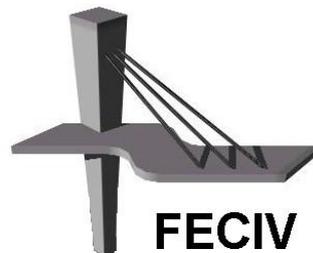


DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO
DE PLUMAS POLUENTES EM AQUÍFEROS**

LARISSE MENDES DOS SANTOS

UBERLÂNDIA, 27 de Janeiro de 2015



FACULDADE DE ENGENHARIA CIVIL
Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil



UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA CIVIL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL



Larisse Mendes dos Santos

MODELAGEM MATEMÁTICA DA DISPERSÃO DE PLUMAS POLUENTES EM AQUÍFEROS

Dissertação apresentada como parte dos requisitos para a obtenção do título de **Mestre em Engenharia Civil**, no Programa de Pós-Graduação da Faculdade de Engenharia Civil da Universidade Federal de Uberlândia.

Orientador: Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho

Uberlândia, 27 de Janeiro de 2015

Dados Internacionais de Catalogação na Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFU, MG, Brasil.

S237m Santos, Larisse Mendes dos, 1988-
2015 Modelagem matemática da dispersão de plumas poluentes em
aquíferos / Larisse Mendes dos Santos. - 2015.
156 f. : il.

Orientador: José Eduardo Alamy Filho.
Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil.
Inclui bibliografia.

1. Engenharia civil - Teses. 2. Águas subterrâneas - Poluição - Teses.
3. Aquíferos - Araguari (MG) - Teses. 4. Poluentes - Teses. I. Alamy
Filho, José Eduardo. II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa
de Pós-Graduação em Engenharia Civil. III. Título.

CDU: 621



SERVIÇO PÚBLICO FEDERAL
MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DE UBERLÂNDIA
FACULDADE DE ENGENHARIA CIVIL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL



ATA DA DEFESA DE DISSERTAÇÃO DE MESTRADO ACADÊMICO DO PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA CIVIL

ATA Nº: 134/2015

CANDIDATA: Larisse Mendes dos Santos

ORIENTADOR: Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho

TÍTULO: "Modelagem matemática da dispersão de plumas poluentes em aquíferos"

ÁREA DE CONCENTRAÇÃO: Engenharia Urbana, Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental

LINHA DE PESQUISA: Recursos Hídricos e Saneamento

DATA DA DEFESA: 27 de janeiro de 2015

LOCAL: Sala de Apoio I

HORÁRIO DE INÍCIO E TÉRMINO DA DEFESA: 15:10 - 18:00

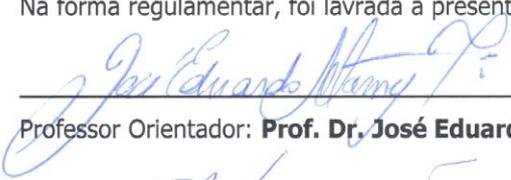
Após avaliação do documento escrito, da exposição oral e das respostas às arguições, os membros da Banca Examinadora decidem que o candidato foi:

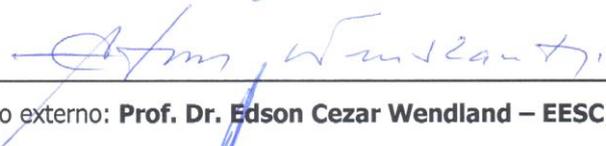
APROVADO

REPROVADO

OBS:

Na forma regulamentar, foi lavrada a presente ata que está assinada pelos membros da Banca:


Professor Orientador: **Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho – FECIV/UFU**


Membro externo: **Prof. Dr. Edson Cezar Wendland – EESC/USP**


Membro: **Prof. Dr. Marcio Ricardo Salla – FECIV/UFU**

Uberlândia, 27 de janeiro de 2015.

*À minha mãe, Laurinda, pelo apoio, incentivo,
companheirismo e amizade. Sem ela nenhum
sonho valeria à pena.*

AGRADECIMENTOS

Ao longo dos dois anos de trabalho que resultaram nessa dissertação, muitas pessoas presenciaram minhas dificuldades e por vezes ajudaram a supri-las, tornando realidade meus objetivos. Assim, não poderia deixar de manifestar meus sinceros e reconhecidos agradecimentos.

Começo, como não poderia ser diferente, por agradecer a Deus por seu infinito amor e por me agraciar com saúde e força para superar os momentos de dificuldade, bem como para conseguir finalizar mais essa etapa em minha vida.

Aos meus familiares pelo exemplo e por ser minha fonte de alegria e descanso. Em especial a minha mãe Laurinda e meus irmãos: Aline, Fábio, Leonardo e Nilza pelo apoio em todas as minhas dificuldades. Eu os admiro muito.

A aos meus queridos sobrinhos Hudson, Iann e Leonardo Filho pela amizade e carinho, bem como pelos momentos felizes que tenho a oportunidade de vivenciar ao lado desses.

Ao meu orientador, Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho, pela paciência, dedicação, pelas sugestões e apoio na elaboração de todos os trabalhos desenvolvidos ao longo dessa pesquisa.

As professoras Dr.^a Karla Maria Wingler Rebelo e Dr.^a Alice Rosa da Silva pelas contribuições enriquecedoras no exame de qualificação.

A todos os professores e colegas do Programa de Pós-graduação da FECIV pelo conhecimento transmitido por meio de aulas, seminários, conversas e debates, os quais possibilitaram a construção do conhecimento em todas as disciplinas ministradas.

Aos meus amigos, Emiliano e Nilton, que sempre estiveram ao meu lado em todos os momentos durante o mestrado, compartilhando não só conhecimento como também uma amizade sincera.

A agência financiadora dessa pesquisa, Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES), pela bolsa concedida durante os anos de curso.

Enfim, a todos que fizeram parte desta etapa da minha vida, pois me fizeram crescer como ser humano e profissionalmente. Obrigada!

“Se cheguei até aqui foi porque me apoiei no ombro de gigantes”.

Isaac Newton

Santos, L. M. Modelagem matemática da dispersão de poluentes em aquíferos. 156 p. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Engenharia Civil, Universidade Federal de Uberlândia, 2014.

RESUMO

Este trabalho teve como objetivos modelar e simular o transporte de poluentes em aquíferos livres. O modelo desenvolvido nesta pesquisa utiliza regime de escoamento permanente e regime de transporte transiente para poluentes. Foi utilizado um modelo Euleriano baseado na equação advecção-dispersão e um modelo lagrangeano auxiliar para estimativa das dispersividades, para simular a distribuição espacial e temporal da concentração de um poluente genérico em águas subterrâneas. O modelo construído fundamentou-se no Método de Diferenças Finitas, com aplicação do esquema de Crank Nicolson, cujas equações discretas foram convenientemente implementadas em uma linguagem computacional. Para solução do sistema linear resultante, utilizou-se o armazenamento esparsa da matriz de coeficientes e o método de Gradientes Bi-conjugados Pré-condicionado e Estabilizado (*PBiCGSTAB*). Para tanto, foram utilizados os programas computacionais *VBA (Visual Basic for Applications)* e o *Surfer10*. A área de aplicação do modelo situa-se na malha urbana da cidade de Araguari/MG, sendo introduzidas fontes de poluição hipotéticas, pontuais, difusas e lineares, disseminadas na malha urbana. Foram realizadas análises de sensibilidade com os parâmetros desconhecidos para o aquífero Bauru, constatando a sensibilidade do modelo ao coeficiente de decaimento de primeira ordem e aos coeficientes que regulam a dispersividade longitudinal e transversal. Os resultados mostraram que o modelo construído apresenta de forma satisfatória o padrão de transporte de poluentes em águas subterrâneas, levando em consideração a exploração de poluentes por poços, seguindo uma expansão com espalhamento do mesmo, ao longo dos anos simulados. A dispersão das plumas poluentes é influenciada pela direção e sentido do fluxo subterrâneo, com migrações para cones de depressão. Uma das vantagens do modelo implementado nesta pesquisa é a possibilidade das simulações serem executadas em computadores individuais simples, sem consumo exagerado de tempo e utilizando o Excel como base, um programa amplamente difundido na prática das Engenharias.

Palavras-chave: Água subterrânea, transporte de poluentes, equação advecção-dispersão, simulação computacional.

Santos, L. M. Mathematical modeling of the dispersion of pollutants in aquifers. 156 p. MSc Dissertation, College of Civil Engineering, Federal University of Uberlândia, 2014.

ABSTRACT

This work had as objectives, model and simulate the transport of pollutants in free aquifers. The model developed in this research uses permanent flow regime and transient transport system for pollutants. We used a model based on Eulerian advection-dispersion equation and Lagrangian model to help estimate of dispersivities to simulate the spatial and temporal distribution of the concentration of a generic pollutant in groundwater. The model built was based on the Finite Difference Method, applying the Crank Nicolson scheme, whose discrete equations were conveniently implemented in a computer language. For solution of the linear system, used the sparse storage of the coefficient matrix and the Biconjugate gradients method Pre-conditioning and stabilized (PBiCGSTAB). Therefore, the computer programs were used VBA (Visual Basic for Applications) and the Surfer10. The model application area is located in the urban area of the city of Araguari / MG, together with a hypothetical sources of pollution, punctual, diffuse and linear, disseminated in the urban area. Sensitivity analyzes were performed with the unknown parameters for the Bauru aquifer, noting the sensitivity of the model to the decay coefficient of the first order and the coefficients governing the longitudinal and transverse dispersivity. The results show that the model built satisfactorily presents the standard pollutant transport in groundwater, taking into account the exploitation of pollutants from the wells in an expansion thereof with spreading over the simulated years. The dispersion of pollutants down is influenced by the direction and sense of groundwater flow, with migration to cones of depression. An advantage of the model is implemented in this study the possibility of the simulation being performed in single individual computers without excessive consumption of time and using Excel as a base, a widespread practice of engineering on the program.

Keywords: Groundwater, pollutant transport, advection-dispersion equation, computer simulation.

SÍMBOLOS, ABREVIATURAS E SIGLAS

SÍMBOLOS

- c - Concentração de poluentes dissolvidos na água subterrânea
- c_0 - Fonte de concentração inicial
- c_b - Cota de base
- c_p - Concentração máxima na origem
- d - Espessura do aquífero
- dec_i - Declividade do lençol na direção i
- $dV_{\text{água}}$ - Volume de água retirado
- $dV_{\text{água}}$ - Volume de água retirado
- d_{vol} - Volume do fluido
- $erf(x)$ - Função erro
- f - Equação genérica que representa $\frac{dc}{dt}$
- \dot{g}, g - Termo sumidouro ou fonte
- h - Carga piezométrica
- k' ou λ - Constante de decaimento de primeira ordem
- k_d - Coeficiente de partição
- k_i - Condutividade hidráulica na direção i
- \dot{m}_i - Fluxo de massa
- n - Porosidade
- n_e - Porosidade efetiva
- q_i - Velocidade aparente na direção i

q_v	- quantidade de massa adicionado à zona de fonte por unidade de volume de água por unidade de tempo
r	- Raio de influência
t	- Tempo
$t_{1/2}$	- Meia vida do material radioativo ou biodegradável
v	- Velocidade na direção x
vel_i	- Módulo do vetor velocidade na direção i
v_i	- Velocidade de percolação na direção i
v_r	- Velocidade resultante média
vol	- Volume do elemento de fluido
v^*	- Velocidade média linear do poluente
x_i	- Coordenada na direção do eixo x
y_i	- Coordenada na direção do eixo y
z_i	- Coordenada na direção do eixo z
A	- Área transversal
B	- Espessura do aquífero
B'	- Espessura saturada do aquífero
D	- Dispersão
D_d	- Coeficiente de difusão
D_L	- Coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal
D_m	- Dispersão mecânica
D_t	- Coeficiente de difusão efetiva
D_T	- Coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal
D_{ij}	- Tensor de coeficiente de dispersão
D^*	- Difusão molecular
D_i^*	- Coeficiente de retardo da dispersão hidrodinâmica na direção i
E	- Escala do domínio
F	- Fluxo de massa do soluto por unidade de área por unidade de tempo
G_p	- Termo fonte sumidouro por operação do poço
H	- altura do plano que ocorre injeção de poluente

L_p	- Comprimento da pluma poluente
M	- Massa do elemento de fluido ou poluente
M_s	- Massa do solo seco em estufa de 105°C
\dot{M}	- Descarga de massa
R	- Fator de Retardo
S	- Coeficiente de armazenamento
S_d	- Desvio padrão na origem Gaussiana
S_p	- Peso de soluto sorvido por unidade de peso seco do material do aquífero
S_s	- Armazenamento específico
S_y	- Rendimento específico para aquífero livre
Q_p	- Vazão do poço
W	- largura do plano que ocorre injeção de poluente
V	- Volume
Y_1	- ordenada do limite inferior da fonte do poluente em $x = 0$
Y_2	- ordenada do limite superior da fonte do poluente em $x = 0$
α_L	- Coeficiente de dispersividade longitudinal
α_T	- Coeficiente de dispersividade transversal
γ	- Constante de decaimento de primeira ordem para a distribuição na origem Gaussiana
ρ_w	- Massa específica da água
ρ_d	- Densidade seca do meio poroso
ϕ	- Variáveis ou parâmetros
ϕ_L	- Parâmetro que exprime a relação entre a dispersividade longitudinal (α_L) e o comprimento da pluma (L_p)
ϕ_T	- Parâmetro que exprime a relação entre a dispersividade transversal (α_T) e a dispersividade longitudinal (α_L)
φ	- Ângulo de rotação médio
θ	- Porosidade do aquífero
ω	- Coeficiente de tortuosidade das trajetórias do fluxo

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Distribuição de água doce na Terra	23
Figura 2: Mecanismos associados à migração de poluentes em solos	26
Figura 3: Elemento de volume infinitesimal de meio poroso saturado	33
Figura 4: Geometria e eixo do sistema de coordenadas para uma fonte de plano vertical.	44
Figura 5: Localização do Município de Araguari - MG	51
Figura 6: Perfil lito-hidrogeológico da região de Araguari/MG	52
Figura 7: Relevo de Araguari/MG.....	53
Figura 8: Poços de exploração em Araguari/MG	54
Figura 9: Malha de discretização retangular e sistema de indexação adotado para os nós	55
Figura 10: Esquema de transferência de informações entre pontos amostrais e os nós de uma malha de discretização	56
Figura 11: Esquema de espalhamento da concentração injetada por uma fonte pontual até os nós mais próximos	63
Figura 12: : Esquema de espalhamento da vazão de um poço até os nós mais próximos .	65
Figura 13: Esquema de domínio de cálculo com 20 nós e 1 fonte injetora de poluente	67
Figura 14: Detalhe do sistema linear $A \times c = d$ na forma matricial	67
Figura 15: Esquema de deslocamento de uma partícula, utilizado para a estimativa da escala de comprimento e para cálculo da dispersividade longitudinal	71
Figura 16: Dados hidrogeológicos do aquífero	72
Figura 17: Coordenadas das fontes poluentes	73
Figura 18: Dados de exploração	73

Figura 19: Condutividade hidráulica (k_x, k_y)	74
Figura 20: Rendimento Específico (S_Y).....	75
Figura 21: Carga Hidráulica (h)	75
Figura 22: Espessura Saturada do aquífero (B')	76
Figura 23: Distribuição das vazões explotadas e dos pontos de injeção de poluentes	76
Figura 24: Fluxograma do algoritmo para solução em regime de escoamento permanente e transporte de poluente em regime transiente	78
Figura 25: Distribuição da superfície freática sob o relevo da cidade	80
Figura 26: Distribuição da espessura do aquífero sob o relevo da cidade.....	80
Figura 27: Fontes de poluente, vazões explotadas e vetores de velocidade de percolação.	82
Figura 28: Evolução espacial e temporal das plumas poluentes para o cenário com: $k^* = 10^{-3} \text{h}^{-1}$, $k_d = 10^{-3}$, $\phi_L = 0,1$, $\phi_T = 0,1$, $\rho_b = 2,0$ e $n = 0,25$	83
Figura 29: Variações nos campos de dispersão hidrodinâmica para os diferentes instantes de simulação	87
Figura 30: Sobreposição dos campos de dispersão hidrodinâmica sobre o relevo local $t = 7$ anos.....	91
Figura 31: Distribuição de plumas na vizinhança da bateria de poços do Estadual e de outros poços isolados	92
Figura 32: Pluma isolada.....	93
Figura 33: Distribuição de plumas no setor central da cidade	94
Figura 34: Distribuição de plumas na vizinhança da bateria de poços de Fátima.....	95
Figura 35: Distribuição de plumas na vizinhança da bateria de poços do Independência .	96
Figura 36: Fontes difusas e lineares utilizadas na simulação	98
Figura 37: Distribuição de plumas induzidas por fontes não pontuais	99
Figura 38: Distribuição de pluma induzida por fonte difusa alocada em um dos cemitérios municipais	100

Figura 39: : Distribuição de pluma induzida por fonte difusa hipótética alocada em uma zona periférica	101
Figura 40: Distribuição de pluma induzida por fonte difusa hipótética alocada em uma zona periférica	102
Figura 41: Distribuição de pluma induzida por fonte linear hipótética alocada sob uma avenida	103
Figura 42: Plumas poluentes ($t = 5$ anos e condição padrão)	106
Figura 43: Campos de dispersão hidrodinâmica ($t = 5$ anos e condição padrão)	107
Figura 44: Plumas poluentes para variações percentuais negativas de k'	108
Figura 45: Desvios absolutos para variações percentuais negativas de k'	108
Figura 46: Plumas poluentes para variações percentuais positivas de k'	109
Figura 47: Desvios absolutos para variações percentuais positivas de k'	110
Figura 48: Desvios relativos para variações percentuais positivas de k'	111
Figura 49: Variação dos desvios absolutos para diferentes variações do parâmetro k' ..	112
Figura 50: Variação dos desvios relativos para diferentes variações do parâmetro k' ...	112
Figura 51: Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de k'	113
Figura 52: Plumas poluentes para variações percentuais negativas de ϕ_L	114
Figura 53: Desvios absolutos para variações percentuais negativas de ϕ_L	115
Figura 54: Desvios relativos para variações percentuais negativas de ϕ_L	116
Figura 55: Plumas poluentes para variações percentuais positivas de ϕ_L	117
Figura 56: Desvios absolutos para variações percentuais positivas de ϕ_L	118
Figura 57: Desvios relativos para variações percentuais positivas de ϕ_L	119
Figura 58: Variação dos desvios absolutos para diferentes variações do parâmetro ϕ_L ..	120
Figura 59: Variação dos desvios relativos para diferentes variações do parâmetro ϕ_L ...	120
Figura 60: Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de ϕ_L	121

Figura 61: Variação dos desvios absolutos para diferentes variações do parâmetro ϕ_T ..	122
Figura 62: Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de ϕ_T	122
Figura 63: Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de ϕ_T	123
Figura 64: Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações ρ_d e k_d	124
Figura 65: Simulações para $R = 1$	124
Figura 66: Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de n	125
Figura 67: Sensibilidade para desvios relativos máximos (maiores desvios positivos)...	127
Figura 68: Sensibilidade para desvios relativos médios.....	127
Figura 69: Sensibilidade para desvios relativos mínimos (maiores desvios relativos)	128

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Solos do Município de Araguari/MG	53
Tabela 2: Relações empíricas para dispersividades.....	70
Tabela 3: Tabela de Variação dos parâmetros do modelo em relação à condição padrão	105

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO	19
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA	23
2.1 EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS	25
2.1.1 <i>Processos Físicos</i>	<i>26</i>
2.1.2 <i>Processos Bio-Físico-Químicos</i>	<i>30</i>
2.2 EQUAÇÕES GOVERNANTES	31
2.2.1 <i>Conceitos Gerais</i>	<i>31</i>
2.2.2 <i>Equação de Escoamento em Aquíferos - modelo horizontal de escoamento (2DH).....</i>	<i>33</i>
2.2.3 <i>Equação de Transporte de poluentes em Aquíferos - modelo horizontal de transporte (2DH).....</i>	<i>37</i>
2.3 SOLUÇÕES ENCONTRADAS NA LITERATURA	41
2.3.1 <i>Soluções analíticas para a equação advecção-dispersão</i>	<i>41</i>
2.3.1.1 <i>Solução dada por Wexler (1992).....</i>	<i>41</i>
2.3.1.2 <i>Solução dada por Cushman e Bal (1993)</i>	<i>43</i>
2.3.1.3 <i>Solução dada por Guyonnet e Neville (2004)</i>	<i>44</i>
2.3.2 <i>Soluções numéricas para a equação advecção-dispersão</i>	<i>47</i>
3 METODOLOGIA.....	50
3.1 ÁREA DE ESTUDO	50
3.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO ADVECÇÃO-DISPERSÃO	55
3.3 ESPALHAMENTO DE PROPRIEDADES PARA OS NÓS	61
3.4 ASPECTOS DE SOLUÇÃO DO SISTEMA LINEAR	65
3.5 ESTIMATIVA DOS COEFICIENTES DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA.....	68
3.6 IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO.....	72

4 RESULTADOS	79
4.1 SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE UM POLUENTE GENÉRICO INTRODUCIDO NO AQUÍFERO POR FONTES PONTUAIS	81
4.2 SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE UM POLUENTE GENÉRICO INTRODUCIDO NO AQUÍFERO POR FONTES NÃO PONTUAIS	97
4.3 ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	104
<i>4.3.1 Análise de sensibilidade para a constante de decaimento de primeira ordem (k')</i>	<i>107</i>
<i>4.3.2 Análise de sensibilidade para a constante de proporcionalidade da dispersividade longitudinal (ϕ_L)</i>	<i>113</i>
<i>4.3.3 Análise de sensibilidade para a constante de proporcionalidade da dispersividade transversal (ϕ_T)</i>	<i>122</i>
<i>4.3.4 Análise de sensibilidade para a densidade do meio poroso seco (ρ_d) e o coeficiente de partição (k_d)</i>	<i>123</i>
<i>4.3.5 Análise de sensibilidade para a porosidade do aquífero (n_e)</i>	<i>125</i>
<i>4.3.6 Ordenamento de sensibilidade</i>	<i>126</i>
5 CONCLUSÃO.....	129
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	132
APÊNDICE A	136
APÊNDICE B.....	143

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Historicamente, a hidrologia subterrânea teve seus primeiros registros por volta de 5000 a.C., quando chineses e egípcios encontravam-se bastante familiarizados com a escavação de poços e já faziam captação de água subterrânea para abastecimento. Antigos chineses perfuravam poços com centenas de metros de profundidade com a utilização de varas de bambu. Ainda, cerca de 800 a.C., persas construíam túneis e poços com o objetivo de atingirem os aquíferos. Embora muitas civilizações antigas tivessem conhecimento da existência de águas subterrâneas, bem como de primitivas técnicas de exploração, somente no século XV deu-se uma explicação formal para a origem da mesma. A explanação correta do ciclo hidrológico deu-se quando Pierre Perrault e Edmé Mariotté realizaram as primeiras medições de precipitação e vazão ao longo do rio Sena, confirmando que somente 16% da precipitação anual contribuíam para a sua vazão, enquanto o restante infiltrava, caracterizando assim a dependência das águas subterrâneas da precipitação e infiltração.

O termo água subterrânea é utilizado para denotar a água da zona de saturação encontrada abaixo da superfície do solo (BEAR, 1979). A presença de uma camada não saturada subjacente faz com que essas águas sejam naturalmente protegidas da poluição e, em termos de abastecimento, na maioria das vezes demandam um tratamento simplificado, sendo realizado basicamente o processo de desinfecção, ressaltando assim a importância qualitativa de mananciais subterrâneos, se comparados com mananciais superficiais.

Em termos percentuais, a água doce que se encontra disponível e acessível no planeta Terra totaliza em cerca de 1%, sendo que aproximadamente 97,7% das águas doces para consumo humano estão em forma de águas subterrâneas. Visando ao estudo da ocorrência e distribuição das águas naturais no globo terrestre, surgiu a Hidrologia (LINSLEY, 1978). Em especial, define-se a Hidrologia Subterrânea, ciência cuja finalidade é estudar a ocorrência, movimentação e distribuição de água na porção subterrânea da Terra (CLEARY, 1989). Tal definição é ampliada, visando a incluir o aspecto da qualidade da água subterrânea.

Embora a água subterrânea não seja visualmente perceptível, a interferência humana de forma negativa no meio ambiente vem ameaçando a sua qualidade, causando poluição principalmente devido ao desenvolvimento urbano, industrial e agrícola. Tais poluentes, ao entrarem em contato com o solo, podem ou não atingir as águas subterrâneas, sendo que sua ação pode ser neutralizada, modificada ou retardada. A poluição das águas subterrâneas compromete a captação de água para consumo devido ao seu lento movimento e grande volume.

Uma vez poluído um aquífero, algumas medidas precisam ser tomadas, tais como: identificação da fonte de poluição, o movimento dos poluentes no fluxo de águas subterrâneas, bem como o estudo das plumas e dispersão dos poluentes. Em especial, visando ao estudo do transporte, concentração e dispersão de poluentes, torna-se necessário o desenvolvimento de ferramentas matemáticas que permitam compreender este fenômeno, como também desenvolver modelos com melhores precisões numéricas para simular plumas poluentes.

Com o objetivo de resolver a equação advecção dispersão, a modelagem vem sendo utilizada para simular o transporte de poluentes em águas subterrâneas. Na literatura, encontram-se alguns métodos numéricos que são aplicados visando à busca de soluções para tal equação. Dentre estes, destacam-se o Método dos Elementos Finitos, Método de Diferenças Finitas, Método de Volumes Finitos, Método de Elementos Analíticos, Método de Elementos de Contorno, Abordagem de Conjuntos Fuzzy, entre outros. Ainda, existem algumas soluções analíticas para a equação advecção-dispersão, a maioria delas para problemas unidimensionais, com características e geometrias simplificadas.

O presente trabalho foi elaborado utilizando um modelo matemático de transporte horizontal de poluentes em aquíferos, com aplicação e adaptação de técnicas numéricas baseadas no Método de Diferenças Finitas. As simulações de transporte de poluentes aqui apresentadas são hipotéticas no que diz respeito à imposição das cargas poluidoras e à atribuição das dispersividades do meio poroso. Entretanto, as simulações foram aplicadas para o sistema aquífero Bauru, utilizando as características hidrogeológicas e hidrodinâmicas deste aquífero sob a zona urbana de Araguari / MG, além da disposição de poços utilizados para o abastecimento público. Como existem parâmetros desconhecidos para tal aquífero, realizaram-se testes de sensibilidade para avaliar a importância destes parâmetros na solução dos campos de concentrações gerados pela solução numérica da equação advecção-dispersão. Resumidamente, as simulações apresentadas neste trabalho buscaram mapear plumas de um poluente genérico em situações de escoamento permanente e regime de transporte de poluentes transiente.

Este trabalho tem, como objetivo principal, a construção de um modelo de transporte horizontal de poluentes em meios porosos saturados. Trata-se aqui de um modelo bidimensional, integrado ao longo da espessura do aquífero. A solução numérica, embora seja baseada no Método de Diferenças Finitas, traz soluções originais para a estimativa das dispersividades do meio e para a modelagem de fontes poluidoras pontuais.

Mais especificamente, propõe-se a:

- Construir a base de dados e o modelo de dispersão de poluentes a partir de um código escrito em *Visual Basic* aplicado às planilhas do Excel;
- Traçar o movimento dos poluentes no fluxo de águas subterrâneas;
- Realizar teste de sensibilidades para os parâmetros: coeficiente de decaimento (k'), coeficiente de partição ou de adsorção (k_d), densidade do meio poroso seco (ρ_d), porosidade do aquífero (n), dispersividades longitudinal e transversal (α_L e α_T);

- Calcular as concentrações de poluentes e mapear o avanço espacial e temporal das plumas;
- Analisar as plumas e dispersão dos poluentes.

Neste contexto, o trabalho está subdividido em seis capítulos, organizados da seguinte maneira:

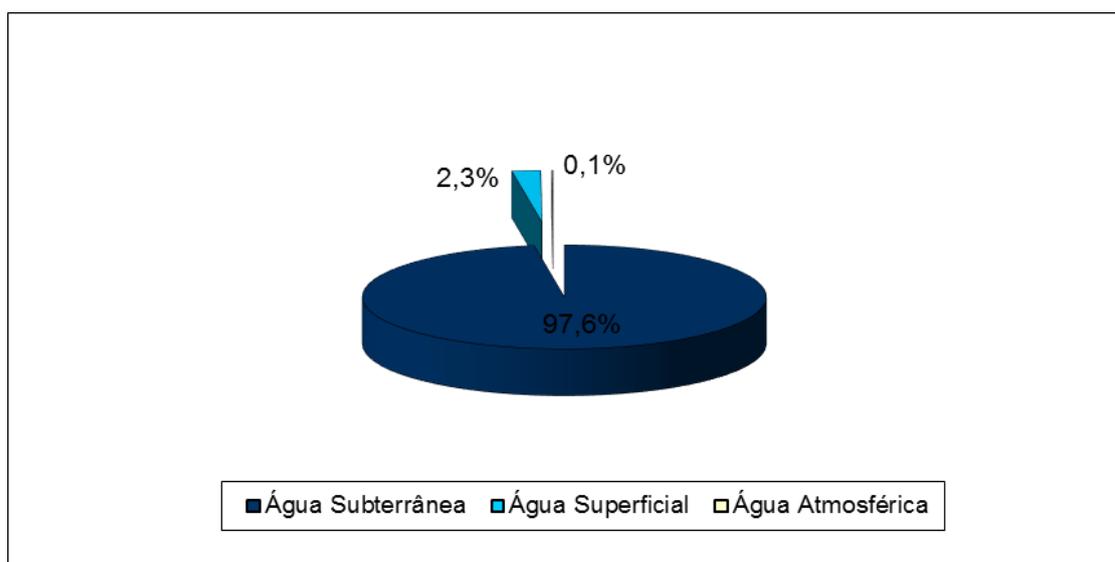
- Capítulo 1 - Introdução: apresenta uma breve explanação do conteúdo a ser explicitado, justificativa do tema escolhido, bem como os objetivos.
- Capítulo 2 - Revisão Bibliográfica: apresenta uma revisão sobre poluição em aquíferos e plumas poluentes, bem como sobre os parâmetros e equações necessários para a simulação da equação advecção-dispersão utilizada para analisar o transporte de poluentes em aquíferos.
- Capítulo 3 - Metodologia: é explicitada a discretização da equação advecção-dispersão e o detalhamento do código implementado.
- Capítulo 4 - Resultados: são apresentados os testes de sensibilidade e os resultados encontrados após as simulações realizadas.
- Capítulo 5 - Conclusão: são apresentadas as considerações finais após a análise dos resultados encontrados na pesquisa.
- Capítulo 6 - Referências Bibliográficas: apresentados os trabalhos que embasaram a construção desta pesquisa.

CAPÍTULO 2

REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Atualmente, a água subterrânea extraída por meio de poços é uma alternativa para abastecimento de comunidades, tendo apresentado uso crescente nos últimos anos. A água subterrânea contribui com mais de 95% para toda a água doce disponível no planeta, sendo que a água doce remanescente encontra-se na superfície e atmosfera (CLEARY, 1989). Em termos quantitativos observa-se, na Figura 1, a importância da água subterrânea em relação aos mananciais superficiais. No entanto, apesar dos quantitativos, nem toda água subterrânea pode ser explorada, levando em consideração a profundidade das formações rochosas nas quais se encontra o aquífero, bem como a elevada retenção de água em alguns meios porosos.

Figura 1 - Distribuição de água doce na Terra



Fonte: Elaborada pelo autor, baseado nos dados encontrados em Alves (2008) e Cleary (1989).

Um dos principais interesses do desenvolvimento e gestão de sistemas de recursos das águas subterrâneas é a qualidade da água a ser extraída. O conceito de qualidade da água é fundamental para manter a sustentabilidade e a saúde humana. A qualidade da água pode ser medida pela quantificação de parâmetros físicos, químicos e biológicos condicionados para consumo humano, industrial, irrigação, entre outros (BEAR, 1979). A Portaria 2.914/11 publicada no diário oficial da união – a qual dispõe sobre os procedimentos de controle e de vigilância da qualidade da água para consumo humano e seu padrão de potabilidade – a fim de garantir a qualidade da água para consumo humano, estabelece uma série de parâmetros microbiológicos e físico-químicos com valores fixados a serem analisados, (BRASIL, 2011). É importante salientar que tais parâmetros podem variar de acordo com o uso ou fim determinado. Neste contexto, quando encontrada fora dos parâmetros estabelecidos, a água subterrânea torna-se imprópria para consumo. Águas poluídas são aquelas encontradas fora dos parâmetros determinados. Quando o consumo destas águas causa riscos diretos à saúde, denominam-se as mesmas como contaminadas.

Pode-se observar a crescente preferência pelo uso de águas subterrâneas para fins potáveis, por apresentarem menor custo no tratamento, por não exigirem a construção de extensas adutoras e por terem, em geral, excelente qualidade. No entanto, a água subterrânea não está totalmente protegida de poluentes, uma vez que a interferência negativa do homem na natureza vem poluindo os aquíferos, comprometendo assim a qualidade da água para consumo, sendo insidiosa, pois a poluição não é visível. Os principais agentes de poluição das águas subterrâneas se dão por conta da disposição inadequada ou de práticas impróprias com produtos com potencial de poluição. Segundo Bear (1979), ocorrem normalmente em:

- Atividades domésticas - ocorrem quando há rupturas de canalizações condutoras de esgotos ou fossas sépticas, infiltração da chuva em aterros sanitários, injeção de água nos aquíferos por água de esgoto tratado;
- Atividades industriais - podem gerar poluição das águas subterrâneas por meio de metais pesados, não deterioração de produtos tóxicos e materiais radioativos, normalmente devido a rupturas de canalizações em esgotos industriais, quando esses são separados de esgotos residenciais, podendo ser poluída ainda por

resíduos petrolíferos, derrames e vazamentos de tubulações em postos de combustíveis;

- Atividades agrícolas - a principal fonte de poluentes dá-se por meio da irrigação e pela chuva que acaba por transportar pesticidas fertilizantes e resíduos de origem animal.

Tais agentes poluentes, ao entrarem em contato com o solo, podem infiltrar e atingir o aquífero com certa facilidade dependendo, entre outros, dos seguintes fatores: tipo de aquífero, profundidade do aquífero, permeabilidade do solo, teor de matéria orgânica existente sobre o solo, tipo de poluente e pluviosidade do local.

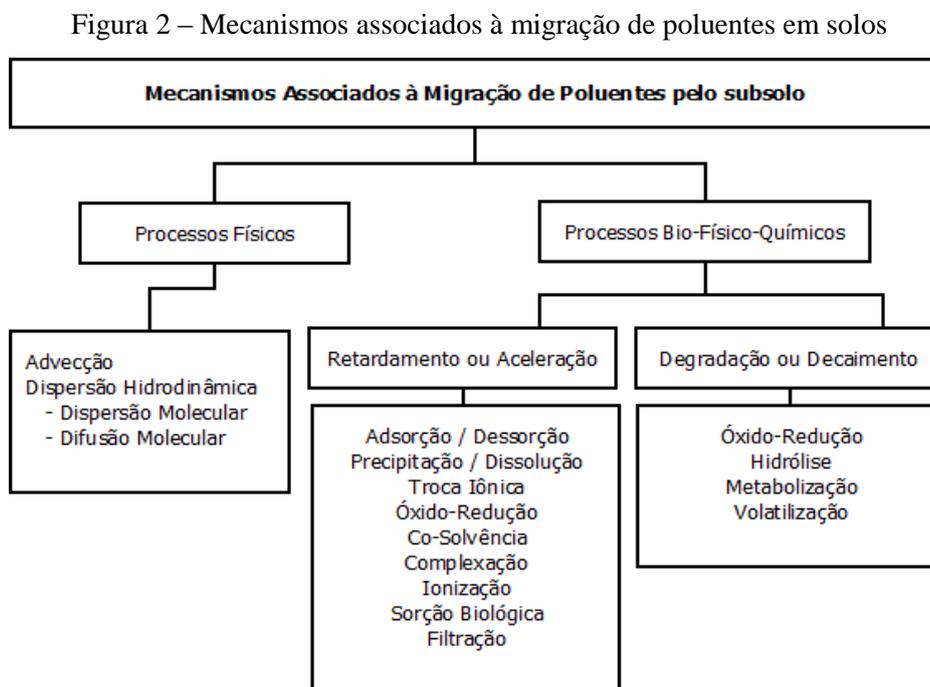
Bear (1979) salienta ainda que pode ocorrer poluição nos aquíferos em consequência do meio no qual o fluxo de águas subterrâneas ocorre, com a intrusão de água salobra no aquífero ou através do fluxo em rochas carbonáticas, onde se verifica a dissolução de quantidades pequenas ou até mesmo significativas da rocha.

2.1 PLUMAS POLUENTES EM ÁGUAS SUBTERRÂNEAS

A emissão de poluentes no subsolo a partir de uma origem pontual, além de seu contato com o aquífero em concentrações superiores aos parâmetros definidos pela lei, afeta a qualidade das águas subterrâneas. O termo plumas de poluentes é utilizado quando uma determinada região do aquífero encontra-se degradada, sendo que o seu formato e volume dependem tanto das características do poluente como do aquífero, possuindo uma expansão previsível influenciada pela direção e sentido do fluxo subterrâneo.

Visando a simular plumas poluentes, é preciso conhecer os fatores que influenciam o transporte de solutos na água. O processo de migração dos poluentes ao longo das camadas do solo até chegar ao aquífero é influenciado pela natureza do poluente e do tipo de solo em questão, determinando uma maior, menor ou até mesmo nenhuma movimentação de tais poluentes no meio poroso. Neste contexto, o movimento dos poluentes passa a não depender apenas do fluxo do fluido no qual estas substâncias irão se dissolver, mas também de mecanismos aos quais tais substâncias são submetidas. Podem-se subdividir

tais mecanismos associados à migração de poluentes através de meios porosos em processos físicos e processos bio-físico-químicos (THOMÉ; KNOP, 2012), como se observa na Figura 2.



Fonte – Adaptado de Thomé e Knop (2012)

Os processos físicos envolvem basicamente os fenômenos de advecção e dispersão, enquanto que os processos bio-físico-químicos envolvem as diversas reações que podem ocorrer entre o poluente e o meio poroso. Assim, após a injeção de poluente no aquífero, a pluma irá se deslocar e pode ser atenuada por dispersão, diluição, biodegradação, adsorção, entre outros mecanismos.

2.1.1 Processos Físicos

Os processos físicos englobam a advecção e a dispersão hidrodinâmica. O transporte por advecção é ocasionado pelo fluxo de água, por onde os poluentes inicialmente se movimentam, enquanto que a dispersão caracteriza-se pelo espalhamento do poluente no aquífero.

Na advecção a substância não se espalha, percorrendo uma distância na mesma velocidade da água percolante. O termo de advecção explicitado na equação diferencial que define o

transporte, em uma dimensão, é definido como se segue (BOUCHE; BONNAUD; RAMOS, 2003):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_x \frac{\partial c}{\partial x}. \quad (1)$$

Em duas dimensões, a equação de transporte por advecção é similar, sendo dada por:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y}, \quad (2)$$

Onde:

c é a concentração do poluente (ML^{-3})

t é o tempo (T)

x e y são as direções

v_x e v_y são as velocidades de percolação calculada pela Lei de Darcy (LT^{-1}).

O termo de advecção tem por objetivo descrever o transporte de poluentes que se misturam com a mesma velocidade que a água subterrânea (ZHENG; WANG, 1999).

A dispersão é causada por difusão molecular e pela dispersão mecânica, sendo que a soma desses dois componentes é denominado dispersão hidrodinâmica ou simplesmente dispersão (ZHENG; WANG, 1999). O transporte por dispersão caracteriza-se pelo espalhamento transversal do poluente ao longo da trajetória do fluxo do fluido (BASSO, 2003). Nesse caso, a substância percorre uma distância com velocidade média e se espalha, sendo o coeficiente de dispersão denotado pela seguinte equação:

$$D = D^* + D_m, \quad (3)$$

Onde:

D é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica (L^2T^{-1})

D^* é a difusividade molecular (L^2T^{-1})

D_m é o coeficiente de dispersão mecânica (L^2T^{-1}).

Coelho *et al* (2012) salientam que, na difusão molecular, o poluente é dissolvido na água e “desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, visando a equalizar a concentração em toda a massa de fluido”. Nesse caso, a substância se espalha independente da velocidade do fluido. A difusão geralmente é insignificante e secundária se comparada com a dispersão mecânica. Este mecanismo de transporte de massa torna-se preponderante quando a velocidade das águas subterrâneas é muito baixa, sendo proporcional ao gradiente de concentração. A difusão molecular pode ser expressa pela primeira Lei de Fick (COELHO *et al*, 2012):

$$F = -D_d \frac{dc}{dx}, \quad (4)$$

Onde:

F é o fluxo de massa do soluto por unidade de área por unidade de tempo ($ML^{-2}T^{-1}$)

D_d é o coeficiente de difusão (L^2T^{-1})

$\frac{dc}{dx}$ denota o gradiente de concentração ($ML^{-3}L^{-1}$).

Considerando sistemas onde a concentração varia com o tempo, a difusão molecular será expressa como segue:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \omega D_d. \quad (5)$$

A difusão é consideravelmente menor em meios porosos de granulometria fina (LOPES, 2005), isso se dá devido à tortuosidade das trajetórias de fluxo, bem como pela retenção de moléculas nas superfícies da partícula. Sendo assim, deve-se usar um coeficiente de difusão efetiva D_t , definido mediante a seguinte equação:

$$D_t = \omega D_d. \quad (6)$$

Na equação (6), o adimensional $\omega < 1$ é o coeficiente de tortuosidade das trajetórias do fluxo e determinado por meio de ensaios laboratoriais.

A dispersão mecânica ou mistura mecânica é decorrente da dispersão em canais individuais, bem como do desenvolvimento de velocidades médias diferentes em canais distintos, segundo Coelho *et al* (1972 apud BEAR, 2012), “devido à variação das dimensões dos poros ao longo das linhas de fluxo e do desvio da trajetória das partículas em decorrência da tortuosidade, reentrâncias e interligações entre os canais”.

