

# METODOLOGIA NUMÉRICO-ANALÍTICA BIDIMENSIONAL PARA TRANSPORTE DE CONTAMINANTE

Celme Tôres Costa<sup>1</sup> & Marco Aurélio Holanda de Castro<sup>2</sup>

**Resumo** – A dinâmica dos contaminantes em um sistema é um problema de natureza transiente e são traduzidos pelos modelos analíticos ou numéricos de transferência de massa. A modelagem e simulação desses fenômenos são feitas através da solução de uma equação diferencial parcial. A maioria dos problemas de transporte de contaminantes são resolvidos utilizando-se uma metodologia numérica para o espaço (Elementos Finitos, Diferenças Finitas, Elementos de Contorno) e o Método das Diferenças Finitas na discretização do tempo. O problema com tal metodologia é que, dependendo da relação entre o intervalo de tempo escolhido e o espaçamento entre os nós da malha pode ocorrer instabilidade e/ou oscilação numérica. Além disso, para minimizar a propagação do erro de um intervalo de tempo para outro, esta relação deve ser otimizada. Visando evitar tais problemas, este trabalho apresenta a formulação de uma metodologia numérico-analítica bidimensional para problemas transiente de transporte de contaminantes: numérica no que diz respeito ao espaço e analítica em relação ao tempo. A principal vantagem desse tipo de solução em comparação com a conhecida solução exclusivamente numérica é que não há necessidade de otimizar a relação entre o intervalo de tempo escolhido e o espaçamento entre os nós da malha.

**Abstract** – Contaminant soil dynamics is a time dependent problem which may be modeled by analytical and numerical mass transfer approaches. Simulating these phenomena results from a solution of partial differential equation. Usually these problems are solved using a numerical procedure for the space (Finite Element, Finite Difference and Boundary Element) and to deal with time it is used a Finite Difference scheme (central, backward or forward difference). One possible problem that may happen with the of this methodology is numerical oscillation and/or instability. Besides in order to minimize error propagation from one time interval to another, the ratio between the time interval and the grid space interval should be carefully chosen. In order to avoid these

---

<sup>1</sup> Doutoranda, Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Bloco 713, Cep. 60451-970, Fortaleza-CE, Brasil, Fone/Fax (85) 288.9589, [celme@deha.ufc.br](mailto:celme@deha.ufc.br)

<sup>2</sup> Prof. Adjunto, Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental, Universidade Federal do Ceará, Campus do Pici, Bloco 713, Cep. 60451-970, Fortaleza-CE, Brasil, Fone/Fax (85) 288.9589, [marco@ufc.br](mailto:marco@ufc.br)

problems, this work presents a new numerical-analytical formulation to solve time dependent mass transfer problems. The method proposed is numerical with respect to space and analytical in time. The main advantage of this solution is that it in no longer requires an optimization of the ratio time-space.

**Palavras-Chave** – transporte; métodos numéricos; contaminação.

## **INTRODUÇÃO**

O transporte de contaminantes considerando balanço de massa e os princípios de convecção e dispersão para problemas de transporte de contaminantes em solos, água subterrânea e superficial são descritos por equações diferenciais e tem gerado um grande número de trabalhos teóricos e experimentais nesta área. Na maioria dos casos essas equações diferenciais são não-lineares, necessitando de métodos numéricos para serem resolvidas. Dependendo da complexidade do domínio e das condições de contorno utilizadas essas equações diferenciais podem ser resolvidas por soluções analíticas, como no caso unidimensional, onde a equação de transporte de contaminantes se reduz a uma equação diferencial linear. Vários estudos apresentam a solução analítica destes casos (van Genuchten e Alves, 1982, Ségol, 1993; Leij e Toride, 1995). Embora as soluções analíticas sejam obtidas para condições restritas, elas têm muitas aplicações, tais como a validação de programas computacionais, prognóstico do transporte de contaminantes a longo termo (tempo ou distância), a análise de sensibilidade e a determinação dos parâmetros da equação de transporte de contaminante.

