

# ESTUDO UNIDIMENSIONAL DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES UTILIZANDO UMA METODOLOGIA NUMÉRICO-ANALÍTICA

*ESTUDO UNIDIMENSIONAL DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES UTILIZANDO UMA METODOLOGIA NUMÉRICO-ANALÍTICA*

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

*Recebido em 21/07/2004, aceito em 17/07/2005*

**RESUMO** Este trabalho propõe uma metodologia numérico-analítica para problemas transiente de transporte de contaminantes unidimensional. Trata-se de um exemplo no qual a metodologia numérico-analítica é comparada ao método dos elementos finitos e à solução analítica. A metodologia apresentada tem o objetivo de reduzir a instabilidade numérica e as oscilações ocasionadas pela discretização temporal que geralmente ocorrem nos métodos numéricos tradicionais. A metodologia numérico-analítica é uma metodologia mista, numérico em relação ao espaço e analítico em relação ao tempo, diferentemente da forma como é feita nos métodos numéricos convencionais, onde o espaço e o tempo são discretizados utilizando métodos numéricos. Nesse estudo foi utilizado um modelo teórico unidimensional na verificação da solução numérico-analítica para o problema de transporte de contaminante. Para validação dos resultados foram aplicados o método dos elementos finitos e a solução analítica da equação de transporte ao modelo teórico. Os resultados obtidos validam a metodologia numérico-analítica, uma vez que as curvas obtidas com a metodologia numérico-analítica, método dos elementos finitos e solução analítica não apresentam diferenças consideráveis.

Palavras chave: métodos numéricos, modelagem, modelo numérico-analítico.

**ABSTRACT** This work proposes a numerical-analytical methodology for one-dimensional transient contaminant transport problems. We present an example in which this new approach is compared to the finite element method and the appropriate analytical solution. The new methodology reduces the numerical oscillation and instability problems which normally occur in the traditional approach. The new methodology is mixed: numeric with respect to space and analytical with respect to time. In this study it was used a theoretical analytical solution in order to verify and validate the new methodology.

Keywords: numerical method, modeling, numerical analytical method

## INTRODUÇÃO

Equações diferenciais ordinárias e parciais aparecem na solução de inúmeros problemas de engenharia, em especial, na área de transporte de contaminantes. Sem dúvida, os métodos analíticos são a melhor forma de solucionar esses problemas, pois fornecem uma solução de forma fechada. Como poucos casos reais têm solução analítica possível ou viável devido às dificuldades impostas pelo conjunto de equações que regem o fenômeno (normalmente equações diferenciais parciais de 2.<sup>a</sup> ordem e não lineares), os métodos numéricos aparecem como uma ferramenta eficiente na solução de problemas complexos.

Mesmo as soluções analíticas para alguns problemas, quando existem, normalmente contém séries infinitas, funções especiais (erf,  $\Gamma$ ), e apresentam limitações que implicam em considerações pouco realistas, tais como: meio semi-infinito, homogêneo, isotrópico, etc. Em geral, as soluções analíticas servem de base para a compreensão do comportamento do sistema de equações, para o desenvolvimento de métodos e validação de códigos computacionais e para

novas metodologias, como é o caso deste trabalho.

A solução analítica das equações diferenciais parciais envolve expressão na forma fechada válida em todo e qualquer ponto do domínio do problema. Em contraste, soluções numéricas fornecem respostas somente em pontos discretos do domínio, chamados pontos nodais ou pontos da malha. A maneira de obter essas equações algébricas é que caracteriza o tipo de método numérico.

A dinâmica dos contaminantes no solo é um problema de natureza transiente e pode ser traduzida pelos modelos analíticos ou numéricos de transferência de massa. A modelagem e a simulação desses fenômenos são feitas através da solução da equação diferencial parcial do problema. Na maioria das vezes, os problemas reais de transporte de contaminantes são resolvidos utilizando-se uma metodologia numérica para o espaço (Elementos Finitos, Diferenças Finitas ou Elementos de Contorno) e outra para o tempo, o Método das Diferenças Finitas. O problema com tal metodologia é que, dependendo da relação entre o intervalo de tempo escolhido e o espaçamento entre os nós da malha,

<sup>1</sup>Universidade Federal do Ceará, Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental (*celme@deha.ufc.br*); (*marco@ufc.br*)

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 propõe um tratamento misto 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.

Atualmente vários trabalhos tratam da problemática da instabilidade e oscilação dos modelos numéricos. Dentre outros, foi apresentado por Sudick (1989) uma técnica de transformar a equação diferencial de transporte a partir da transformada de Laplace, e resolvê-la numericamente por elementos finitos. Esta técnica apresentou bons resultados, e pela inexistência da discretização temporal, os erros numéricos decorrentes desta discretização foram sensivelmente diminuídos.

### **EQUAÇÃO DE TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL DE CONTAMINANTES NÃO REATIVOS**

Dado um modelo unidimensional onde o meio poroso é homogêneo, isotrópico e saturado, o fluxo é constante e a lei de Darcy é válida e o contaminante move-se com a água subterrânea por advecção, dispersão mecânica e difusão molecular, e não sofre nenhum processo de reação química com a matriz porosa e/ou decaimento. Para este caso os parâmetros relativos ao coeficiente de distribuição ( $K_d$ ) e decaimento ( $\lambda$ ) são considerados iguais a zero. Neste caso a equação diferencial que rege o problema no seu estado transiente é dada por:

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (1)$$

onde  $D_x = D + D^*$ ,  $D_x$  é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica na direção  $x$ ,  $D$  é o coeficiente de dispersão mecânica,  $D^*$  é o coeficiente de difusão molecular e  $v_x$  é a velocidade da água no meio poroso.

### **CONDIÇÕES INICIAL E DE CONTORNO**

A solução de qualquer equação diferencial dependente do tempo (transiente) requer a especificação de condições na fronteira do sistema estudado (condições de contorno) e as

condições no início do processo físico (condição inicial). 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.

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

$$C(x,0) = 0 \quad (2)$$

ou

$$C(x,0) = C_o(x) \quad (3)$$

onde  $C_o(x)$  é a concentração inicial de contaminante. A Eq. (1) é usada como condição inicial para sistemas ainda não contaminados, enquanto que a Eq. (2) representa os sistemas que possuem alguma contaminação.