Define-se a dispersão longitudinal como a dispersão que ocorre na direção do fluxo e dispersão transversal a que ocorre perpendicularmente ao fluxo. O coeficiente de dispersão pode ser estimado pelas equações (7) e (8):

$$\text{coeficiente de dispersão longitudinal} = \alpha_L v_x, \quad (7)$$

$$\text{coeficiente de dispersão transversal} = \alpha_T v_y, \quad (8)$$

Onde:

α_L é o coeficiente de dispersividade longitudinal (L), que pode ser estimado por:

$$\alpha_L = \frac{E}{27,535}, \text{ sendo } E \text{ a escala do problema considerado (TAUXE, 1994).}$$

α_T é o coeficiente de dispersividade transversal (L), que pode ser estimado por

$$\alpha_T = \frac{\alpha_L}{3} \text{ (TAUXE, 1994).}$$

Por fim, como o processo de difusão não pode ser separado da dispersão, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica longitudinal (D_L) e transversal (D_T), dado em $[L^2T^{-1}]$, são (CUSHMAN; BALL, 1993):

$$D_L = \alpha_L v_x + D^*. \quad (9)$$

$$D_T = \alpha_T v_x + D^* \quad (10)$$

2.1.2 Processos Bio-Físico-Químicos

Muitas vezes ocorre reação ou degradação entre o poluente e o meio poroso, o que implica em mudanças na concentração do soluto e pode desempenhar um papel essencial no fenômeno de transporte desses poluentes. Dentre os processos bio-físico-químicos, podem-se destacar os processos de retardamento ou aceleração e degradação ou decaimento. As reações que são capazes de provocar a mudança de concentração do soluto no fluido percolante são agrupadas como se observa na Figura 2. As diversas reações químicas e bioquímicas que podem causar tal mudança podem ser rápidas e reversíveis ou mais lentas e irreversíveis, sendo que sua velocidade será relativa ao fluxo. Ainda, o poluente pode ficar retido no solo (FERREIRA, 2010).

A grandeza utilizada para modelar a retenção do poluente no meio poroso é o fator de retardamento (R). O fator de retardamento varia de acordo com o meio no qual o poluente é inserido e, segundo Ferreira (2010), "pode variar de acordo com alguns fatores como a atividade do solo, concentração inicial da substância na solução, concentração de outras substâncias presentes na solução, pH da solução, temperatura e velocidade de percolação", entre outros.

O fator de retardamento é definido como segue (COELHO *et al*, 2012):

$$R = 1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \quad (11)$$

Onde:

ρ_d é a densidade seca do meio poroso (ML^{-3})

n é a porosidade do aquífero (adimensional)

k_d é o coeficiente de partição, definido como a concentração de poluente adsorvido em relação à concentração total do poluente (L^3M^{-1})

O fator de retardo varia de 1 até infinito, sendo que retardo igual a 1 corresponderia à situação mais crítica (OLIVEIRA; FILHO, 2008), na qual o poluente avança pelo meio poroso sem sofrer adsorção, com potencial de atingir áreas mais extensas.

2.2 EQUAÇÕES GOVERNANTES

2.2.1 Conceitos Gerais

Definição 1 (Descarga de Massa \dot{M}) – massa de água (M) transferida entre dois pontos por unidade de tempo (t), ou seja:

$$\dot{M} = \frac{M}{\Delta t}, \text{ dado em } [MT^{-1}]. \quad (12)$$

Definição 2 (Fluxo de Massa \dot{m}) – descarga de massa de água (\dot{M}) por unidade de área transversal (A), ou seja:

$$\dot{m} = \frac{\dot{M}}{A}, \text{ dado em } [MT^{-1}L^{-2}]. \quad (13)$$

Definição 3 (Lei de Darcy) – A Lei de Darcy pode ser definida nas três dimensões coordenadas i , onde denomina-se a velocidade de Darcy ou velocidade aparente como:

$$q_i = -k_i \frac{\partial h}{\partial i}, \quad (14)$$

Onde:

q_i é a velocidade aparente na direção i (LT^{-1})

k_i é a condutividade hidráulica na direção i (LT^{-1})

$\frac{\partial h}{\partial i}$ é o gradiente de carga hidráulica (adimensional)

Para aquíferos livres, a velocidade de percolação na direção i (v_i), será dada pela razão entre a velocidade aparente (q_i) pela porosidade efetiva (n_e), ou seja:

$$v_i = \frac{q_i}{n_e}, \text{ dado em [LT}^{-1}\text{]}. \quad (15)$$

Definição 4 (Coeficiente de armazenamento S) – o coeficiente de armazenamento é um parâmetro adimensional definido como a razão entre o volume de água absorvido ou expelido pelo aquífero por unidade de área superficial. Segundo Miranda (2012), S indica a “quantidade de água que pode ser removida da formação por bombeamento ou por drenagem”.

Definição 5 (Armazenamento específico S_s) – o armazenamento específico é um parâmetro definido como o volume de água retirado ($dV_{\text{água}}$) por unidade de volume do aquífero ($V_{\text{água}}$). Ainda, segundo Miranda (2012), o armazenamento específico é “decorrente de um rebaixamento dh da superfície piezométrica”. Logo, define-se como:

$$S_s = \frac{dV_{\text{água}}}{V_{\text{água}}} \frac{1}{dh} \Rightarrow S_s = \frac{dM/\rho_w}{dx dy dz} \frac{1}{dh} \Rightarrow S_s = \frac{dM}{\rho_w dx dy dz} \frac{1}{dh}, \text{ dado em [L}^{-1}\text{]}. \quad (16)$$

Definição 6 (Rendimento específico S_y) – é definido como a porcentagem de água livre para escoar pelo aquífero.

Definição 7 (Porosidade n) – a porosidade é um parâmetro adimensional definido como a razão entre o volume de vazios V_{vazios} e o volume total V_{total} de uma amostra, ou seja:

$$n = \frac{V_{\text{vazios}}}{V_{\text{total}}}. \quad (17)$$

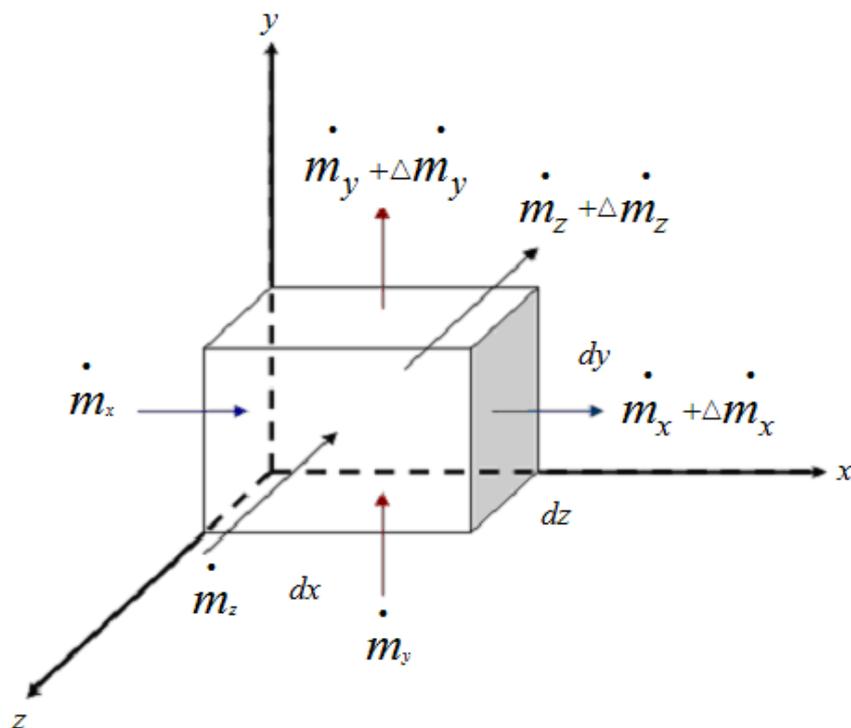
Definição 8 (Porosidade Efetiva n_e) – a porosidade efetiva é um parâmetro adimensional definido pela razão entre volume de água drenada pelo volume total de água.

2.2.2 Equação de escoamento em aquíferos - Modelo horizontal de escoamento (2DH)

A equação de escoamento é obtida por meio da aplicação do Princípio de Conservação de Massa a um elemento infinitesimal de meio poroso saturado. Das definições (1) e (2), conclui-se que $\dot{m} = \frac{M}{\Delta t \cdot A}$, tal igualdade será utilizada ao longo da demonstração.

Seja um elemento infinitesimal de meio poroso, com vazios totalmente preenchidos por água, como um paralelepípedo de dimensões $dx dy dz$, representado na Figura 3. Percebe-se que a água subterrânea flui por este elemento, apresentando fluxos de massa que cruzam as suas faces.

Figura 3 - Elemento de volume infinitesimal de meio poroso saturado



Fonte – Adaptado de Miranda (2012)

Os fluxos de massa de água podem variar à medida que o fluido se desloca no interior do volume elementar representado na Figura 3. Assim, os fluxos que saem por faces opostas sofrem um incremento que pode ser negativo ou positivo. Afinal, nem toda água que entra por uma face sai obrigatoriamente pela face oposta, podendo sair pelas demais faces do elemento de fluido infinitesimal considerado. Para definir esse incremento, será utilizada a

derivada parcial, uma vez que o fluido, ao atravessar o elemento de volume infinitesimal, pode sofrer variações de fluxo de massa nas três direções coordenadas (x, y, z) (SCHULZ, 2003). Logo:

$$\Delta \dot{m}_x = \frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} \cdot dx; \quad \Delta \dot{m}_y = \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} \cdot dy; \quad \Delta \dot{m}_z = \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} \cdot dz \quad (18)$$

Aplicando o Princípio de Conservação de Massa de água no elemento infinitesimal de volume do aquífero:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{M_{entra} - M_{sai}}{dt} = \frac{M_{entra}}{dt} - \frac{M_{sai}}{dt} = \dot{M}_{entra} - \dot{M}_{sai} = \dot{m}_{entra} A - \dot{m}_{sai} A. \quad (19)$$

Usando os conceitos de descarga de massa e fluxo de massa, a equação (19) fica:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} = & (\dot{m}_x dydz + \dot{m}_y dx dz + \dot{m}_z dx dy) - \left(\dot{m}_x + \frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} dx \right) dydz - \left(\dot{m}_y + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} dy \right) dx dz - \\ & - \left(\dot{m}_z + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} dz \right) dx dy. \end{aligned} \quad (20)$$

Assim, rearranjando os termos da equação (20), tem-se:

$$\frac{dM}{dt} = - \left(\frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} \right) dx dy dz. \quad (21)$$

Os fluxos de massa de água que passam pelo elemento de volume de fluido no aquífero são diretamente proporcionais à velocidade de escoamento, ou seja:

$$\dot{m}_i \propto q_i \Rightarrow \dot{m}_i = cte q_i. \quad (22)$$

Na equação (22), considera-se tal constante como sendo $cte = \rho_w$ (massa específica da água, $\rho_w \cong 1000 \text{ kg} / \text{m}^3$) e q_i representa as velocidades aparentes do fluido, dadas pela Lei de Darcy, dada na definição (3).

Logo, a equação (21) fica:

$$\frac{dM}{dt} = - \left(\frac{\partial \rho_w q_x}{\partial x} + \frac{\partial \rho_w q_y}{\partial y} + \frac{\partial \rho_w q_z}{\partial z} \right) dx dy dz. \quad (23)$$

Substituindo a equação da Lei de Darcy, dada na definição (3), em (23) e evidenciando ρ_w , segue:

$$\frac{dM}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right] \rho_w dx dy dz. \quad (24)$$

Utilizando o conceito de armazenamento específico S_s do aquífero, da definição (5), tem-se que:

$$S_s = \frac{dV_{\text{água}}}{V_{\text{água}}} \frac{1}{dh} \Rightarrow S_s = \frac{dM / \rho_w}{dx dy dz} \frac{1}{dh} \Rightarrow S_s = \frac{dM}{\rho_w dx dy dz} \frac{1}{dh} \Rightarrow dM = S_s \rho_w dx dy dz dh. \quad (25)$$

Substituindo (25) em (24) e rearranjando os termos, segue:

$$S_s \frac{dh}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right]. \quad (26)$$

Considerando a vazão de água injetada ou retirada por unidade de volume do aquífero, g , onde $g > 0$ em caso de recarga no aquífero e $g < 0$ em caso de retirada. A equação (26) fica:

$$S_s \frac{dh}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(k_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + g. \quad (27)$$

As dimensões longitudinais ou transversais do aquífero são maiores que sua espessura, o que faz com que o fluxo de água seja praticamente horizontal, quando utilizam-se análises em escala regional, implicando em velocidades verticais praticamente nulas para a água subterrânea ($q_z \cong 0$). Considerando esse fator e integrando (27) ao longo da espessura do aquífero, ou seja, desde a cota de base (c_b) até a cota de topo (h), tem-se:

$$\int_{c_b}^h S_s \frac{dh}{dt} dz = \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) dz + \int_{c_b}^h g dz. \quad (28)$$

Ao integrar a equação (28) segue:

$$\left(S_s \frac{dh}{dt} \right) (h - c_b) = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) \right] (h - c_b) + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) \right] (h - c_b) + g(h - c_b). \quad (29)$$

Em aquíferos livres o conceito de armazenamento específico pode ser substituído pelo conceito de rendimento específico $S_y \cong S = S_s B$. Além disto, a espessura saturada é calculada como $h - c_b = B = B'$. Fazendo estas alterações, segue que a equação diferencial que modela o escoamento bidimensional para aquíferos livres é:

$$S_y \frac{dh}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(B' k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(B' k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + g_1(x, y, t), \quad (30)$$

Onde:

x, y são as variáveis (L)

t é o tempo (T)

S_y é o rendimento específico (adimensional)

h é a cota piezométrica ou carga hidráulica do aquífero (L)

B' é a espessura saturada do aquífero (L)

k_x, k_y são as condutividades hidráulicas nas direções x e y (LT^{-1})

$g_1(x, y, t)$ é o termo sumidouro ou fonte (sendo negativo o termo fonte e positivo o termo sumidouro) ($L^3T^{-1}L^{-2}$)

2.2.3 Equação de transporte de poluentes em aquíferos - Modelo horizontal de transporte (2DH)

A equação de transporte de poluentes, assim como a de escoamento é obtida por meio da aplicação do Princípio de Conservação de Massa para um poluente que percola por um elemento infinitesimal de meio poroso saturado.

A Figura 3 pode ser utilizada para começar tal demonstração, considerando que as descargas e fluxos de massa referem-se agora ao poluente percolante. Assim, a conservação de massa de poluente no elemento de volume de fluido seria escrita como:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{M_{entra} - M_{sai} + M_{gerado}}{dt} = \dot{M}_{entra} - \dot{M}_{sai} + \dot{M}_{gerado}. \quad (31)$$

Onde \dot{M}_{gerado} é uma descarga gerada por unidade de volume de fluido, \dot{g} , sendo considerado um termo fonte se $\dot{g} > 0$ ou sumidouro se $\dot{g} < 0$. Considerando o mesmo raciocínio da demonstração de escoamento, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} = & (\dot{m}_x dydz + \dot{m}_y dx dz + \dot{m}_z dx dy) - \left(\dot{m}_x + \frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} dx \right) dydz - \left(\dot{m}_y + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} dy \right) dx dz - \\ & - \left(\dot{m}_z + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} dz \right) dx dy + \dot{g} dx dy dz. \end{aligned} \quad (32)$$

Assim, rearranjando os termos da equação (32):

$$\frac{dM}{dt} = - \left(\frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} + \dot{g} \right) dx dy dz. \quad (33)$$

Aplicando a Lei de Fick, onde se considera $\dot{m}_j = -D \frac{\partial c}{\partial x_i}$, tem-se que:

$$\frac{dM}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \dot{g} \right] dx dy dz. \quad (34)$$

Analisando a 1ª parcela da igualdade, observa-se que a massa M do poluente depende da posição e do tempo, ou seja, $M(x, y, z, t)$. Assim, pode-se escrever a variação temporal de M aplicando a regra da cadeia, por derivadas parciais:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial M}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial M}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial M}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial M}{\partial t}. \quad (35)$$

Observa-se que $\frac{dx}{dt}$, $\frac{dy}{dt}$ e $\frac{dz}{dt}$ são as componentes de velocidade de percolação do fluido ao longo das direções x , y e z , respectivamente, logo:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial M}{\partial x} v_x + \frac{\partial M}{\partial y} v_y + \frac{\partial M}{\partial z} v_z + \frac{\partial M}{\partial t}. \quad (36)$$

A concentração do poluente pode ser relacionada como a razão entre a massa do poluente (M) pelo volume do fluido ($dvol$), ou seja:

$$c = \frac{M}{dvol} \rightarrow c = \frac{M}{dx dy dz} \rightarrow M = c dx dy dz. \quad (37)$$

Logo, a equação 36 fica:

$$\frac{dM}{dt} = \left(\frac{\partial c}{\partial x} v_x + \frac{\partial c}{\partial y} v_y + \frac{\partial c}{\partial z} v_z + \frac{\partial c}{\partial t} \right) dx dy dz. \quad (38)$$

Igualando a equação (34) e (38), tem-se:

$$\frac{\partial c}{\partial x} v_x + \frac{\partial c}{\partial y} v_y + \frac{\partial c}{\partial z} v_z + \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \dot{g}. \quad (39)$$

O processo de transporte de solutos em águas subterrâneas inclui advecção, difusão, dispersão, adsorção e reações químicas. Visando a considerar os processos físicos e bio-físico-químicos do fluido, a equação diferencial parcial que descreve o transporte de poluentes em sistemas de fluxo de água subterrânea transitórios pode ser escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial c}{\partial x} v_x - \frac{\partial c}{\partial y} v_y - \frac{\partial c}{\partial z} v_z + \dot{g}. \quad (40)$$

Segundo Cushman e Ball (1993), o termo fonte/sumidouro pode ser resumido em:

$$\dot{g} = -k'c - \frac{\rho_d}{n} \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\rho_d k'}{n} S, \quad (41)$$

Onde:

k' é a constante de decaimento (T^{-1}), que pode ser estimada por $k' = \frac{\ln 2}{t_{1/2}}$, sendo $t_{1/2}$ a meia

vida do material radioativo ou biodegradável (FERREIRA, 2010)

ρ_d é a densidade seca do meio poroso (ML^{-3})

n é a porosidade do aquífero (adimensional)

S é o peso de soluto sorvido por unidade de peso seco do material do aquífero, dado por

$S = k_d c$, sendo k_d o coeficiente de partição. (LL^{-1})

Assim, segue que:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial k_d c}{\partial t} = k_d \frac{\partial c}{\partial t}. \quad (42)$$

Substituindo (42) em (41) e rearranjando os termos da equação tem-se que:

$$\dot{g} = -k'c \left(1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \right) - \frac{\rho_d}{n} k_d \frac{\partial c}{\partial t}. \quad (43)$$

Substituindo \dot{g} na equação (40) e evidenciando $\frac{\partial c}{\partial t}$, segue:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \left(1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \right) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial c}{\partial x} v_x - \frac{\partial c}{\partial y} v_y - \frac{\partial c}{\partial z} v_z - k'c \left(1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \right). \quad (44)$$

Considerando que $R = 1 + \frac{\rho_d k_d}{n}$ e $v_z \cong 0$ e integrando a equação (44) ao longo da espessura do aquífero, ou seja, desde a cota de base (c_b) até a cota de topo (h), tem-se:

$$\int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial t} R dz = \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) dz - \int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial x} v_x dz - \int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial y} v_y dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial z} v_z dz - \int_{c_b}^h k'cR dz. \quad (45)$$

Ao integrar a equação (45) segue:

$$\frac{\partial c}{\partial t} R(h - c_b) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) (h - c_b) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) (h - c_b) + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) dz - \frac{\partial c}{\partial x} v_x (h - c_b) - \frac{\partial c}{\partial y} v_y (h - c_b) + \int_{c_b}^h k'cR dz. \quad (46)$$

A equação (46), em duas dimensões, se reduz a:

$$R \frac{\partial (B'c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(B'D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(B'D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (B'v_x c) - \frac{\partial}{\partial y} (B'v_y c) - k'B'c, \quad (47)$$

Onde:

R é o fator de retardamento (adimensional)

c é a concentração de um poluente genérico dissolvido na água subterrânea (ML^{-3})

t é o tempo (T)

D_{ij} é o tensor de coeficiente de dispersão (L^2T^{-1})

v_i é a velocidade de percolação na direções i calculada pela lei de Darcy, dividida pela porosidade efetiva do aquífero livre (ou pela porosidade do aquífero confinado) (LT^{-1})

k' é a constante de decaimento (T^{-1})

B' é a espessura do aquífero (L)

2.3 SOLUÇÕES ENCONTRADAS NA LITERATURA

A solução para a equação advecção-dispersão pode ser determinada usando modelos analíticos ou numéricos. Os modelos numéricos chegam em uma solução aproximada para tal equação, ao passo que os modelos analíticos abrangem soluções exatas, porém em condições mais simplificadas no que se refere às variações das características hidrogeológicas do aquífero.

2.3.1 Soluções analíticas para a equação advecção-dispersão

Normalmente, a equação advecção-dispersão encontra-se associada à resolução de equações diferenciais parciais. Tal equação pode ser resolvida analiticamente através da resolução de métodos algébricos em uma condição particular. Para a solução de fenômenos de transporte, encontram-se poucas soluções analíticas disponíveis, basicamente para problemas unidimensionais que possuem condições de contorno e geometrias simplificadas (ELDHO; RAO, 1997).

2.3.1.1 Solução dada por Wexler (1992)

Jesus (2010) apresenta uma solução analítica bidimensional dada por Wexler em 1992. Segundo Jesus (2010), tal solução considera as seguintes restrições: (1) o aquífero possui extensão infinita; (2) a fonte pontual de contaminação tem comprimento finito; (3) a densidade e a viscosidade do fluido são constantes; (4) o poluente está sujeito a transformação química de primeira ordem. Ao considerar um poluente conservativo, toma-se a constante de decaimento $\lambda = 0$; (5) o fluxo é uniforme e ocorre na direção x , com velocidade constante; (6) os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal são constantes. A direção x é considerada a direção preferencial do escoamento.

Jesus (1992 apud WEXLER, 2010) considera ainda as seguintes condições iniciais e de contorno:

1. $c = c_0$, $x = 0$ e $Y_1 < y < Y_2$;
2. $c = 0$, $x = 0$ e $y < Y_1$ ou $y > Y_2$;
3. $c = 0$ e $\frac{\partial c}{\partial y} = 0$, $y = \pm\infty$;
4. $c = 0$ e $\frac{\partial c}{\partial x} = 0$, $x = \infty$.

Onde:

Y_1 é a ordenada do limite inferior da fonte de poluente em $x = 0$

Y_2 é a ordenada do limite superior da fonte de poluente em $x = 0$

Assim, segundo Jesus (1992 apud WEXLER, 2010) a solução analítica em 2D é dada por:

$$c(x, y, t) = \frac{c_0 x}{\sqrt{\pi D_x}} \exp\left[\frac{vx}{2D_x}\right] \int_0^{\frac{x}{Z}} \frac{1}{Z^3} \exp\left[-\left(\frac{v^2}{4D_x} + \lambda\right)Z^4 - \frac{x^2}{4D_x Z^4}\right] \left\{ \operatorname{erfc}\left[\frac{Y_1 - y}{2Z^2 \sqrt{D_y}}\right] - \operatorname{erfc}\left[\frac{Y_2 - y}{2Z^2 \sqrt{D_y}}\right] \right\} dZ, \quad (48)$$

Onde:

c_0 é a fonte de concentração inicial (ML^{-3})

D_x é o coeficiente de dispersão longitudinal (L^2T^{-1})

D_y é o coeficiente de dispersão transversal (L^2T^{-1})

v é a velocidade na direção x (MT^{-1})

λ é a constante de decaimento de primeira ordem (T^{-1})

O termo $\operatorname{erf}(x)$ indica a função erro. A função erro tem como propriedades: $\operatorname{erf}(\infty) = 1$;

$\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf}(x)$. Considera-se $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_x^\infty e^{-t^2} dt$. O termo da integral é

calculado pela fórmula de translação de Gauss-Legendre.

2.3.1.2 Solução dada por Cushman e Ball (1993)

Cushman e Ball (1993) utilizaram a solução analítica gaussiana para simular o transporte bidimensional de poluentes. As suposições e limitações tomadas para resolução da solução analítica utilizada são as seguintes: (1) o aquífero tem largura infinita nas direções x e y , sendo que x é a direção preferencial do escoamento subterrâneo e, conseqüentemente, y é a direção perpendicular à direção x ; (2) a origem de poluição é gaussiana, situada no eixo y em $x = 0$; (3) a origem da concentração é maior no centro e máxima no momento inicial de análise; (4) o fluxo da água subterrânea é unidimensional na área de interesse com uma velocidade uniforme única na direção x e dispersão nas direções x e y ; (5) os parâmetros do aquífero são constantes (temporal e espacialmente).

Cushman e Ball (1993) consideraram as seguintes condições iniciais e de contorno:

1. A concentração é modelada pela curva gaussiana expressa por $c = c_p e^{-\gamma t} e^{-\frac{(y-y_0)^2}{2S_d^2}}$ e $x=0$, sendo c_p a concentração máxima na origem (ML^{-3})
2. $c = 0$ quando $t = 0$;
3. $\frac{\partial c}{\partial y} \rightarrow 0$ quando $y \rightarrow \pm\infty$ e $\frac{\partial c}{\partial x} \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \pm\infty$.

Por fim, a solução analítica Gaussiana proposta por Cushman e Ball (1993) é a seguinte:

$$c(x, y, t) = \int_{\eta=0}^{(t\beta)^{1/4}} 4 \frac{\sqrt{\beta} e^{-\eta^4 - \frac{x^2\beta}{4D_x^*\eta^4} - \frac{(y-y_0)^2}{4\left(D_y^*\frac{\eta^4}{\beta} + \frac{S_d^2}{2}\right)}}{\eta^3 \left(D_y^*\frac{\eta^4}{\beta} + \frac{S_d^2}{2}\right)^{1/2}} d\eta, \text{ sendo } \beta = -\gamma + k' + \frac{v^*2}{4D_x^2}, \quad (49)$$

Onde:

D_x^*, D_y^* são os coeficientes de dispersão hidrodinâmica nas direções x e y , respectivamente (L^2T^{-1})

S_d é o desvio padrão na origem Gaussiana, onde $S_d = \frac{e^{\gamma t}}{C_p \sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} C(0, y, t) dy$

γ é a constante de decaimento de primeira ordem para a distribuição na origem Gaussiana (T^{-1})

v^* é a velocidade média linear do poluente, sendo $v^* = \frac{v_{média}}{R}$, onde R é o fator de retardo (MT^{-1})

2.3.1.3 Solução dada por Guyonnet e Neville (2004)

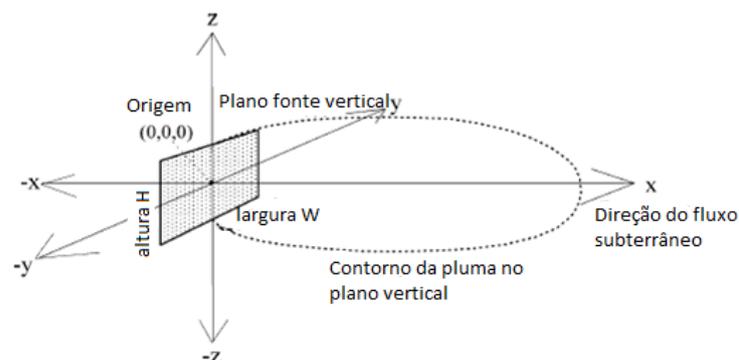
Guyonnet e Neville (2004) apresentaram duas soluções analíticas tridimensionais para a equação de transporte de poluente, nas quais encontram-se as soluções de Domenico de 1987 e Sagar de 1982. A geometria do problema é apresentada na Figura 4.

Ambas as soluções consideram que: (1) o fluxo de águas subterrâneas é constante e unidirecional ao longo do eixo x ; (2) propriedades dos materiais são homogêneas; (3) partição entre as fases dissolvidas e sorvidas são instantâneas e reversíveis; (4) solutos sofrem degradação de primeira ordem com mesma taxa nas fases dissolvidas e sorvidas;

Segundo Guyonnet e Neville (1987 apud DOMENICO, 2004), a solução proposta por Domenico considera as seguintes condições iniciais e de contorno:

1. $c(\pm\infty, y, z, t) = 0$
2. $c(x, \pm\infty, z, t) = c(x, y, \pm\infty, t) = 0$
3. $c(x, y, z, 0) = 0$

Figura 4 – Geometria e eixo do sistema de coordenadas para uma fonte de plano vertical



Fonte – Adaptado Guyonnet e Neville (2004)

Guyonnet e Neville (2004) salientam que tal solução ainda considera as condições de contorno incorporadas à suposição implícita de que o aquífero é infinitamente grande e possui espessura infinita. Tendo como solução analítica:

$$c(x, y, z, t) = \frac{M}{\theta} \frac{1}{8\pi^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{D_x D_y D_z / R}} \frac{1}{(t-t')^{3/2}} e^{-\lambda(t-t')} \exp\left[-\frac{\{(x-x')-v(t-t')/R\}^2}{4D_x(t-t')/R}\right] \times \exp\left[-\frac{(y-y')^2}{4D_y(t-t')/R}\right] \exp\left[-\frac{(z-z')^2}{4D_z(t-t')/R}\right], \quad (50)$$

Onde:

M é a massa de lançamento instantânea no ponto (x', y', z') no tempo t' .

θ é a porosidade do aquífero (adimensional)

D_x, D_y, D_z são os coeficientes de dispersão nas direções x, y e z (L^2T^{-1})

R é o fator de retardo (adimensional)

λ é a constante de decaimento de primeira ordem (T^{-1})

v é a velocidade media linear (MT^{-1})

Domenico ainda propõe uma solução transiente, considerando uma largura W e altura H do plano tomado como fonte de injeção de poluentes no aquífero, definida como:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0}{8} e^{\frac{vx}{2D_x} \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda R D_x}{v^2}}\right)} \operatorname{erfc}\left[\frac{x - \frac{vt}{R} \sqrt{1 + 4\lambda R D_x / v^2}}{2\sqrt{D_x t / R}}\right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{y+W/2}{2\sqrt{D_y x / v}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{y-W/2}{2\sqrt{D_y x / v}}\right) \right] \left[\operatorname{erf}\left(\frac{z+H/2}{2\sqrt{D_z x / v}}\right) - \operatorname{erf}\left(\frac{z-H/2}{2\sqrt{D_z x / v}}\right) \right], \quad (51)$$

Onde:

c_0 é a fonte de concentração inicial (ML^{-3})

D_x, D_y, D_z são os coeficientes de dispersão nas direções x, y e z (L^2T^{-1})

R é o fator de retardo (adimensional)

λ é a constante de decaimento de primeira ordem (T^{-1})

v é a velocidade média linear (MT^{-1})

Segundo Guyonnet e Neville (1982 apud SAGAR, 2004), a solução proposta por Sagar considerando uma largura W e altura H do plano que ocorre injeção de poluentes no aquífero, estabelece as seguintes condições iniciais e de contorno:

1. $c(0, y, z, t) = c_0$ para $-\frac{W}{2} \leq y \leq \frac{W}{2}$ e $-\frac{H}{2} \leq z \leq \frac{H}{2}$
2. $c(0, y, z, t) = 0$ para $|y| > \frac{W}{2}$ e $|z| > \frac{H}{2}$

Guyonnet e Neville (2004) salientam que em tal solução pode ocorrer subestimação da concentração na origem, possuindo assim uma deficiência na solução. A solução de Sagar (1982) possui um domínio semi-infinito na direção x , tendo como expressão:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0 x e^{\left[\frac{vx}{2D_x}\right]}}{8\sqrt{\pi D_x/R}} \int_0^t \frac{1}{\tau^{3/2}} e^{\left[-\left(\lambda + \frac{v^2}{4RD_x}\right)\tau - \frac{Rx^2}{4D_x\tau}\right]} \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{y-W/2}{2\sqrt{D_y\tau/R}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{y+W/2}{2\sqrt{D_y\tau/R}}\right) \right] \left[\operatorname{erfc}\left(\frac{z-H/2}{2\sqrt{D_z\tau/R}}\right) - \operatorname{erfc}\left(\frac{z+H/2}{2\sqrt{D_z\tau/R}}\right) \right] d\tau, \quad (52)$$

Onde:

c_0 é a fonte de concentração inicial (ML^{-3})

D_x, D_y, D_z são os coeficientes de dispersão nas direções x, y e z (L^2T^{-1})

R é o fator de retardo (adimensional)

λ é a constante de decaimento de primeira ordem (T^{-1})

v é a velocidade média linear (MT^{-1})

Salientando que, nas soluções propostas em Guyonnet e Neville (2004), considera-se erf a função erro e $\operatorname{erfc}(x) = 1 - \operatorname{erf}(x)$.

2.3.2 Soluções numéricas para a equação advecção-dispersão

Entre os métodos numéricos encontrados na literatura para resolução da equação advecção-dispersão, a qual caracteriza o transporte de poluentes nas águas subterrâneas, encontram-se o Método de Diferenças Finitas, o Método dos Elementos Finitos, Método de Volumes Finitos, Método de Elementos Analíticos, Método de Elementos de Contorno, Abordagem de Conjuntos Fuzzy, entre outros.

Em especial, grande volume da literatura disponível objetivando obter solução para a equação de transporte e dispersão de poluentes em águas subterrâneas utiliza métodos com malha, a fim de obter uma solução aproximada do problema em questão. Dentre os métodos com malha podem-se destacar o Método de Diferenças Finitas e o Método de Elementos Finitos, os quais diferem basicamente no processo de solução do problema e na topologia de discretização do domínio.

Observa-se que o Método de Diferenças Finitas reduz a solução das equações diferenciais governantes a um problema de equações lineares que irá fornecer as soluções em nós localizados no domínio do problema, empregando malhas triangulares ou retangulares. Hossain e Yonge (1999) simularam a equação de advecção-dispersão para transporte em águas subterrâneas utilizando um Método de Diferenças Finitas melhorado, propondo assim uma solução por diferenças finitas em uma dimensão. Os autores obtiveram excelentes resultados baseando-se em comparações com a solução analítica, sendo que tal metodologia desenvolvida pode ser estendida para problemas de duas ou três dimensões.

No Método de Elementos Finitos, as soluções resultantes são descritas, em todo o domínio e não somente em nós da malha, por polinômios. Em casos de domínio com geometrias irregulares pode-se utilizar o Método de Elementos Finitos, pois tal método não requer topologia de malha estruturada. Sheu e Chen (2002) simularam a advecção e dispersão de poluentes, concentrando no desenvolvimento de um modelo de elementos finitos e usando o modelo de Petrov-Galerkin para aproximar derivadas espaciais. Para tanto, os autores apoiam na equação de advecção-dispersão instável com degradação linear em uma dimensão. O modelo foi validado a partir da análise de soluções analíticas existentes na literatura, como também por meio de problemas teste, verificando-se aplicabilidade

satisfatória para o transporte de poluentes, não foram observadas oscilações nos casos em que a advecção se torna dominante sobre outros termos concorrentes.

No Método de Volumes Finitos, é importante salientar sobre a importância em primeiramente discretizar o domínio, construindo assim uma malha, podendo usar tanto uma malha estruturada como não estruturada. Posteriormente será subdividido em micro volumes. Liu e Soni (1998) simularam o transporte de poluentes da água subterrânea utilizando o Método de Volumes Finitos em duas dimensões, com malha não estruturada. Para tanto, procuraram resolver uma equação diferencial parcial de transporte derivado da conservação de massa. Os autores obtiveram resultados satisfatórios se comparados com a solução analítica, por Método de Volumes Finitos a fim de comparação, obtendo resultados satisfatórios para a simulação em geometrias mais simples.

O Método de Elementos Analíticos por sua vez utiliza soluções elementares analíticas, sendo assim, não necessita de contornos artificiais. É um método baseado na superposição de expressões analíticas, podendo ser considerado como uma variante do Método de Elementos de Contorno que utiliza as funções de Green. Bandilla *et al* (2009) introduziram um método visando simular o transporte de poluentes, combinando o Método de Elementos Analíticos com um Método *streamline*, estando de acordo quando analisados com soluções analíticas e outras soluções numéricas.

O Método de Elementos de Contorno é bastante utilizado na literatura para simular o transporte de poluentes. Eldho e Rao (1997) propuseram uma simulação usando tal método para meios porosos bidimensionais. Os autores usaram uma aproximação utilizando o teorema de Green e o método de reciprocidade dual com o objetivo de obter uma solução única no contorno. Os autores validaram o algoritmo utilizado comparando com soluções analíticas obtidas na literatura, bem como soluções numéricas, verificando ser satisfatória. Aplicando ainda tal algoritmo para um estudo de caso, verifica que a simulação do modelo mostra a eficácia na aproximação do problema de dispersão de poluentes.

Observa-se que a discretização da equação de transporte de poluentes é obtida geralmente cobrindo o domínio de interesse por uma malha. No entanto, o uso de métodos baseados em malhas torna-se uma tarefa complicada em problemas de escoamentos cujo domínio

seja de geometria complicada, problemas não lineares ou problemas dependentes do tempo. Neste contexto, diversos pesquisadores vêm tentando solucionar tal problema, crescendo assim o interesse por métodos sem malha, conhecidas como aproximações *meshless*.

O método *Meshfree* ou *Meshless (Mfree)*, que é um método de elementos de contorno, permite a utilização de uma malha fixa global, evitando assim o mapeamento de soluções entre malhas. O método de colocação de pontos *Meshfree* utiliza um conjunto de nós espalhados pelo domínio do problema e no contorno do domínio, sendo que tais nós não são necessariamente tomados uniformemente. Devido à ausência da malha, o método é de fácil aplicação em dimensões maiores. Ainda, observa-se a redução nos custos e economia no tempo da simulação. Meenal e Eldho (2012) utilizaram o Mfree para simular o transporte de poluentes em águas subterrâneas utilizando técnicas de colocação de ponto com funções de base radial, onde o domínio foi dividido em subdomínios para cada nó em questão com a criação de sistemas de equações algébricas para cada subdomínio. A simulação foi feita para aquíferos não confinados 1D e 2D, sendo comparada com Método de Elementos Finitos e com soluções analíticas disponíveis para transporte de poluentes, verificando-se aplicabilidade satisfatória para o transporte de poluentes.

Ainda, a Abordagem de Conjuntos Fuzzy vem sendo bastante utilizada para simular fluxo, bem como transporte de poluentes em águas subterrâneas, principalmente quando se tem incertezas em algumas variáveis, sendo os métodos estocásticos os mais comuns. Zhang e Achari (2009) desenvolveram uma metodologia visando simular diferentes tipos de incertezas na equação de advecção-dispersão, convertendo função de densidade de probabilidade para um número fuzzy e simulando um estudo de caso concluindo que as concentrações mais prováveis são obtidas por meio da integração de diferentes tipos de incertezas.

CAPÍTULO 3

METODOLOGIA

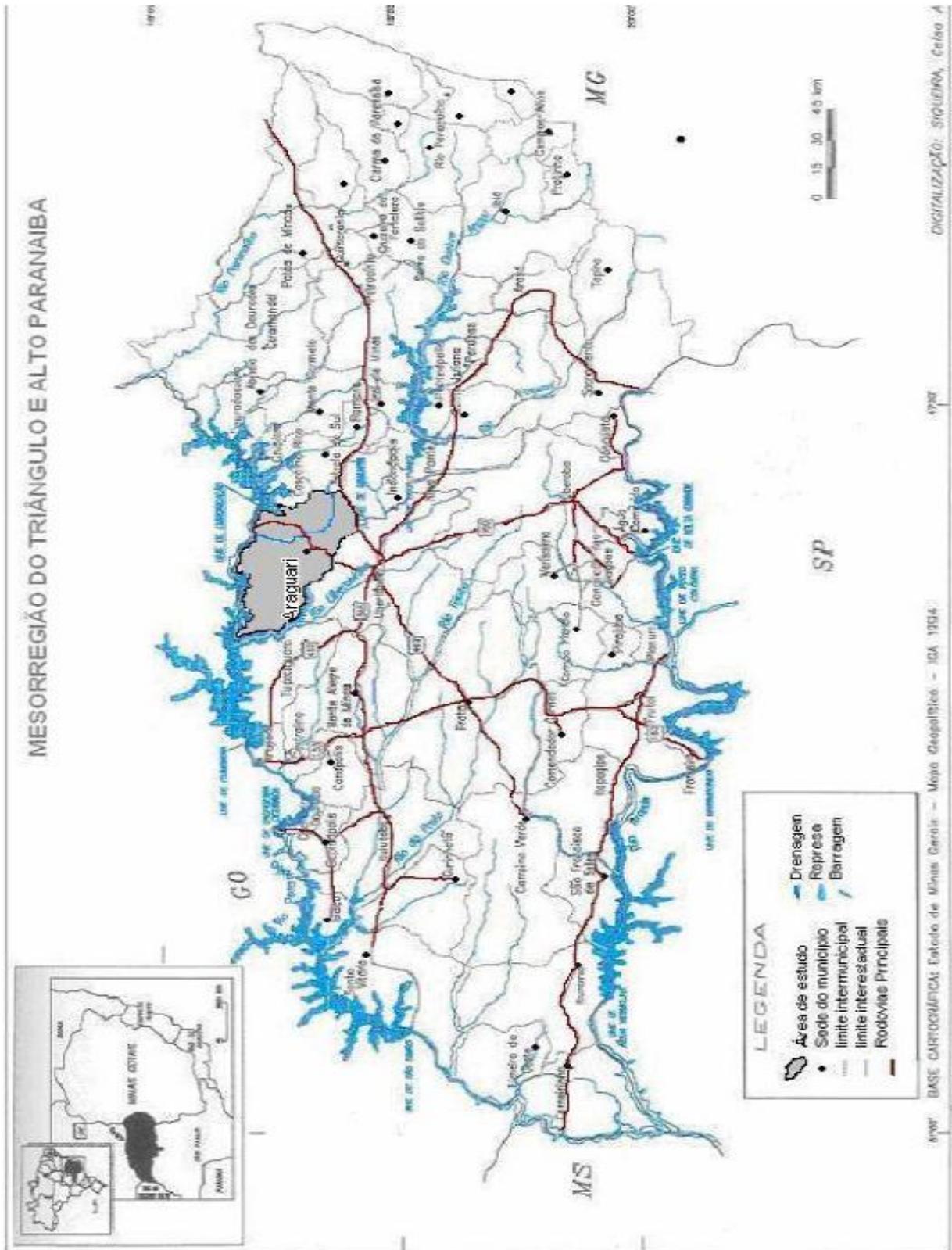
O transporte de solutos em águas subterrâneas inclui os fenômenos clássicos teóricos apresentados neste trabalho: dispersão hidrodinâmica, advecção, entradas e saídas (massa de soluto dissolvida na água que entra ou sai do volume simulado), adsorção e reação química. O presente trabalho surge da necessidade de resolver numericamente a equação advecção-dispersão que simula o transporte de poluentes. Para construção do modelo computacional e simulações hipotéticas, foram utilizados os *softwares Visual Basic* e o *Surfer10*. Assim, a metodologia está subdividida em seis partes:

1. Área de estudo;
2. Discretização da equação advecção-dispersão;
3. Espalhamento de propriedades para os nós;
4. Aspectos de solução do Sistema Linear;
5. Estimativa dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica;
6. Implementação do código.