Algumas soluções analíticas da equação de transporte de contaminantes para o caso bidimensional e diferentes condições iniciais e do contorno são apresentadas nos trabalhos de Liu e Soni (1998); Park e Zhan (2001) e Cleary (1978). No entanto, para domínios mais complexos, as condições iniciais e condições de contorno são mais difíceis de serem obtidas e conseqüentemente as soluções analíticas não podem ser utilizadas. Nesses casos a equação de transporte de contaminante é resolvida por métodos numéricos. Os métodos numéricos mais utilizados para resolver a equação de transporte para os casos 2D (bidimensional) e 3D (tridimensional) são os métodos das diferenças finitas, elementos finitos, método das características, elementos de contorno e formulação de volume de controle. Existem três problemas associados com os métodos numéricos na solução da equação de transporte de contaminantes, são eles: oscilação numérica, dispersão numérica e a limitação computacional. Por exemplo, quando o processo dominante no transporte de contaminante é a difusão, como acontece para valores do número de Péclet muito grande, a oscilação numérica e a dispersão são maiores, gerando valores não condizentes com a realidade.

Esses problemas dificultam a aplicação dos métodos numéricos na solução da equação de transporte de contaminante.

Para se ter confiança em um certo esquema numérico, no sentido da garantia de que a solução obtida representa uma aproximação razoável da solução exata do problema matemático, é necessário que o esquema utilizado apresente propriedades de consistência, convergência e estabilidade. Essas propriedades são inerentes à solução e são funções dos erros envolvidos. A consistência está relacionada com a aproximação do sistema contínuo de equações por um sistema discreto. Convergência é a condição em relação a qual a solução do esquema aproximado tende para a solução exata da equação diferencial, à medida que se diminuem os incrementos espacial e temporal. E por fim, a estabilidade está relacionada com o esquema de integração no tempo. Quando um método numérico qualquer é instável, uma pequena perturbação, tal como um erro de truncamento, tende a crescer na medida em que o processo computacional avança no tempo. Na maioria das vezes, essa amplificação é de ordem exponencial e o erro cresce acima de limites razoáveis após um pequeno número de passos do processo computacional.

Visando evitar tais problemas, este trabalho propõe uma metodologia mista para os problemas transientes: numérica no que diz respeito ao espaço e analítica em relação ao tempo. A principal vantagem desse tipo de solução em comparação com a conhecida solução exclusivamente numérica é que não haveria necessidade de se otimizar a relação entre o intervalo de tempo escolhido e o espaçamento entre os nós da malha.

## METODOLOGIA NUMÉRICO-ANALÍTICA

A forma bidimensional da equação do transporte de contaminante para fluxo uniforme de água subterrânea é dada por (Istok, 1989):

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2(\theta C)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2(\theta C)}{\partial y^2} - \frac{\partial(v_x C)}{\partial x} - \frac{\partial(\rho K_d C)}{\partial t} - \lambda(\theta C + \rho K_d C) \quad (01)$$

Onde,  $\theta$  é conteúdo volumétrico de água no aquífero,  $C$  a concentração do contaminante (função do tempo),  $v_x$  a velocidade real da água na direção  $x$ ,  $D_x$  e  $D_y$  são os coeficientes de dispersão nas direções  $x$  e  $y$  respectivamente,  $\rho$  é a densidade do meio poroso (aquífero),  $K_d$  é a constante da isoterma de Freundlich e  $\lambda$  é o coeficiente de decaimento de primeira ordem do contaminante.

Quando se resolve um problema de transporte de contaminante através do método de elementos finitos, a concentração ( $C$ ) do contaminante em cada nó, é desconhecida. Assumindo uma solução aproximada para  $C$ ,  $\hat{C}$  na forma:

$$\hat{C}^{(e)}(x, y) = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} C_i \quad (02)$$

Onde,  $\hat{C}^{(e)}$  é a solução aproximada para a concentração do contaminante dentro do elemento  $e$ ;  $N_i^{(e)}$  são as funções de interpolação para cada nó do elemento  $e$  e  $C_i$  são as concentrações desconhecidas do contaminante de cada nó do elemento.

Quando a solução aproximada é substituída na equação (01), a equação diferencial não é totalmente satisfeita e ocorre um erro ou resíduo, em todos os pontos do domínio do problema. A contribuição do elemento  $e$  para o resíduo no nó  $i$  é:

$$Ri^{(e)} = - \iint_{A^{(e)}} W_i^{(e)}(x, y) \left[ D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\theta C^{(e)}) + D_y \frac{\partial^2}{\partial y^2} (\theta C^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial x} (V_x C^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial t} (\rho K_d C^{(e)}) - \lambda \left( \theta C^{(e)} + \rho K_d C^{(e)} - \frac{\partial}{\partial t} (\theta C^{(e)}) \right) \right] dx dy \quad (03)$$

$W_i^{(e)}$  é a função de peso para o nó  $i$  e os limites da integração são escolhidos para representar o volume do elemento. No método de Galerkin  $W_i^{(e)} = N_i^{(e)}$ .