As condições de contorno, por sua vez, são expressões matemáticas que especificam a variável dependente (velocidade ou concentração de contaminante) ou fluxo nos contornos do domínio, e são usadas para incluir os efeitos do sistema hidrogeológico externo à área modelada. Quatro tipos de condições de contorno geralmente são utilizadas para descrever o escoamento de água subterrânea e transporte de contaminantes. Essas condições de contorno se apresentam na seguinte forma:

- Tipo 1 (Dirichlet) – concentração definida,  $C=C_o$
- Tipo 2 (Neuman) – gradiente de concentração,  $\partial C / \partial x = 0$
- Tipo 3 (Cauchy) – mista
- Tipo 4 – fronteira livre.

A condição de contorno Tipo 1 faz com que o sistema de equações seja particionado de acordo com os nós nos quais os valores da função são conhecidos.

A condição de contorno Tipo 2 é considerada a condição de contorno natural do problema, que é satisfeita naturalmente na solução da equação de transporte. A aplicação desta implica na satisfação da condição de gradiente de concentração nulo no contorno, que em alguns casos leva a erros na determinação da solução. A utilização desta condição está vinculada ao afastamento do contorno da região de interesse.

Uma alternativa para este problema é a utilização da condição de contorno do Tipo 4. Este tipo de condição de contorno não é determinado por condições externas, mas como

parte da solução do problema. No caso do campo de velocidade não ser nulo, não há necessidade de uma condição para garantir a unicidade da solução. O efeito da existência deste tipo de condição de contorno equivale a se ter o contorno da malha no infinito. A condição de contorno Tipo 3 representa uma fonte de concentração cuja taxa é constante.

A condição de contorno aplicada no exemplo desenvolvido neste trabalho é descrita pela condição de contorno Tipo 1.

### **SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE**

As soluções analíticas da equação de transporte de contaminantes têm sido derivadas para uma variedade de condições de contornos (e.g. VAN GENUCHTEN; ALVES, 1982, SÉGOL, 1993; LEIJ; TORIDE, 1995). Apesar de simples, as soluções analíticas necessitam de cuidadosa atenção no que se refere às condições de contorno que são empregadas na análise matemática do problema físico (PARKER; VAN GENUCHTEN, 1984; TORIDE et al., 1993). Embora a maioria das soluções analíticas pertença aos meios infinito e semi-infinito, soluções analíticas para um meio finito têm sido desenvolvidas e estão sendo utilizadas para quantificar o transporte de contaminantes. Estas soluções são normalmente utilizadas em soluções numéricas (FEIKE; TORIDE, 1998).

As condições de contorno para um sistema semi-infinito consideram que a concentração de contaminantes é macroscopicamente contínua em todo perfil de solo e que não ocorre dispersão externamente (DANKWERTS, 1953; WEHNER; WILHELM, 1956). Desta forma, soluções para uma condição de contorno infinita podem ser aplicadas para uma região finita (PARKER; VAN GENUCHTEN, 1984). Parlange et al. (1992) mostraram que a concentração na saída de um sistema estará entre os valores prognosticados quando usamos um meio finito e uma condição de contorno infinita.

Embora os problemas de transporte de contaminantes em sua maioria sejam resolvidos numericamente, as soluções analíticas ainda são utilizadas em muitas pesquisas porque descrevem com maior precisão as características físicas do problema. As soluções analíticas normalmente não possuem os problemas de dispersão numérica e erros de truncamento que frequentemente ocorrem nas simulações numéricas. Como base de comparação e validação da metodologia proposta, utilizou-se a solução analítica da equação unidimensional de

transporte sem decaimento ou retardamento e solo saturado (OGATA; BANKS, 1970). A solução analítica é obtida para um meio semi-infinito submetido à condição de contorno Tipo 1, na posição  $x = 0$ .

$$C = \frac{C_0}{2} \left[ \operatorname{erfc} \left\{ \frac{L - vt}{2\sqrt{Dt}} \right\} + \exp \left\{ \frac{vx}{D} \right\} \operatorname{erfc} \left\{ \frac{L + vt}{2\sqrt{Dt}} \right\} \right]$$

onde  $\operatorname{erfc}$  é a função de erro complementar.

### **MATERIAL E MÉTODOS**

A forma unidimensional da equação do transporte de contaminante para fluxo uniforme de água subterrânea e meio poroso homogêneo, é dada por (ISTOK, 1989):

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2(\theta C)}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} - \rho_s K_d \frac{\partial C}{\partial t} - \lambda(\theta C - \rho K_d C) \quad (4)$$

onde,  $C$  é a concentração do contaminante (função do tempo);  $\theta$  é o conteúdo de água volumétrica do meio poroso;  $v_x$  a velocidade real da água;  $D_x$  é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica;  $\rho_s$  é a densidade do meio poroso (aquífero);  $K_d$  o coeficiente de distribuição ou partição;  $\lambda$  é o coeficiente de decaimento de primeira ordem do contaminante.

É importante salientar que para obtenção da Eq. (3) foram assumidas as seguintes hipóteses: é válida a lei de Darcy; o meio poroso é homogêneo e isotrópico; a porosidade e a condutividade hidráulica são constantes no tempo; os mecanismos físicos de difusão molecular e dispersão mecânica podem ser tratados conjuntamente como mecanismos de espalhamento de Fick; fluxo permanente (carga hidráulica constante e conseqüentemente vazão constante); a densidade e a viscosidade da solução são constantes ao longo do tempo.

### **MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS**

Dado um domínio com uma geometria qualquer, o Método dos Elementos Finitos (MEF) consiste em dividi-lo em subdomínios mais simples, chamados de elementos. O MEF permite que seja obtida a solução ou uma aproximação desta, para qualquer forma geométrica, utilizando a aproximação dos valores nodais no domínio do elemento. Esta aproximação é feita utilizando-se funções que interpolam a solução no interior do elemento.

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

$$\hat{C}^{(e)}(x) = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} C_i \quad (4)$$

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

Quando a solução aproximada é substituída na Eq. (3), na qual  $C = C(x, t)$  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 para o resíduo no nó  $i$  é:

$$R_i^{(e)} = - \int_e W_i^{(e)}(x) \left[ D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\theta \hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial x} (v_x \hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial t} (\rho_b K_d \hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial t} (\theta \hat{C}^{(e)}) - \lambda (\theta \hat{C}^{(e)} + \rho_b K_d \hat{C}^{(e)}) \right] dx \quad (6)$$

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

Assumindo que as propriedades do meio poroso e a velocidade da água subterrânea são constantes dentro do elemento (mas podem variar de um elemento para outro), a Eq. (5) pode ser escrita como:

$$R_i^{(e)} = - \int_e N_i^{(e)}(x) \left[ D_x^{(e)} \theta^{(e)} \frac{\partial^2 \hat{C}^{(e)}}{\partial x^2} - v_x^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial x} - \rho_b K_d^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} (\theta^{(e)} \hat{C}^{(e)}) - \lambda (\theta^{(e)} \hat{C}^{(e)} + \rho_b K_d^{(e)} \hat{C}^{(e)}) \right] dx \quad (7)$$

onde,  $\theta^{(e)}$  é o conteúdo volumétrico da água no meio poroso dentro do elemento e  $\lambda$  é a constante de decaimento radioativo, é propriedade do contaminante, não do meio poroso, sendo constante para todos os elementos. O conteúdo volumétrico da água e a velocidade da água subterrânea podem ou não mudar com o tempo, por isso, duas formulações separadas da Eq. (6) são possíveis, para fluxo de água no estado permanente e transiente.