3.1 ÁREA DE ESTUDO

A área de estudo, utilizada para aplicação da simulação, está localizada na cidade de Araguari, situada no Triângulo Mineiro no estado de Minas Gerais, como se observa na Figura 5. A região de aplicação do modelo engloba a malha urbana da cidade, correspondente a 64 km².

Figura 5 – Localização do Município de Araguari/MG



Fonte – Assunção (2002), apud Estado de Minas Gerais – município de Araguari

A escolha desta área fundamentou-se na existência de dados coletados e obtidos por estudos anteriores, tais como a distribuição espacial de poços e das características hidrogeológicas e geométricas do aquífero, as quais possibilitaram o cálculo da velocidade de percolação.

A cidade de Araguari possui uma geologia propícia ao armazenamento de água no subsolo, estando localizada na borda da Bacia Sedimentar do Paraná. Segundo Alves (2008):

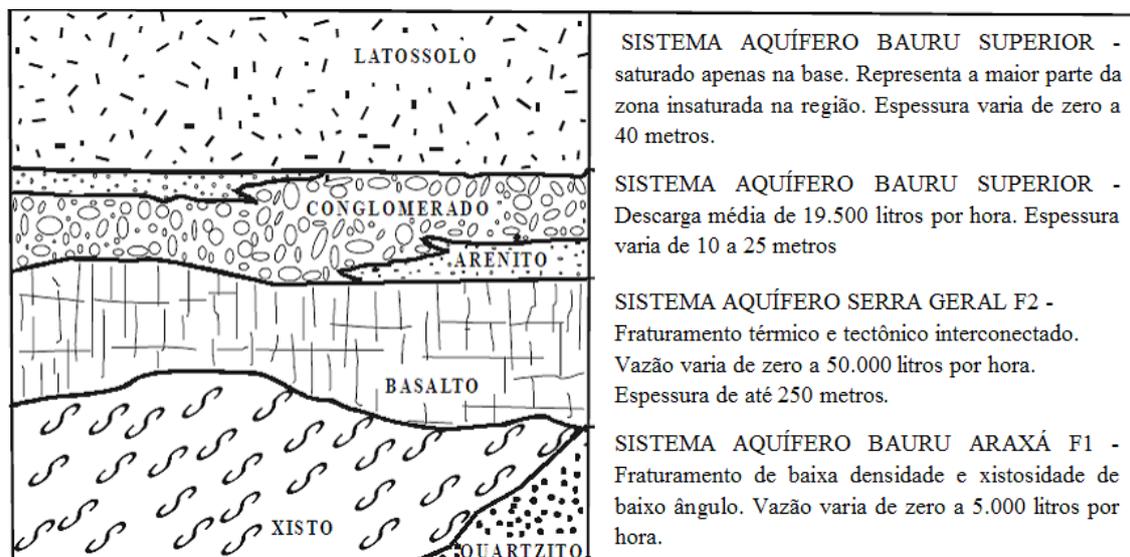
“A geologia do Município de Araguari, é um importante fator no processo de armazenamento da água no subsolo, pois possui uma formação bem diversificada de complexos rochosos, como basaltos, arenitos, conglomerados silteosos e argilosos e com presença de quartzitos, gnaisses, dentre outras formações que favorecem no processo de armazenagem e distribuição da água no lençol freático.”

Ainda, Alves (2008) salienta que a região tem um potencial em:

“formar um aquífero de boa qualidade, produtivo, já que possui a rocha de sustentação que é o basalto, a rocha de filtragem que funciona como uma esponja, o arenito.”

O solo de Araguari é composto basicamente por latossolos. Segundo Oliveira (2003), a área é abrangida com predominância dos latossolos vermelho distroféricos, mas com ocorrência ainda de latossolos vermelho aluminoféricos e latossolos vermelho-amarelos distróficos. A Figura 6 ilustra o perfil lito-hidrogeológico da região de Araguari/MG.

Figura 6 - Perfil lito-hidrogeológico da região de Araguari/MG



Fonte – Oliveira e Campos (2004)

Como se observa na Tabela 1, ocorre a predominância dos latossolos vermelho amarelo, que segundo Alves (2008) são “solos profundos, bem drenados e com uma boa camada de húmus”. A vegetação predominante é caracterizada por cerrados, cerradão, campos limpos, matos de galerias e veredas. A Tabela 1 discrimina os solos na região, com o seu percentual de ocorrência.

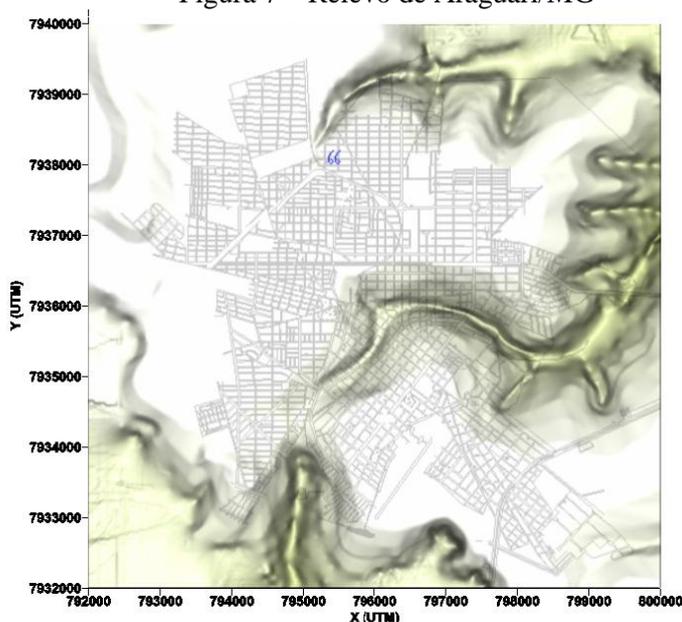
Tabela 1 - Solos do Município de Araguari/MG

Tipo	Area Km ²	% do Total
Latossolo Vermelho-Amarelo	780	28,1
Podzólico Vermelho-Amarelo	741	26,7
Latossolo Roxo	525	18,9
Cambissolo	242	8,7
Solos Litólicos	238	8,6
Terra Roxa Estruturada	54	1,9
água e outras ocorrências	195	7
total	2.774	100,0

Fonte – Assunção (2002)

A cidade possui um relevo, representado na Figura 7, constituído por irregularidades, caracterizados por planaltos, serras e chapadas.

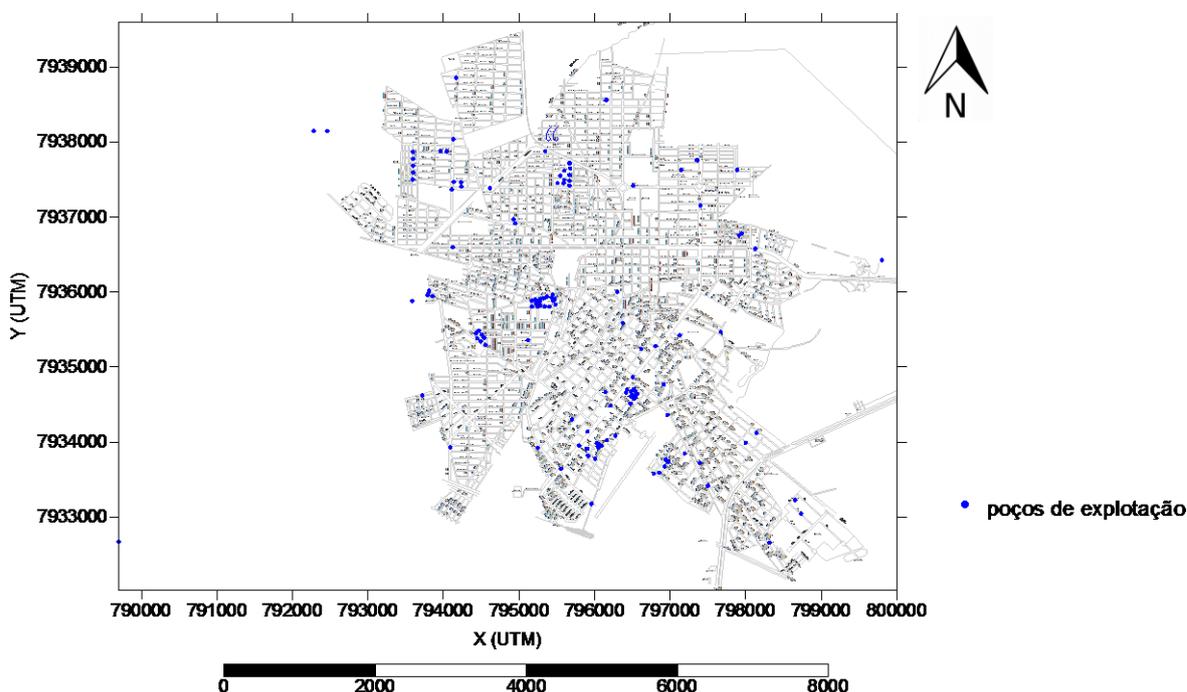
Figura 7 – Relevo de Araguari/MG



Fonte – Elaborada pelo autor. Construído no *software Surfer10* com os dados fornecidos por Miranda (2012)

O abastecimento de água, bem como irrigação e uso industrial é exclusivamente por meio de água subterrânea, sendo extraídas por meio de poços tubulares perfurados no aquífero Bauru. A concessionária de abastecimento público local opera com 128 poços na sua totalidade, mas extrapolando a área urbana e considerando todo o município, a quantidade de poços outorgados amplia-se consideravelmente. Os poços para exploração, utilizados no abastecimento público, estão localizados em sua maioria na zona urbana, como se observa na Figura 8.

Figura 8 - Poços de exploração em Araguari/MG



Fonte – Elaborada pelo autor. Construído no *software Surfer10* com os dados fornecidos por Miranda (2012)

Segundo Alves (2008), o município de Araguari está “localizado em uma área em constante crescimento”, caracterizado por atividades agroindustriais (soja, milho, café, frutas e criação de bovinos), e o fato da área urbana estar edificada sobre o aquífero que abastece a cidade fatalmente eleva o risco de poluição de tal manancial.

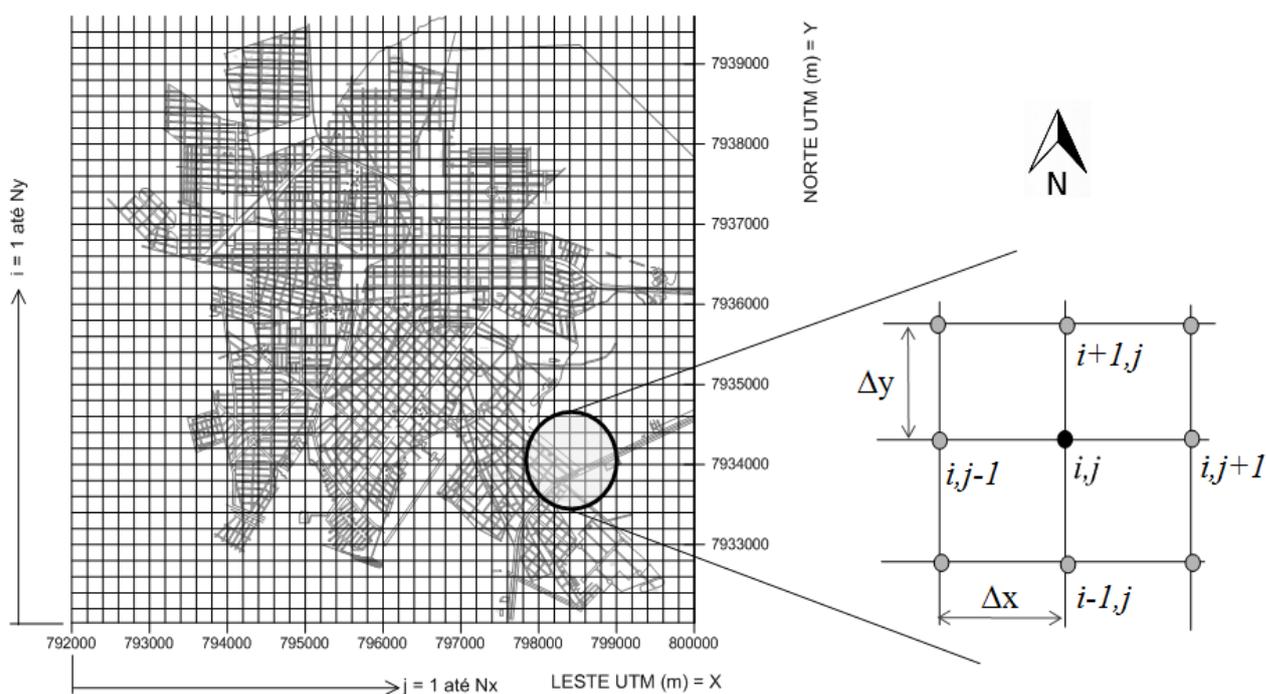
A escolha desta área fundamentou-se na existência de dados coletados e obtidos por estudos anteriores, tais como a distribuição espacial de poços e das características hidrogeológicas e geométricas do aquífero, as quais possibilitaram o cálculo da velocidade de percolação. É importante salientar que as simulações subsequentes, envolvendo

transporte de poluentes, são hipotéticas, tendo em vista que alguns parâmetros não são conhecidos no aquífero em questão, tais como as dispersividades longitudinal e transversal. Além disto, as simulações consideram um poluente genérico, para o qual não há valores específicos para os coeficientes de decaimento e de partição.

3.2 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO ADVEÇÃO-DISPERSÃO

O modelo numérico foi construído a partir da discretização do domínio em uma malha retangular de 250 x 250 pontos (nós), sendo $\Delta x = \Delta y = 32m$. As variáveis e parâmetros necessários para resolução da equação de transporte foram calculados e armazenados nos 62500 nós que constituem esta malha de discretização. O sistema de coordenadas utilizado foi o *Universal Transversa de Mercator* (UTM). A utilização deste sistema cartesiano é vantajosa em áreas pequenas a moderadamente pequenas, como na escala de bairros, zona urbana, ou até mesmo município. Isto porque o sistema UTM permite calcular diretamente distâncias e áreas, uma vez que seus valores numéricos possuem unidade métrica. Em escalas regionais mais extensas, podem-se verificar mudanças de zonas, o que leva a alterações nos valores das coordenadas cartesianas.

Figura 9 - Malha de discretização retangular e sistema de indexação adotado para os nós

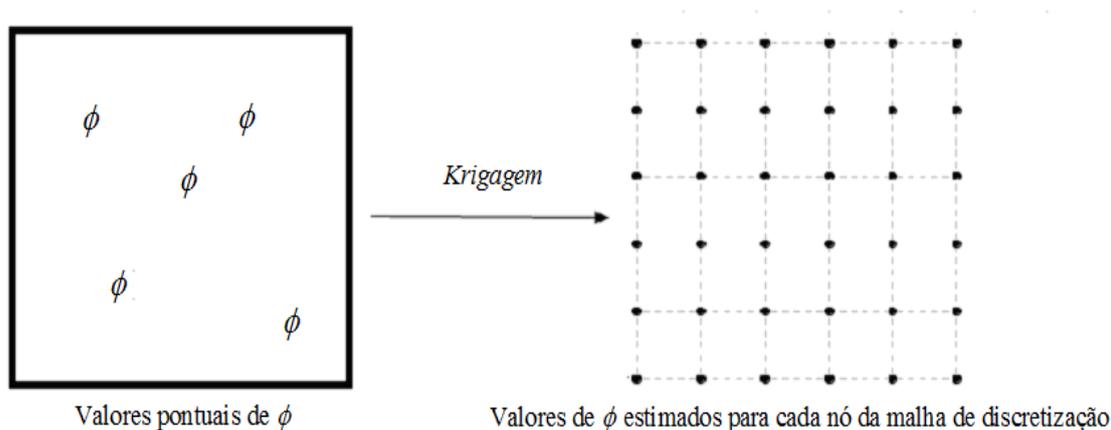


Fonte – Elaborada pelo autor

Neste trabalho, a direção Norte foi referenciada como Y, enquanto que a direção Leste foi referenciada como X. Os nós da malha de discretização serão indexados com os índices i, j , os quais indicam sua posição ao longo dos eixos Y e X, respectivamente. Assim, o índice i refere-se à posição do nó na direção Norte, ao passo que j representa a posição do nó na direção Leste. Este sistema de indexação é ilustrado pela Figura 9.

O método interpolador utilizado foi o Método de *Kriging*. Ao fornecer valores pontuais ao longo da malha de variáveis ou parâmetros (ϕ), estes valores são interpolados para cada cada nó (i, j) contido na malha de discretização, ilustrado na Figura 10 (MIRANDA, 2012). Este procedimento permite a transferência, para os nós da malha, de variáveis pontuais, como a carga hidráulica medida em piezômetros, ou a condutividade hidráulica do aquífero, medida por testes de campo. Este procedimento interpolador também permite a geração gráfica de resultados a partir do programa *Surfer10*, como a distribuição espacial de carga hidráulica ou de concentração de poluentes.

Figura 10 - Esquema de transferência de informações entre pontos amostrais e os nós de uma malha de discretização



Fonte: Miranda (2012)

Foi utilizado o Método de Diferenças Finitas para tratamento numérico da equação advecção-dispersão, a equação (47), sendo que as derivadas espaciais foram discretizadas por diferenças centrais de segunda ordem. A equação (47) relaciona a variação temporal das concentrações com as parcelas de transporte advectivo e difusivo, além de uma parcela

sumidouro/fonte que expressa o decaimento ou acréscimo de poluente. Resumidamente, esta equação pode ser reescrita como:

$$R \frac{\partial (B'c)}{\partial t} = Disp_x + Disp_y + Adv_x + Adv_y + G_1 + G_2. \quad (53)$$

Para as derivadas parciais espaciais, a formulação numérica utilizou o esquema de diferenças centradas de segunda ordem. Desta forma, as parcelas advectivas e dispersivas do segundo membro da equação (53) podem ser linearizadas, para o nó indexado como i,j , como:

$$Adv_x = \left(-\frac{B'_{i,j+1} \cdot Vx_{i,j+1}}{2\Delta x} \right) \cdot c_{i,j+1} + \left(\frac{B'_{i,j-1} \cdot Vx_{i,j-1}}{2\Delta x} \right) \cdot c_{i,j-1} \quad (54)$$

$$Adv_y = \left(-\frac{B'_{i+1,j} \cdot Vy_{i+1,j}}{2\Delta y} \right) \cdot c_{i+1,j} + \left(\frac{B'_{i-1,j} \cdot Vy_{i-1,j}}{2\Delta y} \right) \cdot c_{i-1,j} \quad (55)$$

$$\begin{aligned} Disp_x = & \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j+1} + B'_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j}) \cdot c_{i,j+1} + \\ & + \left[-\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j+1} + B'_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1}) \right] \cdot c_{i,j} + \\ & + \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1}) \cdot c_{i,j-1} \end{aligned} \quad (56)$$

$$\begin{aligned} Disp_y = & \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i+1,j} + B'_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) \cdot c_{i+1,j} + \\ & + \left[-\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i+1,j} + B'_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j}) \right] \cdot c_{i,j} + \\ & + \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j}) \cdot c_{i-1,j} \end{aligned} \quad (57)$$

No conjunto de equações (54) a (57), V_x e V_y são as velocidades médias de percolação do escoamento ao longo das direções X (Leste) e Y (Norte), respectivamente. Ainda nestas expressões, D_x e D_y são os coeficientes de dispersão hidrodinâmica médios nestas direções. Nota-se que o esquema de segunda ordem faz com que o estêncil da discretização envolva cinco pontos: além do nó i,j , no qual se calculam as derivadas, mais quatro vizinhos imediatos.

Na equação (53), o termo G_1 é utilizado para modelar o eventual decaimento de primeira ordem do poluente por reações químicas ou bioquímicas. Além disto, o termo sumidouro G_2 foi introduzido para levar em conta a eventual retirada de poluente por poços que extraem água do aquífero. Estas parcelas dependem de características pontuais no nó i, j e, para estes pontos, podem ser calculadas como:

$$G_1 = -k'_{i,j} B_{i,j} c_{i,j} \quad (58)$$

$$G_2 = -\frac{\dot{M}_{retirada}}{A_{inf}} = \frac{Q_{i,j} c_{i,j}}{A_{inf}} \quad (59)$$

Nas equações (58) e (59), k' é o coeficiente de decaimento de primeira ordem, $\dot{M}_{retirada}$ é a descarga de massa de poluente que o poço extrai do aquífero. Esta extração de água, acompanhada da conseqüente retirada de poluente, somente é verificada se as concentrações são diferentes de zero nas imediações do poço. Ainda nestas equações, Q é a parcela de vazão que o poço retira do nó i,j . Os procedimentos de espalhamento de vazão, descritos no item seguinte, fornecem um nível de detalhamento maior sobre este aspecto da modelagem.

Para o tratamento da derivada temporal da equação (53), foi aplicado o esquema semi-implícito de Crank Nicolson. Neste arranjo, as concentrações no nível de tempo $(n+1)$, que corresponde a um instante futuro para cada nó (i, j) , são calculadas a partir de concentrações conhecidas no nível de tempo atual (n) , mas também dependem dos seus próprios valores desconhecidos no instante $(n+1)$. Esta característica direciona a solução

numérica para a montagem e resolução de um sistema linear. Neste aspecto, o esforço matemático é superior àquele exigido por métodos explícitos. Salienta-se que, ao longo da pesquisa aqui descrita, também foram testados arranjos explícitos, como os de Euler (de primeira ordem), e os esquemas de Adams Bashforth (de segunda, terceira e quarta ordens). A solução por estes esquemas, todavia, evoluiu muito lentamente, uma vez que a estabilidade dos mesmos está condicionada a passos de tempo muito curtos. Como, nos aquíferos, os poluentes percolam lentamente, prognósticos de dispersão para escalas de tempo da ordem de anos ficariam inviabilizados. Isto justificou a escolha do esquema semi-implícito de Crank Nicolson, o qual admitiu passos de tempo maiores.

O esquema de Crank Nicolson, aplicado para as equações (47) ou (53), pode ser escrito como:

$$R \frac{\partial(B'c)}{\partial t} = \frac{1}{2}(f^{n+1} + f^n). \quad (60)$$

$$\text{Sendo que: } f_{i,j}^{(n+1) \text{ ou } n} = (Adv_x + Adv_y + Disp_x + Disp_y + G_1 + G_2)_{i,j}^{(n+1) \text{ ou } n} \quad (61)$$

Trabalhando com um passo de tempo Δt , a equação (60) é discretizada como:

$$c_{i,j}^{(n+1)} = \frac{(B'_{i,j} \cdot c_{i,j})^n + \frac{\Delta t}{2R_{i,j}} \cdot (f_{i,j}^{n+1} + f_{i,j}^n)}{B'_{i,j}{}^{n+1}}. \quad (62)$$

Rearranjos algébricos com as equações (62) e (54) a (59) conduzem ao sistema linear final que precisa ser resolvido para o cálculo do campo de concentrações de poluentes. O sistema $A \times c = d$, em que A representa a matriz de coeficientes, c o vetor de concentrações (incógnitas do problema) e d o vetor resultado, pode ser genericamente escrito como:

$$A_1 c_{i-1,j}^{n+1} + A_2 c_{i,j-1}^{n+1} + A_3 c_{i,j}^{n+1} + A_4 c_{i,j+1}^{n+1} + A_5 c_{i+1,j}^{n+1} = d_{i,j}^n. \quad (63)$$

Em que:

$$A_1 = \frac{\Delta t}{2 \cdot B'_{i,j}{}^{n+1}} \cdot \frac{a_1}{R_{i,j}} \quad (64)$$

$$A_2 = \frac{\Delta t}{2 \cdot B'_{i,j}{}^{n+1}} \cdot \frac{a_2}{R_{i,j}} \quad (65)$$

$$A_3 = \frac{\Delta t}{2 \cdot B'_{i,j}{}^{n+1}} \cdot \frac{a_3}{R_{i,j}} - 1 \quad (66)$$

$$A_4 = \frac{\Delta t}{2 \cdot B'_{i,j}{}^{n+1}} \cdot \frac{a_4}{R_{i,j}} \quad (67)$$

$$A_5 = \frac{\Delta t}{2 \cdot B'_{i,j}{}^{n+1}} \cdot \frac{a_5}{R_{i,j}} \quad (68)$$

$$a_1 = \left\{ \frac{B'_{i-1,j} \cdot Vy_{i-1,j}}{2\Delta y} + \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j}) \right\}^{n+1} \quad (69)$$

$$a_2 = \left\{ \frac{B'_{i,j-1} \cdot Vx_{i,j-1}}{2\Delta x} + \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1}) \right\}^{n+1} \quad (70)$$

$$a_3 = \left\{ \begin{aligned} & -\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j+1} + B'_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j-1} + B'_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j-1} + Dx_{i,j}) + \\ & -\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i+1,j} + B'_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i-1,j} + B'_{i,j}) \cdot (Dy_{i-1,j} + Dy_{i,j}) + \\ & -k'_{i,j} \cdot B'_{i,j} - \frac{Q_{i,j}}{A_{\text{inf}}} \end{aligned} \right\}^{n+1} \quad (71)$$

$$a_4 = \left\{ \frac{B'_{i,j+1} \cdot Vx_{i,j+1}}{2\Delta x} + \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i,j+1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j+1}) \right\}^{n+1} \quad (72)$$

$$a_5 = \left\{ \frac{B'_{i+1,j} \cdot Vy_{i+1,j}}{2\Delta y} + \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (B'_{i,j} + B'_{i+1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i+1,j}) \right\}^{n+1} \quad (73)$$

O vetor de resultados é calculado apenas com valores conhecidos no instante de tempo atual (n), além da espessura do aquífero, que deve ser conhecida no nível de tempo seguinte ($n+1$). No caso de aquíferos livres, para escoamentos transientes, a espessura é calculada previamente pela equação que governa a dinâmica do escoamento. Para escoamentos permanentes, seu valor é constante com o tempo e, portanto, igual à espessura do instante anterior. Para aquíferos confinados, a espessura também é uma propriedade geométrica constante para cada ponto. A equação (74) expressa o cálculo do vetor de resultados.

$$d_{i,j}^n = -\frac{B_{i,j}^n c_{i,j}^n}{B_{i,j}^{n+1}} - \frac{\Delta t}{2B_{i,j}^{n+1}} f_{i,j}^n \quad (74)$$

3.3 ESPALHAMENTO DE PROPRIEDADES PARA OS NÓS

Disseminadas na área de estudo, há singularidades que podem servir como fontes poluidoras diretas, como também um sumidouro de poluentes por extração de água. Em função do método de diferenças finitas, utilizando uma malha estruturada regular e cálculos feitos para os nós, uma fonte pontual de poluição só seria percebida pelo modelo se a coordenada de tal fonte fosse coincidente com o nó da malha de discretização. A mesma observação também vale para um poço que extrai água do aquífero. Todavia, é situação mais comum que, ao fazer a varredura da malha, existam fontes poluidoras e poços que se encontram dentro das células, porém não apresentam posições coincidentes com os nós. Neste contexto, o modelo construído utiliza o espalhamento de propriedades pontuais para os nós mais próximos. Dentre tais propriedades, citam-se as vazões dos poços e as concentrações injetadas por fontes poluentes.

A função implementada no código para espalhamento de propriedades para os nós foi denominada função indicadora. A atribuição da função indicadora aos nós foi dada para fontes poluidoras, bem como pela retirada de poluentes por meio de poços. Assim, para a fonte poluidora iremos considerar a função $indica(i, j) _ fonte$, dada por:

$$indica(i, j)_{\text{ fonte}} = \begin{cases} 0 & \text{para nós longe de fontes} \\ 2 & \text{para nós próximos de fontes} \end{cases}$$

Se $indica(i, j)_{\text{ fonte}} = 0$, utiliza-se a equação advecção-dispersão para cálculo da concentração no nó i, j . Se $indica(i, j)_{\text{ fonte}} = 2$, utilizam-se condições de contorno internas com concentrações prescritas, aplicando uma função Kernel, definida na equação (75), para espalhar a concentração de poluentes a partir do ponto de injeção até o nó i, j .

Assim, para espalhamento do poluente para os nós mais próximos do ponto de injeção, foi utilizada a função de Kernel triangular definida como:

$$kernel(r) = \begin{cases} 1-|r|, & \text{se } |r| \leq 1 \\ 0, & \text{se } |r| > 1 \end{cases} \quad (75)$$

Sendo r o raio de influência da função Kernel, atribuído como:

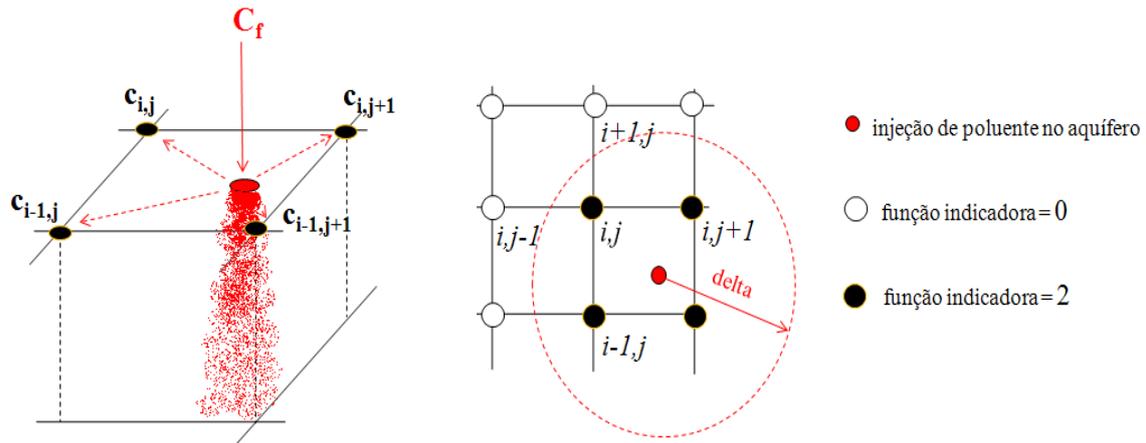
$$r = \frac{dist}{delta} = \frac{\sqrt{(x_{pol} - x)^2 + (y_{pol} - y)^2}}{\sqrt{dx^2 + dy^2}}, \text{ para fontes de poluição.} \quad (76)$$

Sendo que (x_{pol}, y_{pol}) são coordenadas da fonte de poluição. Note-se que a função Kernel estabelece uma ponderação em relação à distância relativa entre a fonte poluidora e o nó. Assim, quanto mais próximo da fonte estiver o nó, este recebe uma parcela maior da concentração da fonte. Também vale salientar que, pela definição da distância adimensional ou raio de influência (r), apenas os nós com função indicadora igual a 2 recebem a parcela de poluente da fonte. Enfim, considerando a possibilidade de possuir mais de uma fonte, os nós com $indica(i, j)_{\text{ fonte}} = 2$ recebem a seguinte concentração da fonte:

$$c_{i, j} = \sum_{N_{fontes}} \{kernel(r) \cdot C_f\}. \quad (77)$$

Na equação (77), C_f é a concentração introduzida no aquífero pela fonte poluidora e N_{fontes} é a quantidade total de fontes vizinhas ao nó i,j . A Figura 11 ilustra o esquema de espalhamento de concentrações.

Figura 11 – Esquema de espalhamento da concentração injetada por uma fonte pontual até os nós mais próximos



Fonte – Elaborada pelo autor

Raciocínio semelhante é feito em relação à presença de poços que, ao bombearem água do aquífero, conseqüentemente retiram substâncias de áreas poluídas. No caso, ao considerar a retirada de poluentes por meio de poços, considera-se a função $indica(i, j)_{poço}$, dada por:

$$indica(i, j)_{poço} = \begin{cases} 0 & \text{para nós longe de poços} \\ 1 & \text{para nós próximos de poços} \end{cases}$$

Considerando Q_p como sendo a vazão do poço. Se $indica(i, j)_{poço} = 0$ então $Q_{i,j} = 0$. Isto significa que nenhuma vazão é extraída do nó i,j . Por outro lado, se $indica(i, j)_{poço} = 1$ então o poço retira os poluentes juntamente com a exploração da água e tem-se $Q_{i,j}$ não nula. Para espalhamento da vazão do poço para os nós mais próximos também utiliza-se a função de Kernel, definida na equação (75). Neste caso, o raio de influência do espalhamento é dado como se segue:

$$r = \frac{dist}{delta} = \frac{\sqrt{(x_{água} - x)^2 + (y_{água} - y)^2}}{\sqrt{dx^2 + dy^2}}, \text{ para exploração de poços.} \quad (78)$$

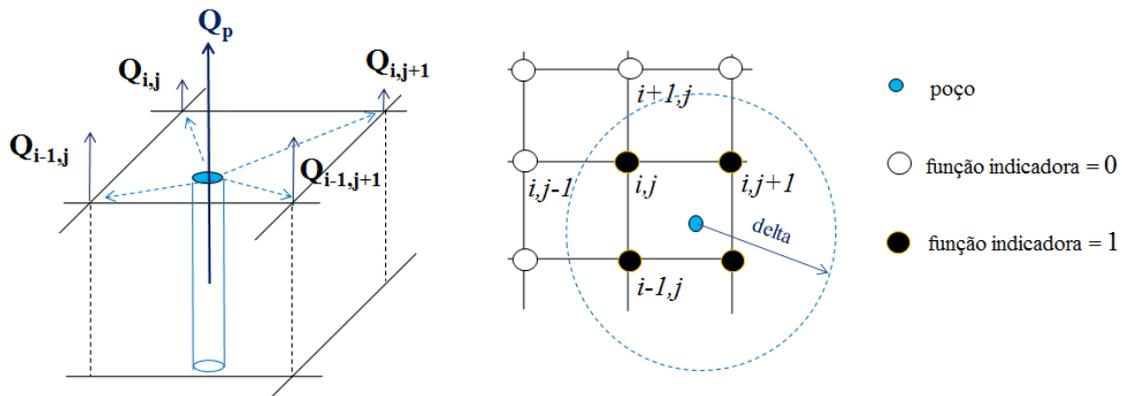
Em que $(x_{água}, y_{água})$ são coordenadas dos poços.

Caso o nó esteja mais próximo de um poço, este recebe uma parcela maior da vazão do poço. Também vale salientar que apenas os nós com função indicadora igual a 1 recebem a parcela de vazão do poço. Enfim, considerando a possibilidade de possuir mais de uma poço, dos nós com $indica(i,j)_{poço}=1$ são retiradas as seguintes vazões:

$$Q_{i,j} = \sum_{N_{poços}} \{ker\ nel(r) \cdot Q_p\}. \quad (79)$$

Na equação (79), Q_p é a vazão de cada poço e $N_{poços}$ é a quantidade total de poços vizinhos ao nó i,j . A Figura 12 ilustra o esquema de espalhamento de vazões.

Figura 12 – Esquema de espalhamento da vazão de um poço até os nós mais próximos



Fonte – Elaborada pelo autor

A descarga de massa retirada de cada nó com função indicadora igual a 1 pode ser calculada por:

$$\dot{M} = Q_{i,j} \cdot c_{i,j} \quad (80)$$

Neste caso utiliza-se a equação advecção-dispersão, adicionando-se o termo sumidouro G_2 . Para que esta parcela tenha unidades compatíveis com as outras parcelas da equação (47) ou (53), o termo G_2 precisa ser dividido por uma área de influência. Assim, a retirada de poluente pelo bombeamento é calculada pela razão entre a descarga de massa de poluente extraída pelo poço e a área de influência, conforme a equação (81):

$$G_2 = -Q_{i,j} \cdot c_{i,j} \cdot \frac{1}{\pi \cdot R_{\text{inf}}^2} \quad (81)$$

Nesta equação, o sinal negativo denota uma descarga de massa que é extraída do sistema, ao passo que o raio de influência é calculado como:

$$R_{\text{inf}} = \sqrt{\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 + \left(\frac{\Delta y}{2}\right)^2} \quad (82)$$

3.4 ASPECTOS DE SOLUÇÃO DO SISTEMA LINEAR

O método de gradientes bi-conjugados (BiCG) é utilizado para resolver sistemas de equações lineares da forma $A \times c = d$, sendo A uma matriz quadrada não simétrica. O método de gradientes bi-conjugados estabilizado e pré-condicionado (PBiCGSTAB) é uma variação do BiCG que tende a apresentar convergência mais regular, com menor susceptibilidade a instabilidades. O pré condicionamento da matriz de coeficientes A visa a acelerar a convergência do método. Neste trabalho, utilizou-se o PBiCGSTAB com pré condicionador de Point Jacobi e o algoritmo de solução do sistema, apresentado por Barret et al. (1994).

Observa-se que a matriz de coeficientes do sistema linear exposto pela equação (63) construída para resolução do problema em questão é uma matriz A quadrada e não simétrica, de $N_x \cdot N_y$ linhas por $N_x \cdot N_y$ colunas. Neste caso, N_x e N_y são, respectivamente, a quantidade de nós nas direções X (Leste) e Y (Norte). Em problemas bidimensionais, esta matriz possui cinco diagonais com elementos não nulos, sendo que a maioria dos espaços são nulos. Sendo assim, preliminarmente à solução do sistema linear, buscou-se

implementar um método de armazenamento esparsa da matriz A , o que representa uma economia considerável no armazenamento em comparação com a matriz cheia.

Segundo Alamy Filho (2006), baseando-se na técnica de armazenamento esparsa *Compressed Row Storage* (CRS), descrita em Barret et al. (1994), pode-se reescrever tal matriz por meio da construção de três vetores: um para números de ponto flutuante denominado val e os outros dois para números inteiros denominados col_ind e row_ptr , sendo que:

- val - armazena todos os elementos diferentes de zero da matriz;
- col_ind - armazena os índices das colunas dos elementos não-nulos do vetor val ;
- row_ptr - armazena a localização, no vetor val , do elemento não nulo que inicia cada linha da matriz A .

A matriz A é construída levando em conta a função indicadora $indica(i,j)_{fonte}$ descrita no item 3.3. Para tanto, devem ser verificados quais são os nós diretamente afetados pelas fontes poluidoras, onde são impostos contornos internos de concentrações prescritas ($C_{i,j}^p$), bem como nós distantes destas fontes, onde é aplicada a equação de advecção-dispersão. Com isto, o sistema linear pode ser escrito segundo estas condicionantes:

$$\text{Se } indica(i, j)_{fonte} = 0: A_1 c_{i-1,j}^{n+1} + A_2 c_{i,j-1}^{n+1} + A_3 c_{i,j}^{n+1} + A_4 c_{i,j+1}^{n+1} + A_5 c_{i+1,j}^{n+1} = d_{i,j}^n$$

$$\text{Se } indica(i, j)_{fonte} = 2: 0 \cdot c_{i-1,j}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j-1}^{n+1} + 1 \cdot c_{i,j}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j+1}^{n+1} + 0 \cdot c_{i+1,j}^{n+1} = C_{i,j}^p \quad (83)$$

Considerando, por exemplo, um domínio de cálculo simples, discretizado por uma malha de $N_x=5$ nós e $N_y=4$ nós, conforme ilustrado na Figura 13, têm-se uma matriz de coeficientes A com 400 elementos na sua forma cheia. O sistema linear resultante é ilustrado pela Figura 14. Neste caso, condições fronteiriças de derivadas normais nulas foram impostas nos limites sul, norte, leste e oeste do domínio.

computacional. O que é mais grave: com malhas duas ordens de grandeza mais refinadas do que esta, a exigência de memória inviabilizaria o armazenamento da matriz A na forma cheia e, conseqüentemente, a solução do problema em computadores simples.

Com o armazenamento esparsa CRS, a matriz cheia A pode ser reescrita utilizando os vetores val , col_ind e row_ptr . Estes três vetores demandariam $(2m+n+1)$ locações, sendo $n = N_x \cdot N_y$ a quantidade total de nós do domínio e m a quantidade de elementos não nulos da matriz A . Para o exemplo, das Figuras 13 e 14, em vez de 400 elementos, seriam necessários apenas 105. Retornando às dimensões de problemas reais, nos quais o grau de refinamento da malha chega a 100 vezes ou mais ao ilustrado pela Figura 13, percebe-se o quão importante é esta economia de memória computacional.

No Apêndice I deste trabalho apresenta-se o algoritmo de montagem do armazenamento CRS, seguido da solução do sistema linear pelo PBiCGSTAB, escritos em código *Visual Basic for Applications*.

3.5 ESTIMATIVA DOS COEFICIENTES DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA

Um dos aspectos complexos da utilização de equações de advecção-difusão ou advecção-dispersão, para o cálculo de concentrações de poluentes em meios contínuos, como a água ou os aquíferos, refere-se à estimativa dos coeficientes de difusão/dispersão. Para corpos de água superficiais, estes valores podem ser obtidos por calibração, a partir de medições de concentrações em campo/laboratório, ou até mesmo tomados como proporcionais ao produto entre a profundidade e a velocidade de atrito do escoamento. Mas para aquíferos localizados no subsolo, estas medidas são dificultadas e ficam na dependência da presença de piezômetros ou de poços exploradores de água. Para escoamentos turbulentos, estes coeficientes normalmente são relacionados como diretamente proporcionais à viscosidade turbulenta, calculada por modelos de turbulência. Para aquíferos, os coeficientes de dispersão presentes nas equações (47) e (53) podem ser calculados como:

$$D_x = \alpha_L \cdot \frac{V_x^2}{|V|} + \alpha_T \frac{V_y^2}{|V|} + D_o \quad (84)$$

$$D_y = \alpha_L \cdot \frac{V_y^2}{|V|} + \alpha_T \frac{V_x^2}{|V|} + D_o \quad (85)$$

Nas equações (84) e (85), α_L e α_T são, respectivamente, as dispersividades do meio nas direções longitudinal e transversal, parâmetros que apresentam unidades de comprimento. A direção longitudinal é considerada como o alinhamento do fluxo dominante ou preferencial. D_o é a difusividade molecular do poluente no meio poroso, cujo valor pode ser desprezado em problemas práticos, uma vez que sua ordem de grandeza gira em torno de 10^{-6} cm²/s. Além disto, $|V|$ é o módulo do vetor velocidade de percolação.

O levantamento direto de α_L e α_T a partir de trabalhos de campo/laboratório é tarefa complexa e imprecisa, pois a retirada de amostras de aquíferos profundos normalmente resulta na destruição da estrutura da amostra de subsolo. Com isto, perdem-se as condições reais e os valores levantados de α_L e α_T podem ser bem diferentes daqueles vigentes no aquífero.

Neste contexto, a calibração de modelos é sempre uma alternativa, porém, altamente dependente do levantamento de concentrações a partir de uma rede de piezômetros e poços. A extensão desta rede interfere na acurácia da calibração, a qual ainda deve contar com a imposição de condições iniciais bem próximas da realidade, o que nem sempre é possível de se quantificar. A literatura tem fornecido algumas relações empíricas para os parâmetros de dispersividade.