Assumindo que as propriedades do meio poroso e a velocidade aparente da água subterrânea são constantes dentro do elemento (mas podem variar de um elemento para outro), a equação (03) pode ser escrita como:

$$Ri^{(e)} = - \iint_{A^{(e)}} N_i^{(e)}(x, y) \left[ D_x^{(e)} \theta^{(e)} \frac{\partial^2 \hat{C}^{(e)}}{\partial x^2} + D_y^{(e)} \theta^{(e)} \frac{\partial^2 \hat{C}^{(e)}}{\partial y^2} - \rho^{(e)} K_d^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial t} - \lambda (\theta^{(e)} \hat{C}^{(e)} + \rho^{(e)} K_d^{(e)} \hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial t} (\theta^{(e)} \hat{C}^{(e)}) \right] dx dy \quad (04)$$

$\theta^{(e)}$  é o conteúdo volumétrico da água no meio poroso dentro do elemento  $e$  e  $\lambda$  é propriedade do contaminante, não do meio poroso, sendo constante para todos os elementos.

O conteúdo volumétrico  $\theta^{(e)}$  e a velocidade aparente da água subterrânea  $v_x^{(e)}$  pode ou não mudar com o tempo, por isso, duas formulações separadas da equação (04) são possíveis.

É importante salientar que o caso de água subterrânea não pode ser analisado com formulações unidimensionais e os dados de um problema no estado permanente são sempre utilizados como um dado de entrada dos problemas no estado transiente.

No fluxo de água subterrânea no estado permanente (meio saturado ou insaturado), o conteúdo de água e a velocidade aparente são constantes para todos os passos de tempo. Eles são

constantes dentro do elemento, mas podem variar de um elemento para outro. Neste caso, a equação (04) se torna:

$$\begin{aligned}
 R_i^{(e)} = & - \iint_{A^{(e)}} N_i^{(e)} \left[ D_x^{(e)} \theta^{(e)} \frac{\partial^2 \hat{C}^{(e)}}{\partial x^2} + D_y^{(e)} \theta^{(e)} \frac{\partial^2 \hat{C}^{(e)}}{\partial y^2} \right] dx dy \\
 & + \iint_{A^{(e)}} N_i^{(e)} \left[ V_x^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial x} \right] dx dy \\
 & + \iint_{A^{(e)}} N_i^{(e)} \left[ \rho^{(e)} K_d^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial t} \right] dx dy \\
 & + \iint_{A^{(e)}} N_i^{(e)} \left[ \lambda \theta^{(e)} \hat{C}^{(e)} + \rho K_d^{(e)} \hat{C}^{(e)} \right] dx dy \\
 & + \iint_{A^{(e)}} N_i^{(e)} \left[ \theta^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial t} \right] dx dy
 \end{aligned} \tag{05}$$

Para o fluxo transiente, pode-se escrever a equação (05) na forma matricial, combinando as expressões para cada nó do elemento  $e$ :

$$\begin{Bmatrix} R_1^{(e)} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ R_n^{(e)} \end{Bmatrix} = [D^{(e)}] \begin{Bmatrix} C_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ C_n \end{Bmatrix} + [A^{(e)}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{\partial \dot{C}_n}{\partial t} \end{Bmatrix} \tag{06}$$

Onde,  $[D^{(e)}]$  é a matriz de dispersão-advvecção do elemento e  $[A^{(e)}]$  é a matriz de sorção do elemento.

$[D^{(e)}]$  é definida como:

$$\begin{aligned}
[D^{(e)}]_{n \times n} = & \iint_{A^{(e)}} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix}_{n \times 2} \begin{bmatrix} D_x^{(e)} \theta^{(e)} & 0 \\ 0 & D_y^{(e)} \theta^{(e)} \end{bmatrix}_{2 \times 2} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix}_{2 \times n} dx dy \\
& + \iint_{A^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{bmatrix}_{n \times 1} V_x^{(e)} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{bmatrix}_{1 \times n} dx dy \\
& + \iint_{A^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{bmatrix}_{n \times 1} \left[ \lambda(\theta^{(e)}) + \rho_b^{(e)} K_d^{(e)} \right] \begin{bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{bmatrix}_{1 \times n} dx dy
\end{aligned} \tag{07}$$

sendo,  $A^{(e)}$  é a área do elemento  $e$ .