No fluxo de água subterrânea no estado permanente (meio saturado ou não-saturado), o conteúdo de água e a velocidade aparente são constantes para todos os passos de tempo. Embora sejam constantes dentro do elemento, eles podem variar de um elemento para outro. Para o fluxo transiente, podemos escrever a Eq. (6) na forma matricial, combinando as expressões para cada nó do elemento.

$$\begin{Bmatrix} R_1^{(e)} \\ \vdots \\ R_n^{(e)} \end{Bmatrix} = [D^{(e)}] \begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \end{Bmatrix} + [A^{(e)}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial C_n}{\partial t} \end{Bmatrix} \quad (5)$$

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

Se a formulação consistente é usada para a derivada do tempo em uma solução aproximada

$\frac{d\hat{C}}{dt}$ , a matriz de sorção do elemento é definida como:

$$[A^{(e)}] = \int_e \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{Bmatrix} \left[ \rho_b^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)} \right] \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{Bmatrix} dx \quad (9)$$

$[D^{(e)}]$  é definida como:

$$[D^{(e)}] = \int_e \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{Bmatrix} \left[ D_x^{(e)} \theta^{(e)} \right] \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{Bmatrix} dx + \int_e \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{Bmatrix} v_x^{(e)} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{Bmatrix} dx + \int_e \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{Bmatrix} \left[ \lambda (\theta^{(e)} + \rho_b^{(e)} K_d^{(e)}) \right] \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{Bmatrix} dx \quad (10)$$

Quando é usada uma formulação concentrada para  $\frac{\partial \hat{C}}{\partial t}$ , a matriz de sorção do elemento, sofre modificações sendo dada por:

$$[A^{(e)}] = (\rho_b^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)}) \frac{V^{(e)}}{n} \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & \cdot & & \\ & & \cdot & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix}_{n \times n} \quad (11)$$

A matriz de dispersão global  $[D]$  e a matriz de sorção global  $[A]$  podem ser obtidas

combinando-se as matrizes de cada um dos elementos numa malha.

$$[D]_{\text{global}} = \sum_{e=1}^m [D^{(e)}]_{\text{nxn}} \quad (6)$$

$$[A]_{\text{global}} = \sum_{e=1}^m [A^{(e)}]_{\text{nxn}} \quad (7)$$

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 é dada por:

$$[D]_{\text{global}} \begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_p \end{Bmatrix} + [A]_{\text{global}} \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial C_p}{\partial t} \end{Bmatrix} = \{F\}_{\text{global}} \quad (14)$$

Definindo-se os dois vetores  $\{C\}$  e  $\{\dot{C}\}$ , como:

$$\{C\} = \begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_p \end{Bmatrix} \quad \{\dot{C}\} = \begin{Bmatrix} \frac{dC_1}{dt} \\ \vdots \\ \frac{dC_p}{dt} \end{Bmatrix} \quad (8)$$

A Eq. (13) pode ser escrita como:

$$[A]_{\text{global}} \{\dot{C}\} + [D]_{\text{global}} \{C\} = \{F\}_{\text{global}} \quad (9)$$

A Eq. (15) é um sistema de equações diferenciais ordinárias, com solução para valores de C e  $\frac{dC}{dt}$  a cada nó na malha de elementos finitos, a cada tempo.

**EXEMPLO TEÓRICO**

A solução numérico-analítica foi aplicada a um modelo teórico unidimensional para o problema de transporte de contaminante. A velocidade da água na direção do fluxo é de 0,03 m/d, o coeficiente de dispersão adotado é de 1,0 m<sup>2</sup>/d e a porosidade (n) é de 0,3 para todos os elementos. O meio poroso é considerado homogêneo, isotrópico e saturado ( $\theta = n$ ) e o sistema inicialmente encontra-se livre de contaminação. Para solução do problema, aplicou-se primeiramente uma metodologia

numérica para tratamento da variável espacial x. Foi usado neste caso, o método dos elementos finitos. O domínio foi dividido em 5 elementos unidimensionais lineares e iguais de 10 m e 6 nós conforme a Figura 01. A contaminação é aplicada diretamente no Nó 1. A concentração no Nó 6 tende a zero e a concentração nos demais nós é desconhecida.

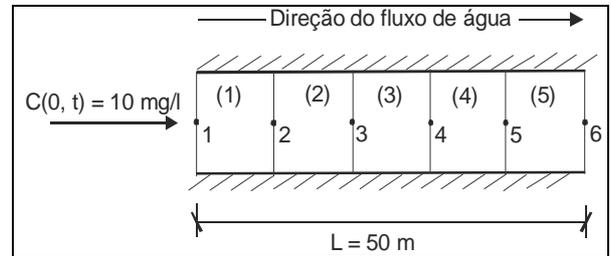


Figura 1 - Exemplo unidimensional de transporte de contaminantes.

Figure 1- unidimensional contaminant transport exemple

Condição Inicial :  $C = C(x,0)$

$$C(x,0) = \begin{Bmatrix} 10 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (10)$$

Condição de Contorno:

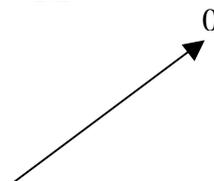
$$\begin{cases} C(0, t) = 10 & t \geq 0 \\ C(50, t) = 0 & t \geq 0 \end{cases}$$

$$C(x,t) = \begin{Bmatrix} 10 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 = 0 \end{Bmatrix} \quad (11)$$

Visando eliminar a adoção da discretização do tempo, a partir deste ponto é detalhada a metodologia analítica para o tratamento da variável tempo.