A Tabela 2 resume algumas destas expressões. Note-se que não há um consenso sobre as equações para as dispersividades. As relações discriminadas na Tabela 2 provavelmente são dependentes de condições locais. Todavia, duas delas mencionam uma escala do sistema, sem contudo explicar claramente o que a ser tal escala. Apenas a equação de Gelhar (1985), dá uma noção desta escala como sendo o comprimento da pluma. De acordo com a teoria Gaussiana, a pluma tem largura limitada pela contenção de 95% da massa de poluente. Esta teoria, entretanto, não menciona sobre o comprimento da pluma.

Tabela 2 – Relações empíricas para as dispersividades

Autor	Relação	Observações
Gelhar (1985)	$\alpha_L = 0,1 \cdot Lp$ $\alpha_T = 0,1 \cdot \alpha_L$	Lp é o comprimento da pluma
Neuman (1990), gerada a partir dos dados de Gelhar et al. (1992)	$\alpha_L = 0,0169 \cdot \chi^{1,53}$ válida para $\chi \leq 100m$	χ é a escala do sistema, com comprimento em metros
Gelhar et al. (1992)	$\alpha_T = 0,1 \cdot \alpha_L$ $\alpha_T = 0,01 \cdot \alpha_L$	
Bear (1979)	“razões da ordem de $\alpha_L / \alpha_T = 5/24$ têm sido mencionadas na literatura”	
Tauxe (1994)	$\alpha_L = E / 27,535$ $\alpha_T = \alpha_L / 3$	E é a escala do problema considerado

Fonte – Elaborada pelo autor

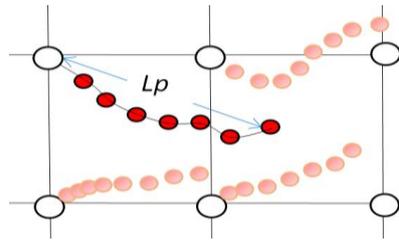
Neste trabalho, optou-se pela ideia de proporcionalidade entre a dispersividade longitudinal e algo similar ao comprimento da pluma. A dispersividade transversal consequentemente será estimada como uma fração da dispersividade longitudinal.

Assim, para o cálculo do comprimento da pluma e de α_L propôs-se a aplicação de uma técnica lagrangeana de transporte de partículas. Nestes casos, acompanha-se a movimentação de partículas que são transportadas com a mesma velocidade do escoamento subterrâneo. No caso, as partículas representam poluentes que são carregados passivamente pela água subterrânea. O resultado final consiste no mapeamento da distribuição temporal e espacial de uma nuvem de partículas, que são emitidas a partir de um ponto inicial.

Como o esquema numérico de diferenças finitas demanda o conhecimento dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica em todos os nós do domínio, uma partícula foi liberada para cada nó.

Conforme ilustra a Figura 15, a distância entre esta partícula e seu nó de liberação, para diferentes instantes, foi considerada como o comprimento da pluma.

Figura 15 – Esquema de deslocamento de uma partícula, utilizado para a estimativa da escala de comprimento e para o cálculo da dispersividade longitudinal



Fonte – Elaborada pelo autor

As equações (86) e (87) foram utilizadas para calcular as posições (\hat{x}, \hat{y}) das partículas transportadas pelo escoamento subterrâneo, para um instante $t + \Delta t$, a partir do conhecimento prévio de suas posições no instante t :

$$\hat{V}_x(t) = \frac{d\hat{x}}{dt} \Rightarrow \hat{x}(t + \Delta t) = \hat{x}(t) + \hat{V}_x(t) \cdot \Delta t \quad (86)$$

$$\hat{V}_y(t) = \frac{d\hat{y}}{dt} \Rightarrow \hat{y}(t + \Delta t) = \hat{y}(t) + \hat{V}_y(t) \cdot \Delta t \quad (87)$$

Nas equações (86) e (87), $\hat{V}_x(t)$ e $\hat{V}_y(t)$ representam as velocidades da partícula, no instante t , na posição $\hat{x}(t), \hat{y}(t)$. Sua estimativa é feita a partir das componentes de velocidade de percolação nas direções horizontais V_x e V_y . Lançando-se mão de métodos numéricos, estas velocidades são calculadas em pontos específicos do aquífero (nós), marcados pelo cruzamento de linhas de grade de uma malha de discretização. É importante notar que a posição dos nós não é coincidente com as posições assumidas pelas partículas, logo, um procedimento de interpolação espacial deve ser adotado para calcular as velocidades $\hat{V}_x(t)$ e $\hat{V}_y(t)$. Durante a execução deste trabalho, utilizou-se média ponderada, tomando o inverso da distância entre a partícula e os nós mais próximos como fator de ponderação.

Em suma, a distância entre a partícula e seu nó de liberação, para cada instante de tempo, será tomada como o comprimento da pluma (L_p). Com isto, as matrizes de dispersividades foram calculadas, neste trabalho, como:

$$\alpha_L = \phi_L \cdot L_p \tag{88}$$

$$\alpha_T = \phi_T \cdot \alpha_L \tag{89}$$

Em que ϕ_L e ϕ_T são parâmetros adimensionais ajustáveis que exprimem a proporção entre o comprimento da pluma e as dispersividades.

3.6 IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO

O código foi implementado em ambiente *VBA (Visual Basic for Applications)* que está contido no *Excel*. Os dados necessários para cálculo da concentração de poluentes foram organizados em planilhas que foram usados diretamente do código. Tais planilhas possuem os dados do aquífero, dos poluentes e de exploração necessários para resolução da equação advecção-dispersão, como ilustrados nas Figuras 16, 17 e 18, respectivamente.

Figura 16 – Dados hidrogeológicos do aquífero

	X (E UTM) (m)	Y (N UTM) (m)	Kx (m/h)	Ky (m/h)	Sy	carga hidráulica inicial h ₀ (m)	cota terreno (m)	cota base do aquífero (m)	porosidade do aquífero	ρ _B (densidade do meio seco)
1	792000	7932000	0,0806	0,0806	0,1493	886,71	902,29	867,27	0,25	2
2	792032,1285	7932000	0,0803	0,0803	0,1493	886,71	901,95	867,20	0,25	2
3	792064,257	7932000	0,0799	0,0799	0,1492	886,69	901,81	867,13	0,25	2
4	792096,3855	7932000	0,0795	0,0795	0,1492	886,65	901,74	867,06	0,25	2
5	792128,5141	7932000	0,0792	0,0792	0,1492	886,60	901,61	866,98	0,25	2
6	792160,6426	7932000	0,0788	0,0788	0,1492	886,53	901,13	866,91	0,25	2
7	792192,7711	7932000	0,0784	0,0784	0,1492	886,44	901,04	866,83	0,25	2
8	792224,8996	7932000	0,0781	0,0781	0,1491	886,33	900,92	866,76	0,25	2
9	792257,0281	7932000	0,0777	0,0777	0,1491	886,21	900,85	866,68	0,25	2
10	792289,1566	7932000	0,0774	0,0774	0,1491	886,07	900,54	866,60	0,25	2
11	792321,2851	7932000	0,0770	0,0770	0,1491	885,91	900,40	866,53	0,25	2
12	792353,4137	7932000	0,0767	0,0767	0,1491	885,75	900,20	866,45	0,25	2
13	792385,5422	7932000	0,0763	0,0763	0,1491	885,57	900,07	866,37	0,25	2
14	792417,6707	7932000	0,0760	0,0760	0,1490	885,47	899,04	866,29	0,25	2
15	792449,7992	7932000	0,0757	0,0757	0,1490	885,17	899,04	866,21	0,25	2
16	792481,9277	7932000	0,0754	0,0754	0,1490	884,95	898,77	866,13	0,25	2
17	792514,0562	7932000	0,0750	0,0750	0,1490	884,73	899,21	866,05	0,25	2
18	792546,1847	7932000	0,0747	0,0747	0,1490	884,49	899,34	865,97	0,25	2
19	792578,3133	7932000	0,0744	0,0744	0,1489	884,25	899,51	865,88	0,25	2
20	792610,4418	7932000	0,0741	0,0741	0,1489	884,00	899,44	865,80	0,25	2
21	792642,5703	7932000	0,0738	0,0738	0,1489	883,74	899,52	865,72	0,25	2
22	792674,6988	7932000	0,0735	0,0735	0,1489	883,48	899,44	865,63	0,25	2
23	792706,8273	7932000	0,0732	0,0732	0,1489	883,21	899,49	865,55	0,25	2

Fonte – Dados de entrada referentes aos parâmetros hidrogeológicos armazenados em cada nó da malha de discretização, fornecidos por Miranda (2012)

Figura 17 – Coordenadas das fontes poluentes

fonte pontual	X (E UTM) (m)	Y (E UTM) (m)	Raio de liberação (m)	$t_{\text{máx}}$ = período de injeção (anos)	$C_{\text{máx}}$ (mg/L)
Leão Autoposto	797590	7933004	0	10	1
Posto Arca	797256	7933272	0	10	1
Brasileirão	799367	7934209	0	10	1
Posto Sombra	798502	7933965	0	10	1
Posto Cascavel	798547	7933430	0	10	1
Leão Autoposto	796842	7934483	0	10	1
Posto BR - Amorim	797205	7934599	0	10	1
Posto do Chico	796984	7934766	0	10	1
Pedrocas (Ton-Ton)	796451	7934789	0	10	1
Posto BR - Bahia	795303	7934839	0	10	1
Autoposto Nacional	796349	7935310	0	10	1
Posto II	796484	7935608	0	10	1
Pedrocas Autoposto	796188	7935818	0	10	1
Nosso Posto	796340	7936025	0	10	1
Posto Pit Stop	796591	7935953	0	10	1
Posto Sogrão	797539	7936559	0	10	1
Pedrocas Autoposto	797375	7936626	0	10	1
Irmãos Marques	796539	7935010	0	10	1
Crezo Autoposto	795258	7936138	0	10	1
Autoposto Melo Viana	794533	7936279	0	10	1
Posto do Oswaldo	796313	7936627	0	10	1
Posto BR - Planalto	795419	7937375	0	10	1
Posto 3 - Teodolino	796104	7935395	0	10	1

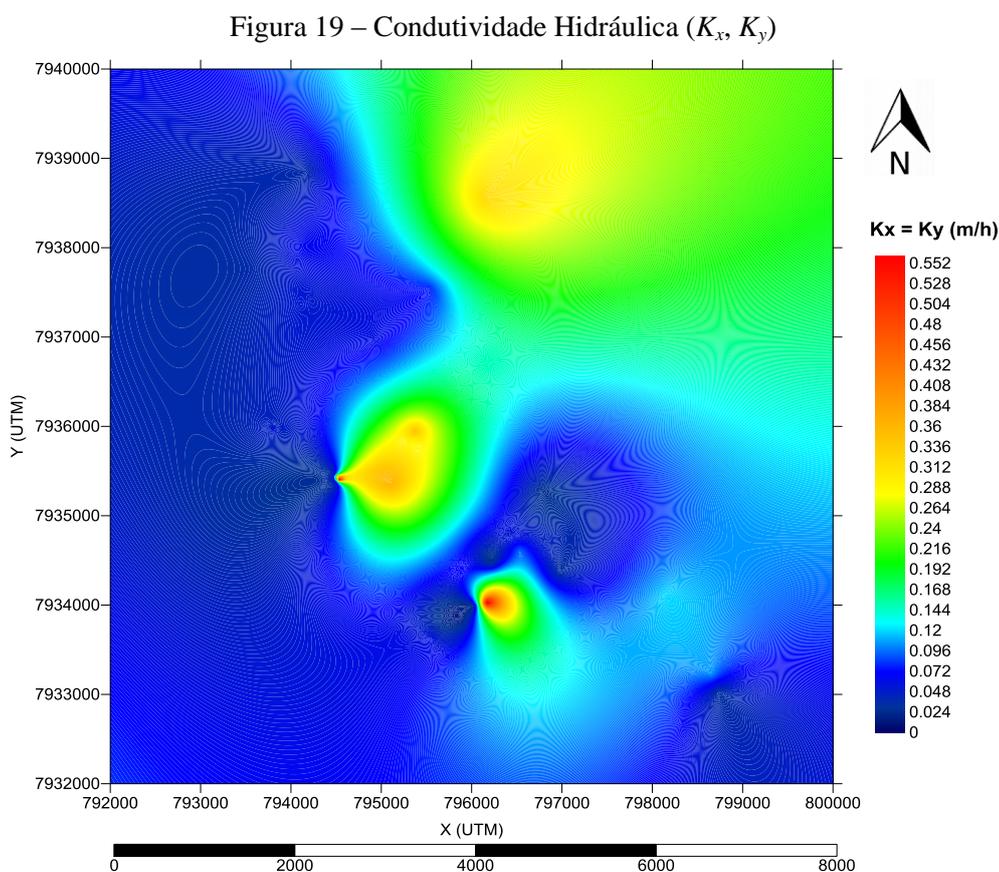
Fonte – Dados de entrada referentes às fontes de poluição

Figura 18 – Dados de exploração

POÇO	Localização - referência	X (E UTM) (m)	Y (N UTM) (m)	Situação (0=desativado;1=ativado)	Q(m ³ /h)	prof. topo filtro (m)	prof. base filtro (m)
s.nome		792280,73	7938149,37	1	80	30	60
s.nome		792462,27	7938146,56	1	100	30	60
PF03		793583,72	7935877,45	1	11	30	60
P29		793593,34	7937501,68	1	40	30	60
P32		793595,00	7937776,00	1	32	30	60
P33		793595,00	7937868,00	1	40	30	60
P30		793596,85	7937591,69	1	30	30	60
P31		793597,80	7937681,70	1	16	30	60
P34		793720,00	7934624,00	1	18	30	60
PH04		793791,00	7935959,00	1	28	30	60
PH02		793796,70	7935984,17	1	12	30	60
PH03		793807,00	7936018,00	1	28	30	60
PH01		793855,00	7935946,00	1	22	30	60
P28		793961,00	7937878,00	1	8	30	60
P27		794043,60	7937873,40	1	20	30	60
P41		794089,48	7933933,27	1	22	30	60
PS04		794111,00	7937368,00	1	30	30	60
PS02		794137,38	7937468,69	1	18	30	60
P47		794166,98	7938854,70	1	12	30	60
PS03		794233,47	7937406,43	1	18	30	60
PS01		794233,73	7937463,26	1	28	30	60
PC7		794428,40	7935452,54	1	30	30	60
PC6		794446,62	7935382,52	1	30	30	60

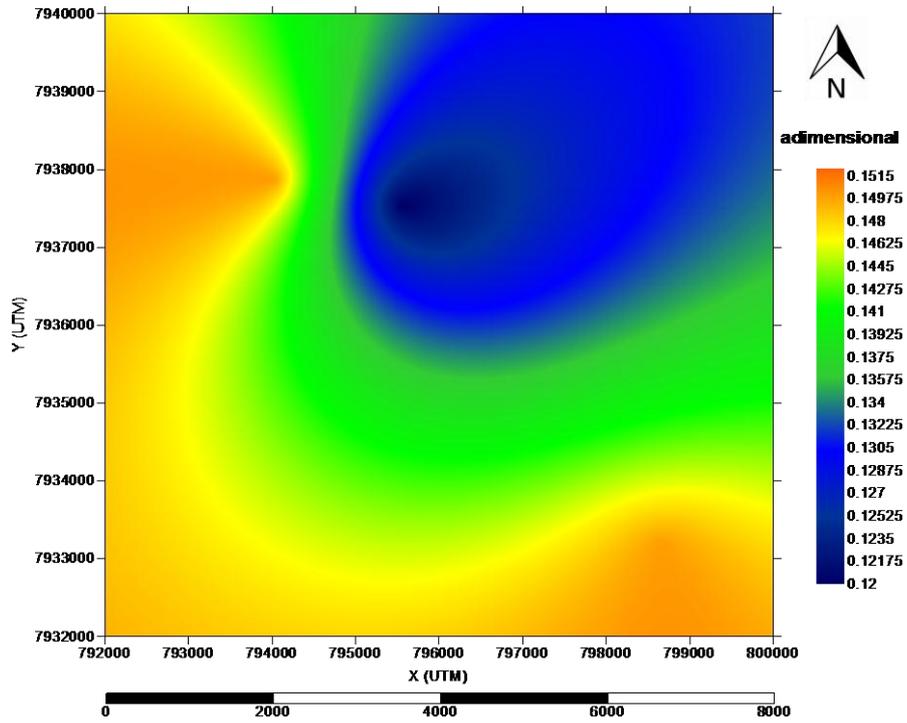
Fonte – Dados de entrada referentes aos poços de exploração, fornecidos por Miranda (2012)

Os dados do aquífero, tais como: coordenadas, condutividade hidráulica nas direções X e Y, rendimento específico, cota do terreno, cota base do aquífero e porosidade efetiva são conhecidas nos 62500 pontos interpolados, apresentados nas Figuras 19, 20, 21 e 22 respectivamente. Estes dados foram obtidos das pesquisas de Segantini (2010), que interpolou resultados de campo. Os mesmos dados foram utilizados para alimentar o modelo hidrodinâmico desenvolvido em Miranda (2012), para o aquífero Bauru sotoposto à cidade de Araguari. Os dados de carga hidráulica e espessura do aquífero foram obtidos do trabalho de Miranda (2012) que simulou o sistema de poços utilizado pela concessionária local de água, até que se atingisse o regime quase estacionário. A partir destas distribuições de carga hidráulica, rendimento específico e do campo de condutividades hidráulicas, foram obtidos os vetores de velocidade de percolação. Conforme já foi explicitado, as velocidades são fundamentais para a equação de advecção-dispersão, uma vez que estabelecem não somente o transporte advectivo, mas também interferem no cálculo dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica.



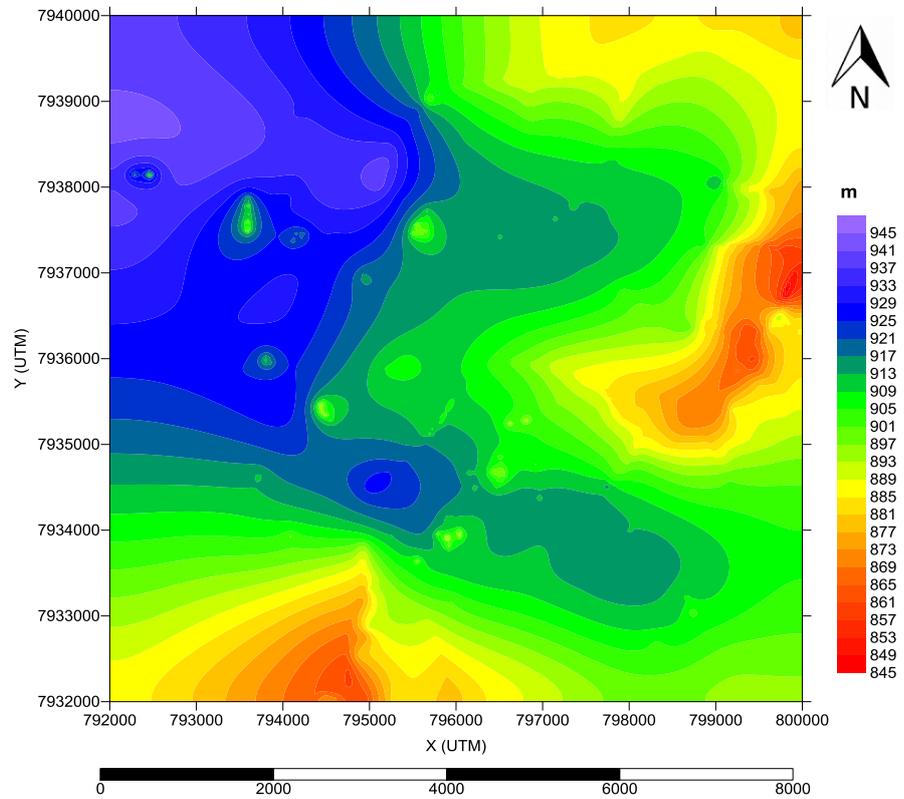
Fonte – Elaborada pelo autor com os dados fornecidos por Segantini (2010) e Miranda (2012)

Figura 20 – Rendimento Específico (S_y)



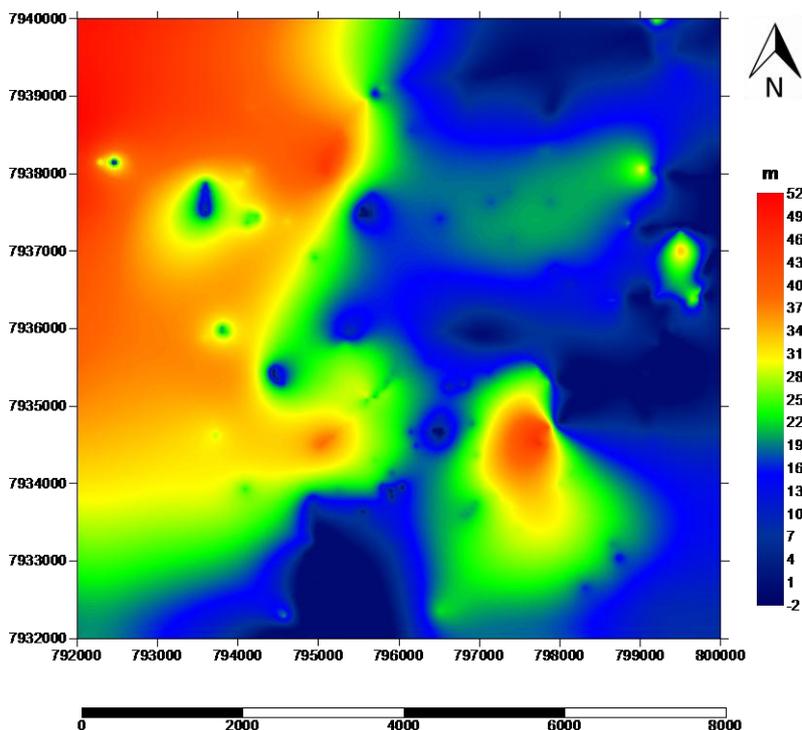
Fonte – Elaborada pelo autor com os dados fornecidos por Segantini (2010)

Figura 21 – Carga Hidráulica (h)



Fonte – Elaborada pelo autor com os dados fornecidos por Miranda (2012)

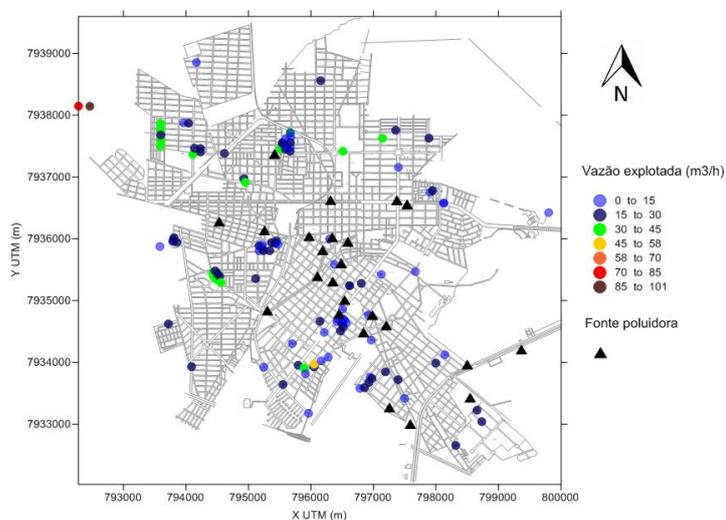
Figura 22 – Espessura Saturada do aquífero (B')



Fonte – Elaborada pelo autor com os dados fornecidos por Miranda (2012), dado pela diferença entre os valores da carga hidráulica e cota de base

Para imposição das fontes poluidoras, foram tomadas as coordenadas referentes à localização de postos de gasolina da cidade de Araguari. A distribuição destas fontes de injeção de poluentes, bem como dos poços e suas respectivas vazões de exploração, estão apresentadas na Figura 23.

Figura 23 – Distribuição das vazões exploradas e dos pontos de injeção de poluentes



Fonte – Elaborada pelo autor

Alguns parâmetros utilizados na equação advecção-dispersão não foram encontrados na literatura para o aquífero em questão, visto que não foram realizados levantamentos de campo para obtenção desses parâmetros para o aquífero Bauru na região de Araguari/MG. Em decorrência disto, estes dados tiveram que ser arbitrados para que se pudessem realizar as simulações. Por isto, embora os campos hidrogeológicos e de velocidade sejam representativos para o local, os campos de concentração simulados são hipotéticos.

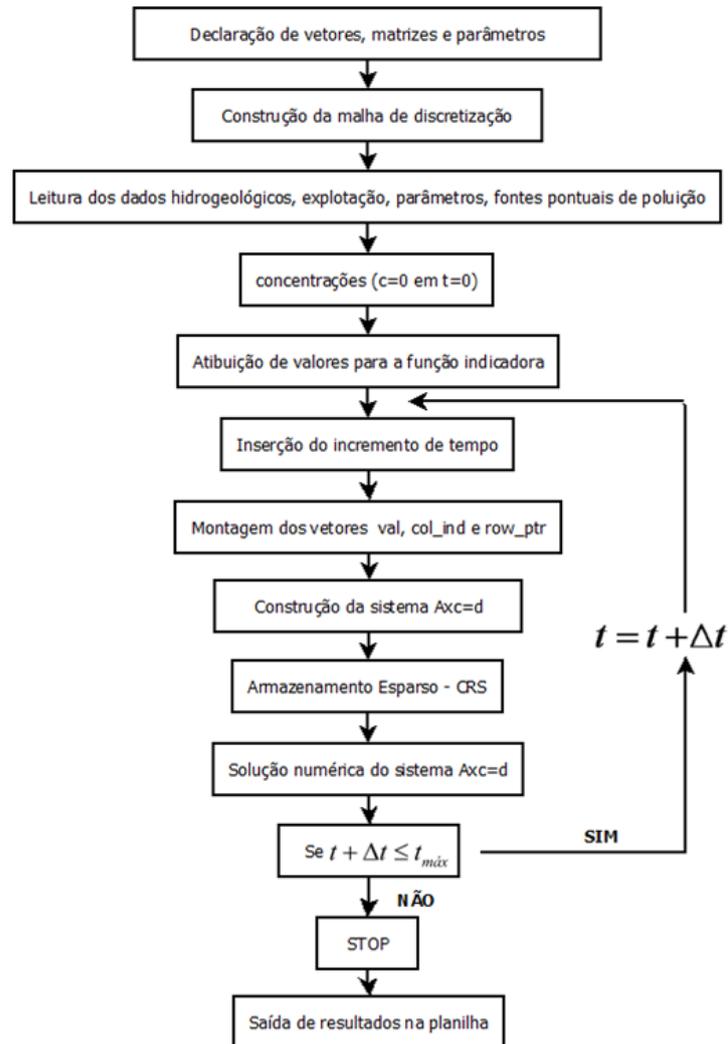
Dentre os parâmetros que foram adotados, citam-se: parâmetros multiplicadores para os coeficientes de dispersividade longitudinal (ϕ_L) e transversal (ϕ_T), coeficiente de adsorção (k_d) e de decaimento de primeira ordem (k'), além da porosidade do aquífero (n).

Uma vez definidas tanto as coordenadas quanto as informações básicas para análise da área de estudo, foram calculadas as velocidades de percolação (nas direções x e y) pela Lei de Darcy, as dispersividades hidrodinâmicas e as concentrações de poluentes em todos os pontos da malha de discretização. Para tanto, foi utilizada a equação advecção-dispersão discretizada pelo Método de Diferenças Finitas, com esquema temporal semi-implícito de Crank Nicolson.

Todos os dados calculados foram organizados em uma planilha eletrônica, também dentro do ambiente do Excel. No *software Surfer10*, foram mapeadas as plumas de poluição.

A Figura 24 ilustra o fluxograma geral do código que soluciona os campos de dispersão de poluentes no aquífero. A listagem do código completo é apresentada no Apêndice B.

Figura 24 - Fluxograma do algoritmo para solução em regime de escoamento permanente e transporte de poluentes em regime transiente



Fonte – Elaborada pelo autor

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

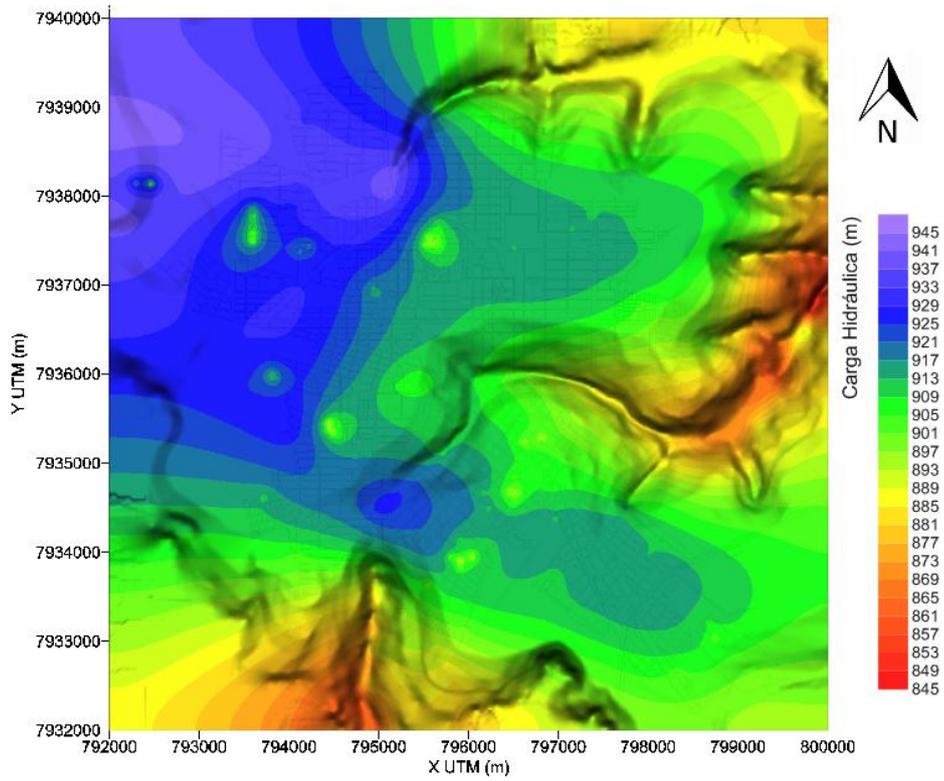
Neste estudo utilizou-se um modelo euleriano baseado na aplicação da equação advecção-dispersão em todo o domínio, bem como um modelo lagrangeano auxiliar para estimativa das dispersividades do aquífero. Estes dois modelos buscaram simular a distribuição espaço/temporal da concentração de poluentes em águas subterrâneas, introduzido através de fontes pontuais. A simulação foi realizada para o aquífero livre Bauru, subjacente à cidade de Araguari-MG.

Os resultados aqui apresentados referem-se a simulações hipotéticas em condições de regime de escoamento permanente e regime de transporte transiente para o poluente.

Durante a simulação, a carga hidráulica foi mantida constante, resultando em velocidades também invariáveis. Estes campos hidrodinâmicos basearam-se nos valores simulados por Miranda (2012), Alamy Filho, Miranda e Salla (2013), até que fosse atingido o regime quase estacionário. Em decorrência disto, também foi utilizada a mesma malha de discretização destes autores. Assim, a região de 8 x 8 km foi discretizada por uma malha cartesiana de 250 x 250 nós, perfazendo espaçamentos aproximados de 32 m entre os nós.

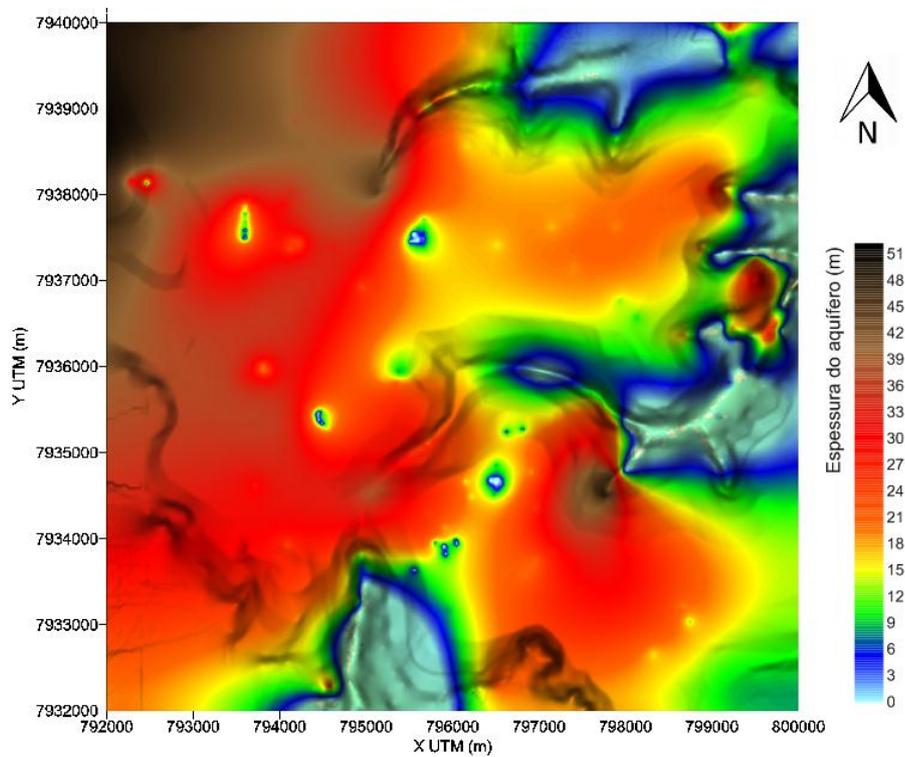
As Figuras 25 e 26 ilustram a distribuição da carga hidráulica e da espessura saturada do aquífero plotadas sobre um mapa de relevo.

Figura 25 – Distribuição da superfície freática sob o relevo da cidade



Fonte: Elaborada pelo autor

Figura 26 – Distribuição da espessura do aquífero sob o relevo da cidade



Fonte: Elaborada pelo autor

4.1 SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE UM POLUENTE GENÉRICO INTRODUZIDO NO AQUIFERO POR FONTES PONTUAIS

O modelo matemático utilizado neste trabalho relaciona, na equação de advecção-dispersão, variáveis que indicam o transporte advectivo da pluma (campo de velocidades V_x e V_y), com variáveis difusivas que indicam o transporte sem direção preferencial (coeficientes de dispersão hidrodinâmica D_x e D_y). Uma análise mais detalhada, não só da equação diferencial governante, mas também das equações auxiliares, permite identificar seis parâmetros básicos vinculados ao aquífero e ao sistema poluente/aquífero:

- k' = coeficiente de decaimento de primeira ordem do poluente [T^{-1}];
- k_d = coeficiente de partição (ou de adsorção) [adimensional];
- ϕ_L = parâmetro que exprime a relação entre a dispersividade longitudinal (α_L) e o comprimento da pluma (L_p) [adimensional];
- ϕ_T = parâmetro que exprime a relação entre a dispersividade transversal (α_T) e a dispersividade longitudinal (α_L) [adimensional];
- ρ_d = densidade do meio poroso seco, que é igual à relação entre a massa específica do meio poroso seco e a massa específica da água [adimensional];
- n = porosidade do aquífero [adimensional].

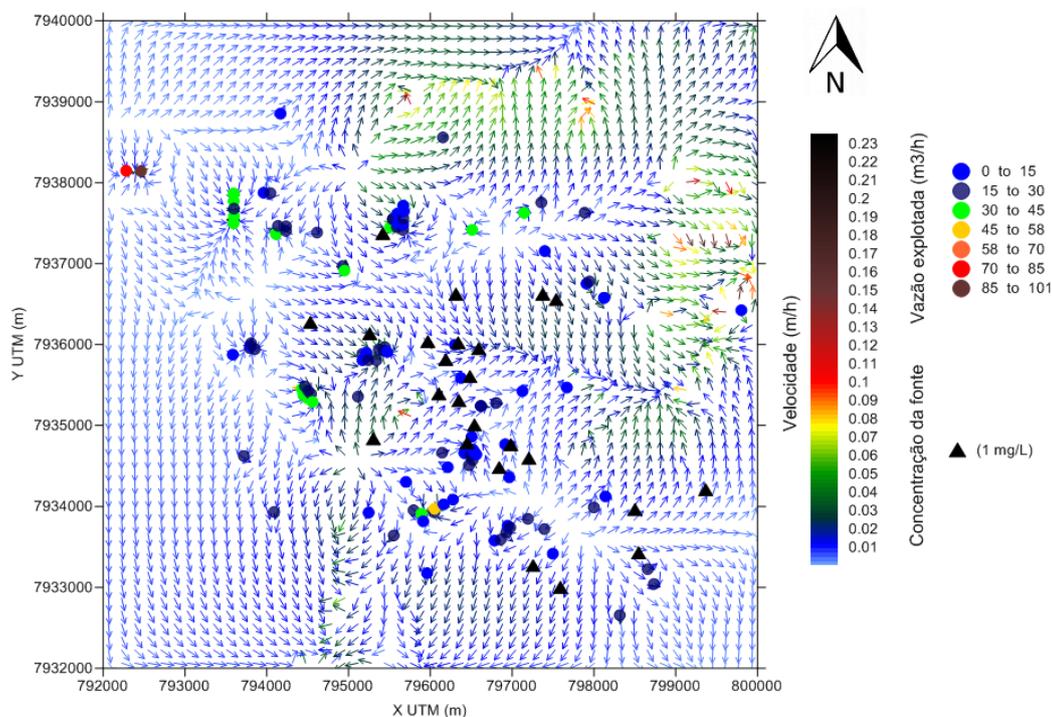
Estes seis parâmetros são considerados primários, uma vez que não são dependentes de outros, ainda que seus valores vinculem-se apenas a características intrínsecas dos meios contínuo (aquífero) e/ou disperso (substância transportada pelo escoamento subterrâneo). Levando em conta situações de campo, pelo menos os parâmetros k' , k_d , ϕ_L , ϕ_T são de difícil determinação prática. No caso, concentrações de um determinado poluente são levantadas em amostras coletadas em uma rede de piezômetros. As simulações atribuem

valores aos parâmetros que conduzam aos menores resíduos entre as concentrações estimadas pelo modelo e as concentrações efetivamente medidas em campo. Uma das grandes dificuldades da calibração em condições de campo é saber exatamente quais são as taxas de injeção do poluente, as quais apenas podem ser controladas em escalas experimentais reduzidas. Em decorrência destas dificuldades, tais parâmetros raramente são previamente conhecidos nos aquíferos, sendo também esta a realidade do aquífero Bauru na região analisada.

As simulações apresentadas neste Capítulo 4 estão vinculadas a valores genéricos e impostos para os parâmetros k' , k_d , ϕ_L , ϕ_T , ρ_d e n . Em primeiro plano, pretende-se visualizar a resposta do modelo no que se refere à dispersão da pluma. Por isto foram trabalhados alguns cenários para estas propriedades.

Para fins de aplicação, foram consideradas 24 fontes emissoras de poluentes disseminadas na malha urbana, como se observa na Figura 27. Nesta Figura também são representados os campos de velocidade média de percolação.

Figura 27 – Fontes de poluente, vazões explotadas e vetores de velocidade de percolação



Fonte – Elaborada pelo autor

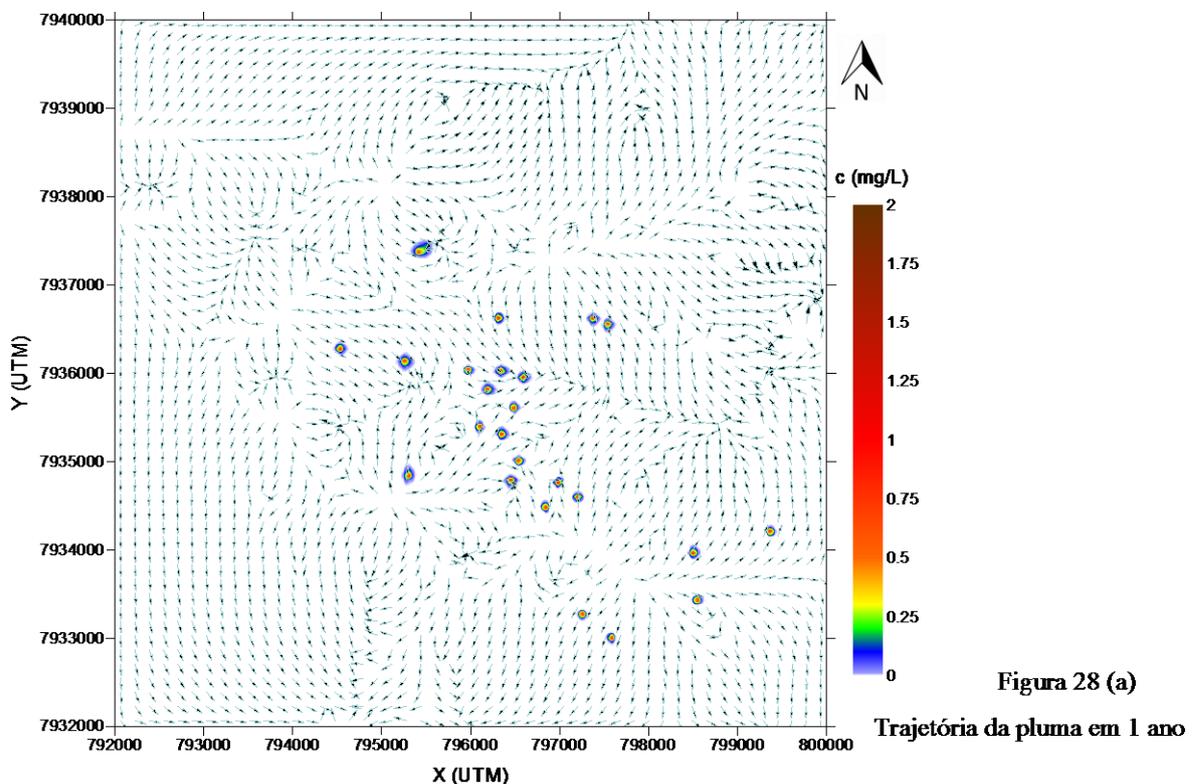
Para efeitos de simulação, as fontes poluidoras introduziram uma concentração de 1 mg/L de um poluente genérico, sendo este valor mantido constante durante todo o horizonte de cálculo. Em todos os casos, as concentrações iniciais foram consideradas nulas ao longo de todo o domínio de cálculo.

Os contornos de concentração traçados nas Figuras 28.a, 28.b, 28.c, 28.d, 28.e, 28.f., ao longo de um horizonte de sete anos, mostram a progressão de uma pluma poluente que emana de tais fontes de poluição. No caso, foi imposto o seguinte cenário: $k' = 10^{-3} \text{ h}^{-1}$, $k_d = 10^{-3}$, $\phi_L = 0,1$, $\phi_T = 0,1$, $\rho_d = 2,0$ e $n = 0,25$.

