatro nós para discretizar o domínio. Os volumes de controle foram construídos, de maneira similar, unindo o baricentro do tetraedro com os baricentros dos triângulos que definem o contorno do elemento. Nas Figuras C1 e D1 dos Apêndices C e D são mostrados os volumes de controle construídos para cada tipo de elemento.

O valor da variável primária armazenada no nó é considerado como o valor representativo de todo o volume de controle. No caso da Figura B2, o valor armazenado no nó 1 será o valor representativo de toda a zona sombreada.

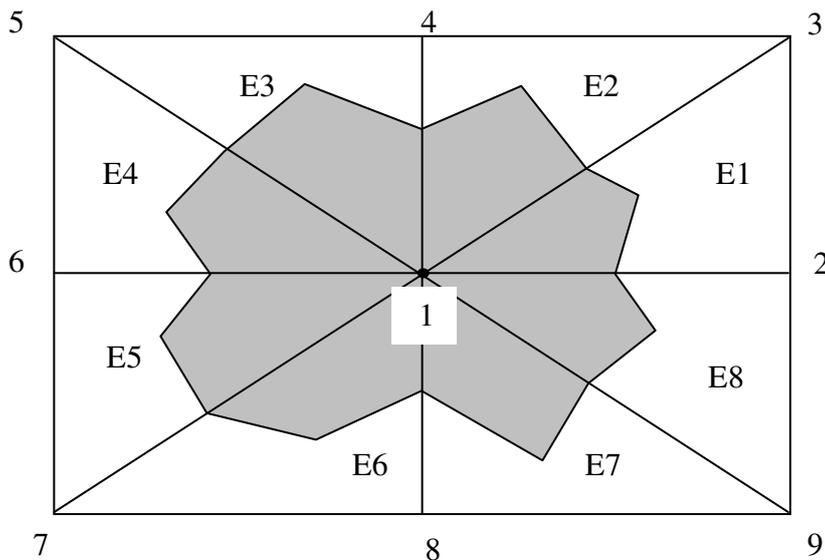


Figura B2. Volume de Controle e subvolumes de controle para o nó 1.

Quando aplicado um método numérico, a equação governante do problema é substituída por um sistema de equações que aproximam a solução exata (isto é, se obterá um sistema de equações discretizadas). Essas equações discretizadas devem manter a conservação da quantidade física sob estudo (vale ressaltar que essa quantidade não é necessariamente a variável primária). Essas equações aproximadas podem ser obtidas de duas maneiras:

- Realizar diretamente o balanço da quantidade sob estudo para cada volume de controle.
- Integrar a equação governante no volume de controle. Esta integração é realizada para cada volume de controle de maneira independente. Por este motivo, esta integração é normalmente classificada como sendo um método de resíduos ponderados, onde o valor da função peso tem valor unitário naquele volume de controle e valor zero nos outros volumes. Para cada volume de controle é montada uma equação aproximada que responde à integração naquele volume. Isto implica que a integral do resíduo naquele volume é nula, isto é, a equação resultante deve manter a conservação da quantidade física sob estudo. Para manter a conservação ou continuidade, a equação diferencial do problema

deve ser integrada empregando o teorema do divergente. Esta maneira de aproximar as equações discretizadas é também conhecida como Método de Colocação por Subdomínio. Em alguns livros de texto esta forma de integração é colocada como um método alternativo de integração em Elementos Finitos (Huyakorn e Pinder, 1983).

Nesta pesquisa, as equações discretizadas foram construídas a partir da utilização do método de integração ponderada. A aplicação do método é demonstrada a seguir para um problema simples, empregando a discretização da Figura B2.

Considere a Equação B1 que representa o fluxo de água bidimensional em estado permanente em condição saturada.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial h}{\partial y} \right) = 0 \quad (\text{B1})$$

a integração do resíduo ponderado desta equação é,

$$\int_A W_1 \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial h}{\partial y} \right) \right] dA = 0 \quad (\text{B2})$$

onde  $W_1$  é a função de ponderação com valor igual a um no volume de integração e zero nos outros volumes. O valor  $A$  é a área resultante de um volume com espessura unitária  $V=1 \cdot A$ . A Equação B2 é transformada para:

$$\int_A \left[ \frac{\partial}{\partial x} \left( k \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left( k \frac{\partial h}{\partial y} \right) \right] dA = 0 \quad (\text{B3})$$

A partir de (B3) observa-se que a integral da equação do problema deve ser zero, isto é, a continuidade deve ser garantida naquele volume de integração. Aplicando o teorema do divergente em (B3), obtém-se uma nova integral que leva em conta as direções dos fluxos.

$$\int_S \left[ k \frac{\partial h}{\partial x} n_x + k \frac{\partial h}{\partial y} n_y \right] dS = 0 \quad (\text{B4})$$

onde  $S$  representa a área do contorno do volume de controle (no caso da Figura B2, o comprimento dos segmentos de reta que definem o contorno do volume de controle do nó 1) e  $n_x$  e  $n_y$  as componentes do vetor normal para fora do domínio aplicado em cada segmento do contorno do volume. A Equação B4

não é outra coisa que a determinação dos fluxos através do contorno do volume, com sinal dado pelo vetor normal. Esse sinal indica se o fluxo é para dentro ou para fora do volume.

Se aplicarmos (B4) para obter a equação discretizada no volume de controle do nó 1 da Figura B2, resulta uma equação em termos dos valores das cargas nodais dos nós 1 até 9. A forma genérica desta equação 1 é mostrada a seguir:

$$G_1 h_1 = G_2 h_2 + G_3 h_3 + G_4 h_4 + G_5 h_5 + G_6 h_6 + G_7 h_7 + G_8 h_8 + G_9 h_9 \quad (B5)$$

Os valores G são fatores numéricos resultantes da integração. Neste apêndice não é mostrada a maneira de obter os valores de G em B5. A aplicação da integração com o MVF é mostrada em detalhe nos Apêndices C, D, E e F. Essa integração consiste basicamente na determinação das quantidades de fluido que são transferidas entre os volumes de controle. No caso do exemplo da Figura B2, é a transferência de fluido entre o volume do nó 1 e os volumes de controle dos nós 2 até 9. As grandezas h em B5 correspondem aos valores da variável primária (carga).

A Equação B5 deve respeitar as quatro regras básicas do MVF. Essas quatro regras básicas são descritas em Patankar (1980) e reproduzidas a seguir.

Regra 1: Consistência dos Fluxos nas Interfaces: Os fluxos através das faces compartilhadas por volumes de controle adjacentes devem estar representados pela mesma expressão nas equações discretizadas. O sentido físico desta regra é claro. Os valores dos fluxos que atravessam as faces devem ser os mesmos. Matematicamente isto significa que as funções que descrevem as variações no espaço da variável primária dentro dos volumes de controle adjacentes, devem ter o mesmo valor na interface, isto é, representadas pela mesma equação.

Regra 2: Coeficientes Positivos: Como mostrado em (B5), o valor da variável primária no nó 1 é aproximado a partir da combinação dos valores nos nós em conectividade com ele. O sinal dos coeficientes G (na Equação B5) deve responder ao sentido físico do problema. Nos problemas de fluxo e transporte, a informação é transmitida entre os nós através dos processos advectivos e dispersivos. Em presença dos efeitos puramente dispersivos, a informação do nó 1 é transmitida em todas as direções, isto é, para todos os nós com os quais tem

contato. Desta forma, um aumento no valor da concentração (por exemplo) no nó 1 induz um aumento na concentração nos nós vizinhos. Se  $G_1$  for positivo, então  $G_2$  a  $G_9$  também devem ser positivos. No caso de efeitos advectivos, se considerarmos que na Figura B1 existe um fluxo horizontal da esquerda para a direita, a informação do nó 1 poderá ser transmitida apenas ao nó de número 2. Isto é, um acréscimo na concentração em 1 significa um acréscimo na concentração em 2. Se  $G_1$  for positivo então  $G_2$  deve ser positivo. Do anterior resulta claro que o sinal dos coeficientes na Equação B5 reflete os efeitos do fenômeno físico. Os coeficientes  $G_1$  a  $G_9$  devem ter o mesmo sinal. Se escolhermos uma discretização que gere sinais positivos, então a regra pode ser escrita da seguinte maneira: *Todos os coeficientes ( $G_1$  e os seus vizinhos  $G_n$ ) devem ser sempre positivos*. O contrário é também válido para sinais negativos.

Regra 3: Somatório dos Coeficientes Vizinhos: Na ausência de termos fontes, a soma dos coeficientes deve respeitar:

$$G_1 = \sum_{n=2}^9 G_n \quad (\text{B6})$$

alternativamente,

$$\frac{\sum_{n=2}^9 G_n}{G_1} = 1 \quad (\text{B7})$$

Sendo que o valor da variável primária no nó 1 é obtido a partir da ponderação dos valores nos nós vizinhos, o valor  $G_1$  deve ser igual à soma das contribuições individuais de cada nó. Outra maneira de explicar isto é supor que o valor da variável primária em todos os nós vizinhos é igual, então na ausência de termos fontes o valor no nó 1 deverá ser o mesmo dos vizinhos (Patankar,1980). Esta regra não é respeitada quando são incorporados termos fontes linearizados com coeficiente positivo, como mostrado na Regra 4.

Regra 4: Linearização do Termo Fonte com Coeficiente Negativo: No MVF quando considerados termos fontes, é prática comum a linearização em função do valor da variável primária. Em alguns problemas o termo fonte depende fisicamente de variável primária. No MVF essa linearização é feita para diminuir

a possibilidade da divergência e melhorar a convergência da solução. Seja  $Q$  um termo fonte na Equação B1, a linearização pode ser colocada da maneira seguinte:

$$Q = Q_c + Q_p h_1 \quad (\text{B8})$$

onde  $Q_c$  e  $Q_p$  são constantes. Incorporando (B8) em (B5), a equação resultante é:

$$G_1' h_1 = G_2 h_2 + G_3 h_3 + G_4 h_4 + G_5 h_5 + G_6 h_6 + G_7 h_7 + G_8 h_8 + G_9 h_9 + Q_c \Delta l \quad (\text{B9})$$

onde  $\Delta l$  é um fator geométrico que considera a área de atuação da fonte, e  $G_1' = G_1 - Q_p \Delta l$ .

Resulta claro que  $G_1' \neq \sum_{n=2}^9 G_n$ , quer dizer, a Equação B9 não cumpre com a Regra 3. Apesar de (B9) estar corretamente colocada do ponto de vista matemático, pode apresentar problemas na realidade física do problema. Se a constante  $Q_p$  aumentar de valor tal que  $G_1'$  seja negativo, a Regra 2 será quebrada. Para manter a consistência física do problema, a constante  $Q_p$  deve ser mantida negativa. Com isto,  $G_1'$  mantém o mesmo sinal que  $G_2$  a  $G_9$ . A Regra 4 pode ser escrita da seguinte forma: *quando um termo fonte for linearizado na forma  $Q = Q_c + Q_p h_1$ , o coeficiente  $Q_p$  dever ser sempre mantido negativo ou igual a zero.*

## B.2. Interpolação e Fluxos nas Interfaces

Para a construção das equações discretizadas, é necessária a determinação dos fluxos nas faces dos volumes de controle. Os fluxos nas interfaces são funções dos gradientes da variável primária e dos valores dos parâmetros do material. Esses valores são armazenados nos nós, devendo serem calculados nas interfaces a partir da interpolação dos valores nodais. Desta forma, nas interfaces dos volumes de controle são determinados os gradientes e as propriedades de transmissão representativas daquela interface, por exemplo, permeabilidade, dispersão, velocidade, etc. Para determinar os valores das interfaces, é necessário definir a maneira como os valores da variável variam no espaço. Quer dizer, precisamos definir um perfil da variação desta variável no espaço. Para a

determinação das propriedades do material na interface será necessário ponderar os valores desta propriedade.

O perfil da variação no espaço da variável é obtido a partir de uma função de interpolação. Existem diferentes tipos de função de interpolação. O tipo de função a ser empregado dependerá da variante do método do volume de controle que esteja sendo utilizada. Maliska (2004) apresenta uma descrição bastante completa dos diferentes tipos de interpolação disponíveis no método das coordenadas curvilíneas, para problema 1D, 2D e 3D. Uma aplicação da interpolação nos diagramas de Voronoi pode ser estudada em Maliska (2004). Uma publicação disponível na internet, embora com uma terminologia mais matemática, é a apresentada por Mishev( ) para diagramas de Voronoi.

Nesta pesquisa foi usado o Método Baseado em Elementos. Neste método, a interpolação da variável primária é definida para cada elemento. Isto é, dentro de cada elemento pode ser empregada uma função de interpolação diferente. Neste trabalho de tese, foram empregadas as mesmas funções de interpolação para todos os elementos. Para representar as variações nas cargas de pressão e nas concentrações nos termos dispersivos, foram empregadas funções de interpolação linear para obter os valores nas interfaces dos volumes de controle. Para representar as concentrações nos termos advectivos da equação, foi utilizada uma função de interpolação exponencial, descrita em detalhe no Apêndice H. Esta função de interpolação tem sido empregada em problemas de fluxo bidimensional com resultados satisfatórios (Abbassi et al, 2003).

As propriedades nas interfaces são importantes para se obter uma discretização adequada. Sendo que a interface entre dois volumes de controle corresponde ao contato entre dois materiais com propriedades diferentes, é necessário também se definir a maneira como essa propriedade é calculada na interface. Existem basicamente três maneiras de se obter esse valor, através da média harmônica, da média linear (variação linear entre os nós vizinhos) e através da média integrada (no caso da propriedade depender da variável primária, a propriedade é integrada considerando a variação da variável primária no espaço). Neste trabalho de pesquisa optou-se por manter as mesmas funções de interpolação lineares acima mencionadas, e foram integradas ao longo do contorno do volume de controle. Desta forma, os valores no contorno resultam da

integração da interpolação a partir dos valores nodais. Comparações de resultados empregando diferentes tipos de ponderação podem ser vistas em Brunone et al (2003) e Sasic et al (2004).

### **B.3. Condições de Contorno**

Para o método centrado no vértice, as bordas do domínio do problema também coincidem com o contorno dos volumes de controle nelas localizados. As faces dos volumes de controle localizadas no contorno do domínio são tratadas da mesma maneira como são tratadas as outras faces localizadas dentro do domínio. Se o valor do fluxo no contorno é conhecido, basta somar esse valor à equação discretizada, da mesma forma como é tratado no MEF. Quando esse valor de fluxo não é conhecido, então uma discretização desse fluxo em termos dos valores nodais deverá ser adicionada à equação discretizada. Portanto condições tipo Dirichlet, Neuman, Superfície Livre ou Cauchy são facilmente incorporadas na formulação. Nos Apêndices C, D, E e F é mostrado o detalhe da incorporação das condições de contorno nos problemas de fluxo e transporte.

## APÊNDICE C: Solução Numérica – Equação de Fluxo na Matriz

A equação que descreve o fluxo de água na matriz foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice C é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é,

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q = \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (C1)$$

Os índices  $i, j$  variam de 1 a 3, e indicam as direções  $x_1, x_2$  e  $x_3$  do sistema de coordenadas.

### C.1. Construção do Volume de Controle

Para a discretização espacial do domínio das matrizes porosas foram empregados elementos tetraédricos. A construção dos volumes de controle foi feita a partir da geometria dos tetraedros. Nas Figuras C1 e C2 é apresentado o contorno do subvolume de controle para o nó  $i$ . O contorno é definido por planos internos localizados dentro do elemento e por planos externos localizados na superfície do elemento.

Os planos internos foram denominados  $S_{ij}$ ,  $S_{ik}$  e  $S_{il}$ . O plano  $S_{ij}$  é delimitado pelos pontos (a,b,e,g), o plano  $S_{ik}$  pelos pontos (b,c,f,g) e o plano  $S_{il}$  pelos pontos (d,e,f,g).

Os pontos (a), (c), e (d) correspondem com o centro dos segmentos  $\overline{Nói - Nój}$ ,  $\overline{Nói - Nók}$  e  $\overline{Nói - Nól}$ , respectivamente. Os pontos (e) e (f) correspondem com o baricentro dos triângulos  $Nóijl$  e  $Nóikl$ , respectivamente. O ponto (g) corresponde com o baricentro do tetraedro.

Os planos externos foram denominados  $S_1$ ,  $S_2$  e  $S_3$ . O plano  $S_1$  é delimitado pelos pontos (Nói,a,b,c), o plano  $S_2$  pelos pontos (Nói,c,d,f) e o plano  $S_3$  pelos pontos (Nói,a,d,e), como mostrado na Figura C2.

Nas Figuras C1 e C2 são também mostradas as componentes dos vetores normais para cada plano.