As matrizes de dispersão [D] e sorção [S] dos elementos utilizando o método dos elementos finitos são dadas por:

$$[D]_{2 \times 2}^{(e)} = \frac{D_x^{(e)}}{L^{(e)}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{v_x^{(e)}}{2\theta^{(e)}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (19)$$



$$[S^{(e)}] = \left( \frac{P_b^{(e)} K_d^{(e)}}{n^{(e)}} + 1 \right) \frac{L^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{L^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (20)$$

Substituindo-se os valores de  $D_x$ ,  $L$ ,  $v_x$  e  $\square$ , nas Equações (19) e (20), temos as matrizes de dispersão e sorção, as quais são iguais para todos os elementos do sistema :

$$D_1^{(e)} = D_2^{(e)} = D_3^{(e)} = D_4^{(e)} = D_5^{(e)} = \begin{bmatrix} 0,05 & -0,05 \\ -0,15 & 0,15 \end{bmatrix}$$

$$S_1^{(e)} = S_2^{(e)} = S_3^{(e)} = S_4^{(e)} = S_5^{(e)} = \begin{bmatrix} 5 & 0 \\ 0 & 5 \end{bmatrix}$$

onde  $D$  são as matrizes de dispersão e  $S$  as matrizes de sorção dos elementos.

As matrizes de dispersão  $[D^*]$  e sorção  $[S^*]$  global são respectivamente:

$$[D^*] = \begin{bmatrix} 0,05 & -0,05 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ -0,15 & 0,20 & -0,05 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -0,15 & 0,20 & -0,05 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -0,15 & 0,20 & -0,05 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -0,15 & 0,20 & -0,05 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -0,15 & 0,15 \end{bmatrix}$$

$$[S^*] = \begin{bmatrix} 5 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 5 \end{bmatrix}$$

Usando-se a metodologia de Galerkin e uma formulação concentrada para as matrizes de dispersão e sorção, chegar-se a um sistema de equações diferenciais ordinárias do tipo:

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

onde,  $[S^*]$  é matriz de sorção global;  $[D^*]$  é 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  $[S^*]$  e  $[D^*]$  são matrizes  $n \times n$  (no caso da Figura 01,  $n=4$ ). Considerando-se apenas os nós 2, 3, 4 e 5, ou seja, levando em consideração a conectividade dos nós, com uso da Eq. (21) podemos escrever o seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 \end{bmatrix} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0,20 & -0,05 & 0 & 0 \\ -0,15 & 0,20 & -0,05 & 0 \\ 0 & -0,15 & 0,50 & -0,05 \\ 0 & 0 & -0,15 & 0,20 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1,5 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

ou abreviadamente:

$$[S] \frac{d\{C(t)\}}{dt} + [D] \{C(t)\} = \{f(t)\} \quad (12)$$

onde  $[S]$  e  $[D]$  são matrizes  $n \times n$ , para o nosso exemplo  $n = 4$ .

A Eq. (22) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d\{C(t)\}}{dt} = -[S]^{-1}[D]\{C(t)\} + [S]^{-1}\{f(t)\} \quad (23)$$

ou,

$$\frac{d\{C(t)\}}{dt} = [A]\{C(t)\} + \{F(t)\} \quad (13)$$

$$[A] = -[S]^{-1}[D] \quad e$$

$$\{F(t)\} = [S]^{-1}\{f(t)\} \quad (14)$$

A solução de (22) é dada por:

$$\{C(t)\} = e^{[A]t} \{C\}_{t=0} + e^{[A]t} \int_0^t e^{-[A]s} \{F(s)\} ds \quad (26)$$

O cálculo  $\int_0^t e^{-[A]s} \{F(s)\} ds$  é obtido substituindo-se

na matriz de transferência os valores de  $t$  por  $(-s)$ , com  $s$  variando de 0 a  $t$ .

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

$$e^{[A]t} = a_0 [I] + a_1 [A] + a_2 [A]^2 + \dots + a_{n-1} [A]^{n-1} \quad (27)$$

Como,  $n=4$ , a equação acima fica:

$$e^{[A]t} = a_0 [I] + a_1 [A] + a_2 [A]^2 + a_3 [A]^3 \quad (28)$$

onde os coeficientes  $a_0$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$  podem ser determinados usando-se o fato de que os autovalores de  $[A]$  também satisfazem a Eq. (28) (CASTRO, 1997). Desta maneira, podemos formar o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned}
 e^{\lambda_1 t} &= a_0 + a_1 \lambda_1 + a_2 \lambda_1 + a_3 \lambda_1 \\
 e^{\lambda_2 t} &= a_0 + a_1 \lambda_2 + a_2 \lambda_2 + a_3 \lambda_2 \quad (29) \\
 e^{\lambda_3 t} &= a_0 + a_1 \lambda_3 + a_2 \lambda_3 + a_3 \lambda_3 \\
 e^{\lambda_4 t} &= a_0 + a_1 \lambda_4 + a_2 \lambda_4 + a_3 \lambda_4
 \end{aligned}$$

onde,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ ,  $\lambda_3$  e  $\lambda_4$  são os autovalores da matriz [A], sendo a mesma dada pelo produto da

matriz inversa de sorção pela matriz de dispersão (Eq. 25).

$$A = \begin{bmatrix} -0.02 & 0.005 & 0 & 0 \\ 0.015 & -0.02 & 0.005 & 0 \\ 0 & 0.015 & -0.05 & 0.005 \\ 0 & 0 & 0.015 & -0.020 \end{bmatrix}$$

Seus autovalores são:

$$\lambda_1 = -0.01; \lambda_2 = -0.028; \lambda_3 = -0.054; \lambda_4 = -0.018;$$

Substituindo os autovalores na Eq. (29) e resolvendo-se o sistema para os valores de  $a_0$ ,  $a_1$ ,  $a_2$  e  $a_3$ , temos:

$$\begin{aligned}
 a_0 &= 4.1e^{-0.01t} - 4.8e^{-0.018t} - 10e^{-0.054t} + 1.8e^{-0.028t} \\
 a_1 &= 440e^{-0.01t} - 740e^{-0.018t} - 20e^{-0.054t} + 320e^{-0.028t} \\
 a_2 &= 14000e^{-0.01t} - 29000e^{-0.018t} - 1200e^{-0.054t} + 16000e^{-0.028t} \\
 a_3 &= 140000e^{-0.01t} - 310000e^{-0.018t} - 22000e^{-0.054t} + 190000e^{-0.028t}
 \end{aligned}$$

Fazendo uso da Eq. (28) determina-se explicitamente a matriz de transferência. O vetor {F(t)} é calculado a partir da Eq. (25):

$$\{F(t)\} = \begin{bmatrix} -0.15 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