Observa-se, na Figura 28, o efeito da dispersão de poluentes, ocorrendo o espalhamento do mesmo, ao longo dos anos simulados. Tanto o formato quanto o direcionamento da pluma, possuem uma expansão previsível influenciada pela direção e sentido do fluxo subterrâneo e pela presença de poços, os quais atraem para si os vetores de velocidade.

Figura 28 – Evolução espacial e temporal das plumas poluentes para o cenário com:

$$k' = 10^{-3} \text{ h}^{-1}, k_d = 10^{-3}, \phi_L = 0,1, \phi_T = 0,1, \rho_d = 2,0 \text{ e } n = 0,25.$$



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

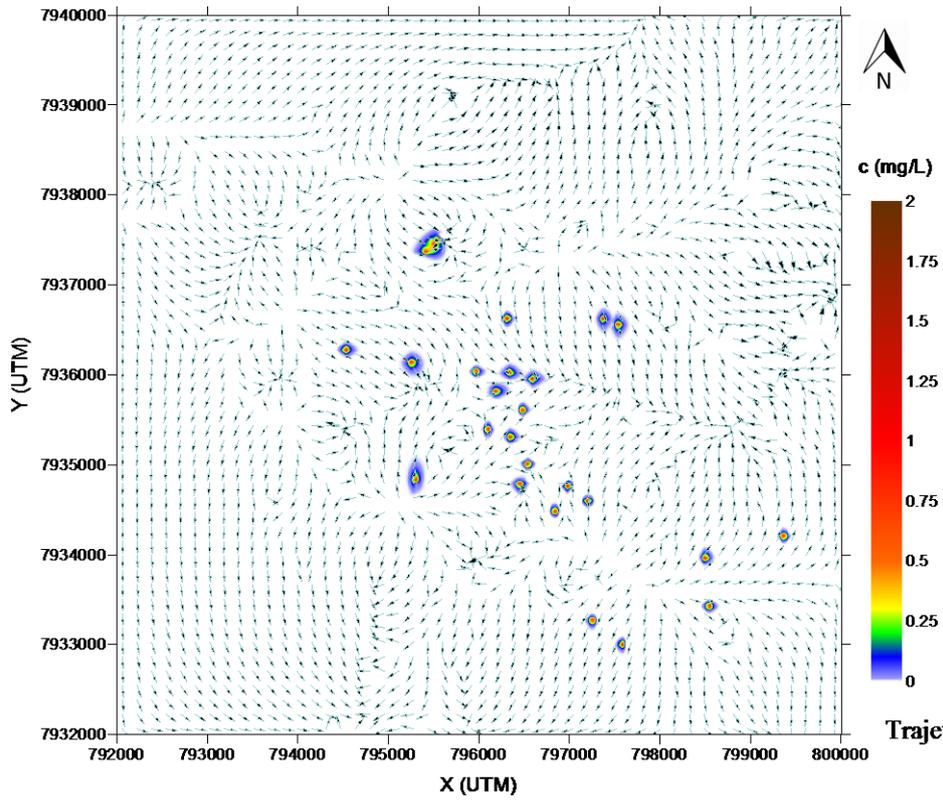


Figura 28 (b)
Trajetória da pluma em 2 anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

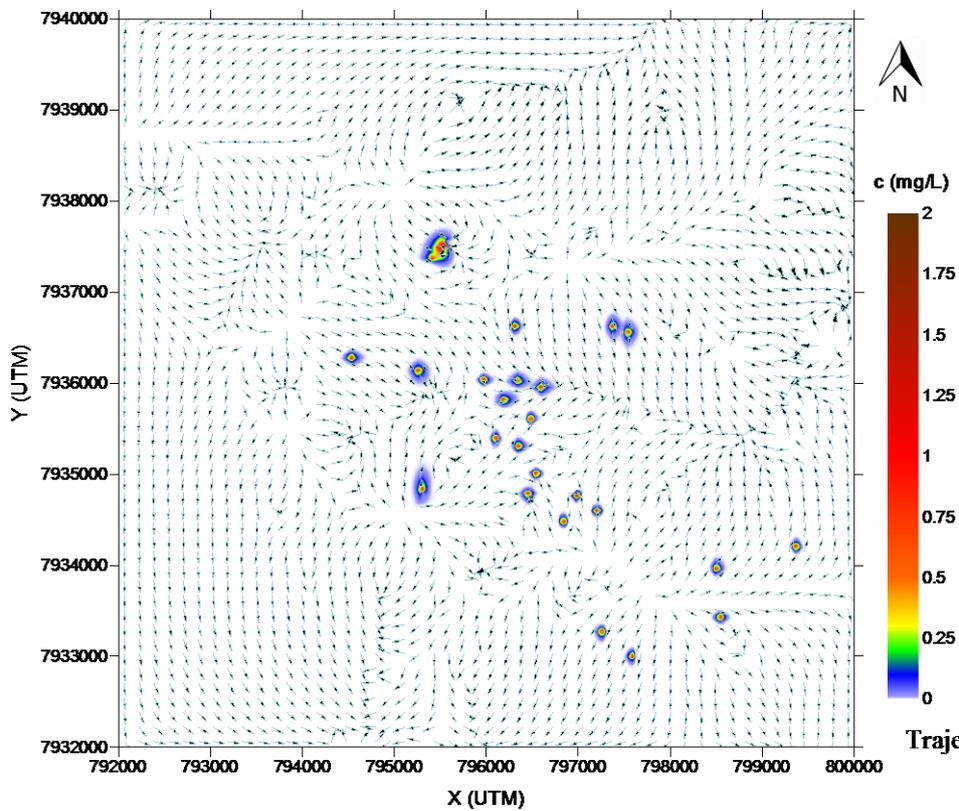


Figura 28 (c)
Trajetória da pluma em 3 anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

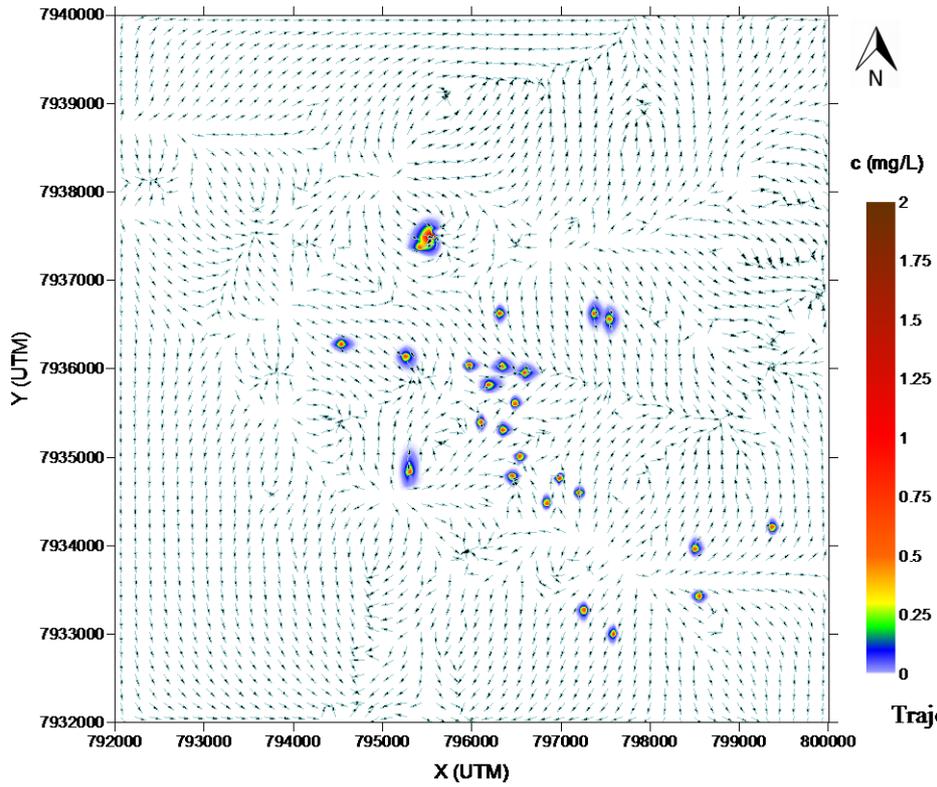


Figura 28 (d)

Trajétória da pluma em 4 anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

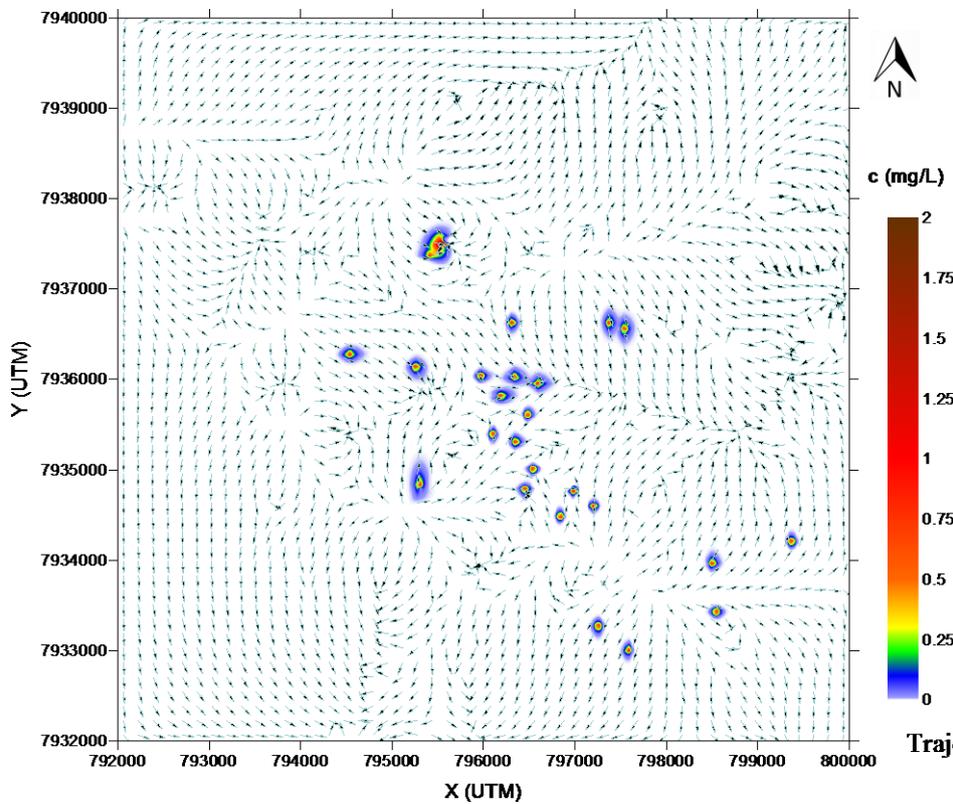


Figura 28 (e)

Trajétória da pluma em 5 anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

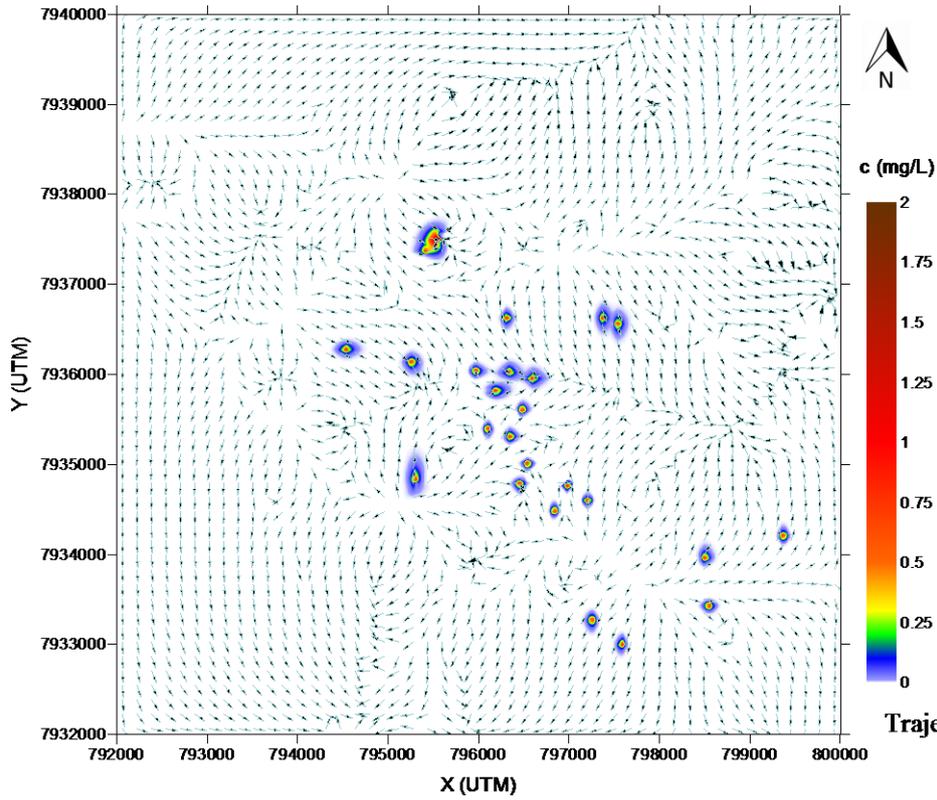


Figura 28 (f)

Trajетória da pluma em 6 anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

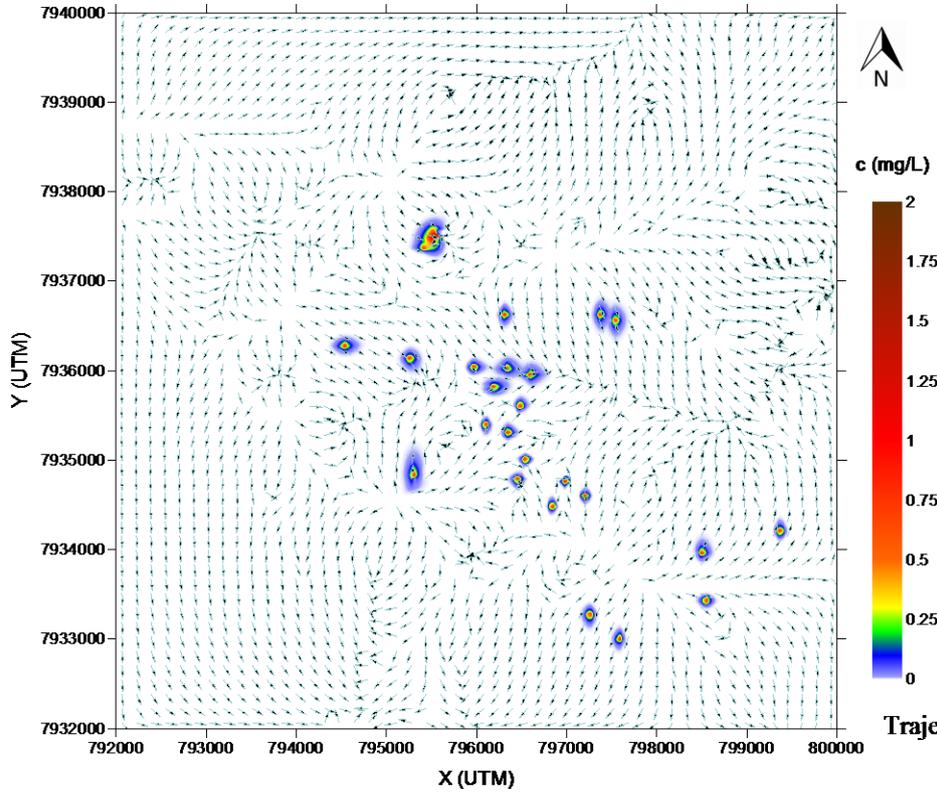


Figura 28 (g)

Trajетória da pluma em 7 anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

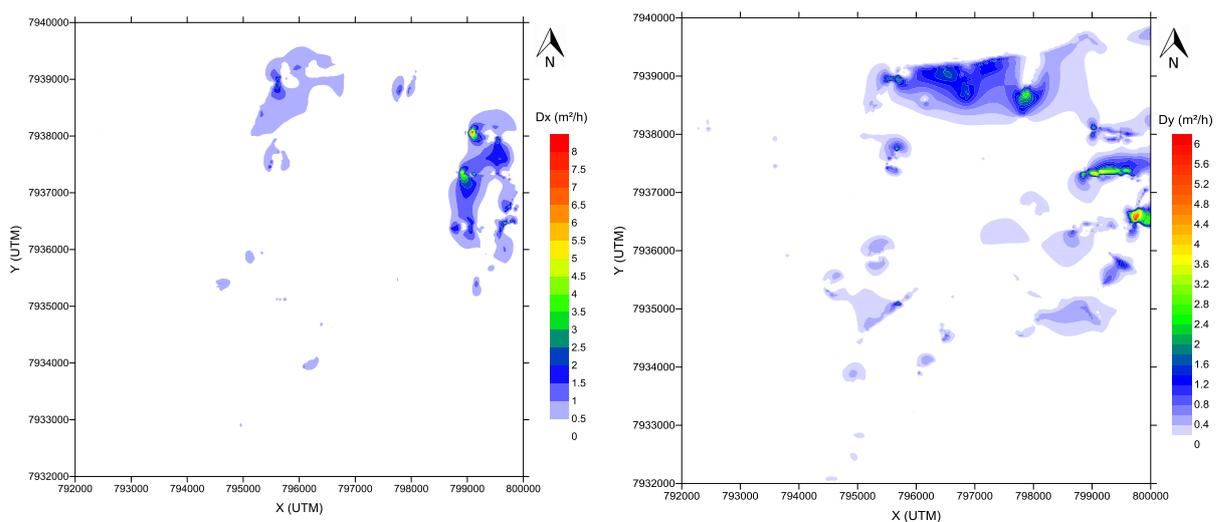
Apesar de a pluma poluente ser influenciada pelo fluxo subterrâneo preferencial, devem-se considerar os poços de exploração que estão presentes na área de estudo, os quais encaminham o fluxo de água do aquífero em direção ao poço, justamente pela necessidade da água fluir em direção ao poço para repor a que está sendo extraída. Sendo assim, podem-se observar fontes poluentes que se encontram próximas e distantes dos poços, destacando-se a tendência de acúmulo de poluentes dentro dos cones de depressão.

Análises mais detalhadas das plumas evidenciam estas tendências. Como os coeficientes de dispersão hidrodinâmica (D_x e D_y) são atrelados ao comprimento da pluma (L_p), seus valores também sofrem variações temporais. Para esta simulação, as alterações nos campos de dispersão hidrodinâmica são ilustradas pelo conjunto de Figuras 29.

Os resultados discriminados na Figura 29 confirmam que os maiores campos de dispersão hidrodinâmica localizam-se nos setores norte e nordeste da região de estudo, onde as velocidades de percolação assumem magnitudes mais elevadas. É interessante salientar que estas velocidades praticamente não são afetadas pela exploração de água, haja vista que não há concentração de poços nestes setores.

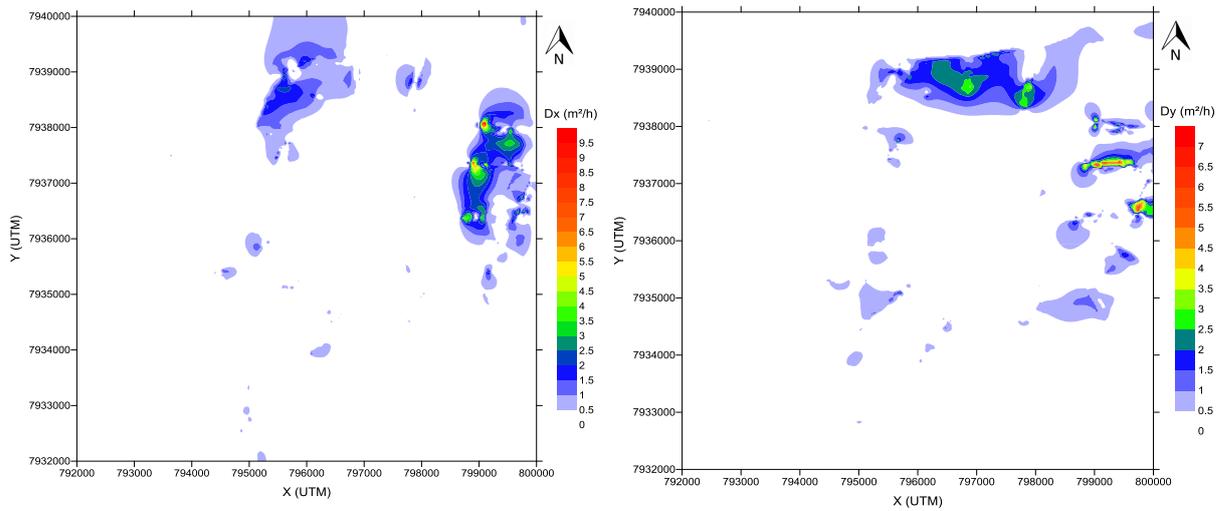
Figura 29 – Variações nos campos de dispersão hidrodinâmica para os diferentes instantes de simulação

Figura 29(a) t= 6 meses



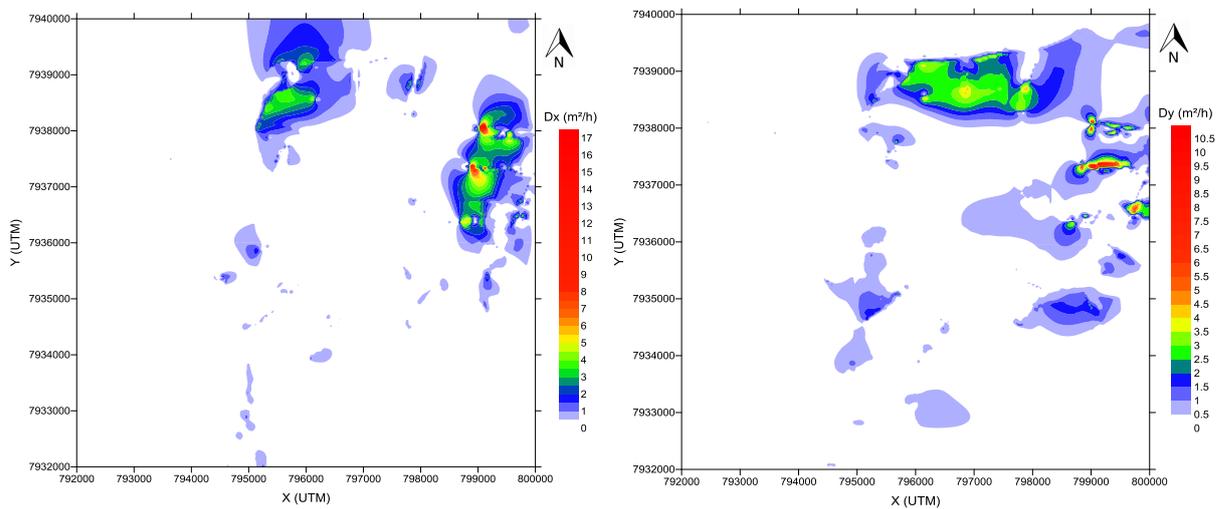
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 29(b) t= 1 ano



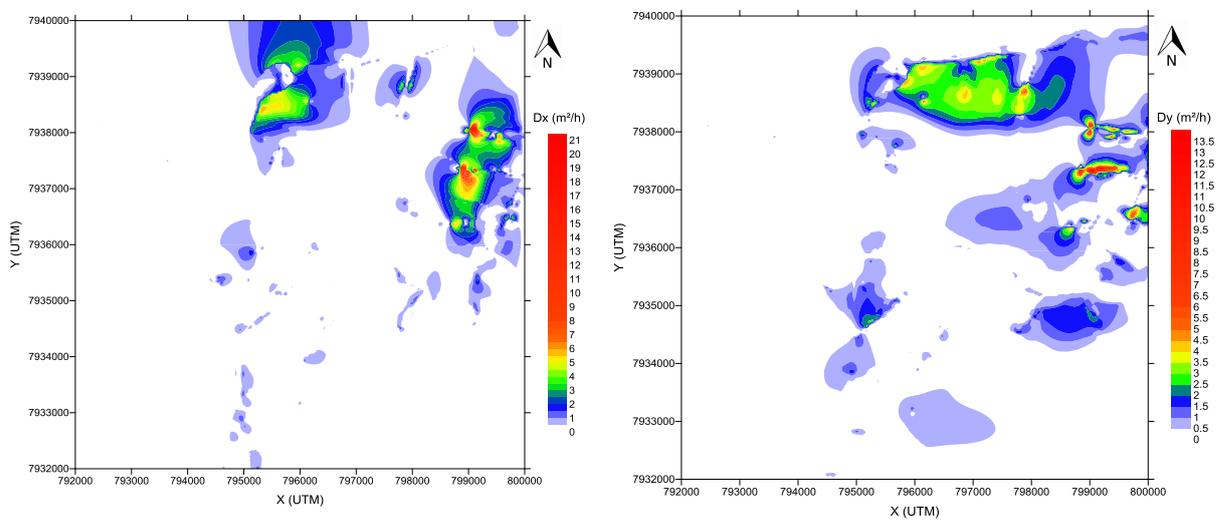
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 29(c) t= 2 anos



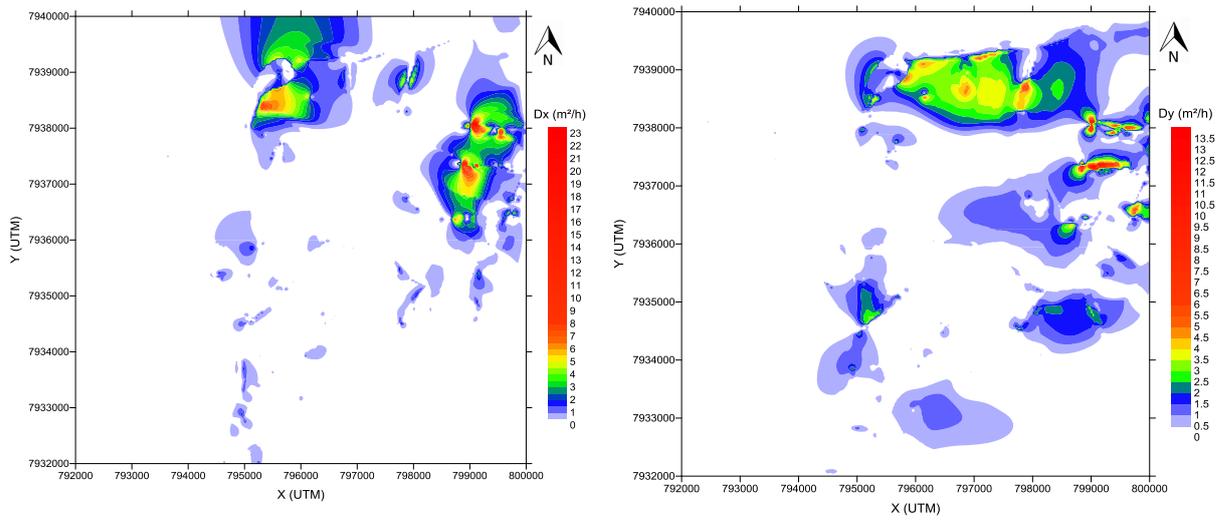
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 29(d) t= 3 anos



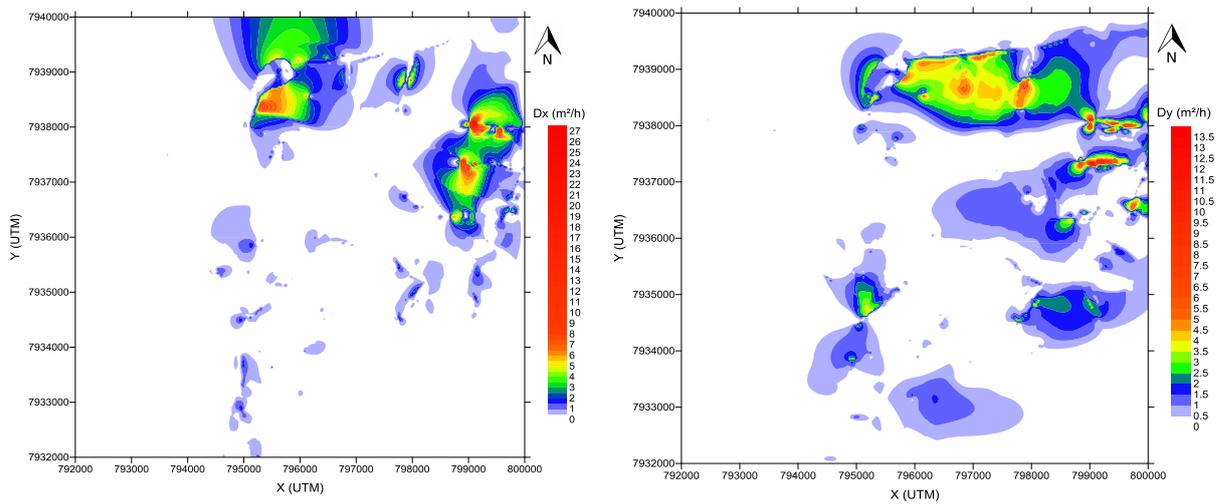
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 29(e) t= 4 anos



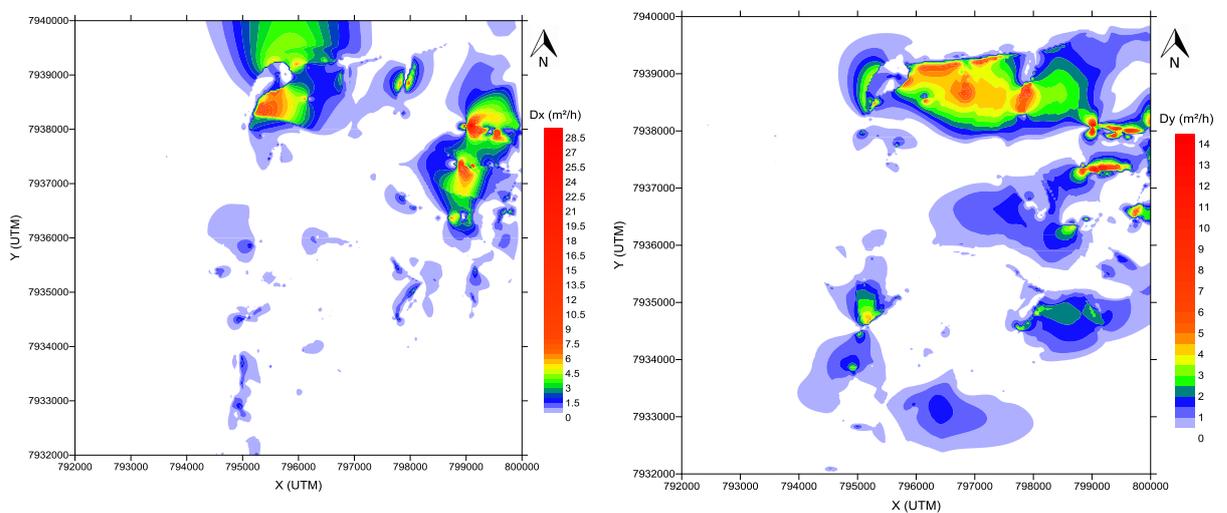
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 29(f) t= 5 anos



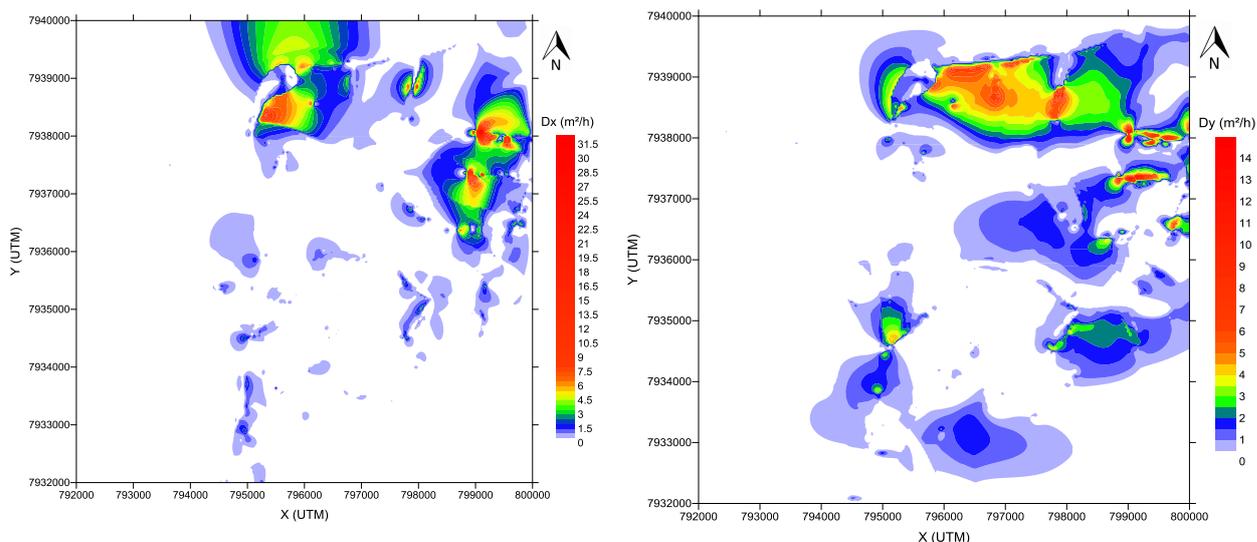
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 29(g) t= 6 anos



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

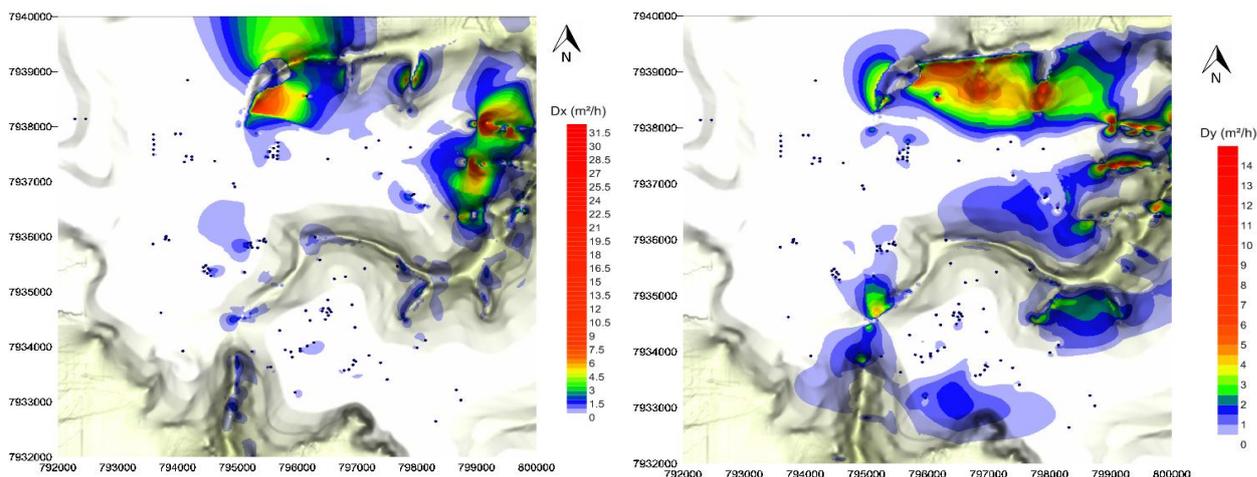
Figura 29(h) t= 7 anos



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Quando os campos de dispersão hidrodinâmica são sobrepostos ao relevo da cidade, na Figura 30, percebe-se que os maiores valores ocorrem justamente na convergência para os talwegues e na vizinhança das baterias de poços, locais onde as velocidades são mais elevadas.

Figura 30 – Sobreposição dos campos de dispersão hidrodinâmica sobre o relevo local t= 7 anos



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Assim, considerando injeção de poluentes no setor central da cidade, o espalhamento da pluma apenas tende a ser mais pronunciado nas proximidades dos poços ou quando o poluente alcança regiões de vale.

Com intuito de verificar, com maior detalhe, os padrões assumidos pelas plumas poluentes, as próximas simulações trabalharam com dois cenários distintos para os parâmetros do modelo:

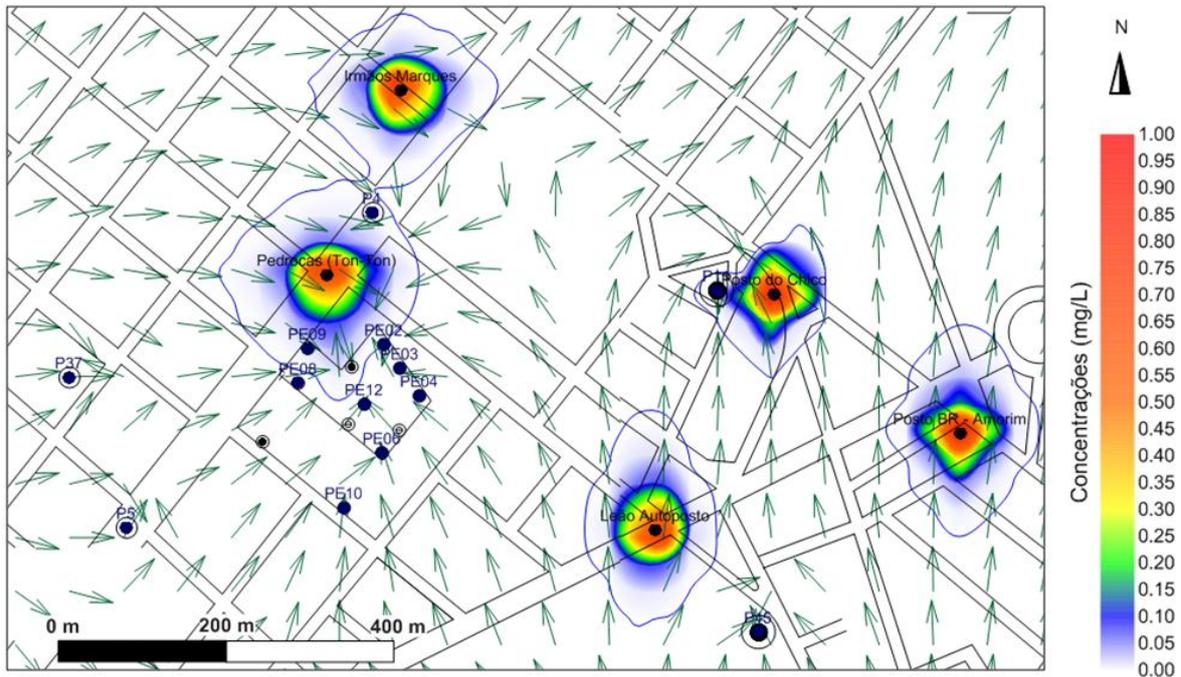
- *CENÁRIO 1*: $k' = 0,001 h^{-1}$; $k_d = 0,001$; $\phi_L = 0,1$; $\phi_T = 0,1$; $\rho_d = 2,0$; $n = 0,25$.
- *CENÁRIO 2*: $k' = 0,001 h^{-1}$; $k_d = 0$; $\phi_L = 1$; $\phi_T = 0,1$; $\rho_d = 1,8$; $n = 0,25$.

No primeiro cenário, foram mantidas as mesmas condições que resultaram nas plumas da Figura 28. No segundo cenário, anulou-se o efeito da adsorção ($k_d = 0$) e ampliaram-se as dispersividades, igualando a dispersividade longitudinal com o comprimento da pluma ($\phi_L = 1$) e mantendo a mesma relação entre as dispersividades transversal e longitudinal ($\phi_T = 0,1$).

Ainda, foi introduzida uma pequena diferença entre a densidade do meio poroso seco: de $\rho_d = 2,0$, no cenário 1, para $\rho_d = 1,8$, no cenário 2. Em ambos os casos, as simulações foram conduzidas até um horizonte de 10 anos ou até que fosse atingida uma concentração máxima de 20 mg/L, 20 vezes maior do que os valores prescritos para as fontes pontuais. Este acúmulo de concentrações tende a ocorrer em locais onde a superfície freática forma fossos, com vetores de velocidade radialmente convergentes, como nos cones de depressão induzidos pelo bombeamento de poços.

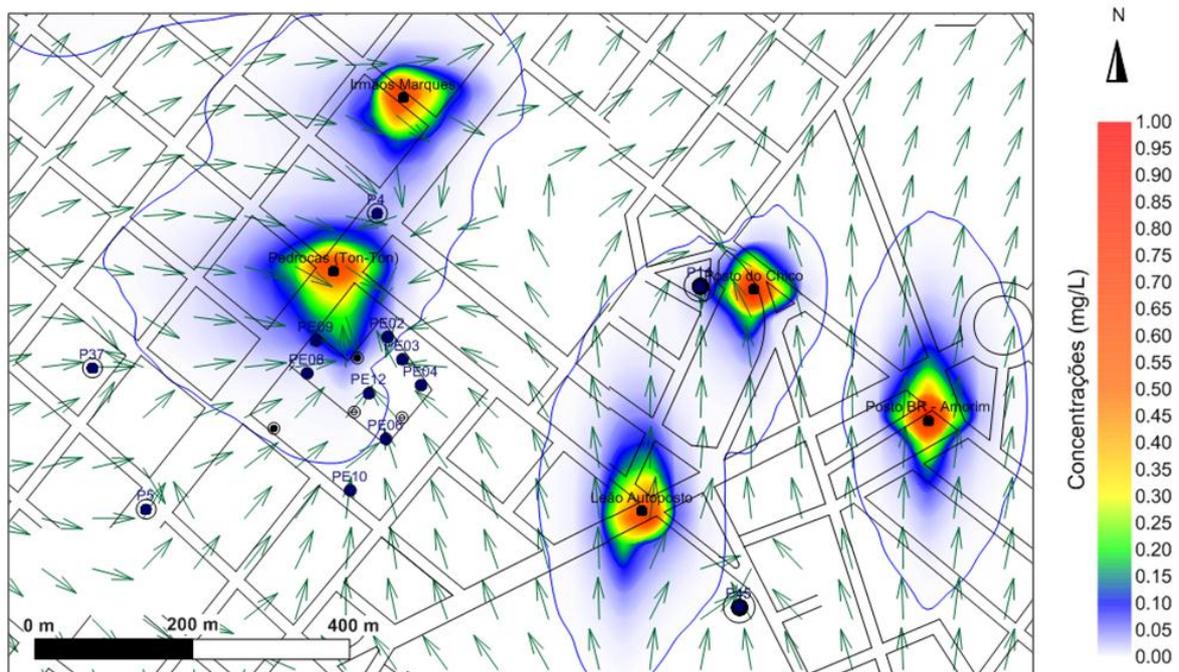
Nas Figuras 31 a 35 ilustram-se as plumas para os dois cenários, em setores distintos da cidade, na vizinhança de poços isolados e de conjuntos de poços concentrados em um terreno (bateria de poços). Nestas figuras, as linhas azuis que abrangem as plumas representam a envoltória de 1 $\mu\text{g/L}$ (micrograma por litro).