A validade dessas equações pode ser conferida multiplicando as mesmas termo a termo e comparando os resultados com as integrais na equação (05). Se o fluxo de água subterrânea não é uniforme, os valores dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica são diferentes para as direções  $x$  e  $y$ . Neste caso, a equação (07) torna-se:

$$\begin{aligned}
[D^{(e)}] = & \iint_{A^{(e)}} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} \\ \vdots & \vdots \\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial z} \end{bmatrix}_{n \times 3} \begin{bmatrix} D_{xx}^{(e)} \theta^{(e)} & D_{xy}^{(e)} \theta^{(e)} \\ D_{yx}^{(e)} \theta^{(e)} & D_{yy}^{(e)} \theta^{(e)} \end{bmatrix}_{2 \times 2} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix}_{2 \times n} dx dy \\
& + \iint_{A^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} & N_1^{(e)} \\ \vdots & \vdots \\ N_n^{(e)} & N_n^{(e)} \end{bmatrix}_{n \times 3} \begin{bmatrix} V_x^{(e)} & 0 \\ 0 & V_y^{(e)} \end{bmatrix}_{2 \times 2} \begin{bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \\ \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial y} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial y} \end{bmatrix}_{2 \times n} dx dy
\end{aligned}$$

$$+ \iint_{A^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{bmatrix} \left[ \lambda \left( \rho^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)} \right) \right] \begin{bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{bmatrix} dx dy \quad (08)$$

Quando a formulação consistente é utilizada para a derivada do tempo em uma solução

aproximada  $\frac{\partial \hat{C}}{\partial t}$ , a matriz de sorção do elemento é definida como:

$$[A^{(e)}] = \iint_{V^{(e)}} \begin{bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{bmatrix} \left[ \rho_b^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)} \right] \begin{bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{bmatrix} dx dy \quad (09)$$

No caso de se utilizar a formulação concentrada para  $\frac{\partial \hat{C}}{\partial t}$ , a equação (09) é modificada, sendo dada por:

$$[A^{(e)}] = (\rho_b^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)}) \frac{V^{(e)}}{n} \begin{bmatrix} 1 & & 0 \\ & \ddots & \\ 0 & & 1 \end{bmatrix}_{n \times n} \quad (10)$$

onde  $V^{(e)}$  é o volume do elemento  $e$ , e  $n$  é o número de nós. A formulação concentração, chamada de “*lumped formulation*”, é uma formulação que impõe mais rigidez ao sistema

A matriz de dispersão-advectação global [D] e a matriz de sorção global [A] podem ser obtidas combinando as matrizes de cada um dos elementos numa malha, levando em consideração a conectividade dos nós da malha..

$$[D]_{\text{global}}^{p \times p} = \sum_{e=1}^m [D^{(e)}]_{\text{expandido}}^{n \times n} \quad (11)$$

$$[A]_{\text{global}}^{p \times p} = \sum_{e=1}^m [A^{(e)}]_{\text{expandido}}^{n \times n} \quad (12)$$

onde  $m$  é o número de elementos e  $p$  é o número de nós da malha.

A formulação residual (de peso) para a equação de transporte de contaminante se torna:

$$[D]_{\text{global}} \begin{Bmatrix} C_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ C_p \end{Bmatrix} + [A]_{\text{global}} \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{\partial \dot{C}_p}{\partial t} \end{Bmatrix} = \{F\}_{\text{global}} \quad (13)$$

Se definindo-se os dois vetores  $\{C\}$  e  $\{\dot{C}\}$

$$\{C\} = \begin{Bmatrix} C_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ C_p \end{Bmatrix} \quad \{\dot{C}\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \cdot \\ \cdot \\ \frac{\partial \dot{C}_p}{\partial t} \end{Bmatrix} \quad (14)$$

A equação (13) pode ser escrita como:

$$[A]_{\text{global}} \{\dot{C}\} + [D]_{\text{global}} \{C\} = \{F\}_{\text{global}} \quad (15)$$

A equação (15) é um sistema de equações diferenciais ordinárias, com solução para valores de  $C$  e  $\frac{\partial C}{\partial t}$  a cada nó na malha de elementos finitos, a cada tempo. Esta equação pode ser resolvida usando o método de diferenças finitas.