É importante notar que {C}<sub>t=0</sub> corresponde às condições iniciais para os nós 2, 3, 4 e 5. Como o sistema encontra-se livre de contaminação temos:

$$\{C(t)\}_{t=0} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Neste ponto, a solução {C(t)}, transiente e permanente, está completamente determinada através do uso da Eq. (26).

$$\{C(t)\} = \begin{bmatrix} 9.972 - 3e^{-0.01t} - 0.028e^{-0.054t} - 3.2e^{-0.028t} \\ 9.899 - 1.5e^{-0.01t} - 0.007e^{-0.054t} - 0.056e^{-0.028t} + 5.4e^{-0.028t} \\ 9.956 - 6e^{-0.01t} - 4.2e^{-0.054t} - 0.44e^{-0.028t} + 0.54e^{-0.028t} \\ 9.955 - 6.9e^{-0.01t} - 0.3e^{-0.054t} + 0.20e^{-0.028t} - 3.4e^{-0.028t} \end{bmatrix}$$

## RESULTADOS

Os gráficos a seguir mostram a comparação dos resultados obtidos utilizando a metodologia numérico-analítica (MNA) e o Método dos Elementos Finitos (MEF). O passo de tempo ( $\Delta t$ ) utilizado no MEF foi de 10 dias.

Os resultados validam a metodologia numérico-analítica, uma vez que as curvas obtidas com as duas metodologias não apresentam diferenças consideráveis. No caso do Método dos Elementos Finitos, o intervalo de tempo  $\Delta t$  poderia ser reduzido, visando-se alcançar resultados mais precisos. No entanto, existem dois aspectos muito importantes a serem considerados neste caso:

1. A redução de  $\Delta t$  implicaria em mais iterações, podendo gerar acumulação de erros computacionais e;

2. Sem conhecer a solução analítica (exata), não há possibilidade de se saber o erro que se está cometendo ao se adotar um determinado  $\Delta t$ .

As curvas atingem o estado permanente após um intervalo de tempo de 300 dias para as duas metodologias, exceto no Nó 2 onde o estado permanente começa a ser alcançado para um intervalo de tempo muito menor ao MNA,  $t = 100$  dias, como pode ser visto nos gráficos das Figura, 2, 3, 4 e 5.

Como no Método dos Elementos Finitos estamos tratando com retas, as curvas características do transporte em todos os nós encontram-se abaixo das curvas da metodologia Numérico-Analítica obtidas de funções exponenciais.

As Figuras 6, 7, 8 e 9 apresentam a comparação da solução analítica com o método numérico-analítico (MNA). A comparação é exclusivamente para mostrar a concordância entre os valores de concentração obtidos com a solução analítica e com o MNA. Pode ser observado que, apesar de não ser perfeita, existe a concordância entre as duas curvas para todos os nós do domínio, fato que valida a metodologia apresentada.

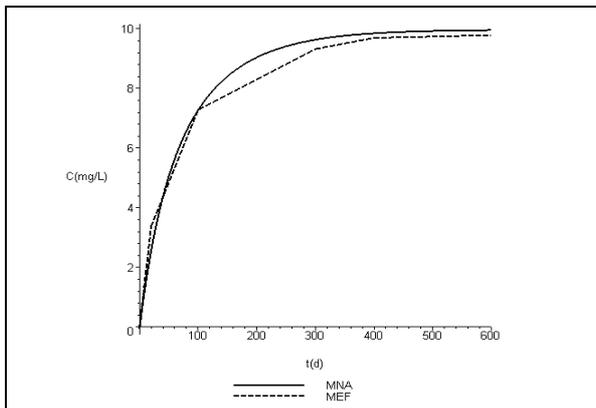


Figura 2 – Variação da concentração no tempo para o Nó 2 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.

*Figura 2 – Variação da concentração no tempo para o Nó 2 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.*

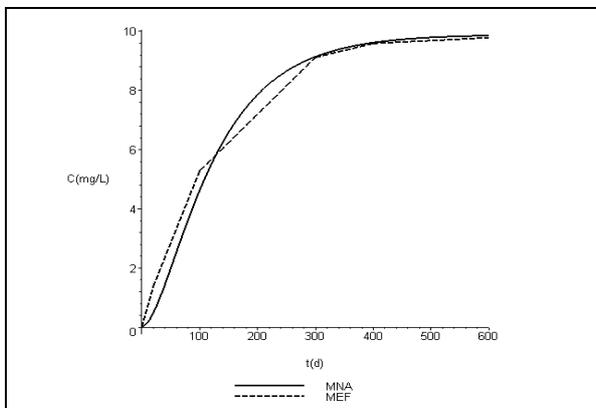


Figura 3 – Variação da concentração no tempo para o Nó 3 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.

*Figura 3 – Variação da concentração no tempo para o Nó 3 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.*

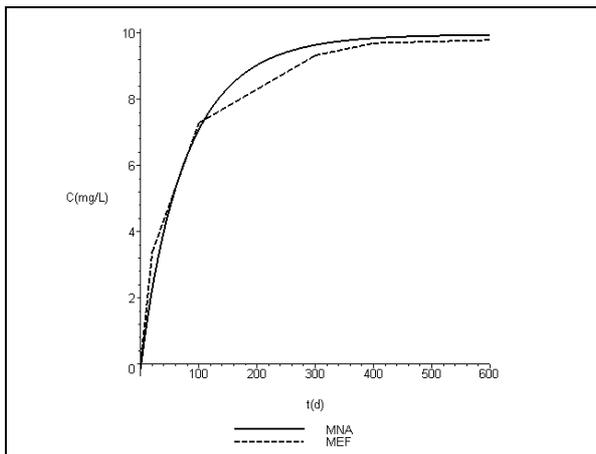


Figura 4 – Variação da concentração no tempo para o Nó 4 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.

*Figura 4 – Variação da concentração no tempo para o Nó 4 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.*

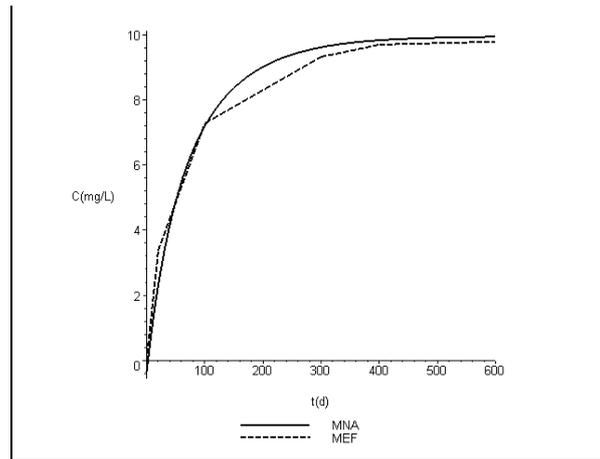


Figura 5 – Variação da concentração no tempo para o Nó 5 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.