Figura 31 – Distribuição de plumas na vizinhança da bateria de poços do Estadual e de outros poços isolados



CENÁRIO 1: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 7,98\text{ anos}$

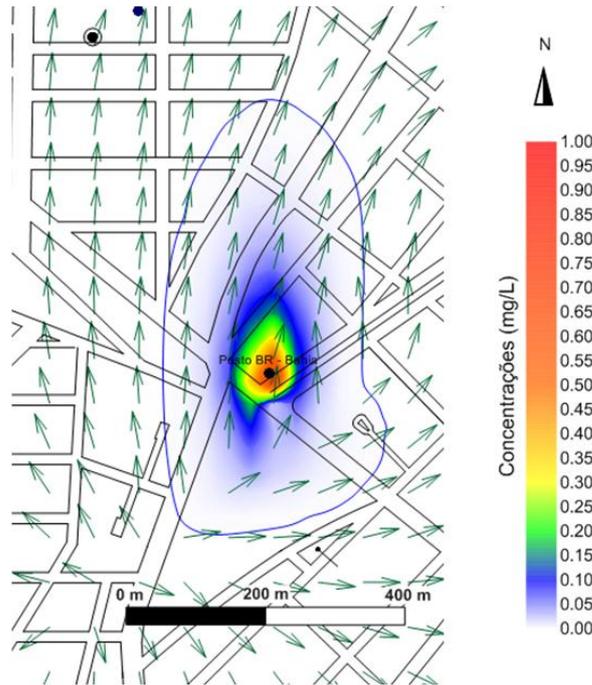


CENÁRIO 2: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 6,5\text{ anos}$

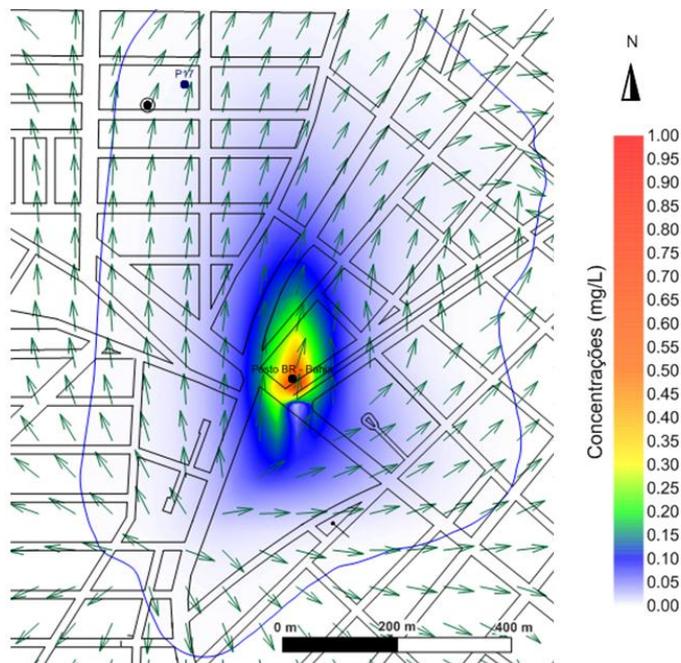
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 32 – Pluma isolada



CENÁRIO 1: $k'=0,001 \text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 7,98 \text{ anos}$

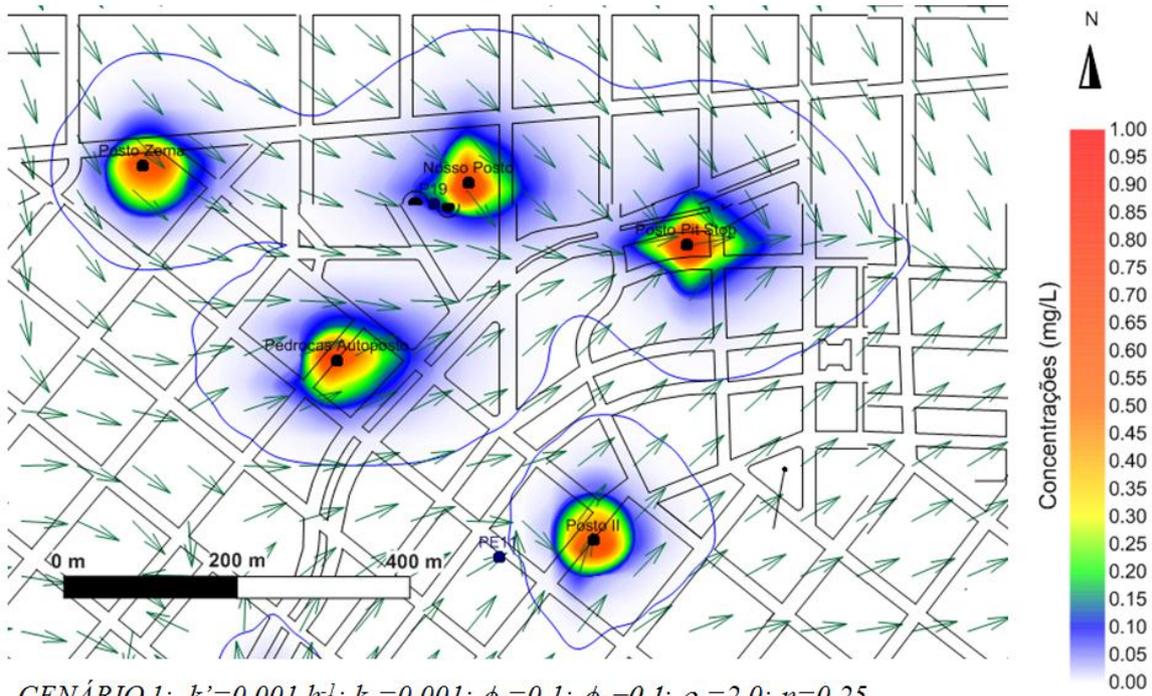


CENÁRIO 2: $k'=0,001 \text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 6,5 \text{ anos}$

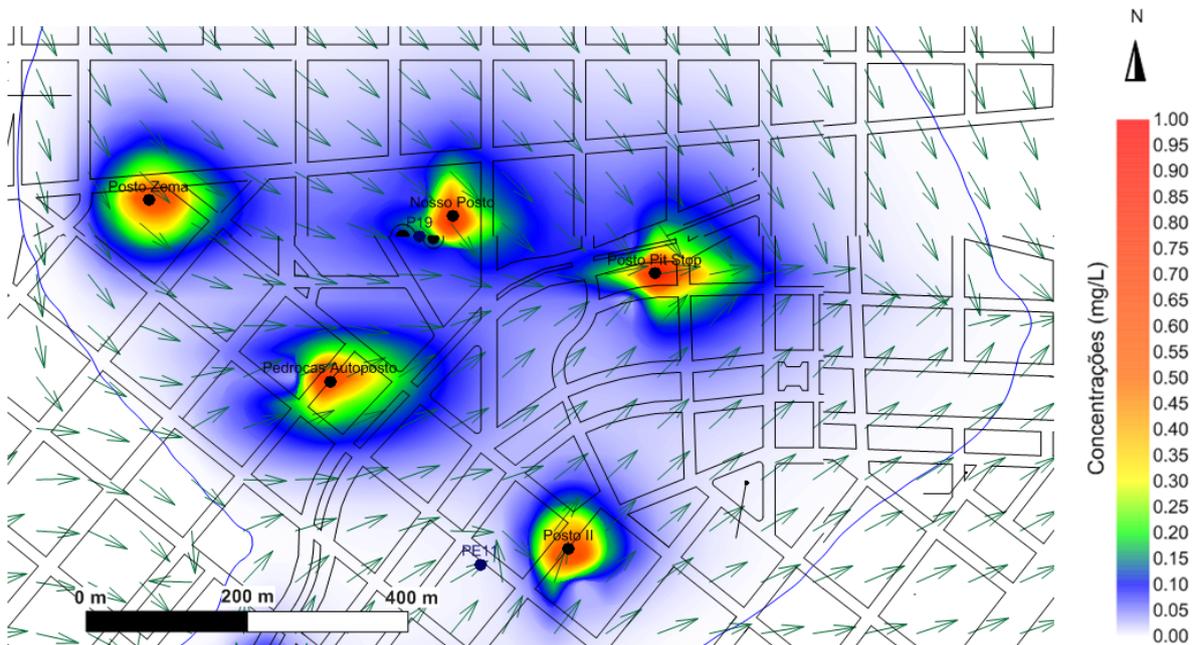
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 33 – Distribuição de plumas no setor central da cidade



CENÁRIO 1: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 7,98\text{ anos}$

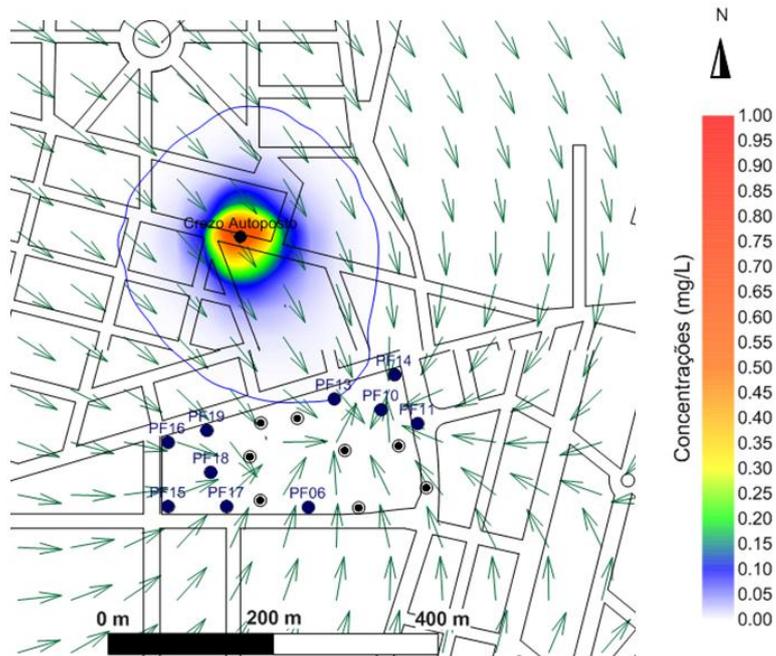


CENÁRIO 2: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 6,5\text{ anos}$

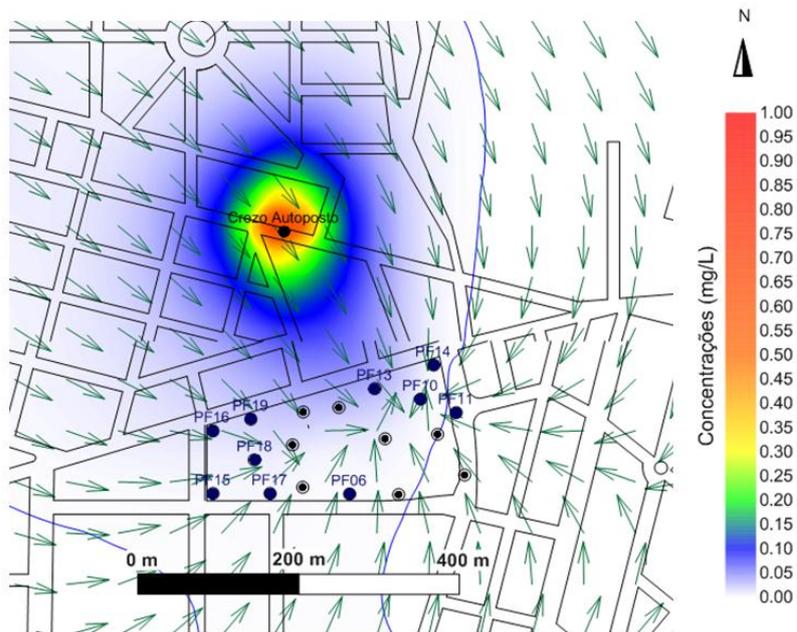
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 34 – Distribuição de plumas na vizinhança da bateria de poços de Fátima



CENÁRIO 1: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 7,98\text{ anos}$

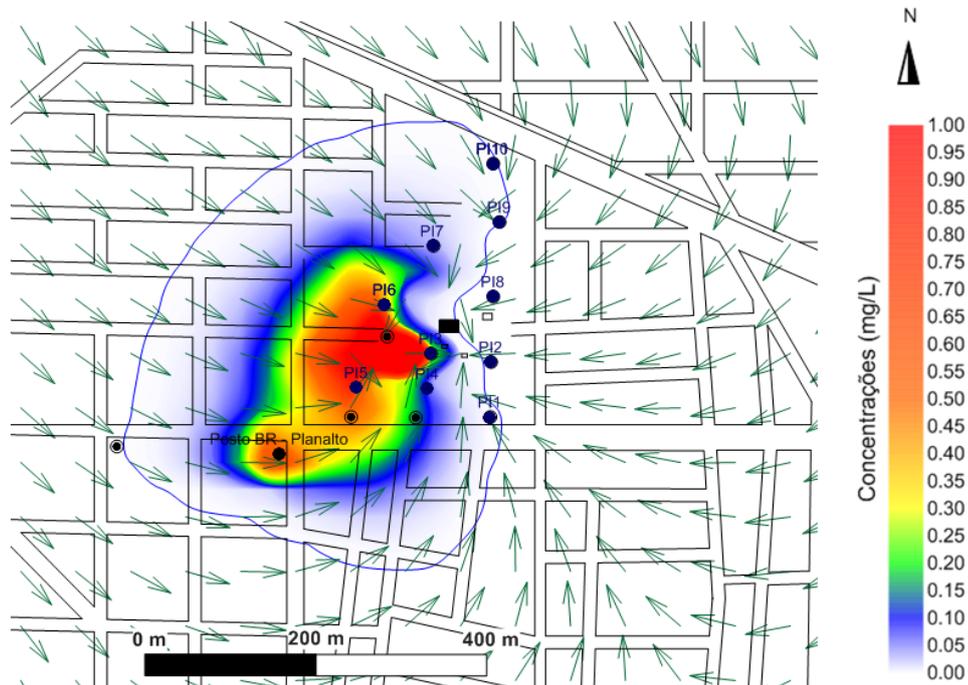


CENÁRIO 2: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 6,5\text{ anos}$

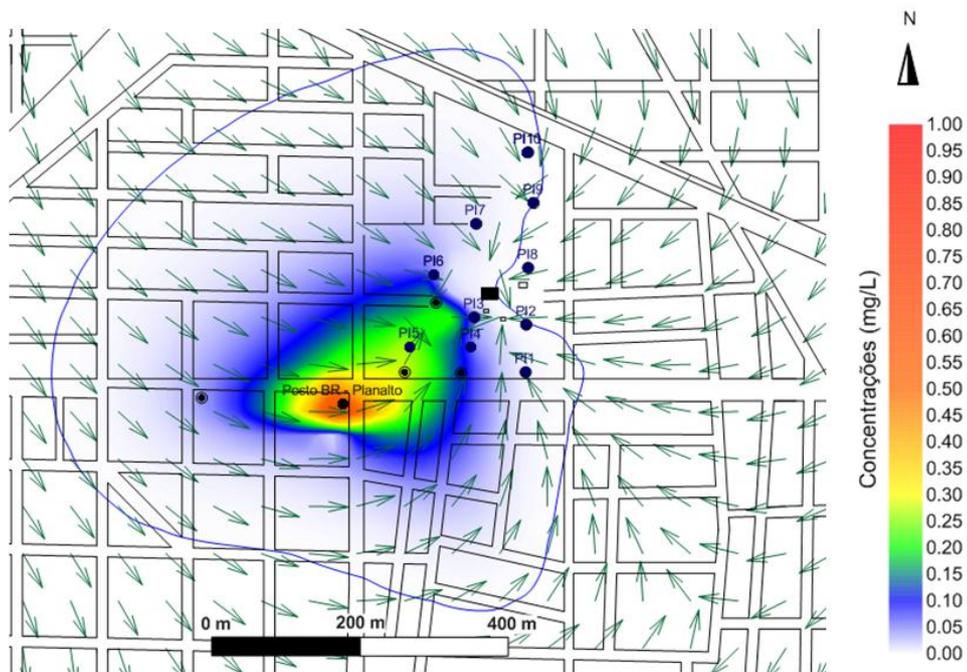
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 35 – Distribuição de plumas na vizinhança da bateria de poços do Independência



CENÁRIO 1: $k'=0,001 h^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 7,98$ anos



CENÁRIO 2: $k'=0,001 h^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 6,5$ anos

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

De uma forma geral, nota-se que ao se anular a adsorção e aumentar as dispersividades do meio, condições vigentes no cenário 2, as plumas tendem a ampliar seu alcance horizontal, avançando mais não somente na direção do fluxo subterrâneo, mas também em direções transversais a este fluxo. Este espalhamento mais acentuado da pluma chega a atingir setores onde há poços que retiram água para abastecimento. Este comportamento fica especialmente evidente nas Figuras 31, 34 e 35.

Na Figura 35, a proximidade da fonte poluidora da bateria de poços do bairro Independência tende a acelerar a chegada do poluente nos cones de depressão induzidos pela operação destes poços. Principalmente no cenário 1, no qual vigora a adsorção e as dispersividades são menores, a conformação mais contida da pluma tende a acumular poluentes dentro dos cones de depressão, setores onde a única forma de saída destas substâncias ocorre por reações de decaimento e pela extração de água pelos poços. Nestas regiões, o prosseguimento da simulação para horizontes de tempo superiores aos simulados, conduziria ao aumento progressivo das concentrações dentro dos cones. Isto, de certa forma, chama a atenção para um melhor tratamento do termo sumidouro G_2 , que modela a retirada de poluentes pelos poços. Em suma, o tratamento de G_2 , com o espalhamento das vazões para os nós e a atribuição de uma área de influência para a retirada do poluente, conforme preconizam as equações (81) e (82), deve ser objeto de estudos futuros mais detalhados. A despeito destes cenários hipotéticos, estes resultados chamam a atenção acerca da susceptibilidade dos poços da bateria do Independência aos riscos de poluição decorrentes da proximidade de um posto de combustíveis.

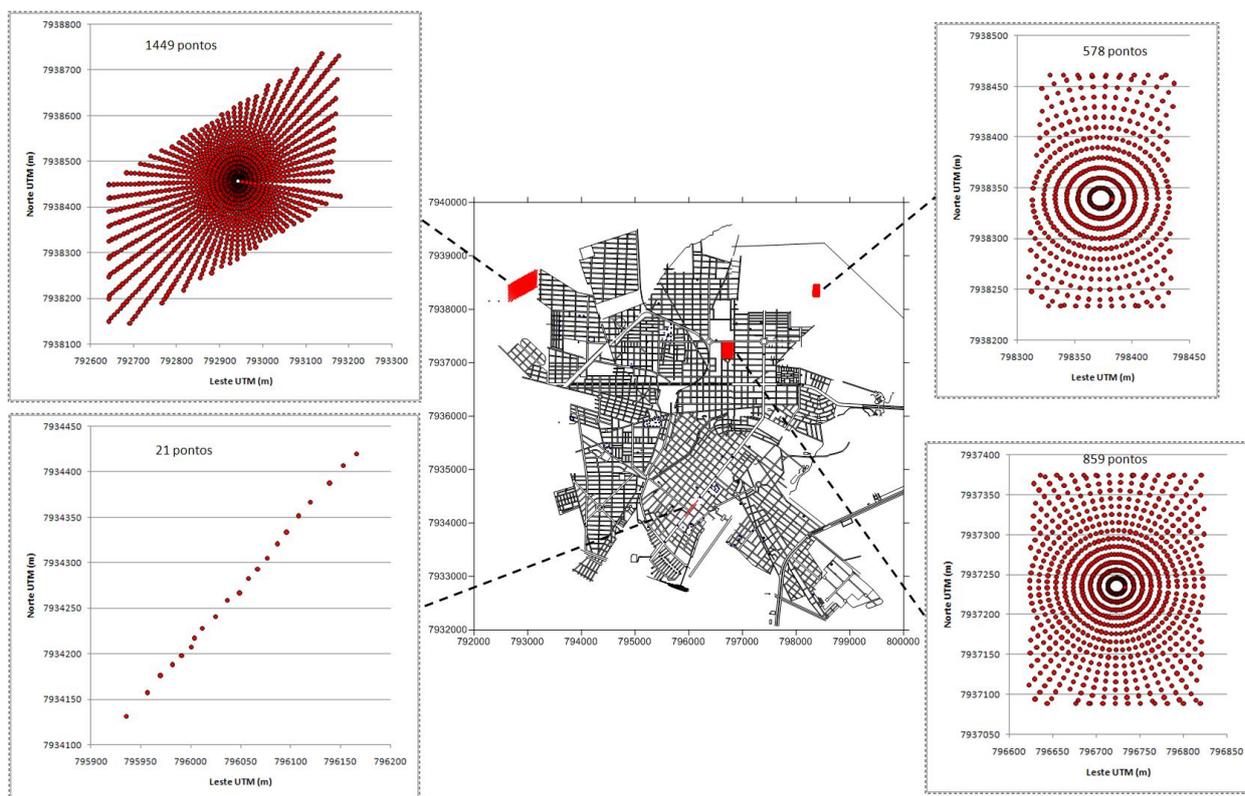
De uma forma geral, notou-se que os padrões das plumas simuladas foram condizentes com a teoria, destacando-se uma maior contenção nos casos em que a adsorção não foi desprezada e em que as dispersividades foram menores. Esta contenção, todavia, pode ser nociva nos casos em que há exploração de água nas proximidades das fontes poluidoras.

4.2 SIMULAÇÃO DA DISPERSÃO DE UM POLUENTE GENÉRICO INTRODUIDO NO AQUÍFERO POR FONTES NÃO PONTUAIS

O modelo adaptado nesta pesquisa trabalha com fontes poluidoras pontuais, que são alocadas pelas suas coordenadas cartesianas. A despeito disto, podem-se fazer

extrapolações para simular fontes difusas ou fontes lineares. No primeiro caso, podem ser representadas injeções espalhadas em áreas degradadas como lixões, cemitérios ou em zonas sujeitas a fertirrigação. No segundo caso, podem ser representados vazamentos em redes coletoras de esgotos, por exemplo. Esta adaptação no modelo consiste em polvilhar várias fontes pontuais dentro da área ou do alinhamento injetor. Para exemplificar isto, foram simuladas fontes difusas e lineares, alocadas hipoteticamente conforme a Figura 36.

Figura 36 – Fontes difusas e lineares utilizadas na simulação



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

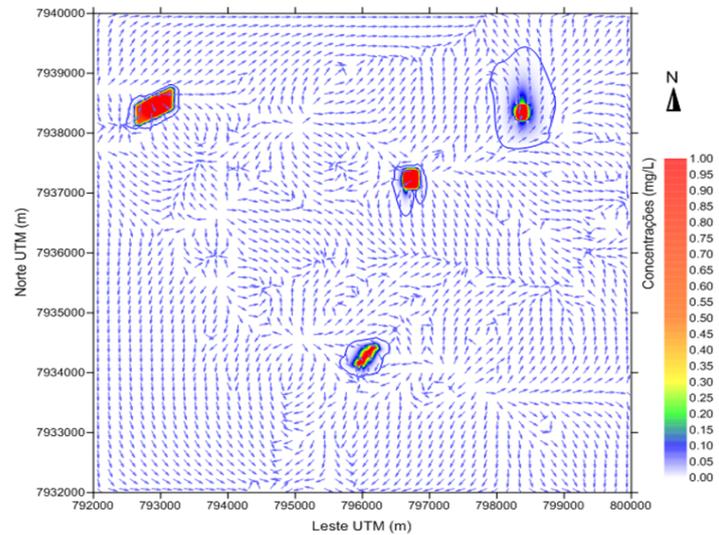
A Figura 37 representa plumas simuladas para dois diferentes cenários relativos aos seis parâmetros do modelo. Tais cenários correspondem a:

- *CENÁRIO 1*: $k' = 0,001 h^{-1}$; $k_d = 0,001$; $\phi_L = 1$; $\phi_T = 0,1$; $\rho_d = 1,8$; $n = 0,25$.
- *CENÁRIO 2*: $k' = 0 h^{-1}$; $k_d = 0$; $\phi_L = 0,1$; $\phi_T = 0,1$; $\rho_d = 2,0$; $n = 0,25$.

Em relação ao cenário 1, o cenário 2 desprezou as reações de decaimento do poluente, bem como o efeito da adsorção. Com isto, facilita-se a disseminação da pluma. Em contrapartida, o

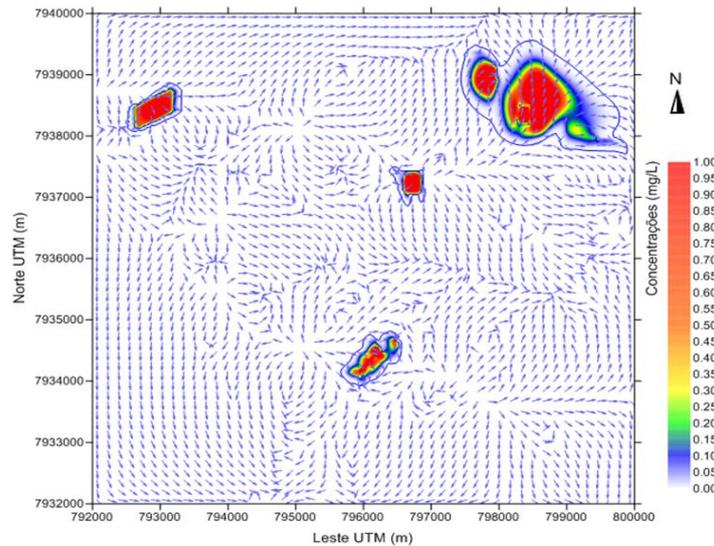
cenário 2 apresenta dispersividades menores do que as do cenário 1. Em todos os casos, foram impostas concentrações prescritas de 0,10 mg/L nos pontos das fontes difusas e de 1 mg/L nos pontos da fonte linear. Estes valores foram mantidos constantes durante todo o horizonte de simulação. A exemplo do item anterior, tal horizonte foi fixado em 10 anos ou até que a concentração máxima, em qualquer nó da malha, atingisse o valor de 20 mg/L. As linhas azuis que contêm as plumas representam a envoltória de 1 µg/L.

Figura 37 – Distribuição de plumas induzidas por fontes não pontuais



CENÁRIO 1: $k'=0,001 \text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$;
 $n=0,25$

$t = 10 \text{ anos}$



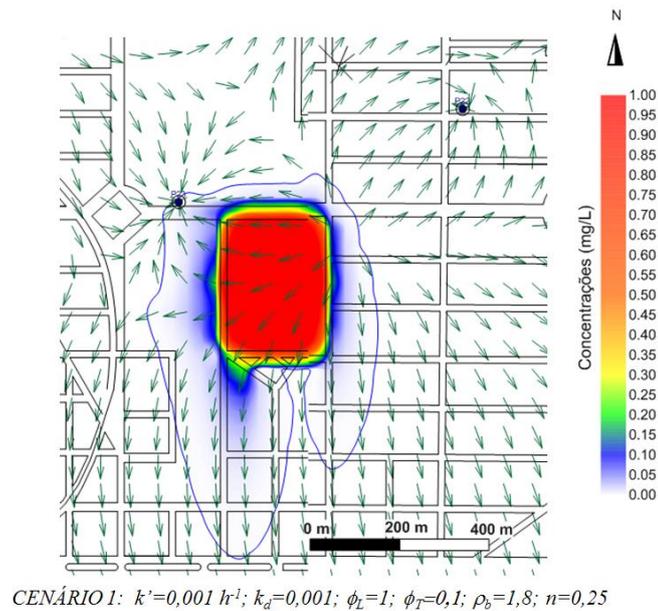
CENÁRIO 2: $k'=0 \text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 3,22 \text{ anos}$

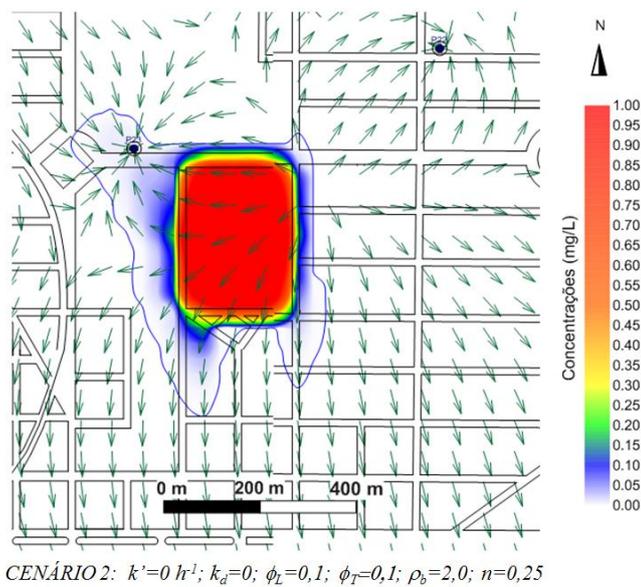
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

De uma maneira geral, percebe-se que o cenário 2 condiciona maior espalhamento da pluma em um tempo mais curto. Isto sugere que, no que diz respeito à abertura e avanço da pluma, o efeito conjunto de um poluente conservativo ($k'=0$) e que não sofre adsorção ($k_d=0$) tende a ser preponderante sobre as dispersividades do meio. Nas Figuras 38 a 41, percebem-se as plumas isoladas vinculadas aos dois cenários.

Figura 38 – Distribuição de pluma induzida por fonte difusa alocada em um dos cemitérios municipais



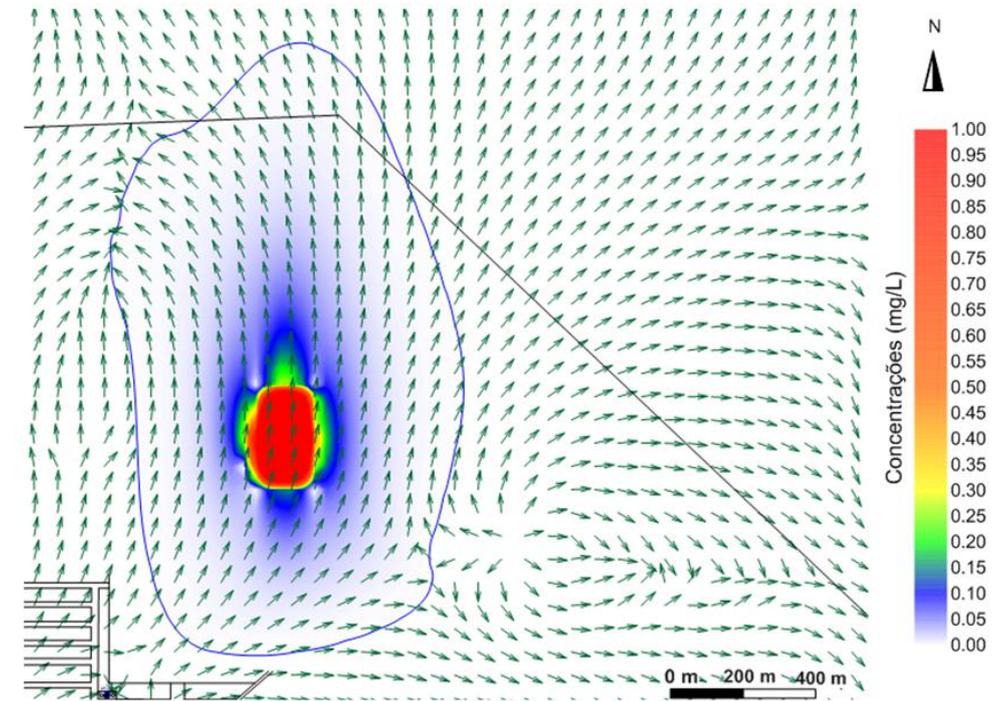
t = 10 anos



t = 3,22 anos

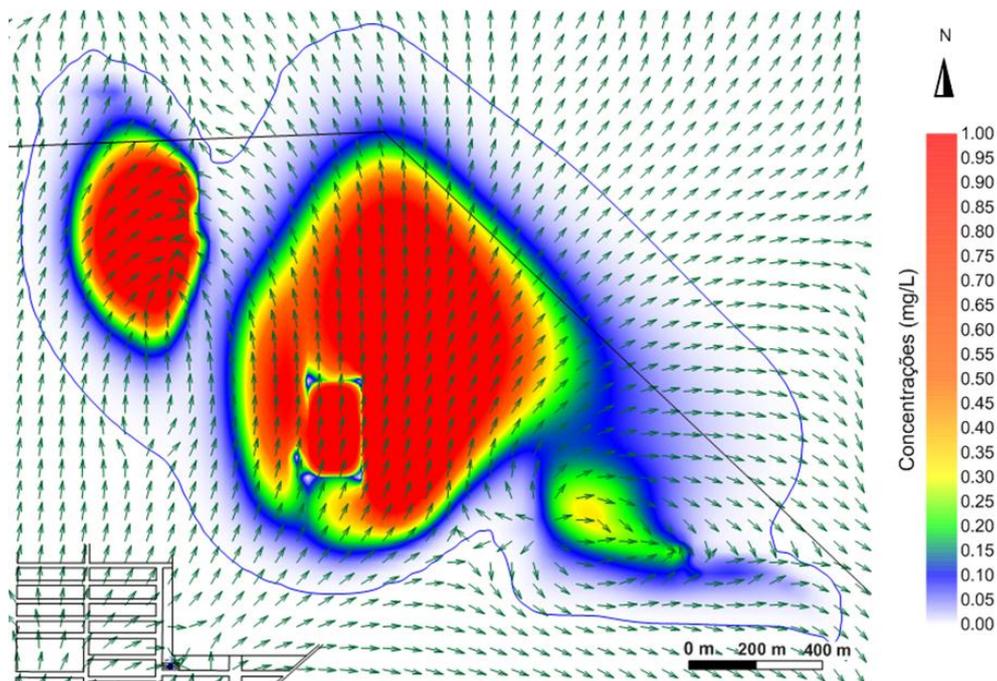
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 39 – Distribuição de pluma induzida por fonte difusa hipotética alocada em uma zona periférica



CENÁRIO 1: $k'=0,001 h^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 10$ anos

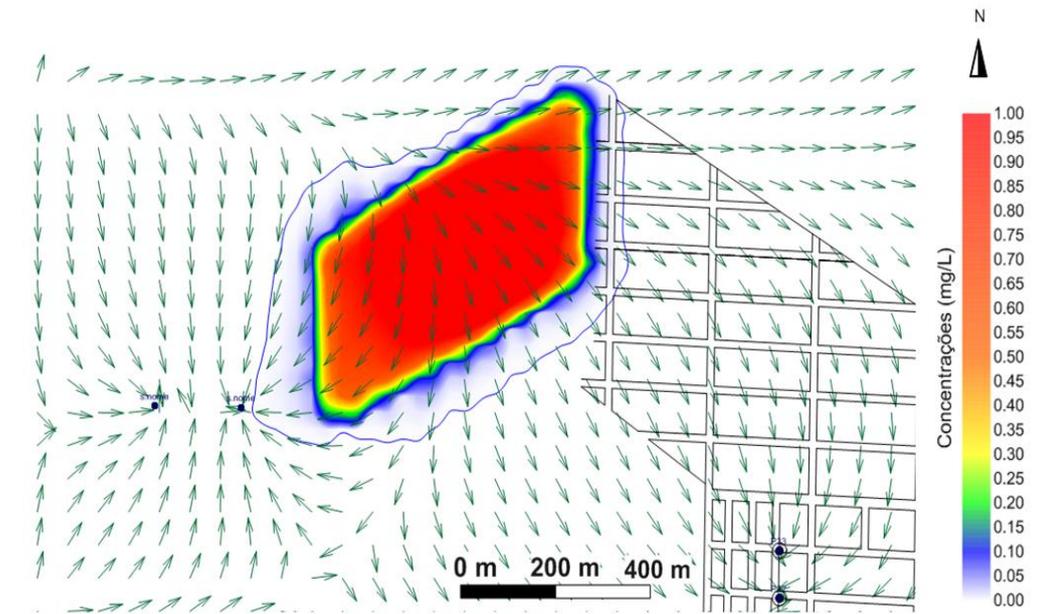


CENÁRIO 2: $k'=0 h^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 3,22$ anos

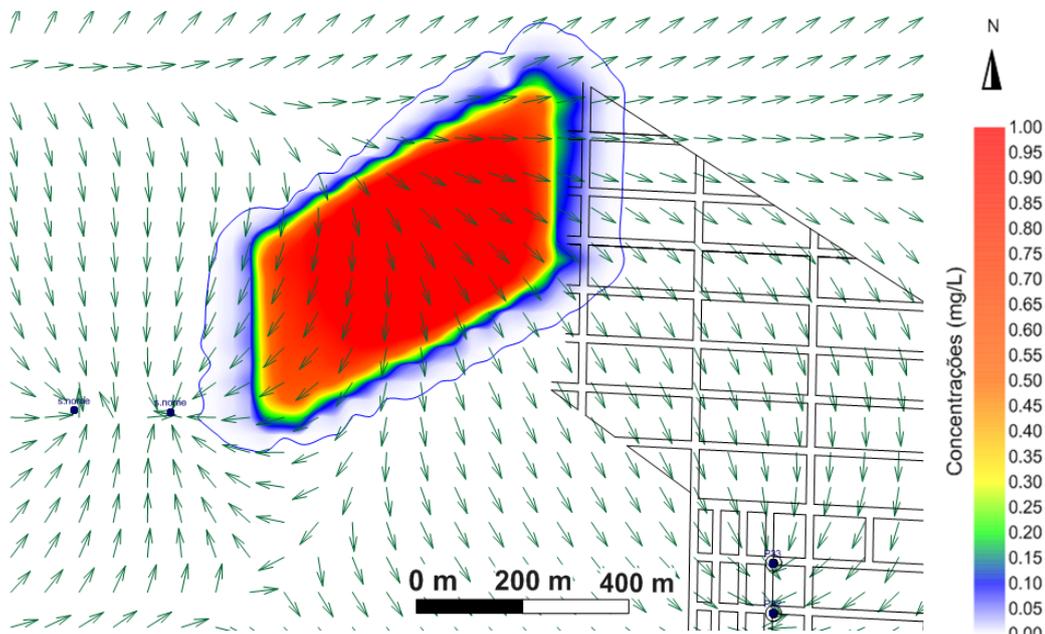
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 40 – Distribuição de pluma induzida por fonte difusa hipotética alocada em uma zona periférica



CENÁRIO 1: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 10\text{ anos}$

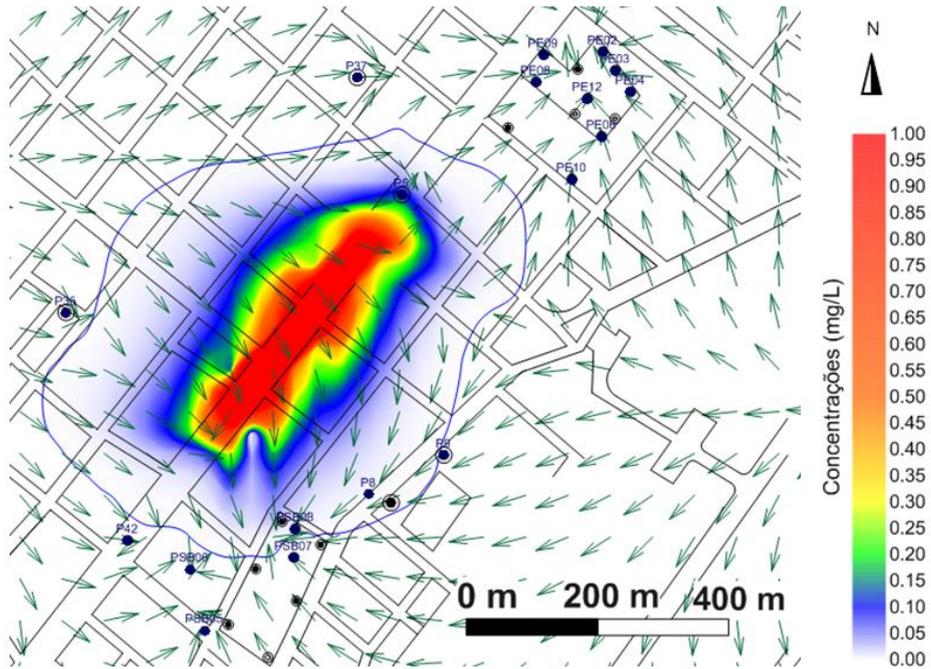


CENÁRIO 2: $k'=0\text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 3,22\text{ anos}$

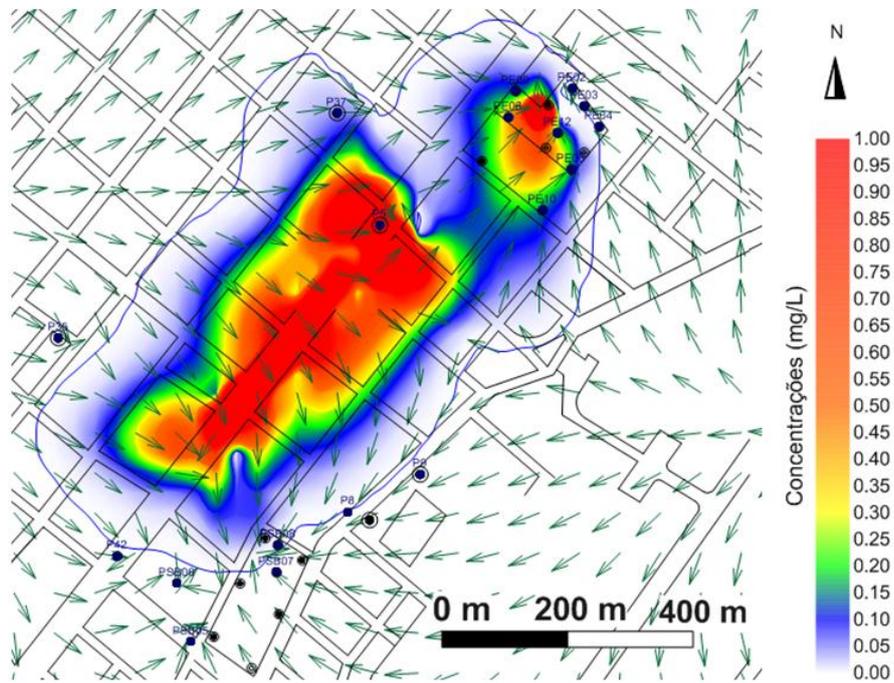
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 41 – Distribuição de pluma induzida por fonte linear hipotética alocada sob uma avenida



CENÁRIO 1: $k'=0,001\text{ h}^{-1}$; $k_d=0,001$; $\phi_L=1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=1,8$; $n=0,25$

$t = 10\text{ anos}$



CENÁRIO 2: $k'=0\text{ h}^{-1}$; $k_d=0$; $\phi_L=0,1$; $\phi_T=0,1$; $\rho_b=2,0$; $n=0,25$

$t = 3,22\text{ anos}$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Os resultados indicam que alterações nos parâmetros do modelo podem ocasionar plumas com diferentes conformações. Isto é mais evidente nas Figuras 38, 39 e 41. Na Figura 41, salienta-se o cenário 2 com migração e acúmulo de poluentes na bateria de poços do Estadual. Este comportamento sugere que vazamentos em redes de esgoto podem prejudicar a qualidade da água de poços, caso a superfície freática seja pouco profunda e os mecanismos atenuadores da zona não saturada sejam insuficientes para impedir a chegada de poluentes ao aquífero.