Considerando um modelo teórico bidimensional sujeito a uma concentração inicial  $C$ , meio poroso homogêneo, isotrópico e saturado, fluxo constante, o contaminante move-se com a água subterrânea por advecção e não sofre nenhum processo de reação química com a matriz porosa e/ou decaimento e o contorno é impermeável. Para este caso os parâmetros relativos ao coeficiente de distribuição ( $K_d$ ) e decaimento ( $\lambda$ ) são considerados iguais a zero. A equação diferencial que rege o problema no seu estado transiente é dada por:

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2(\theta C)}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2(\theta C)}{\partial y^2} - \frac{\partial(v_x C)}{\partial x} \quad (16)$$

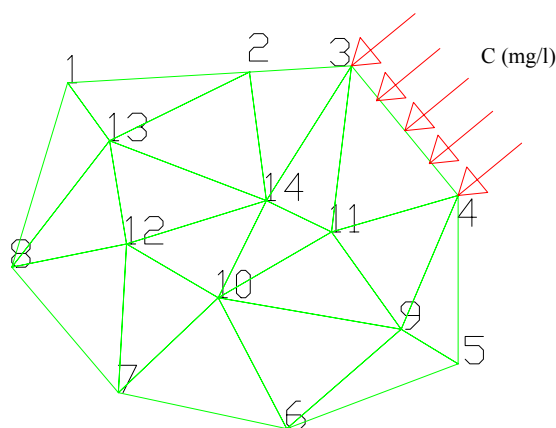
onde  $D$  é o coeficiente de dispersão e  $v_x$  é a velocidade da água no meio poroso.



O primeiro passo para solução do problema é a aplicação de uma metodologia numérica para tratamento da variável espacial x discretização do espaço em uma malha de elementos finitos. O domínio é dividido em elementos unidimensionais lineares conforme a Figura 1. Usando a metodologia de Galerkin e uma formulação concentrada para as matrizes de dispersão e sorção chegaremos a um sistema de equações diferenciais ordinárias do tipo:

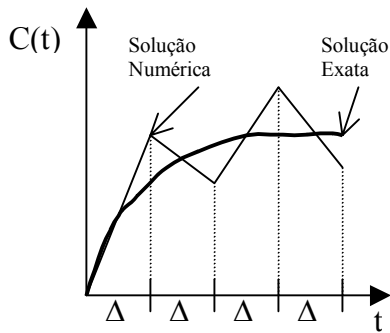
$$[S^*] \frac{d\{C(t)\}}{dt} + [D^*] \{C(t)\} = \{f^*(t)\} \quad (17)$$

$[S^*]$  é a chamada matriz de sorção global;  $[D^*]$  é a chamada matriz de dispersão global;  $\{C(t)\}$  é o vetor que contém o valor da concentração do contaminante nos nós da malha e  $\{f^*(t)\}$  é conhecido como o vetor de carga nodal, o qual contém as condições de contorno referentes à derivada da variável dependente (contaminante) nos nós da malha, as quais podem também ser função do tempo. As matrizes de dispersão e sorção globais são obtidas a partir das matrizes dos elementos levando em consideração a conectividade dos nós.

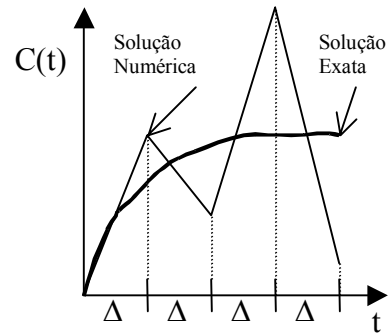


**Figura 01** – Discretização do domínio utilizando o Método dos Elementos Finitos.

É importante notar que a partir deste ponto, quando se utiliza a formulação numérica tradicional, o passo seguinte seria usar o Método das Diferenças Finitas em relação ao tempo. Neste caso é preciso discretizar também a variável tempo, escolher entre os diversos esquemas de solução passo a passo e finalmente determinar o valor da variável C (concentração) a cada intervalo de tempo. Conforme já mencionado, o principal problema desta forma de solução é que, dependendo passo de tempo adotado e da relação  $\Delta x/\Delta t$  utilizada, o procedimento computacional pode gerar instabilidade e/ou oscilação numérica.