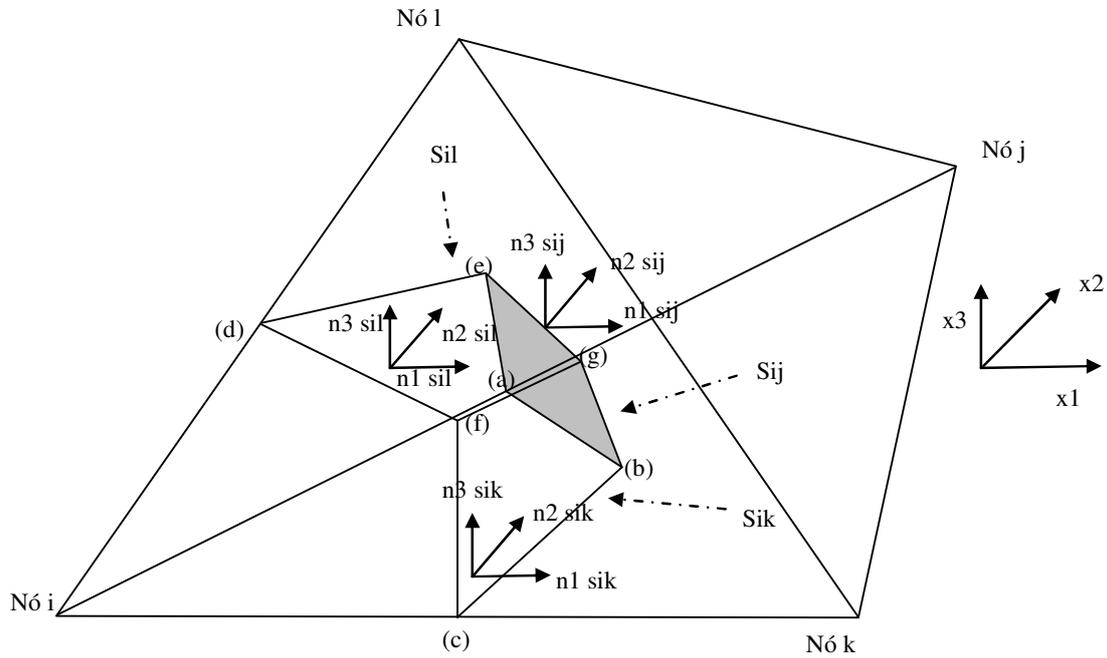


Figura C1. Subvolume de controle para o nó i, planos internos.

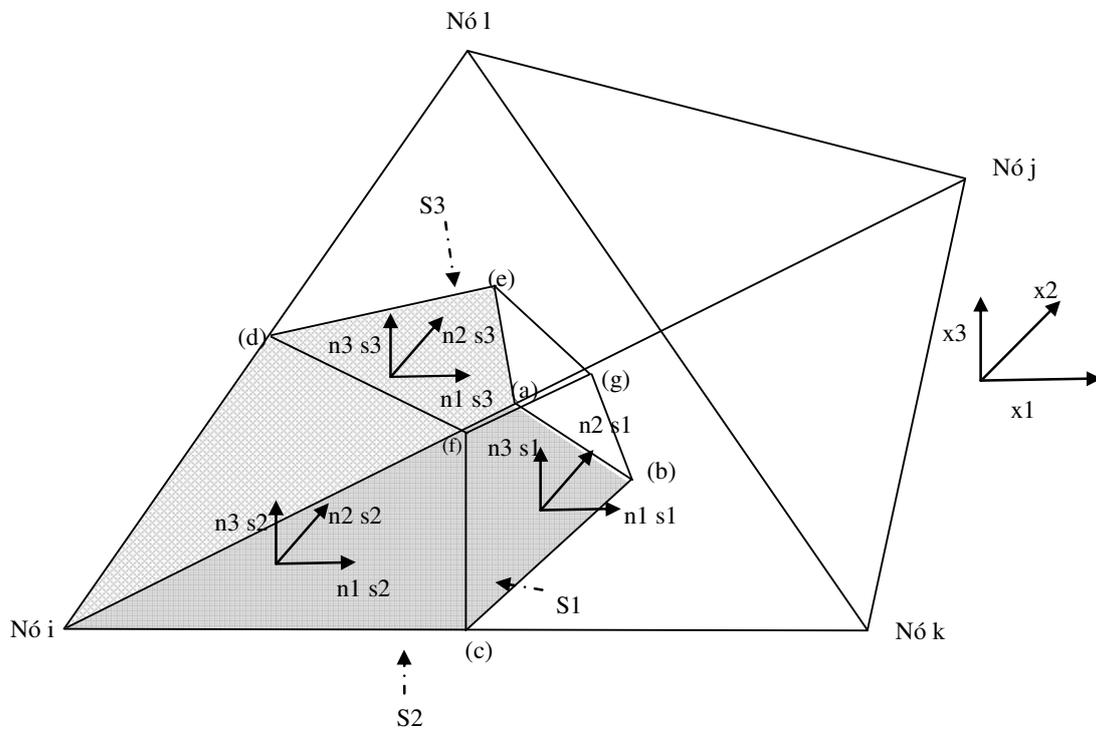


Figura C2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.

## C.2. Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação C1 no subvolume do nó  $i$  das Figuras C1 e C2.

A integração ponderada da Equação C1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_V W_1 \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q - \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] dV = 0 \quad (C2)$$

$W_1$  é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então,

$$\int_V \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q - \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] dV = 0 \quad (C3)$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura C1, a integral anterior é transformada para,

$$\begin{aligned} & \int_V \left[ \pm Q - \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] dV + \\ & \int_{S_{ij}} \left( k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi + z) \right) n_{isij} ds_{ij} + \\ & \int_{S_{ik}} \left( k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi + z) \right) n_{isik} ds_{ik} + \\ & \int_{S_{il}} \left( k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi + z) \right) n_{isil} ds_{il} = 0 \end{aligned} \quad (C4)$$

Considerando que a carga total pode ser definida em qualquer ponto dentro do elemento a partir de interpolação linear dos valores nodais, obtém-se a seguinte expressão:

$$h_t = \psi + z \approx N_m (\psi'_m + z_m) \quad (C5)$$

Onde  $(\psi'_m + z_m)$  representam os valores das cargas de pressão e de elevação nos pontos nodais, e a variável  $N_m$ , o valor da função de interpolação. Empregando C5, a equação C4 é transformada para

$$\begin{aligned}
& \int_V \left[ \pm Q - \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \right) \right] dV + \\
& \int_{S_{ij}} \left[ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_m + z_m)) n_{isij} \right] ds_{ij} + \\
& \int_{S_{ik}} \left[ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_m + z_m)) n_{isik} \right] ds_{ik} + \\
& \int_{S_{il}} \left[ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_m + z_m)) n_{isil} \right] ds_{il} = 0
\end{aligned} \tag{C6}$$

Integrando C6 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os planos internos do subvolume de controle do nó i.

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} + F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} - A \psi'_m = Q_m + A z_m \tag{C7}$$

(Observação: a partir deste ponto os índices i,j,k, são associados aos nós i,j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de C7 são detalhadas a seguir.

$$F_1 = \int_V dV = \frac{V_E}{4} \tag{C8}$$

$$F_2 = \int_V \left[ (S_w S_s) \right] dV = (S_{wi} S_s) \frac{V_E}{4} \tag{C9}$$

onde i indica nó i,  $V_E$  volume do elemento,  $S_w$  saturação e  $S_s$  armazenamento específico.

$$Q_m = \int_V \left[ \pm Q \right] dV = \left[ \pm Q \right] \frac{V_E}{4} \tag{C10}$$

$$\begin{aligned}
A &= \int_{S_{ij}} \left[ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isij} ds_{ij} + \int_{S_{ik}} \left[ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isik} ds_{ik} + \int_{S_{il}} \left[ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isil} ds_{il} = \right. \right. \\
&= \left. \left. \begin{aligned} &\sum_{n=1}^3 S_n \left[ \left( K11_{S_n} b_i + K12_{S_n} c_i + K13_{S_n} d_i \right) n_{1S_n} + \left( K21_{S_n} b_i + K22_{S_n} c_i + K23_{S_n} d_i \right) n_{2S_n} + \right. \\ &\left. \left( K31_{S_n} b_i + K32_{S_n} c_i + K33_{S_n} d_i \right) n_{3S_n} \right] \\ &\sum_{n=1}^3 S_n \left[ \left( K11_{S_n} b_j + K12_{S_n} c_j + K13_{S_n} d_j \right) n_{1S_n} + \left( K21_{S_n} b_j + K22_{S_n} c_j + K23_{S_n} d_j \right) n_{2S_n} + \right. \\ &\left. \left( K31_{S_n} b_j + K32_{S_n} c_j + K33_{S_n} d_j \right) n_{3S_n} \right] \\ &\sum_{n=1}^3 S_n \left[ \left( K11_{S_n} b_k + K12_{S_n} c_k + K13_{S_n} d_k \right) n_{1S_n} + \left( K21_{S_n} b_k + K22_{S_n} c_k + K23_{S_n} d_k \right) n_{2S_n} + \right. \\ &\left. \left( K31_{S_n} b_k + K32_{S_n} c_k + K33_{S_n} d_k \right) n_{3S_n} \right] \\ &\sum_{n=1}^3 S_n \left[ \left( K11_{S_n} b_l + K12_{S_n} c_l + K13_{S_n} d_l \right) n_{1S_n} + \left( K21_{S_n} b_l + K22_{S_n} c_l + K23_{S_n} d_l \right) n_{2S_n} + \right. \\ &\left. \left( K31_{S_n} b_l + K32_{S_n} c_l + K33_{S_n} d_l \right) n_{3S_n} \right] \end{aligned} \right] \tag{C11}
\end{aligned}$$

$$\psi'_m = [\psi'_i \quad \psi'_j \quad \psi'_k \quad \psi'_l] \tag{C12}$$

$$z_m = [z_i \quad z_j \quad z_k \quad z_l] \tag{C13}$$

Os valores  $S_n$  em C11 representam as áreas dos planos internos. O subíndice  $n$  assume valores  $n = 1$  no plano  $ij$ ,  $n = 2$  no plano  $ik$ , e  $n = 3$  no plano  $il$ . O símbolo  $s_n$ , quando usado como subíndice em C11, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_n$  correspondente.

As constantes  $b_i, b_j, b_k, b_l, c_i, c_j, c_k, c_l, d_i, d_j, d_k, d_l$  em C11, correspondem às derivadas das funções de interpolação de cada nó em relação ao sistema de coordenadas. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 b_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E} \\
 b_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E} \\
 b_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E} \\
 b_l &= \frac{\partial N_l}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_l &= \frac{\partial N_l}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_l &= \frac{\partial N_l}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}
 \end{aligned}
 \tag{C14}$$

Os valores  $x_{1i}$ ,  $x_{1j}$ ,  $x_{1k}$ ,  $x_{1l}$ ,  $x_{2i}$ ,  $x_{2j}$ ,  $x_{2k}$ ,  $x_{2l}$ ,  $x_{3i}$ ,  $x_{3j}$ ,  $x_{3k}$  e  $x_{3l}$  em C14, representam as coordenadas dos pontos nodais, no sistema de coordenadas.

Os símbolos  $K11_{S_n}$ ,  $K12_{S_n}$ ,  $K13_{S_n}$ ,  $K21_{S_n}$ ,  $K22_{S_n}$ ,  $K23_{S_n}$ ,  $K31_{S_n}$ ,  $K32_{S_n}$ ,  $K33_{S_n}$ , em C11, representam os valores da condutividade hidráulica nos planos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação nodal em cada plano, como colocado na Equação C15.

$$kmn_{S_n} = \int_{S_n} (kmn_i N_i + kmn_j N_j + kmn_k N_k + kmn_l N_l) ds_n \tag{C15}$$

Onde  $m$  e  $n$  assumem valores 1, 2 e 3 para representar as componentes do tensor de permeabilidade. A integração resultante para cada plano é:

$$kmn_{S_{ij}} = \frac{13}{36} (kmn_i + kmn_j) + \frac{5}{36} (kmn_k + kmn_l) \tag{C16}$$

$$kmn_{S_{ik}} = \frac{13}{36} (kmn_i + kmn_k) + \frac{5}{36} (kmn_j + kmn_l) \tag{C17}$$

$$kmn_{S_{il}} = \frac{13}{36} (kmn_i + kmn_l) + \frac{5}{36} (kmn_k + kmn_j) \tag{C18}$$

As permeabilidades  $k_{mn_i}$ ,  $k_{mn_j}$ ,  $k_{mn_k}$  e  $k_{mn_l}$  representam os valores para cada nó. Esses valores são obtidos da seguinte forma.

$$k_{mn_{nó}} = k_{sat_{nó}} k_{rw_{nó}} k_{mnTensor} \quad (C20)$$

O valor  $k_{mnTensor}$  corresponde ao valor da componente do tensor de anisotropia, e incorpora o efeito da transformação das coordenadas. O tensor de anisotropia no caso 3D é obtido da seguinte forma:

$$k_{11Tensor} = K_1 a_{11} a_{11} + K_2 a_{12} a_{12} + K_3 a_{13} a_{13} \quad (C21)$$

$$k_{22Tensor} = K_1 a_{12} a_{12} + K_2 a_{22} a_{22} + K_3 a_{23} a_{23} \quad (C22)$$

$$k_{33Tensor} = K_1 a_{13} a_{13} + K_2 a_{23} a_{23} + K_3 a_{33} a_{33} \quad (C23)$$

$$k_{12Tensor} = K_1 a_{11} a_{12} + K_2 a_{12} a_{22} + K_3 a_{13} a_{23} \quad (C24)$$

$$k_{13Tensor} = K_1 a_{11} a_{13} + K_2 a_{12} a_{23} + K_3 a_{13} a_{33} \quad (C25)$$

$$k_{23Tensor} = K_1 a_{12} a_{13} + K_2 a_{22} a_{23} + K_3 a_{23} a_{33} \quad (C26)$$

$$k_{21Tensor} = k_{12Tensor} \quad (C27)$$

$$k_{31Tensor} = k_{13Tensor} \quad (C28)$$

$$k_{32Tensor} = k_{23Tensor} \quad (C29)$$

Os valores  $a_{pq}$  indicam o cosseno do ângulo entre a direção principal do tensor de anisotropia (p) e o sistema global de coordenadas (q). Os valores  $K_1$ ,  $K_2$  e  $K_3$  são as componentes do tensor principal de anisotropia.

Os valores  $K_{sat_{nó}}$  e  $K_{rw_{nó}}$  correspondem às permeabilidades saturada e relativa, respectivamente. Eles são avaliados para cada subvolume de controle.

### C.3. Efeito do Contorno

Quando os planos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos dos fluxos nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. Na Figura C2 são mostrados os planos externos que podem coincidir com o contorno do domínio do problema. Os efeitos dos fluxos nesses planos são incorporados na Equação C7.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação C7 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação C30.

$$q_c = Q_{s1}S_1 + Q_{s2}S_2 + Q_{s3}S_3 \quad (C30)$$

onde  $Q_{s1}$ ,  $Q_{s2}$ , e  $Q_{s3}$  representam as vazões por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e  $S_1$ ,  $S_2$  e  $S_3$  as áreas dos planos do contorno. A Equação C30 corresponde à condição de contorno do tipo Neuman.

- se o fluxo não for conhecido é o contorno corresponder com uma face de fluxo livre, então essa parcela do fluxo deverá ser acrescentada na Equação C7. Os planos no contorno são integrados da seguinte forma.

$$\begin{aligned} & \int_{S_1} \left[ (k_{rw}k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m(\psi'_m + z_m))n_{is1} ds_1 + \right. \\ & \int_{S_2} \left[ (k_{rw}k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m(\psi'_m + z_m))n_{is2} ds_2 + \right. \\ & \left. \int_{S_3} \left[ (k_{rw}k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m(\psi'_m + z_m))n_{is3} ds_3 = 0 \right. \right. \end{aligned} \quad (C31)$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não aos nós).

Assim a integral resultante é,

$$A_c(\psi'_m + z_m) \quad (C32)$$

onde:

$$\begin{aligned}
 A_c = & \int_{S_1} [ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is_1} ds_1 + \int_{S_2} [ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is_2} ds_2 + \int_{S_3} [ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is_3} ds_3 = \\
 & \left[ \begin{aligned}
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (K11_{S_n} b_i + K12_{S_n} c_i + K13_{S_n} d_i) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_i + K22_{S_n} c_i + K23_{S_n} d_i) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (K31_{S_n} b_i + K32_{S_n} c_i + K33_{S_n} d_i) n_{3S_n} \right] \\
 = & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (K11_{S_n} b_j + K12_{S_n} c_j + K13_{S_n} d_j) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_j + K22_{S_n} c_j + K23_{S_n} d_j) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (K31_{S_n} b_j + K32_{S_n} c_j + K33_{S_n} d_j) n_{3S_n} \right] \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (K11_{S_n} b_k + K12_{S_n} c_k + K13_{S_n} d_k) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_k + K22_{S_n} c_k + K23_{S_n} d_k) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (K31_{S_n} b_k + K32_{S_n} c_k + K33_{S_n} d_k) n_{3S_n} \right] \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (K11_{S_n} b_l + K12_{S_n} c_l + K13_{S_n} d_l) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_l + K22_{S_n} c_l + K23_{S_n} d_l) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (K31_{S_n} b_l + K32_{S_n} c_l + K33_{S_n} d_l) n_{3S_n} \right]
 \end{aligned} \right] \\
 & \tag{C33}
 \end{aligned}$$

Os valores  $S_n$  em C33 representam as áreas dos planos externos. O subíndice  $n$  assume valores 1, 2 e 3. O símbolo  $s_n$ , quando usado como subíndice em C33, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_n$  correspondente.

Os valores da permeabilidade nos planos externos são obtidos por integração, de maneira similar ao tratamento dos planos internos. Os valores resultantes são mostrados a seguir.

$$kmn_{s_1} = \frac{11}{18} (kmn_i) + \frac{7}{36} (kmn_j + kmn_k) \tag{C34}$$

$$kmn_{s_2} = \frac{11}{18} (kmn_i) + \frac{7}{36} (kmn_l + kmn_k) \tag{C35}$$

$$kmn_{s_3} = \frac{11}{18} (kmn_i) + \frac{7}{36} (kmn_j + kmn_l) \tag{C36}$$

A Equação C32 e C33 corresponde à condição de contorno do tipo superfície livre.