4.3 ANÁLISES DE SENSIBILIDADE

A expansão das plumas poluentes é construída levando em consideração os processos de dispersão, advecção, termos fonte/sumidouros e fator de retardo. Assim como já foi visto, em zonas urbanas, estes mecanismos podem ser afetados pela presença de poços que alteram os gradientes de pressão do aquífero e, conseqüentemente, os campos de velocidade vizinhos, criando fossos como os cones de depressão. Como nem todos os parâmetros são encontrados na literatura para o aquífero Bauru na região de Araguari, foram tomados valores hipotéticos para tais parâmetros denominados como uma condição padrão.

Visando pesquisar a influência de cada parâmetro para a geração de campos de concentração finais, foi realizada uma análise de sensibilidade, a qual consiste na variação dos parâmetros diretamente ligados a equação advecção-dispersão, sendo esses: k' , k_d , ϕ_L , ϕ_T , ρ_d e n .

Sendo assim, varia-se um dos parâmetros e os demais permanecem fixos com valores correspondentes a uma condição tomada como padrão, objetivando analisar qual desses tem maior impacto na concentração final.

As variações foram de 5%, 10%, 20%, 40%, 50% e 90% para mais e para menos do valor considerado inicialmente, conforme porcentagem apresentado na Tabela 3. Ainda, foi analisada a situação em que a taxa de decaimento de primeira ordem e o coeficiente de partição são iguais à zero.

Tabela 3 – Tabela de variação dos parâmetros do modelo em relação à condição padrão

% de variação do parâmetro	k' (h^{-1})	k_d	ϕ_L	ϕ_T	ρ_d	n
CONDIÇÃO PADRÃO	0,001	0,001	0,1	0,1	2	0,25
CONDIÇÃO PADRÃO + 5%	0,00105	0,00105	0,105	0,105	2,1	0,2625
CONDIÇÃO PADRÃO - 5%	0,00095	0,00095	0,095	0,095	1,9	0,2375
CONDIÇÃO PADRÃO + 10%	0,0011	0,0011	0,11	0,11	2,2	0,275
CONDIÇÃO PADRÃO - 10%	0,0009	0,0009	0,09	0,09	1,8	0,225
CONDIÇÃO PADRÃO + 20%	0,0012	0,0012	0,12	0,12	2,4	0,3
CONDIÇÃO PADRÃO - 20%	0,0008	0,0008	0,08	0,08	1,6	0,2
CONDIÇÃO PADRÃO + 40%	0,0014	0,0014	0,14	0,14	2,8	0,35
CONDIÇÃO PADRÃO - 40%	0,0006	0,0006	0,06	0,06	1,2	0,15
CONDIÇÃO PADRÃO + 50%	0,0015	0,0015	0,15	0,15	3	0,375
CONDIÇÃO PADRÃO - 50%	0,0005	0,0005	0,05	0,05	1	0,125
CONDIÇÃO PADRÃO + 90%	0,0019	0,0019	0,19	0,19	3,8	0,475
CONDIÇÃO PADRÃO - 90%	0,0001	0,0001	0,01	0,01	0,2	0,025
	0	0				

Fonte – Elaborada pelo autor

Neste item, trabalhou-se com as mesmas fontes pontuais utilizadas no item 4.1. Os resultados apresentados a seguir mostram a análise de sensibilidade para os parâmetros com simulações realizadas para um horizonte de 5 anos. É importante salientar que os desvios absolutos são apresentados em mg/L e que desvios absolutos menores que $1 \mu\text{g/L}$ foram considerados como 0% de desvio relativo. Ainda, denominam-se as variações dos parâmetros como: (1) variações percentuais negativas (-5%, -10%, -20%, -40%, -50% e de -90%) e (2) variações percentuais positivas (5%, 10%, 20%, 40%, 50% e de 90%).

Os desvios absolutos e relativos foram calculados como se segue:

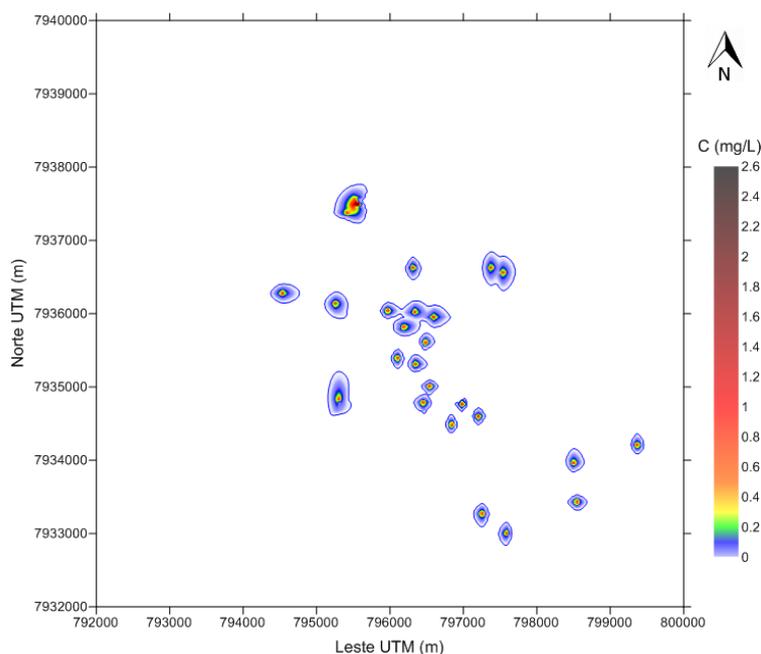
- Desvio absoluto – diferença entre a concentração calculada pela variação do parâmetro e a concentração no cenário padrão, ou seja: $\text{Desvio absoluto} = C_c - C_p$.
- Desvio relativo – porcentagem dada pela divisão entre o desvio absoluto e a concentração padrão, ou seja: $\text{Desvio relativo (\%)} = \frac{C_c - C_p}{C_p} \times 100$. Sendo C_c a

concentração calculada com variações percentuais dos parâmetros e C_p a concentração calculada com os parâmetros na condição padrão.

Se $|C_c - C_p| > 0,001$ ($1 \mu\text{g/L}$), o desvio relativo é calculado normalmente, caso contrário, o desvio relativo é considerado igual à zero. Note-se que equação do desvio relativo é inutilizada nos casos em que o cenário padrão acusa concentrações C_p nulas. Neste trabalho, desprezaram-se as análises quando estas condições foram verificadas. Nesta análise, considera-se que o modelo é sensível a um parâmetro quando o desvio percentual apresentado no desvio relativo for superior a 5%.

As plumas poluentes foram traçadas para a condição padrão, apresentada na Figura 42. Neste cenário, o fator de retardo, dado por $R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{n}$, é igual a 1,008. Sendo assim, o poluente avança pelo meio poroso sofrendo pouca adsorção, com potencial de atingir áreas mais extensas. As concentrações maiores se encontram em uma região onde se localiza um cone de depressão e as concentrações tendem sofrer acúmulo nesse local, pela dificuldade de saída do poluente. Assim, observa-se que a maior parte da pluma poluente tem concentrações entre 0 e 0,7 mg/L, desconsiderando os poluentes que ficam acumulados no cone de depressão. As linhas azuis que englobam as plumas referem-se às envoltórias de $1 \mu\text{g/L}$.

Figura 42 – Plumais poluentes (t = 5 anos e condição padrão)

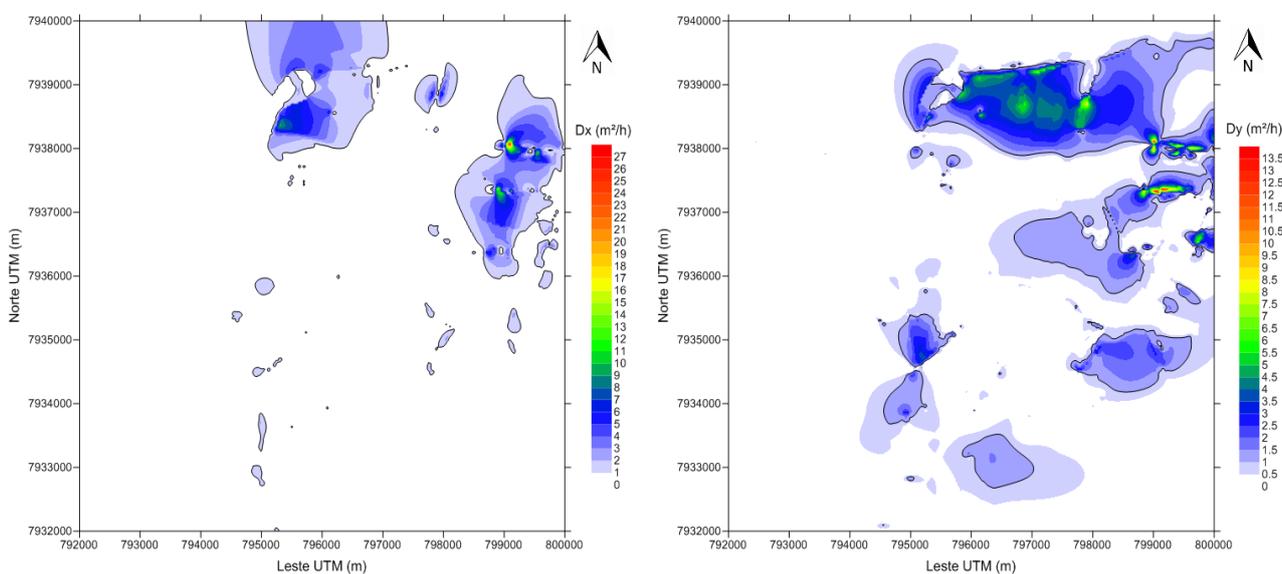


Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados obtidos na simulação numérica

Ainda no cenário padrão, os campos de dispersão hidrodinâmica, simulados para o horizonte de 5 anos, são ilustrados pela Figura 43. Nesta Figura, as linhas pretas indicam as envoltórias de $1 \text{ m}^2/\text{h}$.

Note-se que a maior parte do domínio estudado apresenta coeficientes de dispersão menores que isto. Este fator, conforme já discutido, tende a restringir a evolução espacial da pluma. Por outro lado, nas proximidades de vales e de baterias de poços, a tendência de dispersão é ampliada.

Figura 43 – Campos de dispersão hidrodinâmica ($t = 5$ anos e condição padrão)



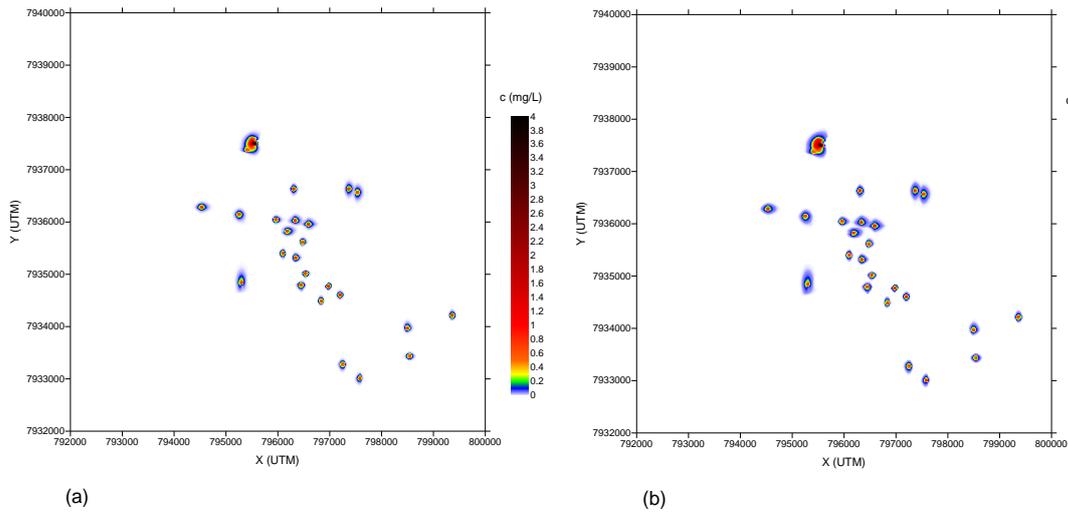
Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados obtidos na simulação numérica

4.3.1 Análise de sensibilidade para a constante de decaimento de primeira ordem (k')

Para análise da constante de decaimento de primeira ordem (k'), variaram-se os valores de k' e fixaram-se os demais parâmetros para o cenário padrão. A variação de k' foi considerada conforme a Tabela 3.

Nas Figuras 44 a 45 ilustram-se os campos de concentração e os desvios absolutos para variações negativas do parâmetro k' .

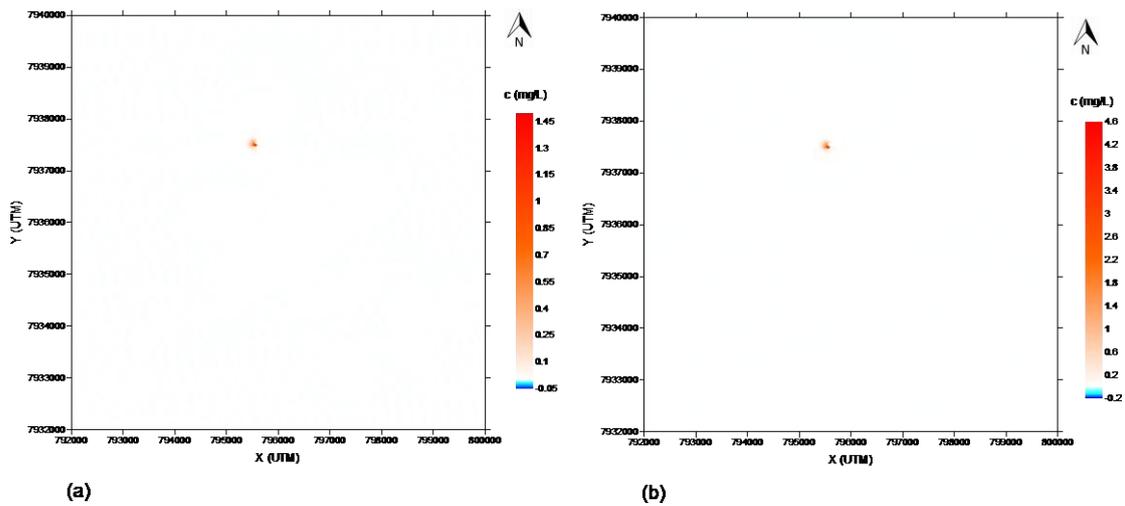
Figura 44 – Plumas poluentes para variações percentuais negativas de k'



Simulações para (a) $k' = 0,00095$ e (b) $k' = 0,0009$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 45 – Desvios absolutos para variações percentuais negativas de k'



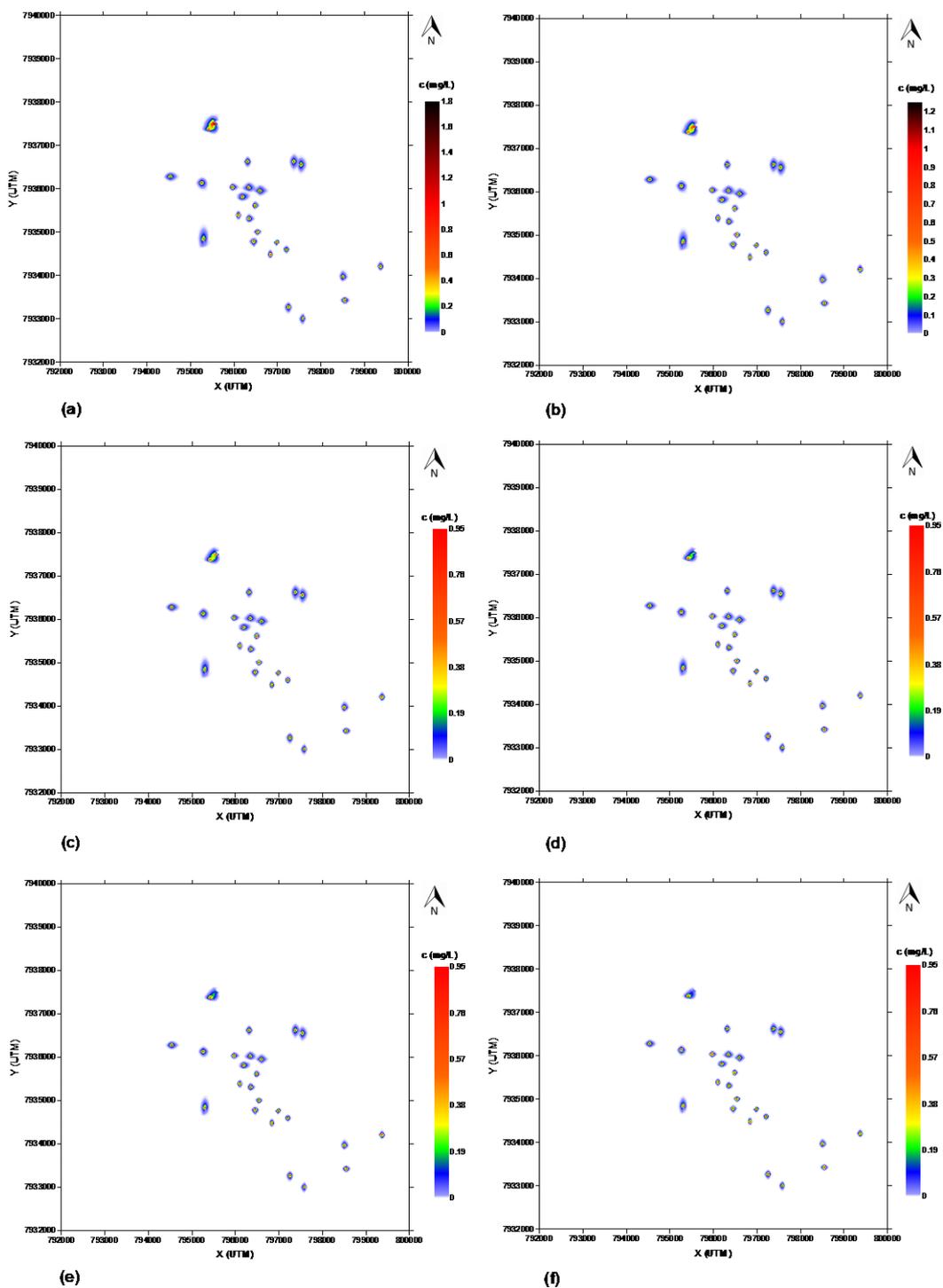
Simulações para (a) $k' = 0,00095$ e (b) $k' = 0,0009$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados obtidos na simulação numérica

As variações negativas superiores a 10% não foram consideradas, tendo em vista que concentrações apresentadas na simulação foram exageradas, principalmente dentro do cone de depressão da bateria de poços do Independência, onde verificaram-se os maiores desvios absolutos. Este acúmulo exagerado de poluentes indica que o termo sumidouro G_2 equação de advecção-dispersão, que modela a retirada de água e consequentemente de poluentes pelos poços, deve ser objeto de estudos mais detalhados. Nas Figuras 46 a 48,

ilustram-se a distribuição das concentrações, dos desvios absolutos e relativos para variações percentuais positivas do parâmetro k' .

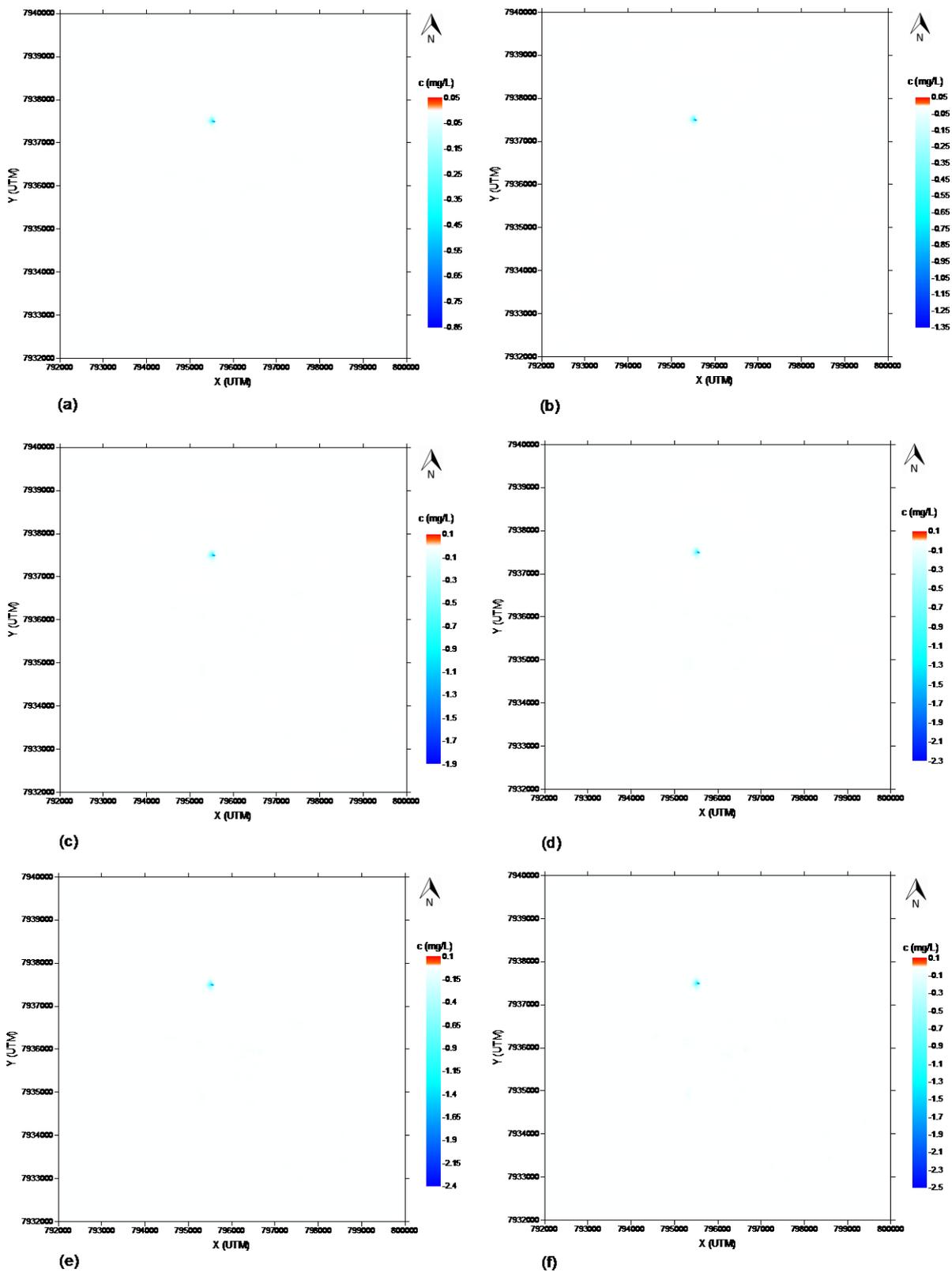
Figura 46 – Plumas poluentes para variações percentuais positivas de k'



Simulações para (a) $k' = 0,00105$, (b) $k' = 0,0011$, (c) $k' = 0,0012$, (d) $k' = 0,0014$, (e) $k' = 0,0015$ e
 (f) $k' = 0,0019$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

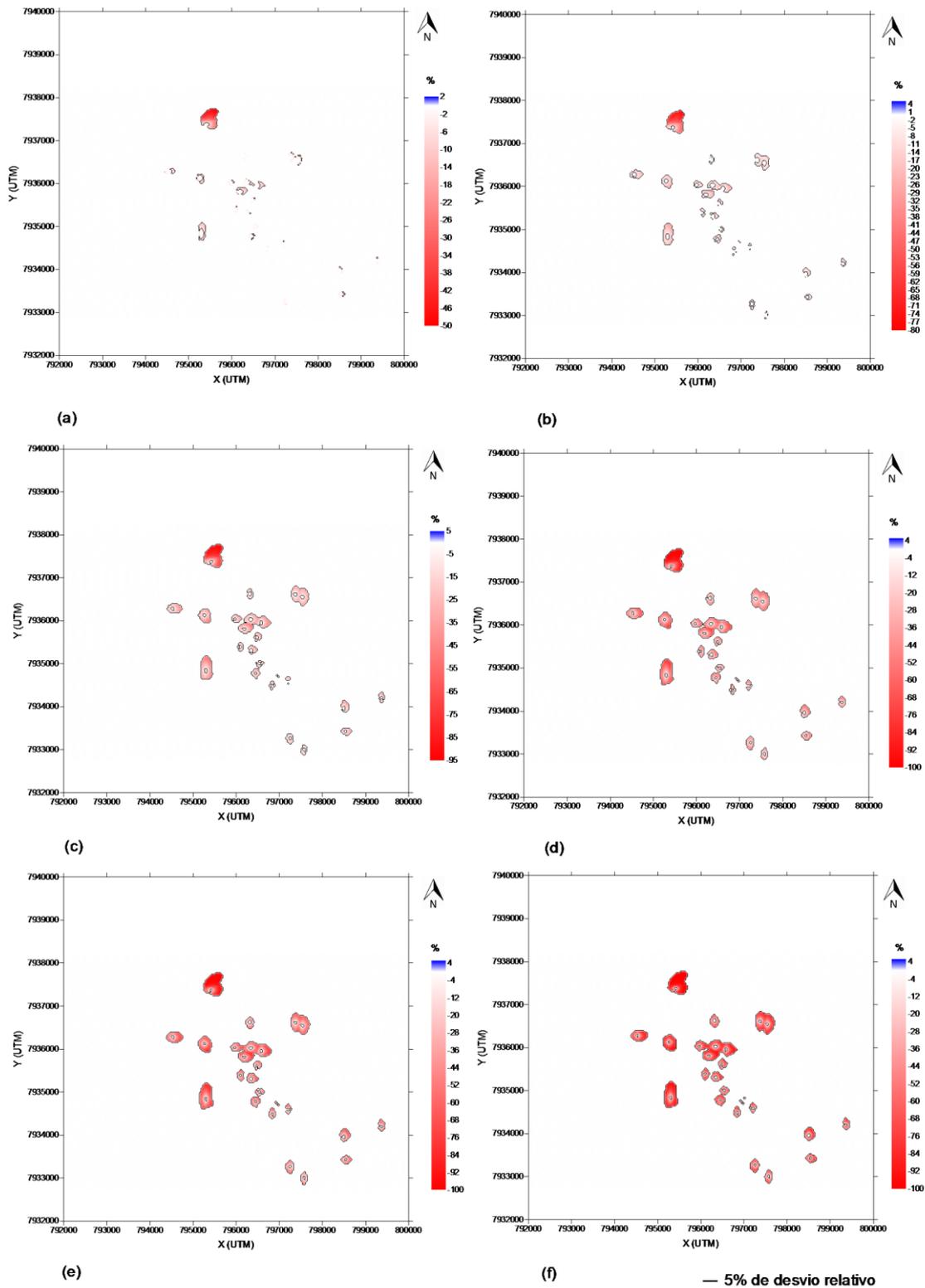
Figura 47 – Desvios absolutos para variações percentuais positivas de k'



Simulações para (a) $k' = 0,00105$, (b) $k' = 0,0011$, (c) $k' = 0,0012$, (d) $k' = 0,0014$, (e) $k' = 0,0015$ e (f) $k' = 0,0019$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 48 – Desvios relativos para variações percentuais positivas de k'

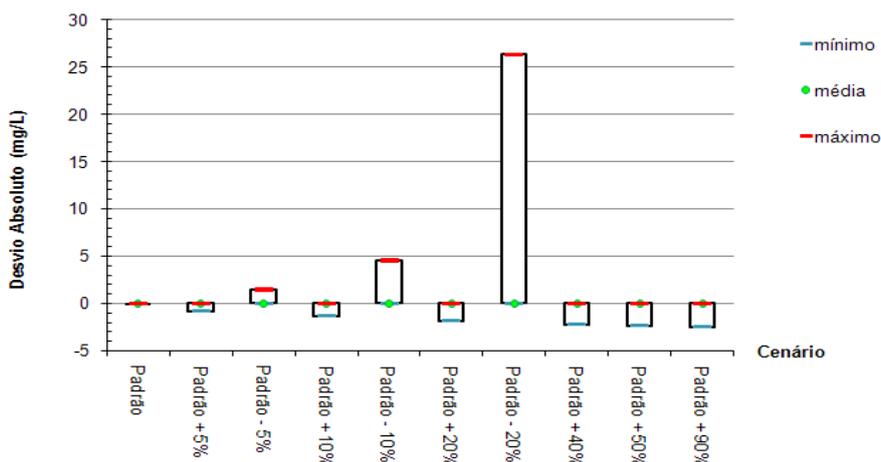


Simulações para (a) $k' = 0,00105$, (b) $k' = 0,0011$, (c) $k' = 0,0012$, (d) $k' = 0,0014$, (e) $k' = 0,0015$ e (f) $k' = 0,0019$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

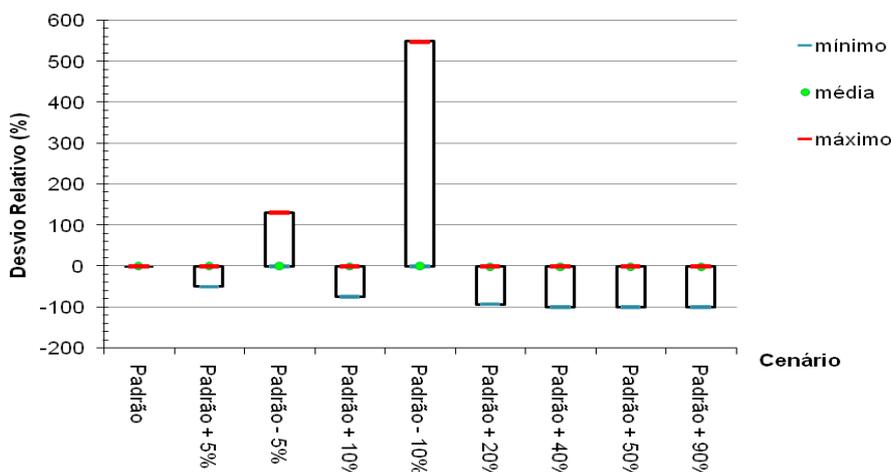
Uma análise mais detalhada da sensibilidade do coeficiente de decaimento pode ser efetuada levando em conta os valores máximos, médios e mínimos dos desvios. A Figura 49 ilustra a variação destes desvios absolutos, enquanto que a Figura 50 apresenta a variação dos desvios relativos para diferentes condições de k' .

Figura 49 – Variação dos desvios absolutos para diferentes variações do parâmetro k'



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 50 – Variação dos desvios relativos para diferentes variações do parâmetro k'

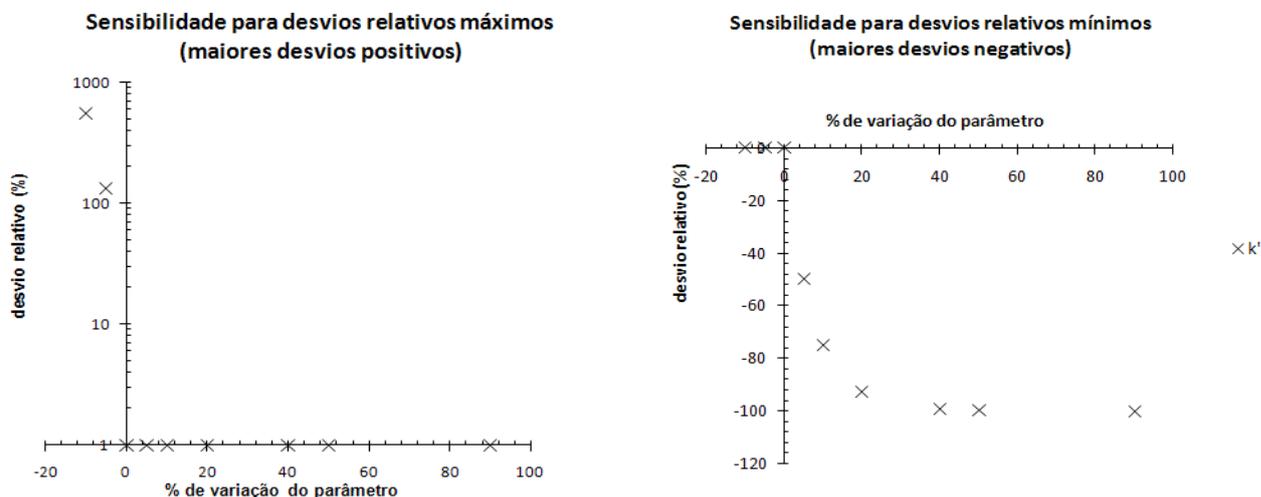


Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Nota-se que as variações negativas do parâmetro acusam desvios relativos máximos maiores do que aqueles ocasionados pelas variações positivas. Todavia, os desvios mínimos, correspondentes aos maiores valores negativos dos desvios, são verificados por

variações positivas de k' . Contudo, uma percepção mais detalhada da sensibilidade do modelo pode ser ilustrada por gráficos de dispersão, como ocorre na Figura 51.

Figura 51 – Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de k'



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

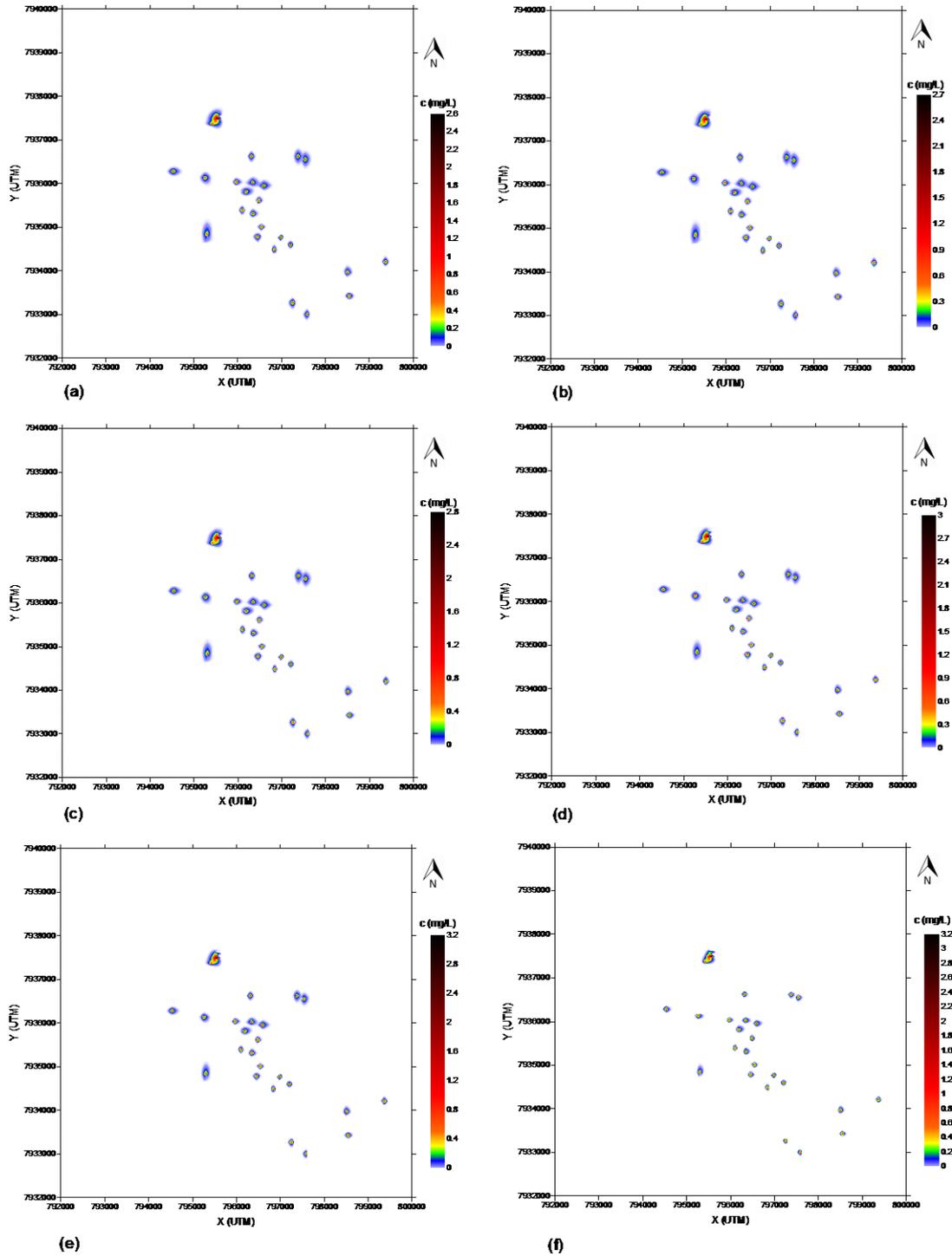
Estes gráficos de dispersão revelam que o modelo apresenta grande sensibilidade em relação a variações negativas de k' , no que tange aos maiores valores positivos dos desvios. Em outras palavras, reduções nos valores de k' resultam em um grande aumento percentual das concentrações. Em relação à condição padrão adotada, reduções de 5% na constante de decaimento resultaram em desvios percentuais máximos superiores a 100%. No que se refere aos maiores valores negativos dos desvios, o modelo é sensível a variações positivas de k' . Em outras palavras, o aumento da constante de decaimento do poluente resulta em grande queda percentual das concentrações. Em todos os casos, variações de + ou - 5% na constante de decaimento resultaram em magnitudes de desvios relativos superiores a 40%, confirmando a sensibilidade do modelo em relação a este parâmetro.

4.3.2 Análise de sensibilidade para a constante de proporcionalidade da dispersividade longitudinal (ϕ_L)

A constante ϕ_L estabelece a proporcionalidade entre dispersividade longitudinal do aquífero e o comprimento da pluma ($\alpha_L = \phi_L \cdot L_p$). Assim, como no item anterior, esta análise mantém a condição padrão, apenas alterando os valores de ϕ_L como dado na Tabela 3.

As Figuras 52 a 54 ilustram os campos de concentração, os desvios absolutos e relativos para as diversas variações percentuais negativas de ϕ_L .