*Figura 5 – Variação da concentração no tempo para o Nó 5 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.*

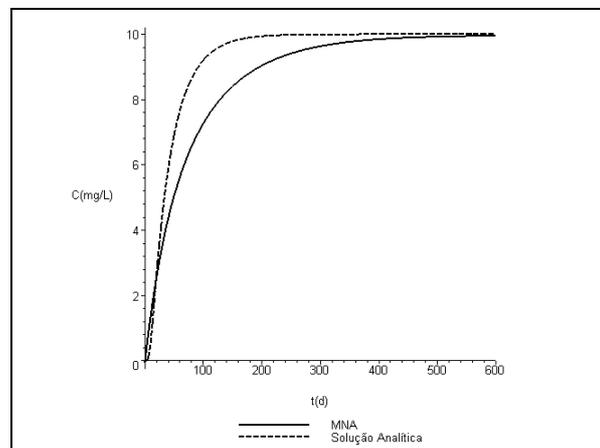


Figura 6 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 2.

*Figura 6 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 2.*

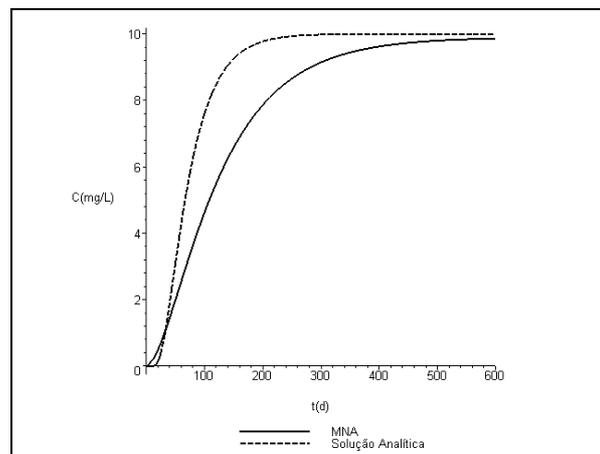


Figura 7 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 3.

*Figura 7 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 3.*

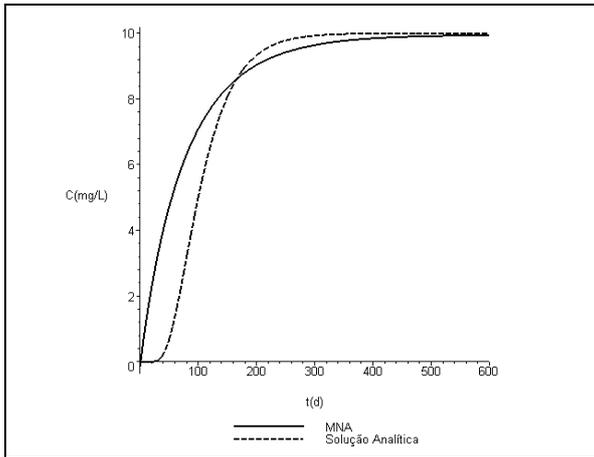


Figura 8 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 4.

*Figura 8 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 4.*

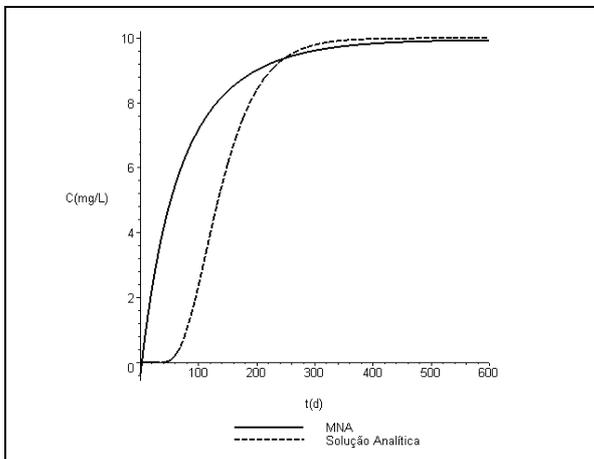


Figura 9 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 5.

*Figura 9 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 5.*

Charbeneau (2000) mostra que existe uma diferença no formato das curvas de transporte de contaminantes quando as soluções são obtidas na entrada e na saída do domínio. Quando a solução é obtida para a entrada do domínio, como é o caso dos métodos numéricos e numérico-analítico, os valores das concentrações variam de acordo com as condições contorno, tendo seus valores variando no eixo dos y. Para as soluções obtidas na saída do domínio, como é o caso das soluções analíticas, a concentração inicial é zero e a curva cresce à medida que o tempo avança até atingir a concentração final. Isso explica a diferença apresentada entre a solução analítica e o método numérico-analítico nas curvas de transporte de contaminantes (Figuras 6, 7, 8 e 9).

Para se testar os resultados apresentados, foram determinados os valores das concentrações para os nós 2, 3, 4 e 5 para a Metodologia

Numérico-Analítica (MNA) e o Método dos Elementos Finitos (MEF), considerando-se um tempo de 10 dias, e calculado o erro relativo entre as duas metodologias (Tabela 1). Apesar dos valores de concentração nos nós 3, 4 e 5 encontrarem-se na mesma faixa de variação, os erros relativos são altos. No entanto, este fato não compromete a validade da metodologia apresentada, uma vez que a mesma tem sua validade demonstrada através da solução analítica.

**Tabela 1 – Erro relativo entre a Metodologia Numérico-Analítica e o Método dos Elementos Finitos.**

Nós	MNA	MEF	Erro relativo (%)
2	7.81	9.12	16.77
3	1.17	1.75	49.57
4	1.02	0.342	66.47
5	0.48	0.066	86.25

As figuras 10, 11 e 12 mostram a evolução da concentração em relação à distância para os tempos de 20, 100 e 300 dias, utilizando-se o Método dos Elementos Finitos (MEF), a metodologia Numérico-Analítica (MNA) e a solução analítica. A curva de decréscimo da concentração é muito mais acentuada nos 20 primeiros dias e torna-se mais suave após 300 dias, intervalo de tempo no qual o sistema começa e entrar no estado permanente, como mostram as figuras 10, 11 e 12.