#### C.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle do nó  $i$  é:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} + F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} - (A + A_c) \psi'_m = Q_m + q_c + (A + A_c) z_m \quad (C37)$$

A matriz  $A_c$  só precisará ser avaliada quando algum plano externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

#### C.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em C37 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo.

A integração do termo contendo o teor de umidade volumétrico na Equação C37 é feita através do método de Célia et al (1990). Esse termo pode ser escrito da seguinte forma:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = F_1 \frac{(\theta_{t+1} - \theta_t)}{\Delta t} = F_1 C \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_{t+1}^k)}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^k - \theta_t)}{\Delta t} \quad (C38)$$

onde  $t+1$  e  $t$  indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo) respectivamente, e  $k+1$  e  $k$ , iterações atual e prévia no método iterativo de Picard (Modificado), e  $C$  é a capacidade específica do solo.

O termo contendo o armazenamento específico na Equação C37 é discretizado da seguinte forma.

$$F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} = F_2 \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_t)}{\Delta t} \quad (C39)$$

Somando C38 e C39 obtém-se

$$(F_1 C + F_2) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - F_1 C \frac{\psi_{t+1}^k}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^k - \theta_t)}{\Delta t} - F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t} \quad (C40)$$

Incorporando C40 em C37 e simplificando termos, obtém-se então a equação discretizada final para o subvolume de controle do nó  $i$ .

$$(F_1 C + F_2) \frac{\psi^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c) \psi'_m =$$

$$Q_m + q_c + (A + A_c) z_m + F_1 C \frac{\psi^k}{\Delta t} - F_1 \frac{(\theta^k - \theta_t)}{\Delta t} + F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t}$$
(C41)

Na Equação C41, os valores  $C$ ,  $\psi^{k+1}$ ,  $\psi^k$ ,  $\psi_t$ ,  $\theta^k$ ,  $\theta_t$  são grandezas relativas ao nó  $i$ , isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó  $i$ , é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\sum_{e=1}^{NE} \left[ (F_{1e} C + F_{2e}) \frac{\psi^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c)_e \psi'_{me} \right] =$$

$$\sum_{e=1}^{NE} \left[ Q_{me} + q_{ce} + (A + A_c)_e z_{me} + F_{1e} C \frac{\psi^k}{\Delta t} - F_{1e} \frac{(\theta^k - \theta_t)}{\Delta t} + F_{2e} \frac{\psi_t}{\Delta t} \right]$$
(C42)

Os vetores  $\psi'_{me}$ ,  $z_{me}$  contêm os valores nodais das cargas de pressão e elevação, respectivamente, do nó  $i$  e de todos aqueles nós em conectividade com ele.

A Equação C42 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

## APÊNDICE D: Solução Numérica – Equação de Fluxo na Fratura

A equação que descreve o fluxo de água na fratura foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice D é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é

$$\frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{r_{wf}} k_{iif} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/l+} - q_{n/l-} \pm 2bQ_f = 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial\psi_f}{\partial t}) \quad (D1)$$

O índice  $f$  refere-se à fratura, e os contadores  $i, j$  assumem valores 1 e 2 e indicam as direções  $x_1$  e  $x_2$ .

### D.1. Construção do Volume de Controle

Cada fratura foi modelada geometricamente como um plano no espaço tridimensional de coordenadas. Esses planos foram discretizados nesta tese a partir de elementos triangulares. Os nós destes elementos constituem pontos no espaço com coordenadas  $x, y$  e  $z$ . Para resolver a Equação D1 no plano da fratura (isto é, num sistema bidimensional), foi feita uma transformação de coordenadas do espaço tridimensional para o espaço do plano da fratura. Para realizar esta transformação foram definidos os eixos  $x_1$  e  $x_2$  do plano. Esses eixos foram definidos da seguinte maneira: o eixo  $x_1$  se fez coincidir com o rumo da fratura e foi sempre mantido no plano  $xy$  do espaço tridimensional de coordenadas, e o eixo  $x_2$  foi obtido através do produto vetorial entre o vetor normal ao plano e o eixo  $x_1$ .

Os volumes de controle para cada nó foram construídos a partir dos elementos triangulares no sistema bidimensional. Na Figura D1 é mostrado um plano discretizado em quatro elementos triangulares e seis nós (apenas mostrados os nós  $i, j, k$  e 2). Nessa mesma figura é mostrada uma área sombreada que representa o volume de controle do nó  $i$ . Esse volume de controle está formado pela união das parcelas sombreadas em cada elemento, cada uma dessas parcelas é

um subvoluma de controle. No caso da Figura D1, são quatro as parcelas que conformam o volume de controle do nó  $i$ . O contorno de cada subvoluma é definido por segmentos internos localizados dentro do elemento e por segmentos externos localizados no contorno do elemento. O subvoluma no elemento E1 está delimitado pelos segmentos internos S1 e S2 e pelos segmentos externos Sb1 e Sb2. Para todos os elementos restantes existem os segmentos internos e externos correspondentes, no entanto são mostrados apenas os segmentos correspondentes ao elemento E1.

Os segmentos internos S1 e S2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos  $\overline{Nói - Nój}$ ,  $\overline{Nói - Nók}$  é o baricentro do triângulo, respectivamente. Os segmentos externos Sb1 e Sb2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos  $\overline{Nói - Nój}$ ,  $\overline{Nói - Nók}$  é o Nó  $i$ . Este mesmo procedimento foi empregado para construir os subvolumes de controle nos elementos restantes.

Na Figura D1 são também mostradas as componentes (no sistema bidimensional) dos vetores normais atuando (para fora) nos segmentos S1 e S2.

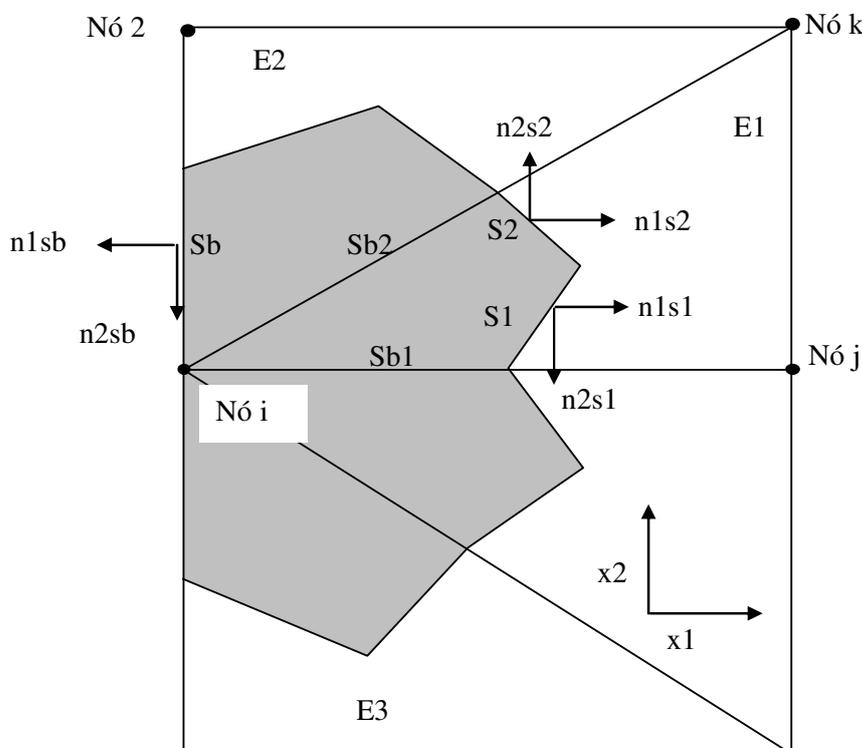


Figura D1. Volume de controle para o nó  $i$ .

## D.2. Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação D1 no subvolume E1 do nó  $i$  da Figura D1.

A integração ponderada da Equação D1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_A W_1 \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/l+} - q_{n/l-} \pm 2bQ_f - 2b \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right) \right] dA = 0 \quad (D2)$$

$W_1$  é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então,

$$\int_A \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/l+} - q_{n/l-} \pm 2bQ_f - 2b \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right) \right] dA = 0 \quad (D3)$$

Substituindo  $A$  pela área do subvolume no elemento E1, a integral D3 resulta em:

$$\int_{AE1} \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/l+} - q_{n/l-} \pm 2bQ_f - 2b \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right) \right] dA_{E1} = 0 \quad (D4)$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura D1, a integral anterior é transformada para:

$$\begin{aligned} & \int_{AE1} \left[ q_{n/l+} - q_{n/l-} \pm 2bQ_f - 2b \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right) \right] dA_{E1} \\ & + \int_{S1} \left[ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi_f + z_f)) n_{is1} \right] ds_1 \\ & + \int_{S2} \left[ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} (\psi_f + z_f)) n_{is2} \right] ds_2 = 0 \end{aligned} \quad (D5)$$

Em D5, os símbolos  $n_{is1}$  e  $n_{is2}$  representam as componentes dos vetores normais nas direções  $i = x1$  e  $i = x2$ .

Considerando que a carga total pode ser definida em qualquer ponto dentro do elemento a partir de interpolação linear dos valores nodais, obtém-se a seguinte expressão:

$$h_t = \psi_f + z_f \approx N_m (\psi'_{fm} + z_{fm}) \quad (D6)$$

Onde  $(\psi'_m + z_m)$  representam os valores das cargas de pressão e de elevação nos pontos nodais, e a variável  $N_m$ , o valor da função de interpolação. Empregando D6, a equação D5 é transformada para

$$\begin{aligned} & \int_{AE1} \left[ q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f - 2b \left( \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf} \frac{\partial \psi_f}{\partial t} \right) \right] dA_{E1} \\ & + \int_{S1} \left[ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_{fm} + z_{fm})) n_{is1} \right] ds_1 \\ & + \int_{S2} \left[ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_{fm} + z_{fm})) n_{is2} \right] ds_2 = 0 \end{aligned} \quad (D7)$$

Integrando D7 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os segmentos internos do subvolume de controle.

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} + F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} - A \psi'_{fm} = q + Q + Az_{fm} \quad (D8)$$

(Observação: a partir deste ponto os índices i,j,k, são associados aos nós i,j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de D8 são detalhadas a seguir

$$F_1 = \int_{AE1} [ 2b ] dA_{E1} = 2b \frac{A_{E1}}{3} \quad (D9)$$

$$F_2 = \int_{AE1} [ 2b(S_{wf} S_{sf}) ] dA_{E1} = 2b(S_{wfi} S_{sfi}) \frac{A_{E1}}{3} \quad (D10)$$

onde i indica nó i,  $S_{wf}$  saturação e  $S_{sf}$  armazenamento específico

$$q = \int_{AE1} [ q_{n/I+} - q_{n/I-} ] dA_{E1} = [ q_{n/I+} - q_{n/I-} ] \frac{A_{E1}}{3} \quad (D11)$$

$$Q = \int_{AE1} [ \pm 2bQ_f ] dA_{E1} = [ \pm 2bQ_f ] \frac{A_{E1}}{3} \quad (D12)$$

$$\begin{aligned}
 A &= \int_{S_1} \left[ (2bk_{rwf} k_{iff} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is_1} ds_1 + \int_{S_2} \left[ (2bk_{rwf} k_{iff} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is_2} ds_2 = \right. \\
 &= 2b \left[ \begin{aligned} &\sum_{n=1}^2 S_n \left[ (K11_{S_n} b_i + K12_{S_n} c_i) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_i + K22_{S_n} c_i) n_{2S_n} \right] \\ &\sum_{n=1}^2 S_n \left[ (K11_{S_n} b_j + K12_{S_n} c_j) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_j + K22_{S_n} c_j) n_{2S_n} \right] \\ &\sum_{n=1}^2 S_n \left[ (K11_{S_n} b_k + K12_{S_n} c_k) n_{1S_n} + (K21_{S_n} b_k + K22_{S_n} c_k) n_{2S_n} \right] \end{aligned} \right] \quad (D13)
 \end{aligned}$$

$$\psi'_{fm} = [\psi'_i \quad \psi'_j \quad \psi'_k] \quad (D14)$$

$$z_{fm} = [z_i \quad z_j \quad z_k] \quad (D15)$$

Os valores  $S_n$  em D13 representam os comprimentos dos segmentos internos. O subíndice  $n$  assume valores  $n = 1$  no segmento S1, e  $n = 2$  no segmento S2. O símbolo  $s_n$ , quando usado como subíndice em D13, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_n$  correspondente.

As constantes  $b_i, b_j, b_k, c_i, c_j, c_k$  em D13, correspondem às derivadas das funções de interpolação de cada nó em relação ao sistema de coordenadas  $x_1-x_2$ . Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 b_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{x_{2j} - x_{2k}}{2A_{E1}} & c_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{x_{1k} - x_{1j}}{2A_{E1}} \\
 b_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{x_{2k} - x_{2i}}{2A_{E1}} & c_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1k}}{2A_{E1}} \\
 b_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{x_{2i} - x_{2j}}{2A_{E1}} & c_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1i}}{2A_{E1}}
 \end{aligned} \quad (D16)$$

Os valores  $x_{1i}, x_{1j}, x_{1k}, x_{2i}, x_{2j}, x_{2k}$  em D16, representam as coordenadas dos pontos nodais no sistema de coordenadas do plano da fratura (bidimensional).

Os símbolos  $K11_{S_n}, K12_{S_n}, K21_{S_n}, K22_{S_n}$  em D13, representam os valores da condutividade hidráulica nos planos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação nodal em cada segmento, como colocado na Equação D17.

$$kmn_{s_n} = \int_{S_n} (kmn_i N_i + kmn_j N_j + kmn_k N_k) ds_n \quad (D17)$$

Onde  $m$  e  $n$  assumem valores 1 e 2 para representar as componentes do tensor de permeabilidade. A integração resultante para cada segmento é:

$$kmn_{s1} = \frac{5}{12}(kmn_i + kmn_j) + \frac{1}{6}kmn_k \quad (D18)$$

$$kmn_{s2} = \frac{5}{12}(kmn_i + kmn_k) + \frac{1}{6}kmn_j \quad (D19)$$

As permeabilidades  $kmn_i$ ,  $kmn_j$  e  $kmn_k$  representam os valores para cada nó. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$kmn_{nó} = ksat_{nó} krwf_{nó} kmnTensor \quad (D20)$$

O valor  $kmnTensor$  corresponde ao valor da componente do tensor de anisotropia, e incorpora o efeito da transformação das coordenadas. O tensor de anisotropia no caso 2D é obtido da seguinte forma:

$$k11Tensor = K_1 \cos^2 \omega + K_2 \sin^2 \omega \quad (D21)$$

$$k22Tensor = K_1 \sin^2 \omega + K_2 \cos^2 \omega \quad (D22)$$

$$k12Tensor = (K_2 - K_1) \cos \omega \sin \omega \quad (D23)$$

$$k21Tensor = k12Tensor \quad (D24)$$

O símbolo  $\omega$  indica o ângulo entre a direção principal do tensor de anisotropia e o sistema de coordenadas bidimensional. Os valores  $K_1$  e  $K_2$  são as componentes do tensor principal de anisotropia.

Os valores  $Ksat_{nó}$  e  $Krwf_{nó}$  correspondem às permeabilidades saturada e relativa, respectivamente, e são avaliados para cada subvolume de controle.

### D.3. Efeito do Contorno

Quando os segmentos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos de fluxos nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. No caso da Figura D1, isto acontece para os subvolumes nos elementos E2 e E3. Nesta figura são mostradas as componentes do vetor normal (para fora) atuando no segmento externo (Sb) do Elemento E2. O segmento Sb é o segmento Sb2

correspondente do elemento E2. Os efeitos dos fluxos nesses contornos são incorporados na Equação D8.

Para manter a generalidade da formulação, são discretizados os segmentos Sb1 e Sb2 considerando que ambos coincidem com o contorno.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação D8 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação D25.

$$q_c = (Q_{c1}S_{b1} + Q_{c2}S_{b2})2b \quad (D25)$$

onde  $Q_{c1}$  e  $Q_{c2}$  representam as vazões por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e  $S_{b1}$ ,  $S_{b2}$  e  $2b$  os comprimentos dos segmento mencionados e a abertura da fratura, respectivamente. A Equação D25 corresponde com a condição de contorno do tipo Neuman

- se o fluxo não for conhecido é o contorno corresponder com uma face de fluxo livre, então essa parcela de fluxo deverá ser acrescentada na Equação D8.

Os segmentos no contorno são integrados da seguinte forma:

$$\int_{Sb1} \left[ (2bk_{rwf}k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m(\psi'_{fm} + z_{fm}))n_{isb1} \right] ds_{b1} + \int_{Sb2} \left[ (2bk_{rwf}k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m(\psi'_{fm} + z_{fm}))n_{isb2} \right] ds_{b2} \quad (D26)$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não os nós).