**Figura 02-** Oscilação numérica<sup>1</sup>



**Figura 03 –** Instabilidade numérica<sup>1</sup>

Na verdade, quando se faz a discretização do tempo adotando um esquema de Diferenças Finitas, a solução está sendo “linearizada”, quando a solução real, em alguns casos, pode ser fortemente não-linear, fato que pode levar a erros consideráveis.

Visando eliminar a adoção da discretização do tempo, tendo em vista os motivos acima descritos, a partir deste ponto é apresentado o equacionamento de uma metodologia analítica para o tratamento da variável tempo.

Para o caso bidimensional descrito anteriormente, as matrizes de dispersão  $[D^e]$  e sorção  $[S^e]$  dos elementos são dadas por:

$$[D_{n \times n}^{(e)}] = \frac{D_L^{(e)}}{L^{(e)}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{v_x^{(e)}}{2\theta^{(e)}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (18)$$

$$[S_{n \times n}^{(e)}] = \left( \frac{\rho_b^{(e)} K_d^{(e)}}{n^{(e)} + 1} \right) \frac{L^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{L^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (19)$$

Onde  $D^{(e)}$  é a matriz de dispersão do elemento e  $S^{(e)}$  é a matriz de sorção do elemento. Como o meio é homogêneo e isotrópico os valores dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica na direção x e y são iguais ( $D_x = D_y$ ), aqui assumido como  $D_L$ .

A solução de qualquer equação diferencial dependente do tempo (transiente) requer a especificação das condições na fronteira do sistema estudado, as condições de contorno, e as condições de início do processo físico, as condições iniciais. A definição precisa das condições de contorno e inicial é a parte mais importante para o processo de modelagem do transporte de contaminantes e escoamento de águas subterrâneas.

A condição inicial para o transporte de contaminantes é utilizada para especificar a concentração do contaminante, C, no sistema, no instante que o modelo de simulação inicia, isto é,

<sup>1</sup> Fonte: CASTRO (1997)

em  $t = 0$ , e são dadas por  $C(x,0)=0$  usada como condição inicial para sistemas ainda não contaminados ou  $C(x,0) = C_o(x)$  para sistemas que possuem alguma contaminação.

O vetor  $\{C(t)\}_{t=0}$  contém os valores das concentrações para o tempo inicial, sendo, portanto a condição inicial do problema. O vetor  $\{C(t)\}$  traz os valores da concentração nos nós da malha.

Na Figura 01 a concentração no nó 2 e 3 é a concentração inicial (C) aplicada ao sistema, sendo portanto uma concentração conhecida e as concentrações nos demais nós são desconhecidas.

Considerando apenas os nós com concentrações desconhecidas do domínio discretizado, o sistema pode ser escrito da seguinte forma:

$$[S] \frac{d\{C(t)\}}{dt} + [D]\{C(t)\} = \{f(t)\} \quad (20)$$

Onde [S] e [D] são matrizes  $n \times n$  (no caso da Figura 01  $n=14$ ).

A equação (20) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d\{C(t)\}}{dt} = -[S]^{-1}[D]\{C(t)\} + [S]^{-1}\{f(t)\} \quad (21)$$

ou

$$\frac{d\{C(t)\}}{dt} = [A]\{C(t)\} + \{F(t)\} \quad (22)$$

onde,

$$[A] = -[S]^{-1}[D] \quad e \quad \{F(t)\} = [S]^{-1}\{f(t)\} \quad (23)$$

e a solução equação (21) é dada por:

$$\{C(t)\} = e^{[A]t} \{C\}_{t=0} + e^{[A]t} \int_0^t e^{-[A]s} \{F(s)\} ds \quad (24)$$

onde a matriz exponencial  $e^{[A]t}$  é conhecida como matriz de transferência. Esta matriz, de fundamental importância para a metodologia, pode ser determinada explicitamente (Castro 1997):

$$e^{[A]t} = a_0[I] + a_1[A] + a_2[A]^2 + \dots + a_{n-1}[A]^{n-1} \quad (25)$$

onde os coeficientes  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_n$  podem ser determinados usando-se o fato de que os autovalores de [A] também satisfazem a equação (20), desta maneira nós podemos formar o seguinte sistema de equações:

$$\left\{ \begin{array}{l} e^{\lambda_1 t} = a_0 + a_1 \lambda_1 + \dots + a_n \lambda_n \\ e^{\lambda_2 t} = a_0 + a_1 \lambda_2 + \dots + a_n \lambda_n \\ \vdots \\ e^{\lambda_n t} = a_0 + a_1 \lambda_n + \dots + a_n \lambda_n \end{array} \right\} \quad (26)$$

Onde,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  e  $\lambda_n$  são os autovalores da matriz [A].