No MEF e no MNA os valores da concentração no final do domínio ( $L = 50$  m) são de 0,350 mg/L e 0,251 mg/L para  $t = 20$  dias, 4,64 mg/L e 2,102 mg/L para  $t = 100$  dias e 9,61 mg/L e 9,15 mg/L para  $t = 300$  dias, respectivamente. Com o uso da solução analítica os valores da concentração para os tempos de 20, 100 e 300 dias no mesmo ponto do domínio são de 0 mg/L ; 1,15 mg/L e 9,8 mg/L, respectivamente. Os valores obtidos com o MNA e MEF encontram-se na mesma faixa de variação dos valores obtidos com a solução analítica, com exceção apenas do valor da concentração de 4,64 mg/L para  $t = 100$  dias com uso do MEF.

A Figura 10 mostra que as curvas obtidas com a MNA corrigem os problemas de oscilação numérica presente no MEF. A oscilação no MEF é devido à obtenção dos valores de concentração em pontos discretos do domínio o que não ocorre

quando se usa o MNA onde os valores são obtidos através de uma equação exponencial. Nas Figuras 11 e 12 fica explícito que os valores de concentrações obtidos com o MNA são bem mais próximas da solução analítica do que os obtidos com o MEF.

Para a medida dos efeitos da discretização espacial, define-se o número de Péclet, que é a relação entre a magnitude da velocidade de fluxo, o tamanho do elemento e o valor do coeficiente de dispersão. Para medida dos efeitos da discretização temporal, define-se o número de Courant, que é a relação entre a magnitude da velocidade de fluxo ( $v_x$ ), o tamanho do intervalo de tempo ( $\Delta t$ ) e o tamanho da discretização espacial na direção da velocidade ( $\Delta x$ ).

DAUS et al. (1985) apresentaram um estudo utilizando o método dos elementos finitos para a solução da equação de transporte de contaminantes, envolvendo a determinação dos valores limites para o número de Péclet, parâmetro que controla a instabilidade da solução com relação a discretização espacial e o número de Courant, para medida dos efeitos da discretização temporal. Para que a solução da equação de transporte não apresente instabilidade é necessário que os autovalores do sistema sejam reais e distintos e para isso  $Pe \leq 2$  e  $Cr \leq Pe/2$ . Desta forma, podemos dizer que o MNA não apresenta propriedades de instabilidade devido à dispersão numérica, tendo os valores do número de Péclet e de Courant igual a 1,5 e 0,03, respectivamente. Isto mostra que a solução numérico-analítica representa uma aproximação razoável da solução exata do problema.

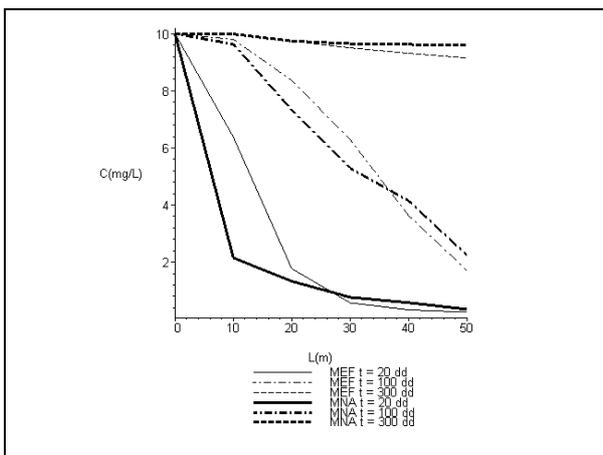


Figura 10 – Variação da concentração em relação à distância para os tempos de 20, 100 e 300 dias utilizando a MEF e MNA.

*Figura 10 – Variação da concentração em relação à distância para os tempos de 20, 100 e 300 dias utilizando a MEF e MNA.*

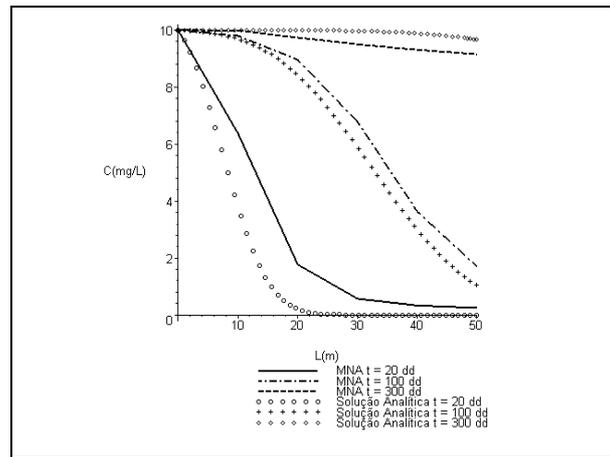


Figura 11– Variação da concentração em relação à distância para os tempos de 20, 100 e 300 dias utilizando a Solução Analítica e MNA.

*Figura 11– Variação da concentração em relação à distância para os tempos de 20, 100 e 300 dias utilizando a Solução Analítica e MNA.*

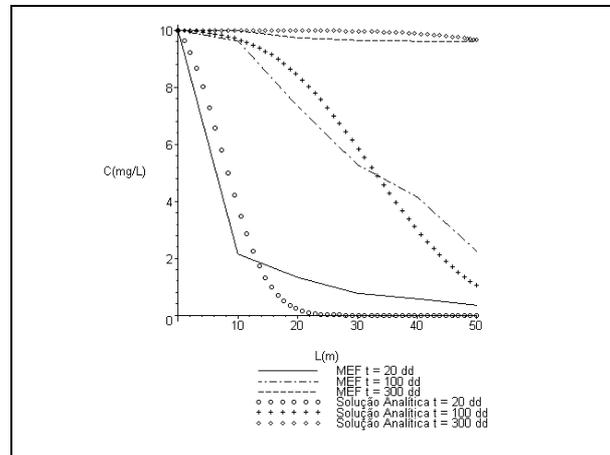


Figura 12– Variação da concentração em relação à distância para os tempo de 20, 100 e 300 dias utilizando a Solução Analítica e MEF.