A integral resultante é:

$$A_c(\psi'_{fm} + z_{fm}) \quad (D27)$$

onde:

$$\begin{aligned}
 A_c &= \int_{Sb1} [ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isb1} ds_{b1} + \int_{Sb2} [ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isb2} ds_{b2} = \\
 &= 2b \left[ \sum_{n=1}^2 S_{bn} \left[ (K11_{Sb_n} b_i + K12_{Sb_n} c_i) n_{1Sb_n} + (K21_{Sb_n} b_i + K22_{Sb_n} c_i) n_{2Sb_n} \right] \right. \\
 &\quad \left. \sum_{n=1}^2 S_{bn} \left[ (K11_{Sb_n} b_j + K12_{Sb_n} c_j) n_{1Sb_n} + (K21_{Sb_n} b_j + K22_{Sb_n} c_j) n_{2Sb_n} \right] \right. \\
 &\quad \left. \sum_{n=1}^2 S_{bn} \left[ (K11_{Sb_n} b_k + K12_{Sb_n} c_k) n_{1Sb_n} + (K21_{Sb_n} b_k + K22_{Sb_n} c_k) n_{2Sb_n} \right] \right]
 \end{aligned}
 \tag{D28}$$

Os valores  $S_{bn}$  em D28 representam os comprimentos dos segmentos externos. O subíndice  $n$  assume valores 1 em Sb1 e 2 em Sb2. O símbolo  $s_{bn}$ , quando usado como subíndice em D28, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_{bn}$  correspondente.

Os valores da permeabilidade nos segmentos externos são obtidos por integração, de maneira similar ao tratamento dos segmentos internos. Os valores resultantes são mostrados a seguir.

$$kmn_{sb1} = \frac{3}{4}(kmn_i) + \frac{1}{4} kmn_j \tag{D29}$$

$$kmn_{sb2} = \frac{3}{4}(kmn_i) + \frac{1}{4} kmn_k \tag{D30}$$

As Equações D27 e D28 correspondem à condição de contorno do tipo superfície livre.

#### D.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle (E1) do nó  $i$  é:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} + F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} - (A + A_c) \psi'_{fm} = q + Q + q_c + (A + A_c) z_{fm} \tag{D31}$$

A matriz  $A_c$  só precisará ser avaliada quando algum segmento externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

## D.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em D31 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo.

A integração do termo contendo o teor de umidade volumétrico na Equação D31 é feita através do método de Célia et al (1990). Esse termo pode ser escrito na seguinte forma:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = F_1 \frac{(\theta_{t+1} - \theta_t)}{\Delta t} = F_1 C \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_{t+1}^k)}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^k - \theta_t)}{\Delta t} \quad (D32)$$

onde t+1 e t indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo), respectivamente, e k+1 e k iterações atual e prévia no método iterativo de Picard (Modificado), e C é a capacidade específica da fratura.

O termo contendo o armazenamento específico na Equação D31 é discretizado na seguinte forma.

$$F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} = F_2 \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_t)}{\Delta t} \quad (D33)$$

Somando D32 e D33 obtém-se:

$$(F_1 C + F_2) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - F_1 C \frac{\psi_{t+1}^k}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^k - \theta_t)}{\Delta t} - F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t} \quad (D34)$$

Incorporando D34 em D31 e simplificando termos, obtém-se então a equação discretizada final para o subvoluma de controle do nó i.

$$(F_1 C + F_2) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c) \psi'_{jm} = q + Q + q_c + (A + A_c) z_{jm} + F_1 C \frac{\psi_{t+1}^k}{\Delta t} - F_1 \frac{(\theta_{t+1}^k - \theta_t)}{\Delta t} + F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t} \quad (D35)$$

Na Equação D35, os valores C,  $\psi_{t+1}^{k+1}$ ,  $\psi_{t+1}^k$ ,  $\psi_t$ ,  $\theta_{t+1}^k$  e  $\theta_t$  são grandezas relativas ao nó i, isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó i, é feito o somatório das parcelas de cada subvoluma de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\sum_{e=1}^{NE} \left[ (F_{1e}C + F_{2e}) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c)_e \psi'_{fme} \right] = \sum_{e=1}^{NE} \left[ q_e + Q_e + q_{ce} + (A + A_c)_e z_{fme} + F_{1e}C \frac{\psi_{t+1}^k}{\Delta t} - F_{1e} \frac{(\theta_{t+1}^k - \theta_t)}{\Delta t} + F_{2e} \frac{\psi_t}{\Delta t} \right] \quad (D36)$$

Os vetores  $\psi'_{fme}$ ,  $z_{fme}$  contêm os valores nodais das cargas de pressão e elevação, respectivamente, do nó  $i$  e de todos aqueles nós em conectividade com ele.

A Equação D36 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

## APÊNDICE E: Solução Numérica – Equação de Transporte na Matriz

A equação que descreve o transporte de vírus na matriz foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice E é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é:

$$\left[ \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} \right] dx dy dz dt = \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) - Q_\mu \right] dx dy dz dt \quad (E1)$$

onde:

$$Q_\mu = (\theta C \mu_l + \rho_b S_{eq} \mu_{eq} + \rho_b S_{din} \mu_{din} + \rho_b S_{str} \mu_{str} + A_{aw} \Gamma \mu_{aw}) \quad (E2)$$

Os índices i, j variam de 1 a 3, e indicam as direções  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  do sistema de coordenadas.

### E.1. Construção do Volume de Controle

Para a discretização espacial do domínio das matrizes porosas foram empregados elementos tetraédricos. A construção dos volumes de controle foi feita a partir da geometria dos tetraedros. Nas Figuras E1 e E2 é apresentado o contorno do subvolume de controle para o nó i. O contorno é definido por planos internos localizados dentro do elemento e por planos externos localizados na superfície do elemento.

Os planos internos foram denominados  $S_{ij}$ ,  $S_{ik}$  e  $S_{il}$ . O plano  $S_{ij}$  é delimitado pelos pontos (a,b,e,g), o plano  $S_{ik}$  pelos pontos (b,c,f,g) e o plano  $S_{il}$  pelos pontos (d,e,f,g), como mostrado na Figura E1.

Os pontos (a), (c), e (d) correspondem com o centro dos segmentos  $\overline{Nói - Nój}$ ,  $\overline{Nói - Nók}$  e  $\overline{Nói - Nól}$ , respectivamente. Os pontos (e) e (f) correspondem com o baricentro dos triângulos  $Nóijl$  e  $Nóikl$ , respectivamente. O ponto (g) corresponde com o baricentro do tetraedro.

Os planos externos foram denominados  $S_1$ ,  $S_2$  e  $S_3$ . O plano  $S_1$  é delimitado pelos pontos  $(Nó i, a, b, c)$ , o plano  $S_2$  pelos pontos  $(Nó i, c, d, f)$  e o plano  $S_3$  pelos pontos  $(Nó i, a, d, e)$ , como mostrado na Figura E2.

Nas Figuras E1 e E2 são também mostradas as componentes dos vetores normais para cada plano.

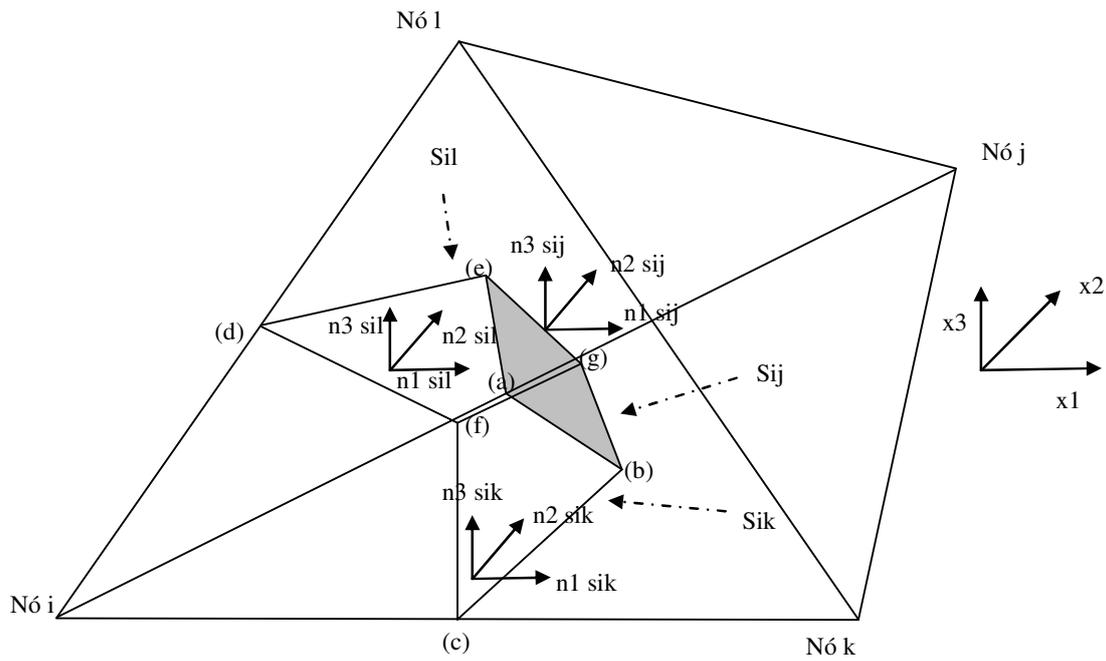


Figura E1. Subvolume de controle para o nó  $i$ , planos internos.

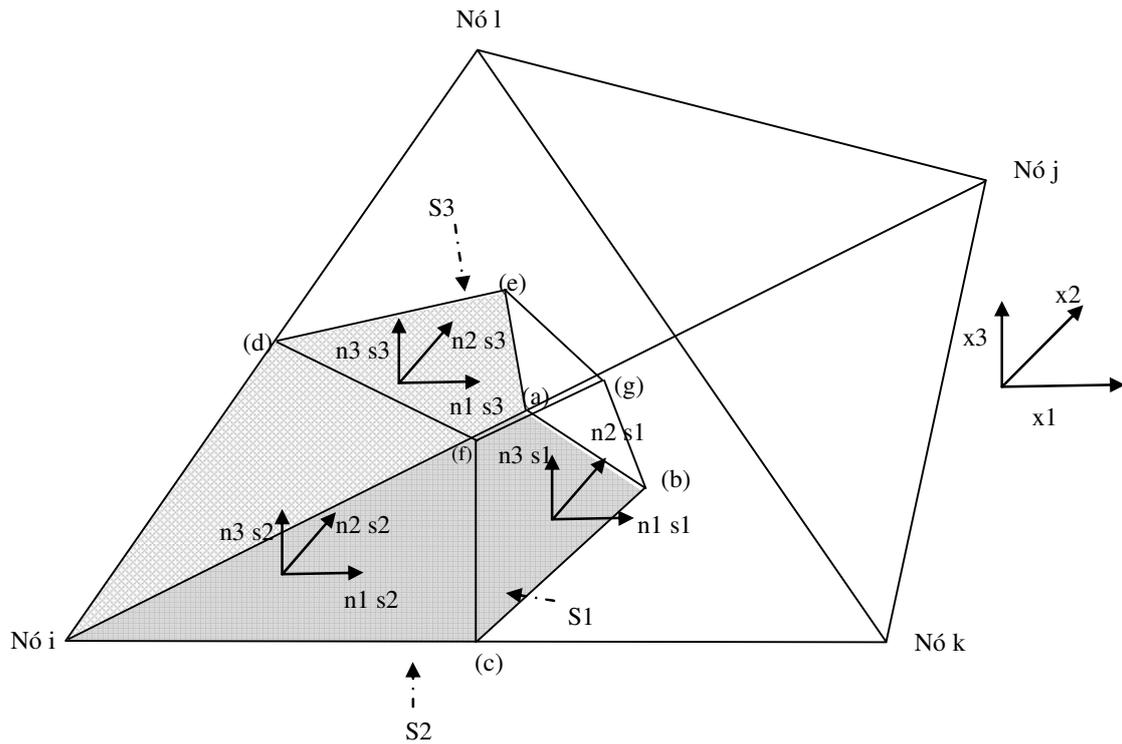


Figura E2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.

## E.2. Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação E1 no subvolume do nó i das Figuras E1 e E2.

A integração ponderada da Equação E1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_V W_1 \left[ \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} \right] dV = \int_V W_1 \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) - Q_\mu \right] dV \tag{E3}$$

$W_1$  é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então,

$$\int_V \left[ \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} \right] dV = \int_V \left[ \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) - Q_\mu \right] dV \tag{E4}$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura E1, a integral anterior é transformada para,

$$\begin{aligned}
 & \int_V \left[ \frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} \right] dV + \\
 & \int_V [Q_{\mu}] dV + \\
 & \int_{S_{ij}} \left[ -(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) \right] n_{isij} ds_{ij} + \\
 & \int_{S_{ik}} \left[ -(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) \right] n_{isik} ds_{ik} + \\
 & \int_{S_{il}} \left[ -(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C) \right] n_{isil} ds_{il} = 0
 \end{aligned} \tag{E5}$$

A concentração  $C$  da Equação E5 é substituída por uma combinação dos valores nodais. No caso dos termos dispersivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação linear do elemento. No caso dos termos advectivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação exponencial do elemento. Esta função de interpolação incorpora o efeito do sentido do fluxo. No Apêndice H é apresentada a descrição dessa função. Desta forma, as concentrações em E5 são:

Para os termos dispersivos:

$$C = C_d \approx N_{md}(C^i) \tag{E6}$$

Para os termos advectivos:

$$C = C_a \approx N_{ma}(C^i) \tag{E7}$$

Onde  $(C^i)$  representa os valores de concentração nos pontos nodais, a variável  $N_{md}$ , o valor da função de interpolação linear, e a variável  $N_{ma}$ , o valor da função de interpolação exponencial.

A concentração  $S_{eq}$  pode ser substituída por:

$$S_{eq} = K_d C \tag{E8}$$

Empregando as Equações E6, E7 e E8, a Equação E5 é transformada para

$$\begin{aligned}
 & \int_V \left[ \frac{\partial(\theta + \rho_b K_d)C}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} \right] dV + \\
 & \int_V [Q_\mu] dV + \\
 & \int_{S_{ij}} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md} C')}{\partial x_j}] n_{isij} ds_{ij} + \int_{S_{ik}} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md} C')}{\partial x_j}] n_{isik} ds_{ik} \\
 & + \int_{S_{il}} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md} C')}{\partial x_j}] n_{isil} ds_{il} + \\
 & \int_{S_{ij}} [q_i(N_{ma} C')] n_{isij} ds_{ij} + \int_{S_{ik}} [q_i(N_{ma} C')] n_{isik} ds_{ik} \\
 & + \int_{S_{il}} [q_i(N_{ma} C')] n_{isil} ds_{il} = 0
 \end{aligned} \tag{E9}$$

Sendo :

$$Q_\mu = (\theta \mu_l + \rho_b K_d \mu_{eq})C + \rho_b S_{din} \mu_{din} + \rho_b S_{str} \mu_{str} + A_{aw} \Gamma \mu_{aw} \tag{E10}$$

Integrando E9 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os planos internos do subvolume de controle do nó i.

$$\begin{aligned}
 & F_1 \left( \frac{\partial(\theta + \rho_b K_d)C}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} \right) \\
 & + (A_d + A_a)C' + F_1 Q_\mu = 0
 \end{aligned} \tag{E11}$$

(Observação: a partir deste ponto os índices i, j, k, são associados aos nós i, j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de E11 são detalhadas a seguir.

$$F_1 = \int_V dV = \frac{V_E}{4} \tag{E12}$$

Onde  $V_E$  indica o volume do elemento.

$$\begin{aligned}
 A_d = & \int_{S_{ij}} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{isij} ds_{ij} + \int_{S_{ik}} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{isik} ds_{ik} + \int_{S_{il}} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{isil} ds_{il} = \\
 = & \left[ \begin{aligned}
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (\theta D_{11_{S_n}} b_i + \theta D_{12_{S_n}} c_i + \theta D_{13_{S_n}} d_i) n_{1S_n} + (\theta D_{21_{S_n}} b_i + \theta D_{22_{S_n}} c_i + \theta D_{23_{S_n}} d_i) n_{2S_n} \right. \\
 & \left. + (\theta D_{31_{S_n}} b_i + \theta D_{32_{S_n}} c_i + \theta D_{33_{S_n}} d_i) n_{3S_n} \right] \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (\theta D_{11_{S_n}} b_j + \theta D_{12_{S_n}} c_j + \theta D_{13_{S_n}} d_j) n_{1S_n} + (\theta D_{21_{S_n}} b_j + \theta D_{22_{S_n}} c_j + \theta D_{23_{S_n}} d_j) n_{2S_n} \right. \\
 & \left. + (\theta D_{31_{S_n}} b_j + \theta D_{32_{S_n}} c_j + \theta D_{33_{S_n}} d_j) n_{3S_n} \right] \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (\theta D_{11_{S_n}} b_k + \theta D_{12_{S_n}} c_k + \theta D_{13_{S_n}} d_k) n_{1S_n} + (\theta D_{21_{S_n}} b_k + \theta D_{22_{S_n}} c_k + \theta D_{23_{S_n}} d_k) n_{2S_n} \right. \\
 & \left. + (\theta D_{31_{S_n}} b_k + \theta D_{32_{S_n}} c_k + \theta D_{33_{S_n}} d_k) n_{3S_n} \right] \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (\theta D_{11_{S_n}} b_l + \theta D_{12_{S_n}} c_l + \theta D_{13_{S_n}} d_l) n_{1S_n} + (\theta D_{21_{S_n}} b_l + \theta D_{22_{S_n}} c_l + \theta D_{23_{S_n}} d_l) n_{2S_n} \right. \\
 & \left. + (\theta D_{31_{S_n}} b_l + \theta D_{32_{S_n}} c_l + \theta D_{33_{S_n}} d_l) n_{3S_n} \right]
 \end{aligned} \right] \quad (E13)
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 A_a = & \int_{S_{ij}} [q_i(N_{ma})] n_{isij} ds_{ij} + \int_{S_{ik}} [q_i(N_{ma})] n_{isik} ds_{ik} + \int_{S_{il}} [q_i(N_{ma})] n_{isil} ds_{il} = \\
 = & \left[ \begin{aligned}
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (q_{11_{S_n}} + q_{12_{S_n}} + q_{13_{S_n}}) n_{1S_n} + (q_{21_{S_n}} + q_{22_{S_n}} + q_{23_{S_n}}) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (q_{31_{S_n}} + q_{32_{S_n}} + q_{33_{S_n}}) n_{3S_n} \right] N_{is_n} \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (q_{11_{S_n}} + q_{12_{S_n}} + q_{13_{S_n}}) n_{1S_n} + (q_{21_{S_n}} + q_{22_{S_n}} + q_{23_{S_n}}) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (q_{31_{S_n}} + q_{32_{S_n}} + q_{33_{S_n}}) n_{3S_n} \right] N_{js_n} \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (q_{11_{S_n}} + q_{12_{S_n}} + q_{13_{S_n}}) n_{1S_n} + (q_{21_{S_n}} + q_{22_{S_n}} + q_{23_{S_n}}) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (q_{31_{S_n}} + q_{32_{S_n}} + q_{33_{S_n}}) n_{3S_n} \right] N_{ks_n} \\
 & \sum_{n=1}^3 S_n \left[ (q_{11_{S_n}} + q_{12_{S_n}} + q_{13_{S_n}}) n_{1S_n} + (q_{21_{S_n}} + q_{22_{S_n}} + q_{23_{S_n}}) n_{2S_n} + \right. \\
 & \left. (q_{31_{S_n}} + q_{32_{S_n}} + q_{33_{S_n}}) n_{3S_n} \right] N_{ls_n}
 \end{aligned} \right] \quad (E14)
 \end{aligned}$$

$$C' = [C'_i \quad C'_j \quad C'_k \quad C'_l] \quad (E15)$$

Os valores  $S_n$  em E13 e E14 representam as áreas dos planos internos. O subíndice  $n$  assume valores  $n = 1$  no plano  $ij$ ,  $n = 2$  no plano  $ik$ , e  $n = 3$  no plano  $il$ . O símbolo  $s_n$ , quando usado como subíndice em E13 e E14, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_n$  correspondente.