Usando a equação (17) e resolvendo o sistema para  $a_0$ ,  $a_1$  e  $a_n$ , teremos um sistema de equações em função dos autovalores da matriz [A]. Fazendo uso da equação (26) é possível determinar explicitamente a matriz de transferência. É importante notar que  $\{C\}_{t=0}$  corresponde às condições iniciais para os nós de concentrações desconhecidas. Admitindo que o sistema está inicialmente livre de contaminação os valores são considerados iguais a zero. Através do uso da equação (24), a solução  $\{C(t)\}$  (transiente e permanente) é completamente determinada para cada nó do domínio.

## CONSIDERAÇÕES FINAIS

É oportuno comparar os resultados obtidos através do uso da metodologia Numérico-Analítica proposta neste estudo com os resultados obtidos através do uso da metodologia de Diferenças Finitas para a variável tempo. Isso irá possibilitar a análise das possíveis diferenças nos resultados entre os dois métodos. Os trabalhos de CASTRO(1997) e CASTRO (1998) mostram a aplicação desta metodologia para solução de problemas transientes de percolação de água em uma coluna de solo composta por três tipos de solo. Ele apresentou a existência de uma diferença considerável na aplicação da metodologia numérico-analítica e o método das diferenças finitas. No caso do método das diferenças finitas, quando reduzimos o intervalo de tempo  $\Delta t$  visando alcançar resultados mais precisos dois aspectos devem ser considerados: (i) A redução de  $\Delta t$  implica em mais iterações, podendo gerar acumulação de erros computacionais; (ii) sem conhecer a solução analítica (exata), não há possibilidade de se saber o erro que se está cometendo ao se adotar um determinado  $\Delta t$ .

O Método Numérico-Analítico (MNA) é uma nova metodologia proposta para determinação bidimensional do transporte de contaminantes. A validação da metodologia pode ser demonstrada através da comparação com o Método dos Elementos Finitos e com a Solução Analítica da equação de transporte de contaminantes. A metodologia Numérico-Analítica aqui proposta associa a versatilidade dos métodos numéricos tradicionais de acomodar condições de contorno com

geometrias de domínios complexos, meios heterogêneos e anisotrópicos com a garantia de convergência e estabilidade das soluções normalmente encontrada nos métodos analíticos.

## **REFERENCIAS BIBLIOGRÁFICAS**

- [1] CASTRO, M. A. H. (1997). Uma Metodologia Numérico-Analítica para Solução de Problemas Transientes em Recursos Hídricos, XII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, Vitória, ES, Vol. 2, p. 313-318.
- [2] CASTRO, M. A. H. (1998). Solução de Problemas Transientes em Recursos Hídricos através da Matrix de Transferência. II Simpósio de Recursos Hídricos Del Cone Sur, Santa Fé, Argentina, v. IV, p. 309-318.
- [3] LEIJ, F.J.; TORIDE, N. (1995). Discrete time and length-averaged solutions of the advection-dispersion equation. *Water Resour. Res.* 31: 1713-1724.
- [4] LIU, J.J.; SONI, B.K. (1998). 2D groundwater contaminant transport modeling by using the finite volume method on an unsaturated grid system. *Applied Mathematics and Computations*, 89:199-211.
- [5] M.T. VAN GENUCHTEN; W.J. ALVES. (1987). Analytical solution of the one-dimensional convection-dispersion transport equation. *Tech. Bull., U.S. Dept. Agric.*, 1661.
- [6] PARK, E.; ZHAN, H. (2001). Analytical solutions of contaminant transport from finite one, two and three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer. *Journal of Contaminant Hydrology*, 53: 41-61.
- [7] SÉGOL, G. (1993). *Classic groundwater simulations: Proving and improving numerical models.* Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.