*Figura 12– Variação da concentração em relação à distância para os tempo de 20, 100 e 300 dias utilizando a Solução Analítica e MEF.*

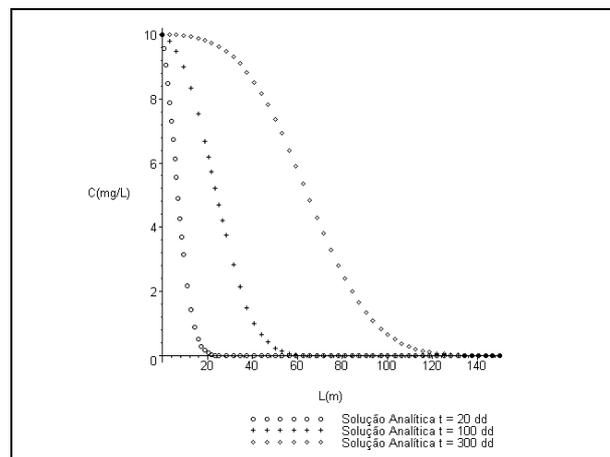


Figura 13 – Variação da Solução Analítica extrapolando os valores em relação a distância para os tempo de 20, 100 e 300 dias.

*Figura 13 – Variação da Solução Analítica extrapolando os valores em relação a distância para os tempo de 20, 100 e 300 dias.*

Como as soluções analíticas são obtidas para um meio semi-infinito e o nosso modelo teórico trata de um meio finito, se extrapolarmos os valores de  $x$  para além do domínio, os valores da concentração tendem a zero, como pode ser observado na Figura 13. Este fato explica a variação no comportamento entre curvas obtidas com os MNA, MEF e a solução analítica (Figuras 11 e 12). Ao contrário do que acontece quando extrapolamos as curvas em relação ao tempo, nesse caso iremos obter os valores da concentração inicial e atingimos assim o estado permanente (Figuras 06, 07, 08 e 09).

Os trabalhos de Castro (1997, 1998) mostram a aplicação da Metodologia Numérico-Analítica para solução de problemas transientes de percolação de água em uma coluna de solo composta por três tipos de solo. Os resultados da variação da carga hidráulica no tempo mostraram a existência de uma diferença considerável entre a metodologia numérico-analítica e o resultado obtido por Istok (1989) para o mesmo problema.

## **CONCLUSÕES**

Neste trabalho, propõe-se criar uma ferramenta para análise de contaminação da água subterrânea que fosse capaz de traduzir problemas de transporte de contaminantes unidimensionais, com precisão e eficiência. Tais objetivos foram atingidos com a utilização de uma metodologia analítica no tratamento da variável tempo. O Método Numérico-Analítico (MNA) é uma nova metodologia proposta para determinação da curva de transporte de contaminante em uma dimensão. Os resultados obtidos com a MNA e comparados ao Método dos Elementos Finitos e a Solução Analítica da equação de transporte de contaminantes validam a metodologia apresentada.

A metodologia Numérico-Analítica 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 encontradas nos métodos analíticos. Pelo exposto, a ferramenta numérico-analítica é adequada e confiável quando se está de posse de um método numérico que resolva corretamente as equações diferenciais, e de um modelo matemático que represente com fidelidade o fenômeno físico.

## REFERÊNCIAS

- BEAR, J. **Dynamics of Fluids in Porous Media**. American Elsevier, New York. 1972.
- BEAR, J. Analysis of flow against dispersion in porous media-Comments. **Journal Hydrology**, v. 40, p. 381-385, 1979.
- CASTRO, M. A. H. Uma Metodologia Numérico-Analítica para Solução de Problemas Transientes em Recursos Hídricos. In: XII SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, Vitória, ES, v. 2, p. 313-318, 1997.
- CASTRO, M. A. H. Solução de Problemas Transientes em Recursos Hídricos através da Matriz de Transferência. In: II SIMPÓSIO DE RECURSOS HÍDRICOS DEL CONE SUR, Santa Fé, Argentina, v. IV, p. 309-318, 1998.
- CASTRO, M. A. H. Um Método Numérico-Analítico para Solução de Problemas Transientes. In: XI CONGRESSO BRASILEIRO DE MECÂNICA DOS SOLOS E ENGENHARIA GEOTÉCNICA, Brasília, Anais do XI COBRAMSEG, v. I, p. 1-8, 1998.
- CHARBENEAU, R.J. **Groundwater Hydraulics and Pollutant Transport**. Prentice-Hall, Inc. New Jersey. 2000
- COSTA, C.T. 2000. **Caracterização hidrodispersiva de um solo aluvial no semi-árido do Nordeste do Brasil**. Dissertação de Mestrado. UFPE. 2000.
- DANKWERTS, P. V. Continuous Flow Systems. **Chemical Engineering Science**, v. 2, p. 1-13, 1953.
- FEIKE, J.L.; TORIDE, N. Analytical solutions for solute transport in finite soil columns with arbitrary initial distributions. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v. 62, p. 855-864, 1998
- FETTER, C.W. **Contaminant Hydrogeology**. Macmillan Publishing Company, New York, N.Y., 1993.
- FREEZE, R. A., E CHEERY, J. A. **Groundwater**, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J. 1979.
- ISTOK, J. D. **Groundwater Modeling by the Finite Element Method**, American Geophysical Union, Washington, DC, USA. 1989.
- LEIJ, F.J.; TORIDE, N. Discrete time and length-averaged solutions of the advection-dispersion equation. **Water Resources Research**, v. 31, p. 1713-1724. 1995.
- PAKER, J. C.; VAN GENUCHTEN, M. TH. Flux-average and volume-average concentration in continuum approaches to solute transport. **Water Resource Research**. v. 20, p. 866-872, 1984
- PARLANGE, J.Y. ; STARR, J. L.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; BARRY, D.A.; PARKER, J.C. Exit Condition for Miscible Displacement Experiments. **Soil Sci**, v. 153, p. 165-171, 1992.
- ROTH, K. **Lecture notes in soil physics**. Institute of Soil Science, University of Hohenheim. Version 3.2, 1996.
- SÉGOL, G. **Classic groundwater simulations: Proving and improving numerical models**. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ. 1993.
- SUDICK, E.A. The Laplace transforms Galerkin Technique: A time-continuous Finite Element Theory and Application to mass transport in Groundwater. **Water Resource Research**, v. 25 (8), p. 1833-1846. 1989.
- TORIDE, N.; LEIJ, F.J.; VAN GENUCHTEN, M. Th. A comprehensive set of analytical solutions for solute transport with first-order decay and zero-order production. **Water Resource Research**, v. 29, p. 2167-2182, 1993.
- VAN GENUCHTEN, M. TH.; ALVES, W.J. Analytical solutions of the one dimensional convective-dispersive solute transport equation. **USDA, Agricultural Research Service, Tech. Bull.**, p. 1661, 1982.
- YONG, R.N. et al. **Principles of contaminant transport in soils**. Development in geotechnical Engineering, Netherlands: Elsevier Science Publishers, 73, 327p, 1992.