As constantes  $b_i, b_j, b_k, b_l, c_i, c_j, c_k, c_l, d_i, d_j, d_k, d_l$  em E13, correspondem com as derivadas das funções de interpolação lineares de cada nó em relação ao sistema de coordenadas. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
 b_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E} \\
 b_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E} \\
 b_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E} \\
 b_l &= \frac{\partial N_l}{\partial x_1} = \frac{-\det \begin{vmatrix} 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & c_l &= \frac{\partial N_l}{\partial x_2} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} & d_l &= \frac{\partial N_l}{\partial x_3} = \frac{-\det \begin{vmatrix} x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}
 \end{aligned}
 \tag{E16}$$

Os valores  $x_{1i}, x_{1j}, x_{1k}, x_{1l}, x_{2i}, x_{2j}, x_{2k}, x_{2l}, x_{3i}, x_{3j}, x_{3k}$  e  $x_{3l}$  em E16, representam as coordenadas dos pontos nodais no sistema de coordenadas.

Os símbolos  $\theta D11_{S_n}, \theta D12_{S_n}, \theta D13_{S_n}, \theta D21_{S_n}, \theta D22_{S_n}, \theta D23_{S_n}, \theta D31_{S_n}, \theta D32_{S_n}, \theta D33_{S_n}$  em E13, representam os valores da dispersão hidrodinâmica nos planos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada plano, como colocado na Equação E17.

$$\theta Dmn_{S_n} = \int_{S_n} (\theta Dmn_i N_i + \theta Dmn_j N_j + \theta Dmn_k N_k + \theta Dmn_l N_l) ds_n \tag{E17}$$

Onde  $m$  e  $n$  assumem valores 1, 2 e 3 para representar as componentes do tensor de dispersão. A integração resultante para cada plano é:

$$\theta Dmn_{S_{ij}} = \frac{13}{36} (\theta Dmn_i + \theta Dmn_j) + \frac{5}{36} (\theta Dmn_k + \theta Dmn_l) \tag{E18}$$

$$\theta Dmn_{S_{ik}} = \frac{13}{36} (\theta Dmn_i + \theta Dmn_k) + \frac{5}{36} (\theta Dmn_j + \theta Dmn_l) \tag{E19}$$

$$\theta D_{mn_{sil}} = \frac{13}{36}(\theta D_{mn_i} + \theta D_{mn_l}) + \frac{5}{36}(\theta D_{mn_k} + \theta D_{mn_j}) \quad (E20)$$

As dispersões  $\theta D_{mn_i}$ ,  $\theta D_{mn_j}$ ,  $\theta D_{mn_k}$  e  $\theta D_{mn_l}$  representam os valores nodais. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\theta D_{11} = \alpha_l \frac{q_{11}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{22}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{33}^2}{q} + \theta D_d \tau \quad (E21)$$

$$\theta D_{22} = \alpha_l \frac{q_{22}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{11}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{33}^2}{q} + \theta D_d \tau \quad (E22)$$

$$\theta D_{33} = \alpha_l \frac{q_{33}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{11}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{22}^2}{q} + \theta D_d \tau \quad (E23)$$

$$\theta D_{12} = (\alpha_l - \alpha_t) \frac{q_{11}q_{22}}{q} \quad (E24)$$

$$\theta D_{13} = (\alpha_l - \alpha_t) \frac{q_{11}q_{33}}{q} \quad (E25)$$

$$\theta D_{23} = (\alpha_l - \alpha_t) \frac{q_{22}q_{33}}{q} \quad (E26)$$

$$\tau = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \quad (E27)$$

Sendo  $\alpha_l$  e  $\alpha_t$  as dispersividades longitudinal e transversal, respectivamente.  $D_d$  é o coeficiente de difusão molecular,  $\tau$  a tortuosidade e  $\theta_s$ , o teor de umidade volumétrico saturado.

Os símbolos  $q_{11_{S_n}}$ ,  $q_{12_{S_n}}$ ,  $q_{13_{S_n}}$ ,  $q_{21_{S_n}}$ ,  $q_{22_{S_n}}$ ,  $q_{23_{S_n}}$ ,  $q_{31_{S_n}}$ ,  $q_{32_{S_n}}$ ,  $q_{33_{S_n}}$  em E14, representam as componentes direcionais da vazão específica do fluido nos planos internos  $S_{ij}$ ,  $S_{ik}$  e  $S_{il}$ . Os valores foram obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada plano, como colocado na Equação E28.

$$q_{mn_{S_n}} = \int_{S_n} (q_{mn_i} N_i + q_{mn_j} N_j + q_{mn_k} N_k + q_{mn_l} N_l) ds_n \quad (E28)$$

Onde  $m$  e  $n$  assumem valores 1, 2 e 3 para representar as componentes direcionais do fluxo. A integração resultante para cada plano é:

$$q_{mn_{S_{ij}}} = \frac{13}{36}(q_{mn_i} + q_{mn_j}) + \frac{5}{36}(q_{mn_k} + q_{mn_l}) \quad (E29)$$

$$q_{mn_{S_{ik}}} = \frac{13}{36}(q_{mn_i} + q_{mn_k}) + \frac{5}{36}(q_{mn_j} + q_{mn_l}) \quad (E30)$$

$$qmn_{sil} = \frac{13}{36}(qmn_i + qmn_l) + \frac{5}{36}(qmn_k + qmn_j) \quad (E31)$$

As vazões  $qmn_i$ ,  $qmn_j$ ,  $qmn_k$  e  $qmn_l$  representam os valores nodais. Esses valores são obtidos a partir da solução do problema de fluxo e são determinados para cada passo de tempo.

### E.3. Efeito do Contorno

Quando os planos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos dos fluxos de vírus nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. Na Figura E2 são mostrados os planos externos que podem coincidir com o contorno do domínio do problema. Os efeitos dos fluxos nesses contornos são incorporados na Equação E11.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação E11 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação E32.

$$q_c = (Q_{s1}S_1C_1 + Q_{s2}S_2C_2 + Q_{s3}S_3C_3) \quad (E32)$$

Onde  $Q_{s1}$ ,  $Q_{s2}$ , e  $Q_{s3}$  representam as vazões de fluido por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e  $S_1$ ,  $S_2$  e  $S_3$  as áreas dos planos do contorno. As grandezas  $C_1$ ,  $C_2$  e  $C_3$  são os valores de concentração com que os vírus são injetados nos planos referidos. A Equação E32 corresponde à condição de contorno do tipo Neuman.

- se o fluxo não for conhecido é o contorno corresponder com uma face onde existe fluxo de vírus, então essa parcela do fluxo deverá ser acrescentada na Equação E11. Os planos no contorno são integrados da seguinte forma:

$$\int_{S_1} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md} C')}{\partial x_j}] n_{is1} ds_1 + \int_{S_2} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md} C')}{\partial x_j}] n_{is2} ds_2 + \int_{S_3} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md} C')}{\partial x_j}] n_{is3} ds_3 +$$

$$\int [q_i(N_{ma} C')] n_{is1} ds_1 + \int [q_i(N_{ma} C')] n_{is2} ds_2 + \int [q_i(N_{ma} C')] n_{is3} ds_3 = 0 \quad (E33)$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não aos nós).

A integral resultante é:

$$(A_{dc} + A_{ac}) C' \quad (E34)$$

onde

$$A_{dc} = \int_{S_1} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{is1} ds_1 + \int_{S_2} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{is2} ds_2 + \int_{S_3} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{is3} ds_3 =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{aligned} &(\theta D_{11} b_i + \theta D_{12} c_i + \theta D_{13} d_i) n_{1S_n} + (\theta D_{21} b_i + \theta D_{22} c_i + \theta D_{23} d_i) n_{2S_n} + \\ &(\theta D_{31} b_i + \theta D_{32} c_i + \theta D_{33} d_i) n_{3S_n} \end{aligned} \right] \\ \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{aligned} &(\theta D_{11} b_j + \theta D_{12} c_j + \theta D_{13} d_j) n_{1S_n} + (\theta D_{21} b_j + \theta D_{22} c_j + \theta D_{23} d_j) n_{2S_n} + \\ &(\theta D_{31} b_j + \theta D_{32} c_j + \theta D_{33} d_j) n_{3S_n} \end{aligned} \right] \\ \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{aligned} &(\theta D_{11} b_k + \theta D_{12} c_k + \theta D_{13} d_k) n_{1S_n} + (\theta D_{21} b_k + \theta D_{22} c_k + \theta D_{23} d_k) n_{2S_n} + \\ &(\theta D_{31} b_k + \theta D_{32} c_k + \theta D_{33} d_k) n_{3S_n} \end{aligned} \right] \\ \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{aligned} &(\theta D_{11} b_l + \theta D_{12} c_l + \theta D_{13} d_l) n_{1S_n} + (\theta D_{21} b_l + \theta D_{22} c_l + \theta D_{23} d_l) n_{2S_n} + \\ &(\theta D_{31} b_l + \theta D_{32} c_l + \theta D_{33} d_l) n_{3S_n} \end{aligned} \right] \end{bmatrix} \quad (E35)$$

$$\begin{aligned}
A_{ac} &= \int_{S_1} [q_i(N_{ma})]n_{is_1}ds_1 + \int_{S_2} [q_i(N_{ma})]n_{is_2}ds_2 + \int_{S_3} [q_i(N_{ma})]n_{is_3}ds_3 = \\
&= \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{matrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n})n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n})n_{3S_n} \end{matrix} \right] N_{is_n} \\ \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{matrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n})n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n})n_{3S_n} \end{matrix} \right] N_{js_n} \\ \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{matrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n})n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n})n_{3S_n} \end{matrix} \right] N_{ks_n} \\ \sum_{n=1}^3 S_n \left[ \begin{matrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n})n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n})n_{3S_n} \end{matrix} \right] N_{ls_n} \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{E36}$$

Os valores  $S_n$  em E35 e E36 representam as áreas dos planos externos. O subíndice  $n$  assume valores 1, 2 e 3. O símbolo  $s_n$ , quando usado como subíndice em E35 e E36, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_n$  correspondente.

Os valores de dispersão e vazão nos planos externos são dados por:

$$\theta Dmn_{s_1} = \frac{33}{54}(\theta Dmn_i) + \frac{21}{108}(\theta Dmn_j + \theta Dmn_k) \tag{E37}$$

$$\theta Dmn_{s_2} = \frac{33}{54}(\theta Dmn_i) + \frac{21}{108}(\theta Dmn_l + \theta Dmn_k) \tag{E38}$$

$$\theta Dmn_{s_3} = \frac{33}{54}(\theta Dmn_i) + \frac{21}{108}(\theta Dmn_j + \theta Dmn_l) \tag{E39}$$

$$qmn_{s_1} = \frac{33}{54}(qmn_i) + \frac{21}{108}(qmn_j + qmn_k) \tag{E40}$$

$$qmn_{s_2} = \frac{33}{54}(qmn_i) + \frac{21}{108}(qmn_l + qmn_k) \tag{E41}$$

$$qmn_{s_3} = \frac{33}{54}(qmn_i) + \frac{21}{108}(qmn_j + qmn_l) \tag{E42}$$

As Equações E34 a E36 definem a discretização da condição de contorno no domínio. No caso de se considerar uma condição do tipo Cauchy, ambas as matrizes  $A_{dc}$  e  $A_{ac}$  devem ser avaliadas. No caso de se considerar uma condição de contorno do tipo gradiente nulo, somente a matriz  $A_{ac}$  deve se avaliar.

#### E.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

Incorporando E32 e E34 em E11 obtém-se a seguinte expressão:

$$F_1 \left( \frac{\partial(\theta + \rho_b K_d)C}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} \right) + (A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})C' + F_1 Q_\mu = q_c \quad (E43)$$

Considerando as concentrações sorvidas e filtradas dadas pelas equações E44 a E46, e acoplado junto à Equação E43 obtém-se a equação discretizada final.

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} = (\theta CK_{att} \psi_{att} - S_{din} \rho_b K_{det} - S_{din} \rho_b \mu_{din}) \quad (E44)$$

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} = (\theta CK_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str}) \quad (E45)$$

$$\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} = (\theta CK_{aw} \psi_{aw} - A_{aw}\Gamma K_{daw} - A_{aw}\Gamma \mu_{aw}) \quad (E46)$$

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle do nó  $i$  é:

$$F_1 \left( \frac{\partial(\theta + \rho_b K_d)C}{\partial t} \right) + F_1 (\theta K_{att} \psi_{att} + \theta K_{str} \psi_{str} + \theta K_{aw} \psi_{aw}) C + (A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac}) C' = q_c + F_1 (S_{din} \rho_b K_{det}) + F_1 (A_{aw} \Gamma K_{daw}) \quad (E47)$$

As matrizes  $A_{dc}$  e  $A_{ac}$  só precisam ser avaliadas quando algum plano externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

#### E.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em E47 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo. A integração de E47 resulta em:

$$F_1 \frac{(\theta + \rho_b K_d)_{t+1} C_{t+1}}{\Delta t} + F_1 (\theta K_{att} \psi_{att} + \theta K_{str} \psi_{str} + \theta K_{aw} \psi_{aw})_{t+1} C_{t+1} + (A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1} C_{t+1}' = q_c + F_1 (S_{din} \rho_b K_{det})_{t+1} + F_1 (A_{aw} \Gamma K_{daw})_{t+1} + F_1 \frac{(\theta + \rho_b K_d)_t C_t}{\Delta t} \quad (E48)$$

Onde  $t+1$  e  $t$  indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo), respectivamente. Na Equação E48, os valores  $\theta$ ,  $K_d$ ,  $K_{att}$ ,  $K_{str}$ ,  $K_{aw}$ ,  $\psi_{att}$ ,  $\psi_{str}$ ,  $\psi_{aw}$ ,  $A_{aw}$ ,  $K_{det}$ ,  $K_{daw}$ ,  $S_{din}$  e  $\Gamma$  são grandezas relativas ao nó  $i$ , isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó  $i$ , é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(\theta + \rho_b K_d)_{t+1,e} C_{t+1}}{\Delta t} + F_{1e} (\theta K_{att} \psi_{att} + \theta K_{str} \psi_{str} + \theta K_{aw} \psi_{aw})_{t+1,e} C_{t+1} \right] \\ & + \sum_{e=1}^{NE} [(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1,e} C_{t+1,e}'] = \quad (E49) \\ & \sum_{e=1}^{NE} [q_{ce} + F_{1e} (S_{din} \rho_b K_{det})_{t+1,e} + F_{1e} (A_{aw} \Gamma K_{daw})_{t+1,e} + F_{1e} \frac{(\theta + \rho_b K_d)_{t,e} C_t}{\Delta t}] \end{aligned}$$

O vetor  $C_e'$  contém os valores nodais das concentrações do nó  $i$  e de todos aqueles nós em conectividade com ele. A grandeza  $C$  (sem o subíndice “e”) em E49 é relativa ao nó  $i$ .

A Equação E49 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

## APÊNDICE F: Solução Numérica – Equação de Transporte na Fratura

A equação que descreve o transporte de vírus na fratura foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice F é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é,

$$2b\left(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t}\right) dx dz dt =$$

$$\left[ 2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-} - 2b Q_{\mu f} \right] dx dz dt \quad (F1)$$

onde,

$$Q_{\mu f} = (\theta C_f \mu_{lf} + S_{eqf} A_s \mu_{eqf} + S_{din f} A_s \mu_{din f} + S_{strf} A_s \mu_{strf} + A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf}) \quad (F2)$$

O índice  $f$  refere-se à fratura, e os contadores  $i, j$  assumem valores 1 e 2 e indicam as direções  $x_1$  e  $x_2$ .

### F.1. Construção do Volume de Controle

Cada fratura foi modelada geometricamente como um plano no espaço tridimensional de coordenadas. Esses planos foram discretizados nesta tese a partir de elementos triangulares. Os nós destes elementos constituem pontos no espaço com coordenadas  $x, y$  e  $z$ . Para resolver a Equação F1 no plano da fratura (isto é, num sistema bidimensional), foi feita uma transformação de coordenadas do espaço tridimensional para o espaço do plano da fratura. Para realizar esta transformação foram definidos os eixos  $x_1$  e  $x_2$  do plano. Esses eixos foram definidos da seguinte maneira: o eixo  $x_1$  se fez coincidir com o rumo da fratura e foi sempre mantido no plano  $xy$  do espaço tridimensional de coordenadas, e o eixo  $x_2$  foi obtido através do produto vetorial entre o vetor normal ao plano e o eixo  $x_1$ .

Os volumes de controle para cada nó foram construídos a partir dos elementos triangulares no sistema bidimensional. Na Figura F1 é mostrado um plano discretizado em quatro elementos triangulares e seis nós (apenas mostrados

os nós  $i$ ,  $j$ ,  $k$  e  $2$ ). Nessa mesma figura é mostrada uma área sombreada que representa o volume de controle do nó  $i$ . Esse volume de controle está formado pela união das parcelas sombreadas em cada elemento, cada uma dessas parcelas é um subvolume de controle. No caso da Figura F1, são quatro as parcelas que conformam o volume de controle do nó  $i$ . O contorno de cada subvolume é definido por segmentos internos localizados dentro do elemento e por segmentos externos localizados no contorno do elemento. O subvolume no elemento E1 está delimitado pelos segmentos internos S1 e S2 e pelos segmentos externos Sb1 e Sb2. Para todos os elementos restantes existem os segmentos internos e externos correspondentes, no entanto são mostrados apenas os segmentos correspondentes ao elemento E1.

Os segmentos internos S1 e S2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos  $\overline{Nói - Nój}$ ,  $\overline{Nói - Nók}$  é o baricentro do triângulo, respectivamente. Os segmentos externos Sb1 e Sb2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos  $\overline{Nói - Nój}$ ,  $\overline{Nói - Nók}$  é o Nó  $i$ . Este mesmo procedimento foi empregado para construir os subvolumes de controle nos elementos restantes.

Na Figura F1 são também mostradas as componentes (no sistema bidimensional) dos vetores normais atuando (para fora) nos segmentos S1 e S2.

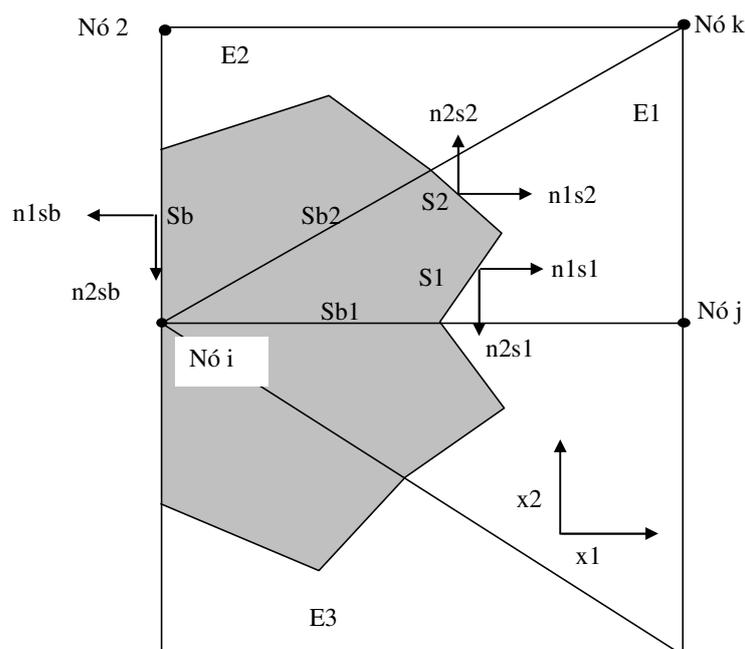


Figura F1. Volume de controle para o nó  $i$ .

## F.2. Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação F1 no subvolume E1 do nó  $i$  da Figura F1.

A integração ponderada da Equação F1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_A W_1 \left[ 2b \left( \frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{dinf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{avf} \Gamma_f)}{\partial t} \right) - 2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f) - (\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}) + 2b Q_{\mu f} \right] dA = 0 \quad (F3)$$

$W_1$  é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então:

$$\int_A \left[ 2b \left( \frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{dinf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{avf} \Gamma_f)}{\partial t} \right) - 2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f) - (\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}) + 2b Q_{\mu f} \right] dA = 0 \quad (F4)$$

Substituindo  $A$  pela área do subvolume no elemento E1, a integral F4 resulta em:

$$\int_{AE1} \left[ 2b \left( \frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{dinf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{avf} \Gamma_f)}{\partial t} \right) - 2b \frac{\partial}{\partial x_i} (\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f) - (\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}) + 2b Q_{\mu f} \right] dA_{E1} = 0 \quad (F5)$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura F1, a integral anterior é transformada em:

$$\begin{aligned} & \int_{AE1} \left[ 2b \left( \frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{dinf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{avf} \Gamma_f)}{\partial t} \right) \right] dA_{E1} + \\ & \int_{AE1} [ -(\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}) + 2b Q_{\mu f} ] dA_{E1} \\ & + \int_{S1} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f)] n_{is1} ds_1 \\ & + \int_{S2} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial C_f}{\partial x_j} - q_{fi} C_f)] n_{is2} ds_2 = 0 \end{aligned} \quad (F6)$$

Em F6, os símbolos  $n_{is1}$  e  $n_{is2}$  representam as componentes dos vetores normais nas direções  $i = x1$  e  $i = x2$ .

A concentração  $C$  da Equação F6 é substituída por uma combinação dos valores nodais. No caso dos termos dispersivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação linear do elemento. No caso dos termos advectivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação exponencial do elemento. Esta função de interpolação incorpora o efeito do sentido do fluxo. No Apêndice H é apresentada a descrição dessa função. Desta forma, as concentrações em F6 são:

Para os termos dispersivos:

$$C = C_d \approx N_{md}(C') \quad (F7)$$

Para os termos advetivos:

$$C = C_a \approx N_{ma}(C') \quad (F8)$$

Onde  $(C')$  representa os valores de concentração nos pontos nodais, a variável  $N_{md}$ , o valor da função de interpolação linear, e a variável  $N_{ma}$ , o valor da função de interpolação exponencial.

A concentração  $S_{eq}$  pode ser substituída por:

$$S_{eq} = K_d C \quad (F9)$$

Empregando as Equações F7, F8 e F9, a Equação F6 é transformada em:

$$\begin{aligned} & \int_{AE1} [2b(\frac{\partial(\theta + A_s K_{df})C_f}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{dinf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t})] dA_{E1} + \\ & \int_{AE1} [-(\Omega_{n/l^+} - \Omega_{n/l^-}) + 2b Q_{\mu f}] dA_{E1} \\ & + \int_{S1} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md} C'_f)}{\partial x_j})] n_{is1} ds_1 \quad (F10) \\ & + \int_{S2} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{ma} C'_f)}{\partial x_j})] n_{is2} ds_2 + \\ & \int_{S1} [2b q_{fi}(N_{ma} C'_f)] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [2b q_{fi}(N_{ma} C'_f)] n_{is2} ds_2 = 0 \end{aligned}$$

Sendo:

$$Q_{\mu f} = (\theta \mu_{lf} + K_{df} A_s \mu_{eqf}) C_f + S_{dinf} A_s \mu_{dinf} + S_{strf} A_s \mu_{strf} + A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf} \quad (F11)$$

Integrando F10 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os planos internos do subvolume de controle do nó  $i$ .

$$F_1 \left( \frac{\partial(\theta + A_s K_{df}) C_f}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} \right) + (A_d + A_a) C_f' + F_1 Q_{df} = \Omega \quad (F12)$$

(Observação: a partir deste ponto os índices i, j, k, são associados aos nós i, j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de F12 são detalhadas a seguir

$$F_1 = \int_{AE1} [2b] dA_{E1} = 2b \frac{A_{E1}}{3} \quad (F13)$$

$$\Omega = \int_{AE1} [\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}] dA_{E1} = [\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}] \frac{A_{E1}}{3} \quad (F14)$$

$$A_d = \int_{S1} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j})] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j})] n_{is2} ds_2 =$$

$$= -2b \left[ \begin{aligned} & \sum_{n=1}^2 S_n [(\theta D11_{S_n} b_i + \theta D12_{S_n} c_i) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_i + \theta D22_{S_n} c_i) n_{2S_n}] \\ & \sum_{n=1}^2 S_n [(\theta D11_{S_n} b_j + \theta D12_{S_n} c_j) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_j + \theta D22_{S_n} c_j) n_{2S_n}] \\ & \sum_{n=1}^2 S_n [(\theta D11_{S_n} b_k + \theta D12_{S_n} c_k) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_k + \theta D22_{S_n} c_k) n_{2S_n}] \end{aligned} \right] \quad (F15)$$

$$A_a = \int_{S1} [2b q_{fi} (N_{ma})] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [2b q_{fi} (N_{ma})] n_{is2} ds_2 =$$

$$= 2b \left[ \begin{aligned} & \sum_{n=1}^2 S_n [(q11_{S_n} + q12_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n}) n_{2S_n}] N_{is_n} \\ & \sum_{n=1}^2 S_n [(q11_{S_n} + q12_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n}) n_{2S_n}] N_{js_n} \\ & \sum_{n=1}^2 S_n [(q11_{S_n} + q12_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n}) n_{2S_n}] N_{ks_n} \end{aligned} \right] \quad (F16)$$

$$C_f' = [C_i' \quad C_j' \quad C_k'] \quad (F17)$$

Os valores  $S_n$  em F15 e F16 representam os comprimentos dos segmentos internos. O subíndice  $n$  assume valores  $n=1$  no segmento S1 e  $n=2$  no segmento S2. O símbolo  $s_n$ , quando usado como subíndice em F15 e F16, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_n$  correspondente.

As constantes  $b_i$ ,  $b_j$ ,  $b_k$ ,  $c_i$ ,  $c_j$ , e  $c_k$  em F15 correspondem às derivadas das funções de interpolação de cada nó em relação ao sistema de coordenadas  $x_1$ - $x_2$ . Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} b_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{x_{2j} - x_{2k}}{2A_{E1}} & c_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{x_{1k} - x_{1j}}{2A_{E1}} \\ b_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{x_{2k} - x_{2i}}{2A_{E1}} & c_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1k}}{2A_{E1}} \\ b_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{x_{2i} - x_{2j}}{2A_{E1}} & c_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1i}}{2A_{E1}} \end{aligned} \quad (F18)$$

Os valores  $x_{1i}$ ,  $x_{1j}$ ,  $x_{1k}$ ,  $x_{2i}$ ,  $x_{2j}$ ,  $x_{2k}$  em F18, representam as coordenadas dos pontos nodais no sistema de coordenadas do plano da fratura (bidimensional).

Os símbolos  $\theta D11_{S_n}$ ,  $\theta D12_{S_n}$ ,  $\theta D21_{S_n}$ ,  $\theta D22_{S_n}$  em F15, representam os valores da dispersão hidrodinâmica nos segmentos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada segmento, como colocado na Equação F19.

$$\theta Dmn_{S_n} = \int_{S_n} (\theta Dmn_i N_i + \theta Dmn_j N_j + \theta Dmn_k N_k) ds_n \quad (F19)$$

Onde  $m$  e  $n$  assumem valores 1 e 2 para representar as componentes do tensor de dispersão. A integração resultante para cada plano é:

$$\theta Dmn_{S1} = \frac{5}{12} (\theta Dmn_i + \theta Dmn_j) + \frac{1}{6} \theta Dmn_k \quad (F20)$$

$$\theta Dmn_{S2} = \frac{5}{12} (\theta Dmn_i + \theta Dmn_k) + \frac{1}{6} \theta Dmn_j \quad (F21)$$

As dispersões  $\theta Dmn_i$ ,  $\theta Dmn_j$ , e  $\theta Dmn_k$  representam os valores nodais. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\theta D11 = \alpha_l \frac{q_{11}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{22}^2}{q} + \theta D_d \tau \quad (F22)$$

$$\theta D22 = \alpha_l \frac{q_{22}^2}{q} + \alpha_t \frac{q_{11}^2}{q} + \theta D_d \tau \quad (F23)$$

$$\theta D12 = \theta D21 = (\alpha_l - \alpha_t) \frac{q_{11} q_{22}}{q} \quad (F24)$$

$$\tau = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \quad (\text{F25})$$

Sendo  $\alpha_l$  e  $\alpha_t$  as dispersividades longitudinal e transversal, respectivamente.  $D_d$  é o coeficiente de difusão molecular,  $\tau$  a tortuosidade e  $\theta_s$ , o teor de umidade volumétrico saturado.

Os símbolos  $q11_{s_n}$ ,  $q12_{s_n}$ ,  $q21_{s_n}$ ,  $q22_{s_n}$  em F16, representam as componentes direcionais da vazão específica do fluido nos segmentos internos  $S1$  e  $S2$ . Os valores foram obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada segmento, como colocado na Equação F26.

$$qmn_{s_n} = \int_{s_n} (qmn_i N_i + qmn_j N_j + qmn_k N_k) ds_n \quad (\text{F26})$$

Onde  $m$  e  $n$  assumem valores 1 e 2 para representar as componentes direcionais do fluxo. A integração resultante para cada segmento é:

$$qmn_{s1} = \frac{5}{12}(qmn_i + qmn_j) + \frac{1}{6}qmn_k \quad (\text{F27})$$

$$qmn_{s2} = \frac{5}{12}(qmn_i + qmn_k) + \frac{1}{6}qmn_j \quad (\text{F28})$$

As vazões  $qmn_i$ ,  $qmn_j$  e  $qmn_k$  representam os valores nodais. Esses valores são obtidos a partir da solução do problema de fluxo e são determinados para cada passo de tempo.

### F.3. Efeito do Contorno

Quando os segmentos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos de fluxos nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. No caso da Figura F,1 isto acontece para os subvolumes nos elementos E2 e E3. Nesta figura são mostradas as componentes do vetor normal (para fora) atuando no segmento externo (Sb) do Elemento E2. O segmento Sb é o segmento Sb2 correspondente do elemento E2. Os efeitos dos fluxos nesses contornos são incorporados na Equação F12.

Para manter a generalidade da formulação, são discretizados os segmentos Sb1 e Sb2 considerando que ambos coincidem com o contorno.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação F12 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação F29.

$$\Omega_c = (q_1 S_{b1} C_1 + q_2 S_{b2} C_2) 2b \tag{F29}$$

Onde  $Q_{c1}$  e  $Q_{c2}$  representam as vazões por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e  $S_{b1}$ ,  $S_{b2}$  e  $2b$  os comprimentos dos segmentos mencionados e a abertura da fratura, respectivamente. As grandezas  $C_1$  e  $C_2$  são os valores de concentração com que os vírus são injetados nos segmentos referidos. A Equação F29 corresponde à condição de contorno do tipo Neuman.

- se o fluxo não for conhecido, é o contorno corresponder com uma face onde existe fluxo de vírus, então essa parcela do fluxo deverá ser acrescentada na Equação F12. Os segmentos no contorno são integrados da seguinte forma

$$\int_{S_{b1}} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md} C'_f)}{\partial x_j})] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{S_{b2}} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md} C'_f)}{\partial x_j})] n_{isb2} ds_{b2} + \tag{F30}$$

$$\int_{S_{b1}} [2b q_{fi} (N_{ma} C'_f)] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{S_{b2}} [2b q_{fi} (N_{ma} C'_f)] n_{isb2} ds_{b2} = 0$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não aos nós).

A integral resultante é:

$$(A_{dc} + A_{ac}) C'_f \tag{F31}$$

Onde:

$$A_{dc} = \int_{S_{b1}} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j})] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{S_{b2}} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j})] n_{isb2} ds_{b2} =$$

$$= -2b \left[ \sum_{n=1}^2 S_{bn} [(\theta D11_{Sbn} b_i + \theta D12_{Sbn} c_i) n_{1Sbn} + (\theta D21_{Sbn} b_i + \theta D22_{Sbn} c_i) n_{2Sbn}] \right. \tag{F32}$$

$$\left. \sum_{n=1}^2 S_{bn} [(\theta D11_{Sbn} b_j + \theta D12_{Sbn} c_j) n_{1Sbn} + (\theta D21_{Sbn} b_j + \theta D22_{Sbn} c_j) n_{2Sbn}] \right.$$

$$\left. \sum_{n=1}^2 S_{bn} [(\theta D11_{Sbn} b_k + \theta D12_{Sbn} c_k) n_{1Sbn} + (\theta D21_{Sbn} b_k + \theta D22_{Sbn} c_k) n_{2Sbn}] \right]$$

$$\begin{aligned}
 A_{ac} &= \int_{Sb1} [2b \ q_{fi}(N_{ma})]n_{isb1} ds_{b1} + \int_{Sb2} [2b \ q_{fi}(N_{ma})]n_{isb2} ds_{b2} = \\
 &= 2b \left[ \sum_{n=1}^2 S_{bn} [(q11_{Sb_n} + q12_{Sb_n})n_{1Sb_n} + (q21_{Sb_n} + q22_{Sb_n})n_{2Sb_n}]N_{isb_n} \right. \\
 &\quad \left. \sum_{n=1}^2 S_{bn} [(q11_{Sb_n} + q12_{Sb_n})n_{1Sb_n} + (q21_{Sb_n} + q22_{Sb_n})n_{2Sb_n}]N_{jsb_n} \right. \\
 &\quad \left. \sum_{n=1}^2 S_{bn} [(q11_{Sb_n} + q12_{Sb_n})n_{1Sb_n} + (q21_{Sb_n} + q22_{Sb_n})n_{2Sb_n}]N_{ksb_n} \right] \quad (F33)
 \end{aligned}$$

Os valores  $S_{bn}$  em F32 e F33 representam os comprimentos dos segmentos externos. O subíndice  $n$  assume valores 1 em Sb1 e 2 em Sb2. O símbolo  $s_{bn}$ , quando usado como subíndice em F32 e F33, refere-se aos valores relativos ao plano  $S_{bn}$  correspondente.

Os valores de dispersão e vazão nos segmentos externos são dados por:

$$\theta Dmn_{sb1} = \frac{3}{4}(\theta Dmn_i) + \frac{1}{4}(\theta Dmn_j) \quad (F34)$$

$$\theta Dmn_{sb2} = \frac{3}{4}(\theta Dmn_i) + \frac{1}{4}(\theta Dmn_k) \quad (F35)$$

$$qmn_{sb1} = \frac{3}{4}(qmn_i) + \frac{1}{4}(qmn_j) \quad (F36)$$

$$qmn_{sb2} = \frac{3}{4}(qmn_i) + \frac{1}{4}(qmn_k) \quad (F37)$$

As Equações F31 a F33 definem a discretização da condição de contorno do domínio. No caso de se considerar uma condição do tipo Cauchy, ambas as matrizes  $A_{dc}$  e  $A_{ac}$  devem ser avaliadas. No caso de se considerar uma condição de contorno do tipo gradiente nulo, somente a matriz  $A_{ac}$  deve se avaliar.

#### F.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

Incorporando F29 e F31 em F12 obtém-se a seguinte expressão:

$$F_1 \left( \frac{\partial(\theta + A_s K_{df})C_f}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{str f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} \right) + \quad (F38)$$

$$(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})C_f' + F_1 Q_{\mu f} = \Omega + \Omega_c$$

Considerando as concentrações sorvidas e filtradas dadas pelas equações F39 a F41, e acoplando junto à Equação F38 obtém-se a equação discretizada final.

$$\frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} = (\theta C_f K_{atf} \psi_{atf} - S_{din f} A_s K_{det f} - S_{din f} A_s \mu_{din f}) \quad (F39)$$

$$\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} = (\theta C_f K_{strf} \psi_{strf} - A_s S_{strf} \mu_{strf}) \quad (F40)$$

$$\frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} = (\theta C_f K_{awf} \psi_{awf} - A_{awf} \Gamma_f K_{dawf} - A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf}) \quad (F41)$$

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle do nó  $i$  é:

$$F_1 \left( \frac{\partial(\theta + A_s K_{df}) C_f}{\partial t} \right) + F_1 (\theta K_{atf} \psi_{atf} + \theta K_{strf} \psi_{strf} + \theta K_{awf} \psi_{awf}) C_f + \quad (F42)$$

$$(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac}) C_f' = \Omega + \Omega_c + F_1 (S_{din f} A_s K_{det f}) + F_1 (A_{awf} \Gamma_f K_{dawf})$$

As matrizes  $A_{dc}$  e  $A_{ac}$  só precisam se avaliadas quando algum plano externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

## F.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em F42 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo. A integração de F42 resulta em:

$$F_1 \frac{(\theta + A_s K_{df})_{t+1} C_{f(t+1)}}{\Delta t} + F_1 (\theta K_{atf} \psi_{atf} + \theta K_{strf} \psi_{strf} + \theta K_{awf} \psi_{awf})_{t+1} C_{f(t+1)} + \quad (F43)$$

$$(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1} C_{f(t+1)}' =$$

$$\Omega + \Omega_c + F_1 (S_{din f} A_s K_{det f})_{t+1} + F_1 (A_{awf} \Gamma_f K_{dawf})_{t+1} + F_1 \frac{(\theta + A_s K_{df})_t C_{f(t)}}{\Delta t}$$

Onde  $t+1$  e  $t$  indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo), respectivamente. Na Equação F43, os valores  $\theta$ ,  $A_s$ ,  $K_{df}$ ,  $K_{atf}$ ,  $K_{strf}$ ,  $K_{awf}$ ,  $\psi_{atf}$ ,  $\psi_{strf}$ ,  $\psi_{awf}$ ,  $A_{awf}$ ,  $K_{detf}$ ,  $K_{dawf}$ ,  $S_{din f}$  e  $\Gamma_f$  são grandezas relativas ao nó  $i$ , isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó  $i$ , é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\begin{aligned} & \sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(\theta + A_s K_{df})_{t+1,e} C_{f(t+1)}}{\Delta t} + F_{1e} (\theta K_{atf} \psi_{atf} + \theta K_{strf} \psi_{strf} + \theta K_{awf} \psi_{awf})_{t+1,e} C_{f(t+1)} \right] \\ & + \sum_{e=1}^{NE} [(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1,e} C'_{f(t+1),e}] = \\ & \sum_{e=1}^{NE} [\Omega_e + \Omega_{ce} + F_{1e} (S_{din f} A_s K_{det f})_{t+1,e} + F_{1e} (A_{awf} \Gamma_f K_{dawf})_{t+1,e} + F_{1e} \frac{(\theta + A_s K_{df})_{t,e} C_{f(t)}}{\Delta t}] \end{aligned} \quad (F44)$$

O vetor  $C'_{fe}$  contém os valores nodais das concentrações do nó  $i$  e de todos aqueles nós em conectividade com ele. A grandeza  $C_f$  (sem o subíndice “e”) em F44 é relativa ao nó  $i$ . A Equação F44 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

## APÊNDICE G: Solução Numérica – Equações Complementares

As equações que descrevem a variação das concentrações sorvidas e filtradas, na matriz e na fratura, foram descritas no Apêndice A. Neste Apêndice G é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). Cada equação é integrada para os subvolumes de controle do nó  $i$ , mostrados nas Figuras C1 e D1 dos Apêndices C e D, respectivamente. A somatória das parcelas de cada subvolume define a equação discretizada para o volume de controle.

### G.1. Equações da Matriz

As equações de continuidade para a matriz são:

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} dx dy dz dt = (\theta CK_{att} \psi_{att} - S_{din} \rho_b K_{det} - S_{din} \rho_b \mu_{din}) dx dy dz dt \quad (G1)$$

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} dx dy dz dt = (\theta CK_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str}) dx dy dz dt \quad (G2)$$

$$\frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} dx dy dz dt = (\theta CK_{aw} \psi_{aw} - A_{aw} \Gamma K_{daw} - A_{aw} \Gamma \mu_{aw}) dx dy dz dt \quad (G3)$$

Integrando G1, G2 e G3 no subvolume de controle da Figura C1 através do esquema de resíduos ponderados, tem-se:

$$\int_V W_1 \left[ \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} - (\theta CK_{att} \psi_{att} - S_{din} \rho_b K_{det} - S_{din} \rho_b \mu_{din}) \right] dV = 0 \quad (G4)$$

$$\int_V W_1 \left[ \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} - (\theta CK_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str}) \right] dV = 0 \quad (G5)$$

$$\int_V W_1 \left[ \frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} - (\theta CK_{aw} \psi_{aw} - A_{aw} \Gamma K_{daw} - A_{aw} \Gamma \mu_{aw}) \right] dV = 0 \quad (G6)$$

Para o fator de ponderação,  $W_1 = 1$ , as integrais resultantes são:

$$F_1 \left[ \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} - (\theta CK_{att} \psi_{att} - S_{din} \rho_b K_{det} - S_{din} \rho_b \mu_{din}) \right] = 0 \quad (G7)$$

$$F_1 \left[ \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} - (\theta CK_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str}) \right] = 0 \quad (G8)$$

$$F_1 \left[ \frac{\partial(A_{aw} \Gamma)}{\partial t} - (\theta CK_{aw} \psi_{aw} - A_{aw} \Gamma K_{daw} - A_{aw} \Gamma \mu_{aw}) \right] = 0 \quad (G9)$$

Onde  $F_1 = \frac{V_E}{4}$ , e  $V_E$  o volume do tetraedro. Isto é, o volume do subvolume

de controle corresponde com a quarta parte do volume do elemento.

Substituindo os termos transientes em G7 a G9 por aproximações em diferenças finitas ascendentes, e somando os subvolumes de controle do nó  $i$  para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence, obtém-se a equação discretizada final para o volume de controle do nó  $i$ .

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} \rho_{b,e} \left( \frac{1}{\Delta t} + K_{det} + \mu_{din} \right)_e S_{din,(t+1)} = \sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(\rho_{b,e} S_{din})_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta CK_{att,e} \psi_{att,e})_{t+1} \right] \quad (G10)$$

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} \rho_{be} \left( \frac{1}{\Delta t} + \mu_{str} \right)_e S_{str,(t+1)} = \sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(\rho_{b,e} S_{str})_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta CK_{str,e} \psi_{str,e})_{t+1} \right] \quad (G11)$$

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{aw,(t+1)} \left( \frac{1}{\Delta t} + K_{daw} + \mu_{aw} \right)_e \Gamma_{t+1} = \sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(A_{aw} \Gamma)_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta CK_{aw,e} \psi_{aw,e})_{t+1} \right] \quad (G12)$$

## G.2. Equações da Fratura

As equações de continuidade para a fratura são:

$$2b \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} dx dz dt = 2b (\theta C_f K_{atf} \psi_{atf} - S_{din f} A_s K_{det f} - S_{din f} A_s \mu_{din f}) dx dz dt \quad (G13)$$

$$2b \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} dx dz dt = 2b(\theta C_f K_{strf} \psi_{strf} - A_s S_{strf} \mu_{strf}) dx dz dt \quad (G14)$$

$$2b \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} dx dz dt = 2b(\theta C_f K_{awf} \psi_{awf} - A_{awf} \Gamma_f K_{dawf} - A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf}) dx dz dt \quad (G15)$$

Integrando G13, G14 e G15 no subvolume de controle E1 da Figura D1 através do esquema de resíduos ponderados, tem-se:

$$\int_A W_1 [2b \frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} - 2b(\theta C_f K_{atf} \psi_{atf} - S_{din f} A_s K_{det f} - S_{din f} A_s \mu_{din f})] dA = 0 \quad (G16)$$

$$\int_A W_1 [2b \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} - 2b(\theta C_f K_{strf} \psi_{strf} - A_s S_{strf} \mu_{strf})] dA = 0 \quad (G17)$$

$$\int_A W_1 [2b \frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} - 2b(\theta C_f K_{awf} \psi_{awf} - A_{awf} \Gamma_f K_{dawf} - A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf})] dA = 0 \quad (G18)$$

Para o fator de ponderação,  $W_1 = 1$ , as integrais resultantes são:

$$F_1 [\frac{\partial(A_s S_{din f})}{\partial t} - (\theta C_f K_{atf} \psi_{atf} - S_{din f} A_s K_{det f} - S_{din f} A_s \mu_{din f})] = 0 \quad (G19)$$

$$F_1 [\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} - (\theta C_f K_{strf} \psi_{strf} - A_s S_{strf} \mu_{strf})] = 0 \quad (G20)$$

$$F_1 [\frac{\partial(A_{awf} \Gamma_f)}{\partial t} - (\theta C_f K_{awf} \psi_{awf} - A_{awf} \Gamma_f K_{dawf} - A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf})] = 0 \quad (G21)$$

Onde  $F_1 = 2b \frac{A_E}{3}$ , e  $A_E$  a área do elemento. Isto é, a área do subvolume de

controle corresponde com um terço da área do elemento.

Substituindo os termos transientes em G19 a G21 por aproximações em diferenças finitas ascendentes, e somando os subvolumes de controle do nó  $i$  para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence, obtém-se a equação discretizada final para o volume de controle do nó  $i$ .

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{se} \left( \frac{1}{\Delta t} + K_{\det f} + \mu_{din f} \right)_e S_{din f, (t+1)} =$$

$$\sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(A_{se} S_{din f})_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta C_f K_{atf, e} \psi_{atf, e})_{t+1} \right]$$
(G22)

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{se} \left( \frac{1}{\Delta t} + \mu_{strf} \right)_e S_{strf, (t+1)} =$$

$$\sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(A_{se} S_{strf})_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta C_f K_{strf} \psi_{strf})_{t+1} \right]$$
(G23)

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{awf, (t+1)} \left( \frac{1}{\Delta t} + K_{dawf} + \mu_{awf} \right)_e \Gamma_{f, (t+1)} =$$

$$\sum_{e=1}^{NE} \left[ F_{1e} \frac{(A_{awf} \Gamma_f)_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta C_f K_{awf, e} \psi_{awf, e})_{t+1} \right]$$
(G24)

Todos os valores mostrados nas Equações G10 a G12 e G22 a G24 são relativos ao nó de integração (no caso do exemplo nó i). A formulação é condensada, e por isto não foram empregadas funções de interpolação nas integrações.

## APÊNDICE H: Função de Interpolação Exponencial

As equações diferenciais de continuidade respondem à descrição em termos matemáticos dos processos físicos envolvidos num determinado problema. Cada termo da equação diferencial pode ser interpretado desde o ponto de vista físico e desde o ponto de vista matemático. No caso da equação de continuidade para o problema de transporte de massa, os processos advectivos e dispersivos têm interpretação física e matemática. Desde o ponto de vista matemático, o termo dispersivo é do tipo elíptico e transmite as informações em todas as direções do domínio. O termo advectivo é do tipo parabólico e transmite as informações apenas no sentido do fluxo. Qualquer função de interpolação que pretenda representar a variação no espaço das grandezas transportadas por advecção e/ou dispersão, deve também ser capaz de reproduzir os comportamentos elípticos e parabólicos. Neste trabalho de tese, os termos dispersivos foram interpolados com funções lineares, e os termos advectivos com uma função exponencial.

A função de interpolação exponencial empregada nesta tese foi inicialmente proposta por Baliga e Patankar (1980) para estudar problemas de advecção e difusão em elementos finitos triangulares. No ano de 1986, Prakash apresentou uma versão modificada desta função ao incorporar o efeito dos termos fontes (Prakash, 1986). No mesmo ano de 1986, LeDain Muir e Baliga apresentaram a extensão da formulação original para problemas tridimensionais com elementos tetraédricos. LeDain Muir e Baliga (1986) destacam que a função de interpolação exponencial não necessariamente garante continuidade  $C^0$  nos contornos dos elementos (não garante continuidade da concentração por exemplo). Porém, esses autores também ressaltam que a função de interpolação e suas derivadas são contínuas dentro do elemento e, portanto contínuas nos contornos dos volumes finitos. Na medida em que o número de Peclet diminui, o valor da função exponencial tende ao valor da função de interpolação linear. Isto é, a função de interpolação linear é um caso particular da função exponencial.

A seguir é descrita a mecânica da aplicação desta função para o caso bidimensional.

Morfologicamente a função exponencial apresenta o mesmo aspecto da função linear tradicionalmente empregada para interpolar em elementos triangulares. A diferença está nas coordenadas utilizadas na interpolação. Essas coordenadas resultam de transformações exponenciais das coordenadas do problema para um novo sistema de coordenadas paralelo ao sentido do fluxo. A interpolação de uma variável primária arbitrária ( $C$ ) é dada pela seguinte expressão:

$$C = A\xi + BY + D \quad (\text{H1})$$

Onde  $A$ ,  $B$  e  $D$  são valores constantes e  $\xi$  e  $Y$  as coordenadas do ponto onde o valor de  $C$  será determinado. A maneira como as coordenadas  $\xi$  e  $Y$  são obtidas é explicada a seguir.

Considere o elemento triangular mostrado na Figura H1. Nessa figura é mostrado o sistema global de coordenadas definido pelos eixos  $X_1$  e  $X_2$ . Dentro do elemento está localizado o ponto  $B$ , que corresponde ao baricentro, definido como o ponto de encontro das medianas (as linhas tracejadas). Vale ressaltar que as medianas correspondem com os contornos dos volumes de controle para cada nó dentro do elemento. Adicionalmente é mostrada a direção do fluxo (vetor  $\vec{V}$ ). Esse vetor é a resultante do valor médio das velocidades nodais (no sistema global de coordenadas) calculada no baricentro.

$$\vec{V} = \left( \frac{v_{i,x1} + v_{j,x1} + v_{k,x1}}{3} \right) \vec{x}_1 + \left( \frac{v_{i,x2} + v_{j,x2} + v_{k,x2}}{3} \right) \vec{x}_2 = v_{x1} \vec{x}_1 + v_{x2} \vec{x}_2 \quad (\text{H2})$$

Onde  $\vec{x}_1$  e  $\vec{x}_2$  são vetores unitários, e  $v_{i,x1}, v_{j,x1}, v_{k,x1}, v_{i,x2}, v_{j,x2}, v_{k,x2}$  as componentes nodais da velocidade nas direções  $X_1$  e  $X_2$ .

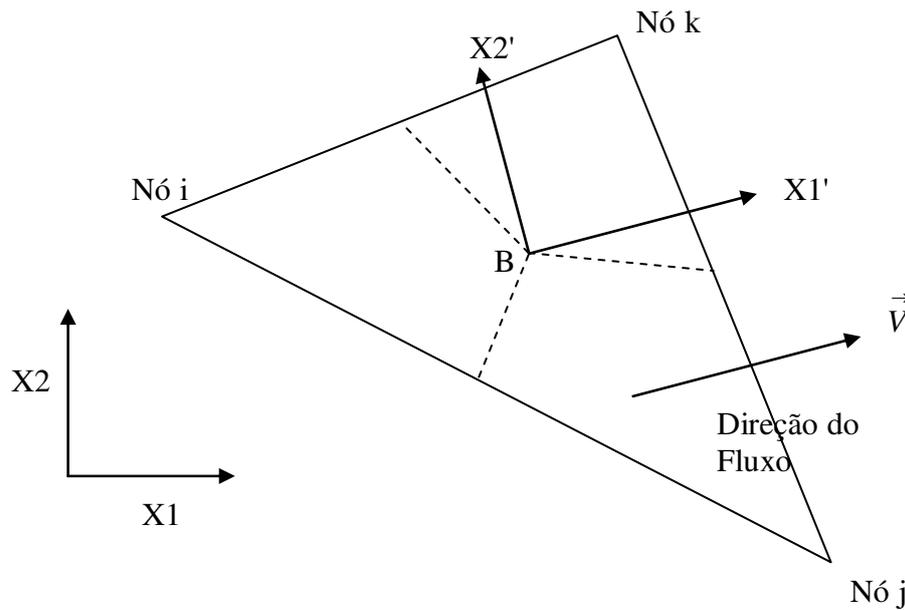


Figura H1. Sistemas de Coordenadas para a aplicação da função de interpolação exponencial.

Na mesma Figura H1 é mostrado um sistema local de coordenadas definido pelos eixos X1' e X2'. A origem desse novo sistema de coordenadas é feita coincidir com o baricentro do elemento, e a direção de X1' é escolhida de maneira tal que seja paralela à direção do vetor  $\vec{V}$ . Desta forma o eixo X1' coincide com a direção do fluxo. A direção do eixo X2' é obtida por ortogonalidade entre a normal ao plano do elemento e o eixo X1'. As coordenadas globais e o vetor de fluxo são transformados para este novo sistema de coordenadas.

O vetor de velocidade média do elemento, no novo sistema de coordenadas X1', X2' é dado por:

$$\vec{V}_n = (\sqrt{v_{x1}^2 + v_{x2}^2}) \vec{x}_1' + (0) \vec{x}_2' = V_n \vec{x}_1' \tag{H3}$$

Onde  $\vec{x}_1'$  e  $\vec{x}_2'$  são os vetores unitários no novo sistema de coordenadas e  $V_n$  velocidade resultante (módulo do vetor  $\vec{V}$ ).

As coordenadas nodais são transformadas linearmente do sistema global X1, X2, para o sistema local X1', X2', obtendo-se assim as novas coordenadas  $x1'_i, x1'_j, x1'_k, x2'_i, x2'_j, x2'_k$ .

A partir das novas coordenadas no sistema local, são obtidos os valores máximo e mínimo no eixo  $X1'$ .

$$X_{\max} = \text{Máximo}(x1'_i, x1'_j, x1'_k) \quad (\text{H4})$$

$$X_{\min} = \text{Mínimo}(x1'_i, x1'_j, x1'_k) \quad (\text{H5})$$

Seguidamente é definido o valor do número de Peclet para o elemento.

$$P_e = \rho V_n \frac{(X_{\max} - X_{\min})}{D} \quad (\text{H6})$$

Onde  $\rho$  é a massa específica do fluido e  $D$  a dispersão. Deve ser dito que a formulação original foi proposta para problemas difusivos e não dispersivos, pelo que  $D$  representa originalmente o coeficiente de difusão.

Na formulação apresentada nesta pesquisa  $D$  corresponde à dispersão representativa na direção do fluxo (eixo  $X1'$ ). O valor de  $D$  foi obtido a partir do tensor de dispersão médio (do elemento) da seguinte forma:

$$D = \sqrt{(D11_e + D12_e)^2 + (D21_e + D22_e)^2} \quad (\text{H7})$$

Onde  $D11_e, D12_e, D21_e, D22_e$ , são os valores (médios) do tensor de dispersão no baricentro do elemento. Esses valores foram obtidos por interpolação linear dos valores nodais (média aritmética).

A massa específica na Equação H6 surge na formulação original de Baliga e Patankar, devido à variável transportada estar referida à massa do material que a transporta. Nesta pesquisa, a variável transportada corresponde à concentração dos vírus, e é referida ao volume e não à massa do fluido. Por esse motivo o valor  $\rho$  empregado nesta tese é  $\rho = 1$ . O símbolo  $\rho$  é utilizado nas equações deste apêndice para manter a conformidade com a formulação original.

A partir do número de Peclet calculado, é feita uma nova transformação apenas das coordenadas do eixo  $X1'$ . Essa nova transformação é realizada com a função exponencial mostrada na Equação H8.

$$\xi = \frac{D}{\rho V_n} \left[ \text{Exp}\left(P_e \frac{X - X_{\max}}{X_{\max} - X_{\min}}\right) - 1 \right] \quad (\text{H8})$$

Com  $\xi$  e  $Y = X2'$  são finalmente definidos os valores das coordenadas a serem empregadas na Equação H1. A obtenção das constantes  $A$ ,  $B$  e  $D$  da Equação H1 segue as mesmas regras da função de interpolação linear tradicional.

Para o caso de interpolação em tetraedros, a Equação H1 é modificada, se tornando:

$$C = A\xi + BY + DZ + E \quad (\text{H9})$$

Onde os valores  $\xi$  são obtidos com (H8) e os valores Y e Z representam as coordenadas nos eixos ortogonais com origem no baricentro do tetraedro (homologas ao eixo X2'). As constantes são determinadas a partir das novas coordenadas  $\xi$ , Y e Z de maneira similar à função de interpolação linear.

A seguir é mostrada a aplicação da função exponencial para um caso bidimensional simples. Considere o triângulo da Figura H2, com o sistema de global de coordenadas X1 e X2. Para cada nó do elemento são mostradas as coordenadas no sistema global. Para efeitos da simplicidade, a direção do fluxo no baricentro coincide com a direção do eixo X1. O módulo do vetor de velocidade é considerado unitário  $V_n = 1$ . Desta forma, o novo sistema local de coordenadas X1'-X2' coincide com o sistema global.

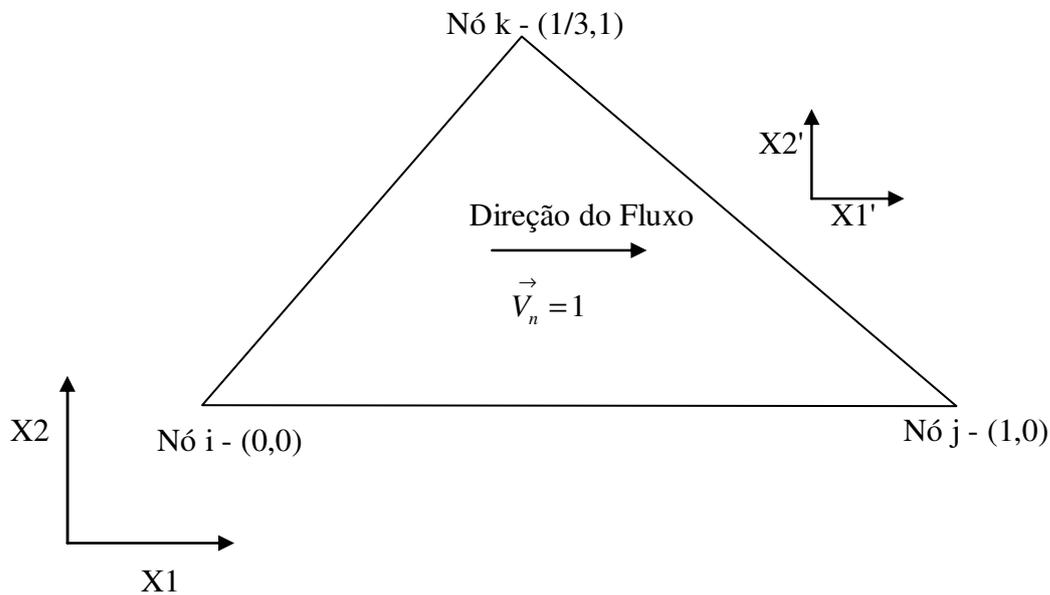


Figura H2. Exemplo de Aplicação.

Assim, as coordenadas nodais no novo sistema local são:

	Coord. X1	Coord. X2	Coord. X1'	Coord. X2'=Y
Nó i	0	0	-0,444	-0,333
Nó j	1	0	0,556	-0,333
Nó k	1/3	1	-0,111	0,667

Para estas coordenadas  $x_{max} - x_{min} = 1,0$

A partir das coordenadas anteriores, foram avaliadas as funções de interpolação no baricentro do elemento para dois casos de número de Peclet.

$P_e = 0.0001$  ( corresponde a  $D = 10000$  )

$P_e = 10000$  ( corresponde a  $D = 0,0001$  )

Os valores das coordenadas  $\xi$  Y e das funções de interpolação nodais são mostrados a seguir.

	Coord. $\xi$ para <b>D = 10000</b>	Coord. $\xi$ para <b>D = 0,0001</b>	Coord. Y	Interpolação para <b>Pe = 0.0001</b>	Interpolação para <b>Pe = 10000</b>
Nó i	-1,000	-0,0001	-0,333	1/3	2/3
Nó j	0,000	0	-0,333	1/3	0
Nó k	-0,667	-0,0001	0,667	1/3	1/3

Dos resultados anteriores é possível concluir que:

Para números de Peclet baixos, isto é, para problemas de dispersão dominante, a função exponencial reproduz os mesmos valores que a função linear.

Para números de Peclet altos, isto é, problemas com advecção dominante, a função exponencial consegue reproduzir o efeito do sentido do fluxo. No caso do exemplo anterior, o valor no baricentro da variável interpolada é dado apenas pela combinação dos valores dos nós i e k. Isto é fisicamente correto uma vez que informação é transmitida no sentido do nó j. A informação do nó j não pode ser transmitida a montante.

## Anexo 1: Soluções Analíticas

São mostradas neste anexo, as soluções analíticas empregadas no Capítulo 5 para validar a solução numérica do programa VirTran-3D.

### An.1. Fluxo Saturado Unidimensional em Regime Transiente

Solução apresentada por Carslaw e Jaeger (1946) (apud Frind,1995) para condição de contorno do tipo Dirichlet.

$$\frac{u(x,t)}{u_o} = \left\{ 1 - \frac{x}{L} \right\} - \frac{2}{\pi} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n} \operatorname{sen} \left\{ \frac{n\pi x}{L} \right\} \exp \left\{ \frac{-n^2 \pi^2 Kt}{L^2 S_s} \right\} \quad (\text{An.1})$$

onde

$u$  = carga de pressão (L)

$u_o$  = carga de pressão imposta (L)

$x$  = distância (L)

$L$  = comprimento do domínio (L)

$t$  = tempo (T)

$K$  = permeabilidade saturada (L/T)

$S_s$  = armazenamento específico (1/L)

### An.2. Transporte unidimensional de vírus no meio poroso saturado

Soluções apresentadas por Sim e Chrysikopoulos (1995) para condições de contorno do tipo Dirichlet e Neuman.

Para Condição de Dirichlet:

$$C(x,t) = C_0 \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} \right] \left\{ \int_0^t \text{H} \left( \text{Exp}(-H\tau) \int_0^\tau \frac{xJ_0 \left[ 2\sqrt{B\zeta(\tau-\zeta)} \right]}{2\sqrt{D\pi\zeta^3}} \text{Exp} \left[ \frac{-x^2}{4D\zeta} + \left( H - A - \frac{U^2}{4D} \right) \zeta \right] d\zeta \right) d\tau \right. \\ \left. + \text{Exp}(-Ht) \int_0^t \frac{xJ_0 \left[ 2\sqrt{B\zeta(t-\zeta)} \right]}{2\sqrt{D\pi\zeta^3}} \text{Exp} \left[ \frac{-x^2}{4D\zeta} + \left( H - A - \frac{U^2}{4D} \right) \zeta \right] d\zeta \right\} \quad (\text{An.2})$$

Para Condição de Neuman:

$$C(x,t) = \frac{C_0 U}{\sqrt{D}} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} \right] \left\{ \int_0^t \int_0^\tau \text{H} \text{Exp}(-H\tau) J_0 \left[ 2\sqrt{B\zeta(\tau-\zeta)} \right] * \right. \\ \left. \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi\zeta}} \text{Exp} \left[ \frac{-x^2}{4D\zeta} + \left( H - A - \frac{U^2}{4D} \right) \zeta \right] - \frac{U}{2\sqrt{D}} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} + (H-A)\zeta \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x}{2\sqrt{D\zeta}} + \frac{U}{2} \sqrt{\frac{\zeta}{D}} \right] \right\} d\zeta d\tau \right. \\ \left. + \text{Exp}(-Ht) \int_0^t J_0 \left[ 2\sqrt{B\zeta(\tau-\zeta)} \right] \left\{ \frac{1}{\sqrt{\pi\zeta}} \text{Exp} \left[ \frac{-x^2}{4D\zeta} + \left( H - A - \frac{U^2}{4D} \right) \zeta \right] \right. \right. \\ \left. \left. - \frac{U}{2\sqrt{D}} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} + (H-A)\zeta \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x}{2\sqrt{D\zeta}} + \frac{U}{2} \sqrt{\frac{\zeta}{D}} \right] \right\} d\zeta \right\} \quad (\text{An.3})$$

Onde

$$A = K_{att} + \mu_l \quad (\text{An.4})$$

$$B = \frac{K_{att} K_{det} \theta}{\rho} \quad (\text{An.5})$$

$$H = \frac{K_{det} \theta}{\rho} + \mu_{din} \quad (\text{An.6})$$

$C$  = Concentração na fase líquida ( vírus/L<sup>3</sup>)

$C_0$  = Concentração na fase líquida imposta no contorno ( vírus/L<sup>3</sup>)

$U$  = velocidade intersticial do fluido (L/T)

$D$  = dispersão dos vírus (L<sup>2</sup>/T)

$K_{att}$  = taxa de adsorção (1/T)

$K_{det}$  = taxa de desorção (1/T)

$\mu_l$  = taxa de inativação dos vírus na fase líquida (1/T)

$\mu_{din}$  = taxa de inativação dos vírus na fase sorvida (1/T)

$\theta$  = teor de umidade volumétrico saturado ( $L^3/L^3$ )

$x$  = distância (L)

$t$  = tempo (T)

$J_0$  = Função de Bessel do primeiro tipo de ordem zero.

### An.3.

#### Transporte unidimensional de colóides numa fratura saturada com abertura constante

Soluções apresentadas por Addel-Salam e Chrysikopoulos (1994) para condições de contorno do tipo Dirichlet e Neuman.

Para Condição de Dirichlet:

$$C(x,t) = \frac{C_o}{2} \left\{ \begin{array}{l} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} (1 - \xi) \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x - Ut\xi}{2\sqrt{Dt}} \right] \\ + \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} (1 + \xi) \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x + Ut\xi}{2\sqrt{Dt}} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{An.7})$$

Para Condição de Neuman:

$$C(x,t) = C_0 \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{1 + \xi} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} (1 - \xi) \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x - Ut\xi}{2\sqrt{Dt}} \right] \\ + \frac{1}{1 - \xi} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{2D} (1 + \xi) \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x + Ut\xi}{2\sqrt{Dt}} \right] \\ + \frac{Ub^2}{4Dk} \text{Exp} \left[ \frac{Ux}{D} - \frac{2Ukt}{b^2} \right] \text{Erfc} \left[ \frac{x + Ut\xi}{2\sqrt{Dt}} \right] \end{array} \right\} \quad (\text{An.8})$$

Onde:

$$\xi = \left( 1 + \frac{8kD}{Ub^2} \right)^{1/2} \quad (\text{An.9})$$

$C$  = Concentração na fase líquida ( # colóides/L<sup>3</sup>)

$C_0$  = Concentração na fase líquida imposta no contorno ( # colóides/L<sup>3</sup>)

$U$  = velocidade intersticial do fluido (L/T)

$D$  = dispersão dos colóides (L<sup>2</sup>/T)

$k$  = coeficiente de deposição na fratura (L)

$b$  = abertura da fratura (L)

$x$  = distância (L)

$t$  = tempo (T)

# 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](#)