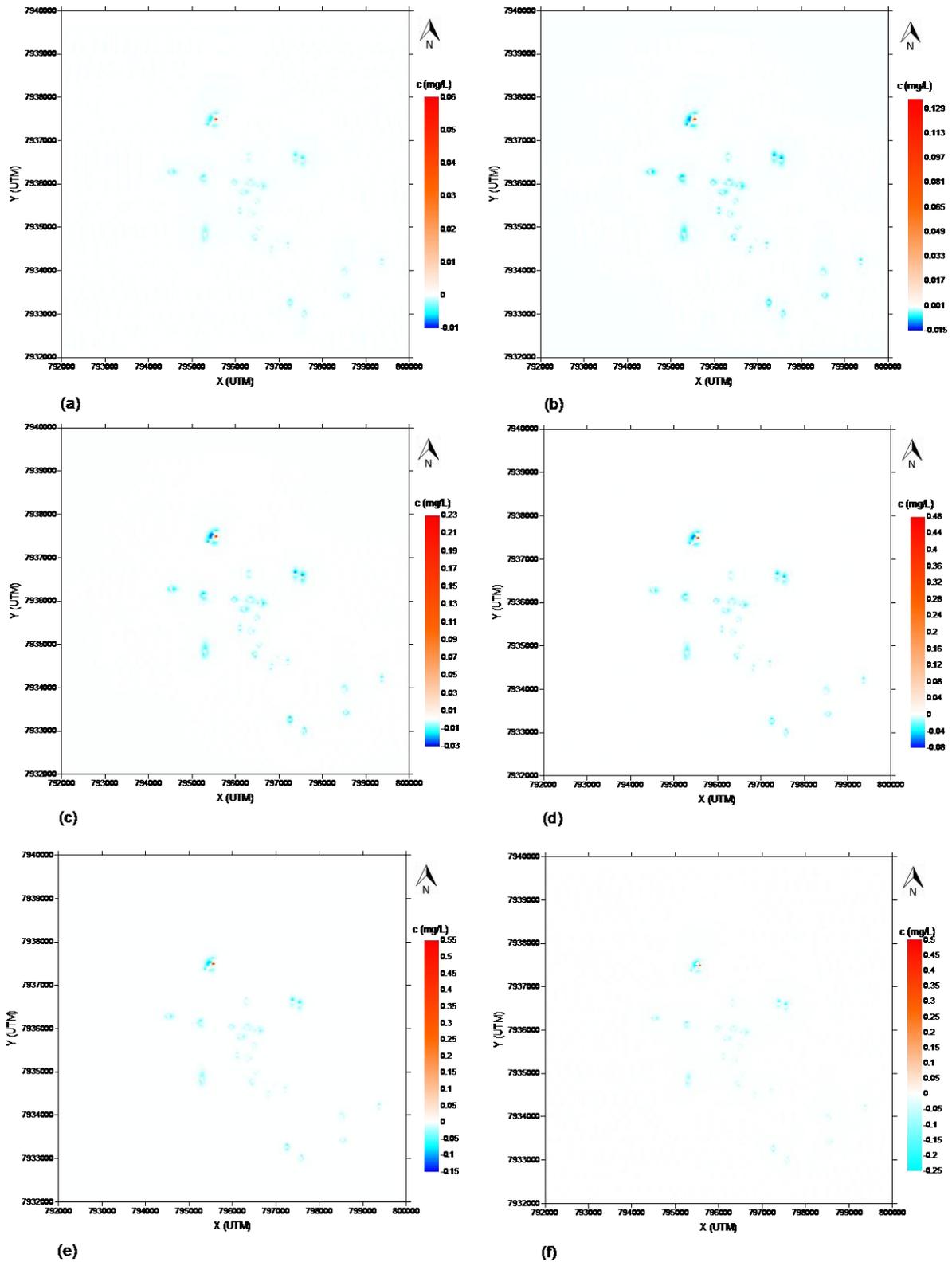
Figura 52 – Plumas poluentes para variações percentuais negativas de ϕ_L



Simulações para (a) $\phi_L = 0,095$; (b) $\phi_L = 0,090$; (c) $\phi_L = 0,080$; (d) $\phi_L = 0,060$; (e) $\phi_L = 0,050$ e
(f) $\phi_L = 0,01$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

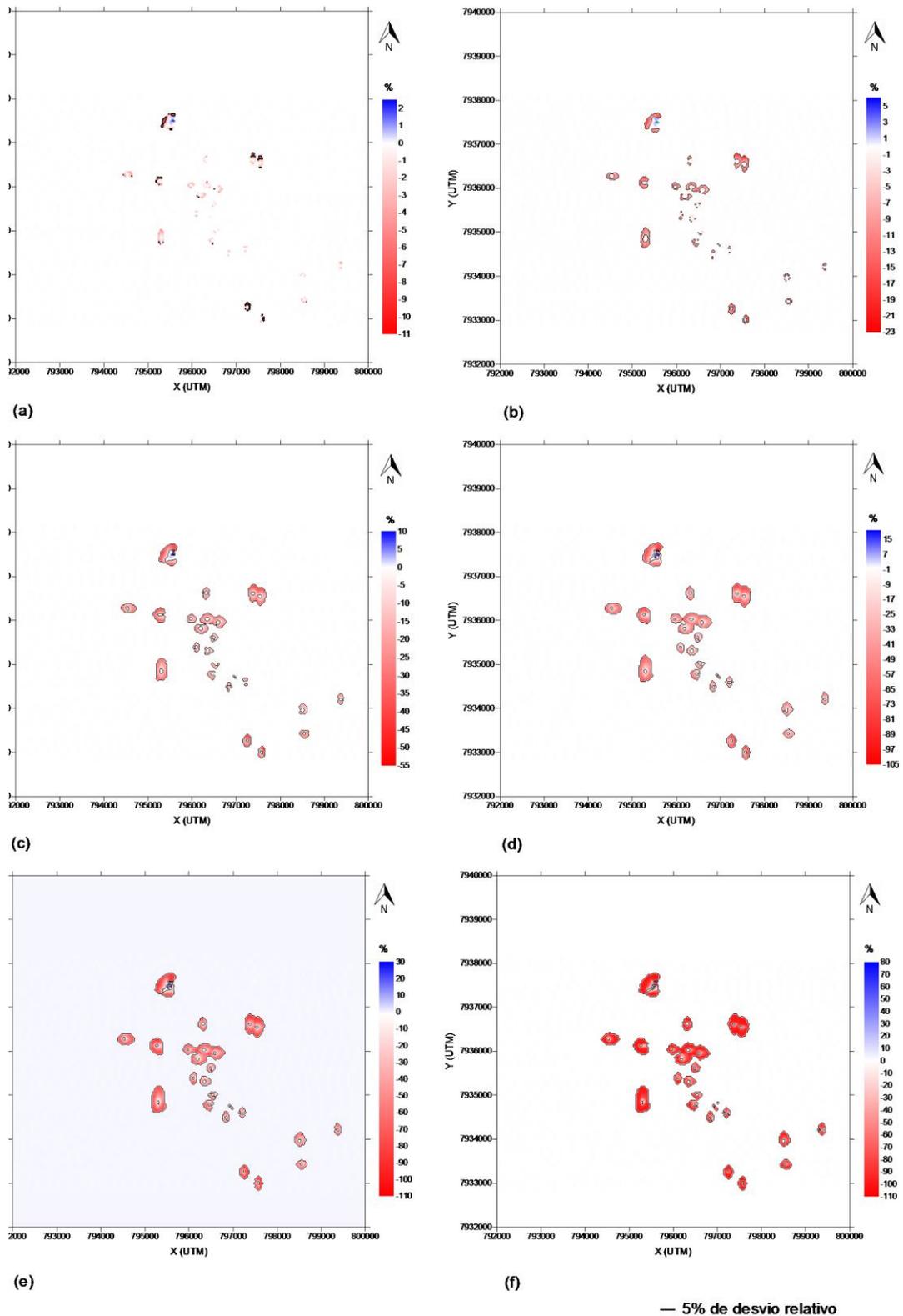
Figura 53 – Desvios absolutos para variações percentuais negativas de ϕ_L



Simulações para (a) $\phi_L = 0,095$; (b) $\phi_L = 0,090$; (c) $\phi_L = 0,080$; (d) $\phi_L = 0,060$; (e) $\phi_L = 0,050$ e
 (f) $\phi_L = 0,01$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 54 – Desvios relativos para variações percentuais negativas de ϕ_L

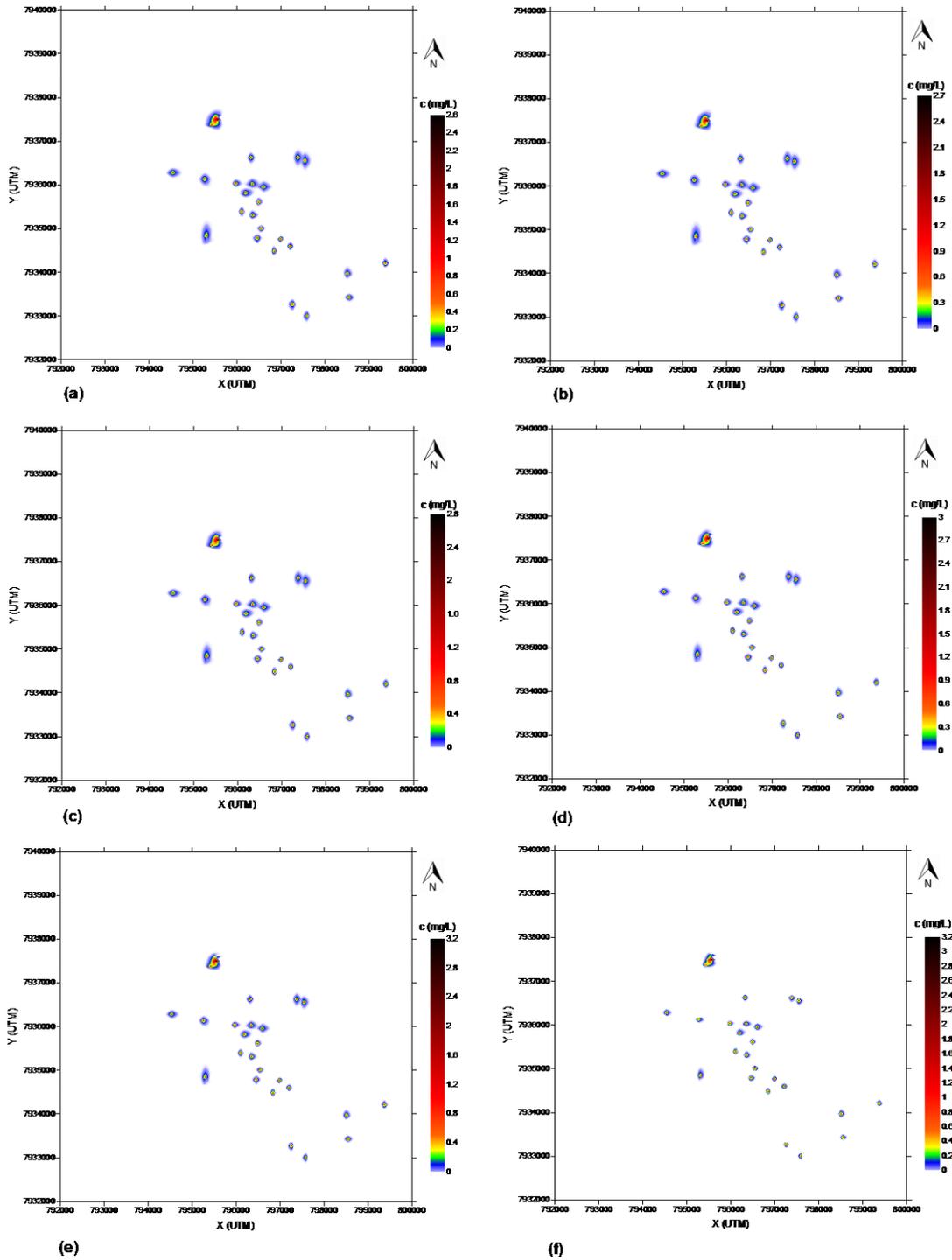


Simulações para (a) $\phi_L = 0,095$; (b) $\phi_L = 0,090$; (c) $\phi_L = 0,080$; (d) $\phi_L = 0,060$; (e) $\phi_L = 0,050$ e
 (f) $\phi_L = 0,01$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

As Figuras 55 a 57 ilustram os campos de concentração, os desvios absolutos e relativos para as diversas variações percentuais positivas de ϕ_L

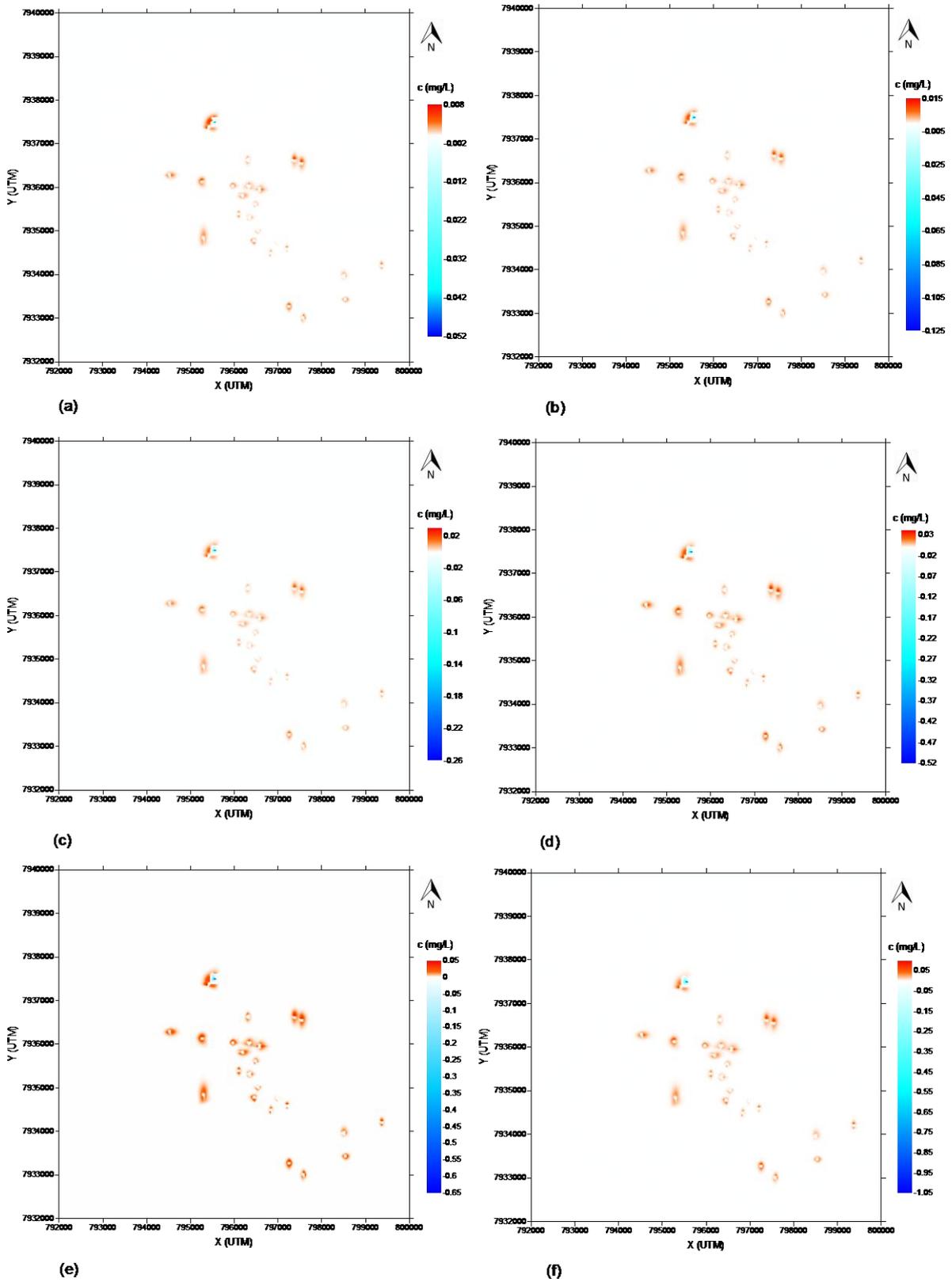
Figura 55 – Plumas poluentes para variações percentuais positivas de ϕ_L



Simulações para (a) $\phi_L = 0,105$; (b) $\phi_L = 0,11$; (c) $\phi_L = 0,12$; (d) $\phi_L = 0,14$; (e) $\phi_L = 0,15$ e
(f) $\phi_L = 0,19$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

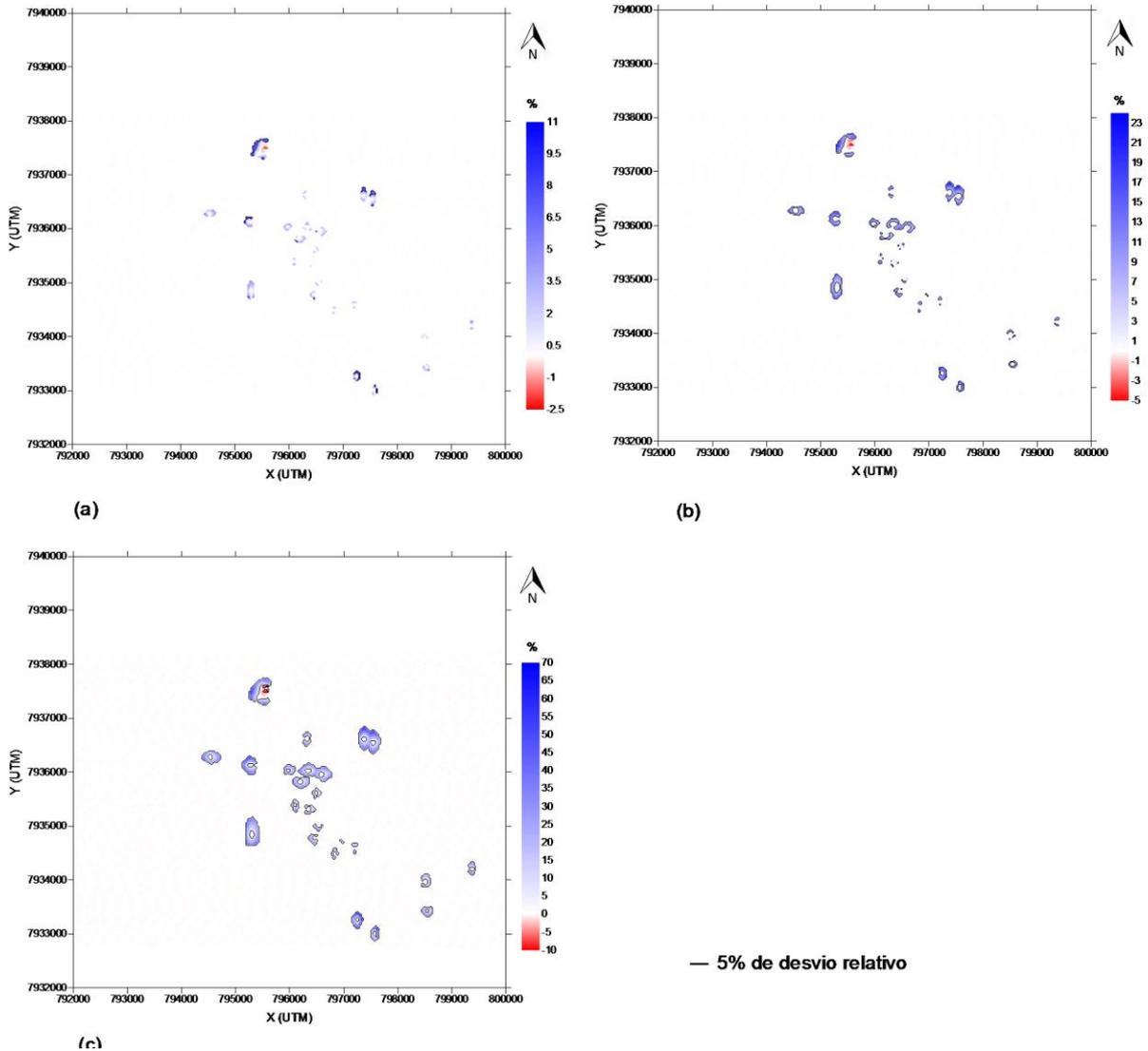
Figura 56 – Desvios absolutos para variações percentuais positivas de ϕ_L



Simulações para (a) $\phi_L = 0,105$; (b) $\phi_L = 0,11$; (c) $\phi_L = 0,12$; (d) $\phi_L = 0,14$; (e) $\phi_L = 0,15$ e (f) $\phi_L = 0,19$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 57 – Desvios relativos para variações percentuais positivas de ϕ_L



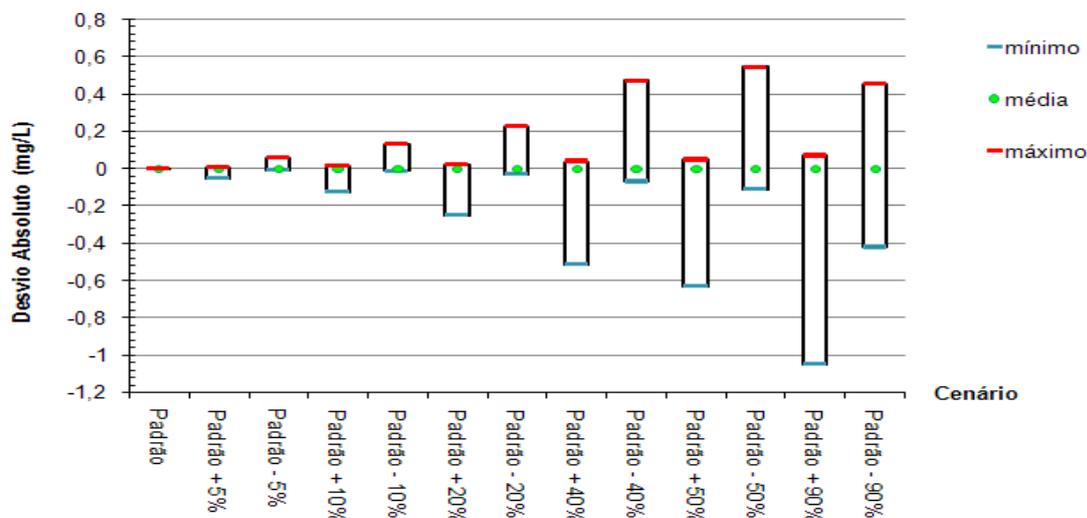
Simulações para (a) $\phi_L = 0,105$; (b) $\phi_L = 0,11$ e (c) $\phi_L = 0,12$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Mesmo apresentando desvios absolutos pequenos ao longo da pluma, os desvios relativos são altos para variações acima de +5%, apresentando desvios relativos exorbitantes para variações de ϕ_L superiores a +40%. Estes casos foram desconsiderados nesta análise, por tratarem-se de acúmulos numéricos espúrios, decorrentes da insuficiência do termo sumidouro G_2 no tocante à eliminação de poluentes que concentram-se nos cones de depressão.

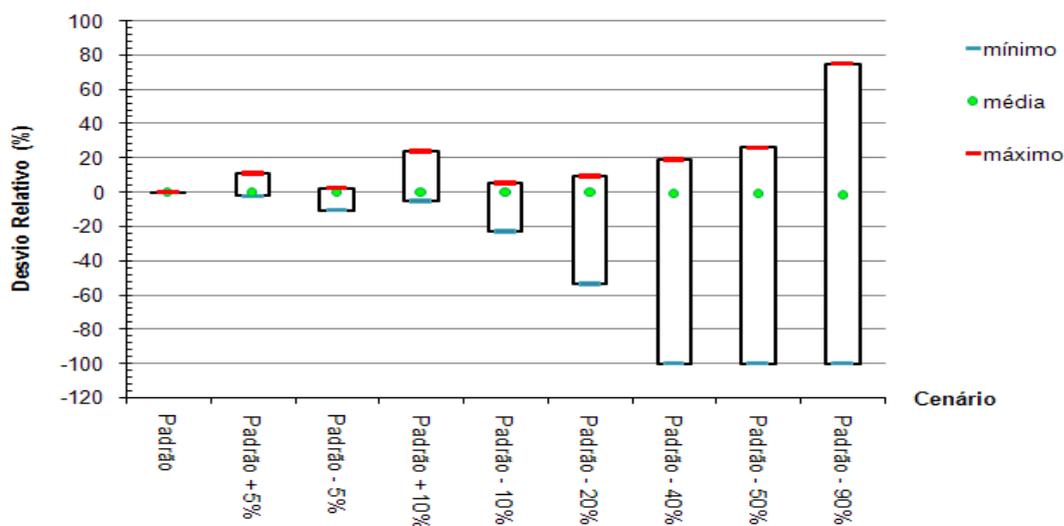
Os desvios absolutos e relativos máximos, médios e mínimos, são ilustrados pelas Figuras 58 e 59.

Figura 58 – Variação dos desvios absolutos para diferentes variações do parâmetro ϕ_L



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 59 – Variação dos desvios relativos para diferentes variações do parâmetro ϕ_L

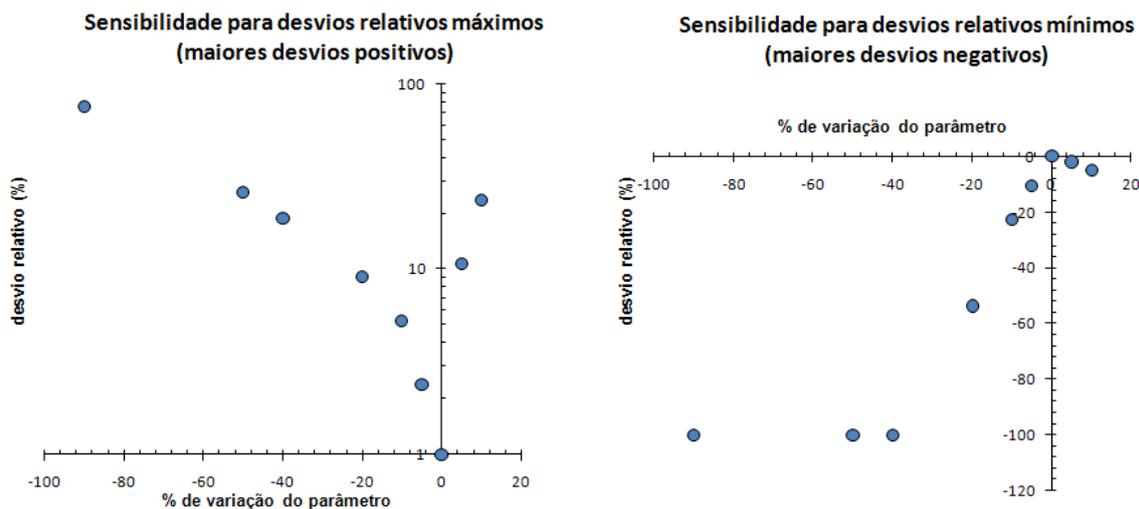


Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Os resultados revelam que variações positivas de ϕ_L são mais decisivas para os desvios máximos (maiores desvios positivos), enquanto que as variações negativas são mais importantes para os desvios mínimos (maiores desvios negativos). Os desvios médios são pouco influenciados, uma vez que esta análise considerou todos os nós do domínio, sendo que, na maioria deles, as concentrações são nulas ou inferiores a 1 $\mu\text{g/L}$.

Finalmente, a análise de gráficos de dispersão (Figura 60) permitem identificar a sensibilidade do modelo às variações do parâmetro que regula a dispersividade longitudinal.

Figura 60 – Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de ϕ_L



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

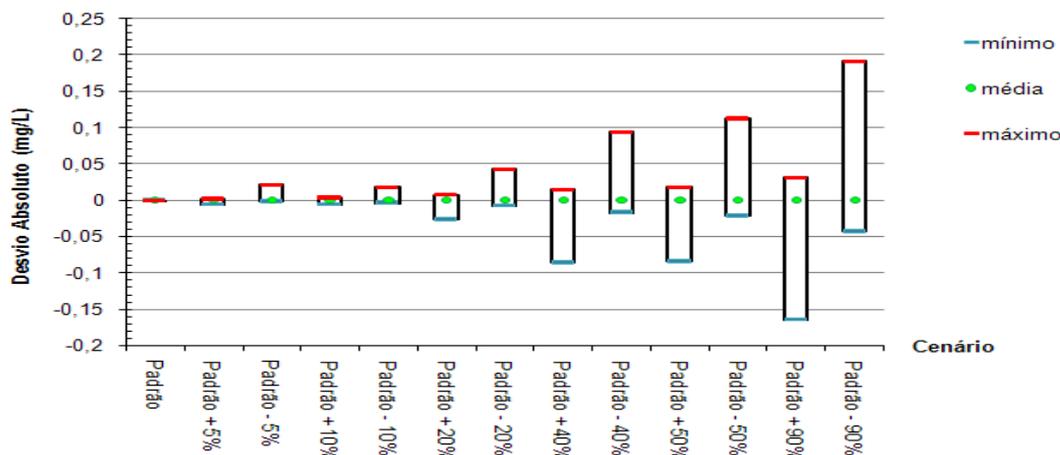
Estes gráficos de dispersão revelam que o modelo apresenta maior sensibilidade em relação a variações positivas de ϕ_L , no que tange aos maiores valores positivos dos desvios. Em outras palavras, aumentos nos valores de ϕ_L resultam em um grande aumento percentual das concentrações. Variações negativas do parâmetro também resultam em grandes desvios relativos máximos. Em relação à condição padrão adotada, aumentos de 5% em ϕ_L resultaram em desvios percentuais máximos superiores a 10%. Quedas de 5% resultaram em desvios percentuais máximos superiores a 2%. No que se refere aos maiores valores negativos dos desvios, o modelo é mais sensível a variações negativas de ϕ_L . Em outras palavras, a redução da dispersividade longitudinal (com a queda de ϕ_L) resulta em grande queda percentual das concentrações. Nestes casos, variações de + ou - 5% na constante ϕ_L resultaram em magnitudes de desvios relativos superiores a 10%, confirmando a sensibilidade do modelo em relação a este parâmetro.

4.3.3 Análise de sensibilidade para a constante de proporcionalidade da dispersividade transversal (ϕ_T)

A constante ϕ_T estabelece a proporcionalidade entre as dispersividades transversal e longitudinal do aquífero ($\alpha_T = \phi_T \cdot \alpha_L$). Assim, como nos itens anteriores, esta análise mantém a condição padrão, apenas alterando os valores de ϕ_T como dado na Tabela 3.

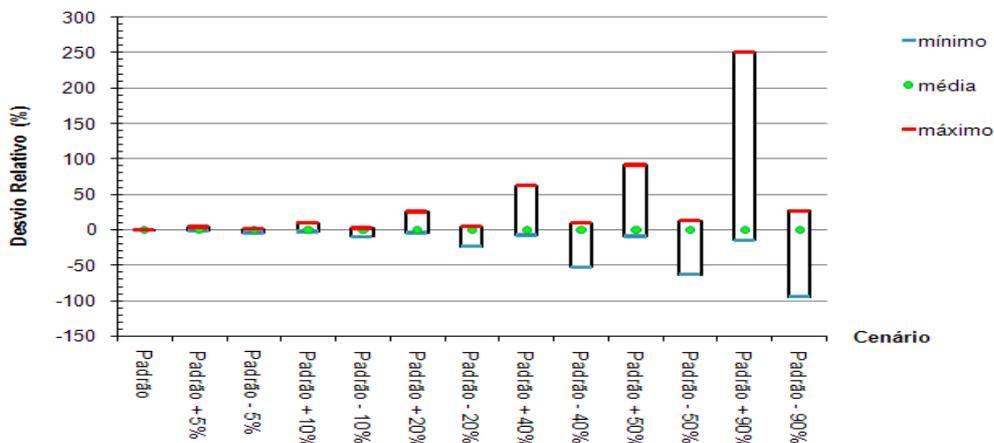
Esta análise, assim como as seguintes, seguem os mesmos procedimentos dos itens 4.3.1 e 4.3.2. Nas Figuras 61 e 62 estão discriminados os desvios absolutos e relativos para as diversas variações percentuais de ϕ_T .

Figura 61 – Variação dos desvios absolutos para diferentes variações do parâmetro ϕ_T



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

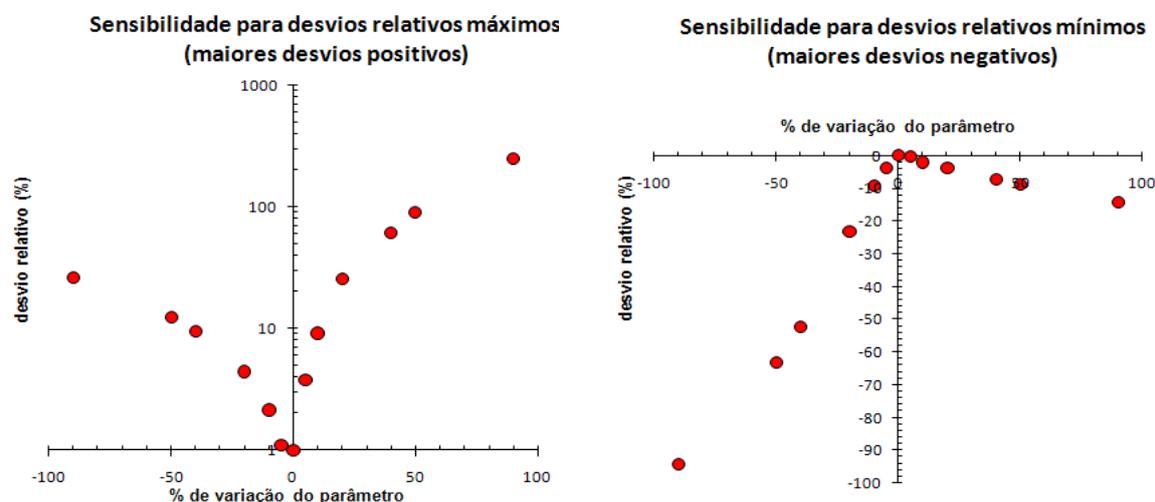
Figura 62 – Variação dos desvios relativos para diferentes variações do parâmetro ϕ_T



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Em relação aos desvios máximos, o modelo é mais sensível a variações positivas de ϕ_T . Todavia, no que tange aos maiores desvios negativos (desvios mínimos), variações percentuais negativas de ϕ_T acusam maior sensibilidade do modelo. Gráficos de dispersão ilustrados na Figura 63 corroboram estas conclusões, mostrando ainda que variações de + ou - 5% são insuficientes para alterar os desvios em mais de 5%. Isto sugere que o modelo é menos sensível a ϕ_T do que a ϕ_L ou a k' .

Figura 63 – Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de ϕ_T

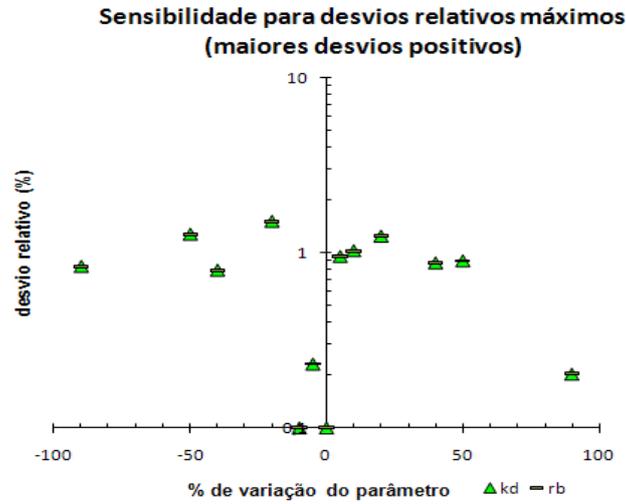


Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

4.3.4 Análise de sensibilidade para a densidade do meio poroso seco (ρ_d) e o coeficiente de partição (k_d)

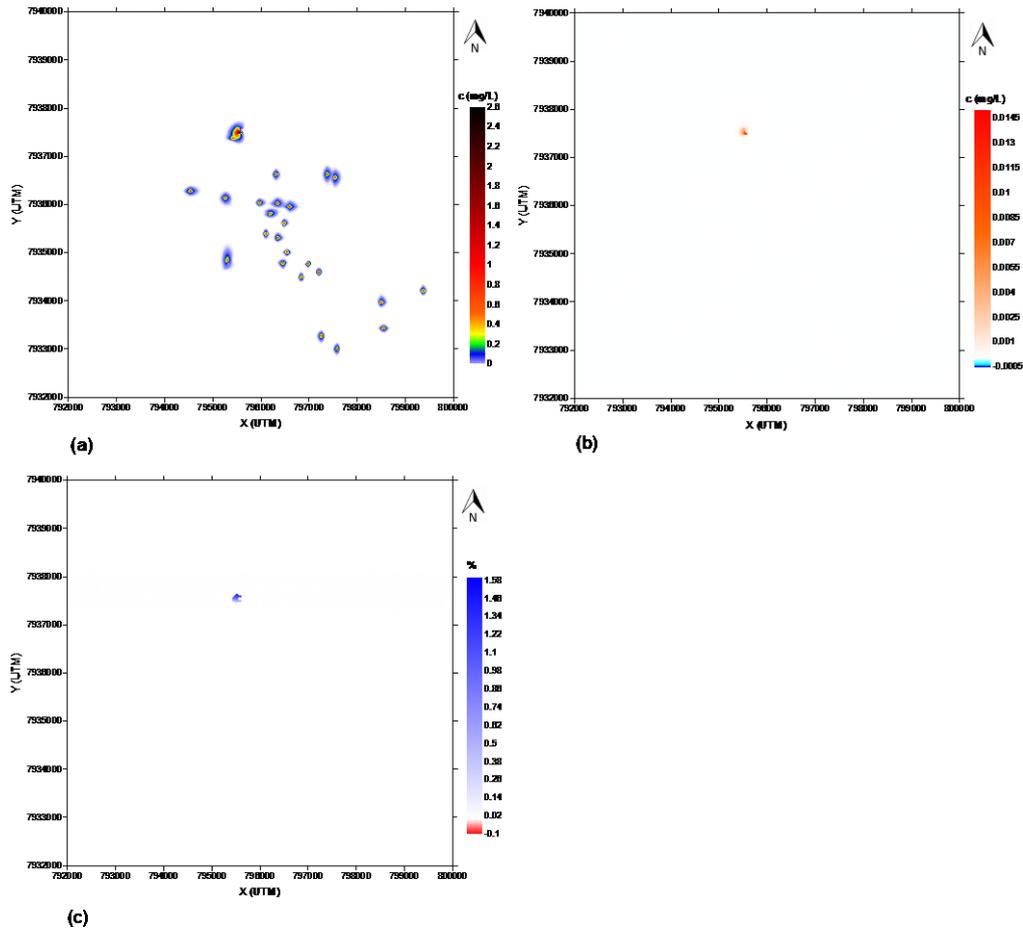
Os parâmetros ρ_d e k_d aparecem na equação advecção-dispersão no cálculo do fator de retardo ($R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{n}$). Como esses estão em forma de multiplicação, à medida que varia-se um dos parâmetros e fixamos o outro, a concentração calculada será sempre a mesma. Sendo assim, para análise da densidade seca do meio poroso (ρ_d) e do coeficiente de partição (k_d), é a variação do produto $\rho_d k_d$ que produzirá alteração no fator de retardo e, conseqüentemente, nas concentrações finais. Análises individuais para os parâmetros k_d e ρ_d revelam que os mesmos introduzem poucas variações no modelo. Considerando os maiores desvios positivos (Figura 64), não se atinge 5% de variação para quaisquer mudanças nos parâmetros. Para desvios médios e mínimos (maiores desvios negativos), as alterações são praticamente nulas.

Figura 64 – Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de ρ_d e k_d



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Figura 65 – Simulações para $R = 1$



(a) Concentração, (b) Desvio Absoluto e (c) Desvio relativo para $\rho_d K_d = 0$ e $R = 1$

Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

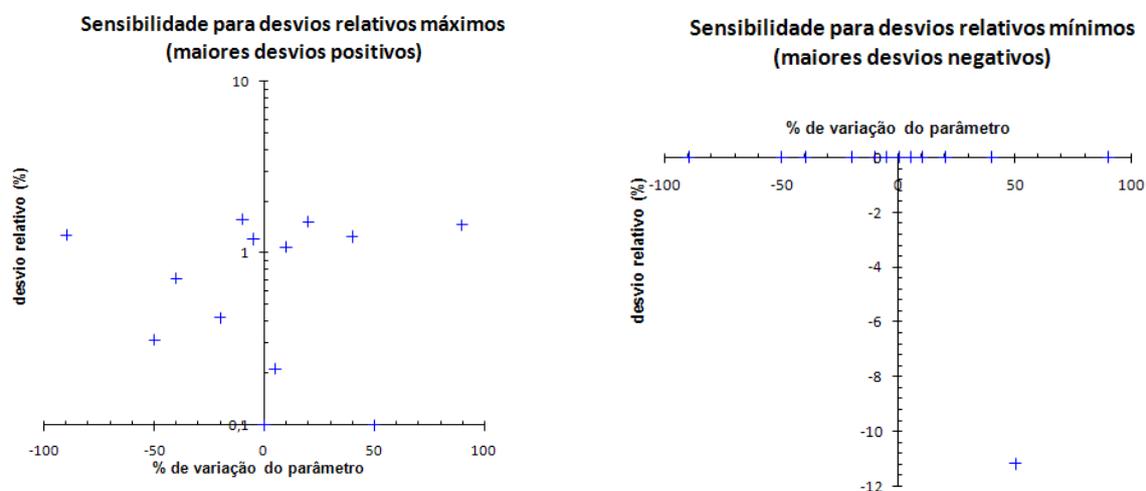
Assim, pode-se concluir que, se assumirmos valores pequenos de ρ_d e k_d como dado na situação padrão, $\rho_d k_d$ não será um parâmetro sensível na equação advecção-dispersão, mesmo para variações grandes de tais parâmetros quando considera-se um fator de retardo que ocorre pouca adsorção de poluente na matriz porosa.

Também foram feitas simulações, com resultados ilustrados na Figura 65, para o caso em que o fator de retardo é igual a 1, ou seja, quando não há nenhuma adsorção do poluente no solo. Nota-se que concentração atinge um valor máximo de 2,6 mg/L, sofrendo variação principalmente no cone de depressão. O valor absoluto máximo é menor que 0,0005 mg/L ao longo da pluma, apresentando desvio absoluto máximo igual a 1,58%.

4.3.5 Análise de sensibilidade para a porosidade do aquífero (n)

A porosidade é a propriedade que expressa a relação entre o volume de vazios e o volume total de uma amostra de substrato poroso. Apesar desta propriedade ser facilmente levantada em laboratório, sua determinação em campo não é direta. Para levar amostras para o laboratório, garantindo que estas sejam representativas das condições de campo, as mesmas devem ser indeformadas, de forma a manterem a integridade na sua estrutura. Para amostras coletadas no subsolo, a muitos metros de profundidade, onde normalmente jazem os aquíferos, dificilmente consegue-se manter a estrutura íntegra, o que traz imprecisão para as porosidades medidas em laboratório.

Figura 66 – Desvios relativos máximos e mínimos para diferentes variações de n



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Na equação de advecção-dispersão, a porosidade (n) aparece embutida no fator de retardo ($R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{n}$). Sendo assim, nesta análise de sensibilidade, considerou-se a variação de n como dado na Tabela 3, mantendo-se os demais parâmetros nas condições estipuladas como padrão. Os resultados da análise de sensibilidade são resumidos na Figura 66, que ilustra a dispersão dos desvios relativos máximos e mínimos, em função de alterações nos valores da porosidade.

Nota-se que a porosidade ocasiona pequenas alterações nos desvios positivos, de forma que mudanças no seu valor pouco contribuem para ampliar os valores de concentração, considerando valores pequenos, como dado na situação padrão. Todos os desvios relativos máximos simulados ficaram abaixo de 5%. No caso dos maiores desvios negativos, os valores foram irrisórios. Uma exceção foi verificada para porosidades 50% acima da condição padrão, atingindo desvios negativos da magnitude de 11%. De uma forma geral, conclui-se que o modelo de transporte de poluentes também é pouco sensível a alterações na porosidade do aquífero com os dados que foram considerados.

Entretanto, não se pode afirmar que, no fenômeno global de percolação de poluentes, a porosidade seja uma propriedade desprezível. Ela assume grande importância no cálculo dos campos de velocidade estimados por outro modelo: o hidrodinâmico. As velocidades, por sua vez, interferem em dois pontos decisivos da equação de advecção-dispersão: nos termos advectivos e nos termos difusivos (cálculo dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica).

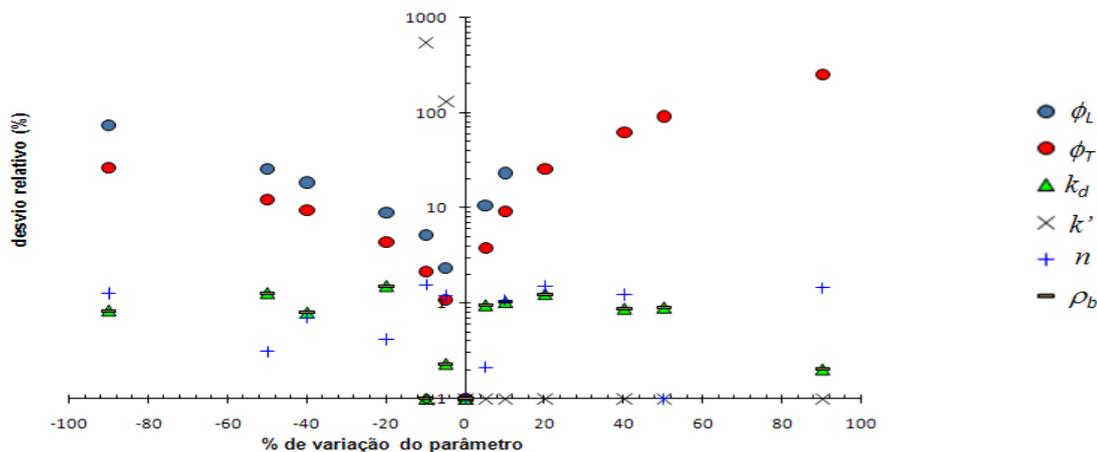
4.3.6 Ordenamento da sensibilidade

Quando os resultados individuais de análise de sensibilidade são plotados em um mesmo gráfico de dispersão, podem-se verificar quais, entre os parâmetros, são mais decisivos no modelo de advecção-dispersão. Neste contexto, a Figura 67 resume os resultados das análises para os desvios relativos máximos (maiores desvios positivos).

Assim, percebe-se que pequenas alterações nos valores de k' , ϕ_L e ϕ_T resultam nos maiores desvios positivos em relação à situação padrão. Os demais parâmetros condicionam desvios inferiores a 2%. Nota-se que variações negativas (-5%) na constante de decaimento

k' produzem desvios superiores a 100% e que variações positivas no parâmetro ϕ_L (+5%) induzem a desvios ligeiramente superiores a 10%. Para o parâmetro ϕ_T , desvios de mesma ordem de grandeza são alcançados para variações de + ou - 10%.

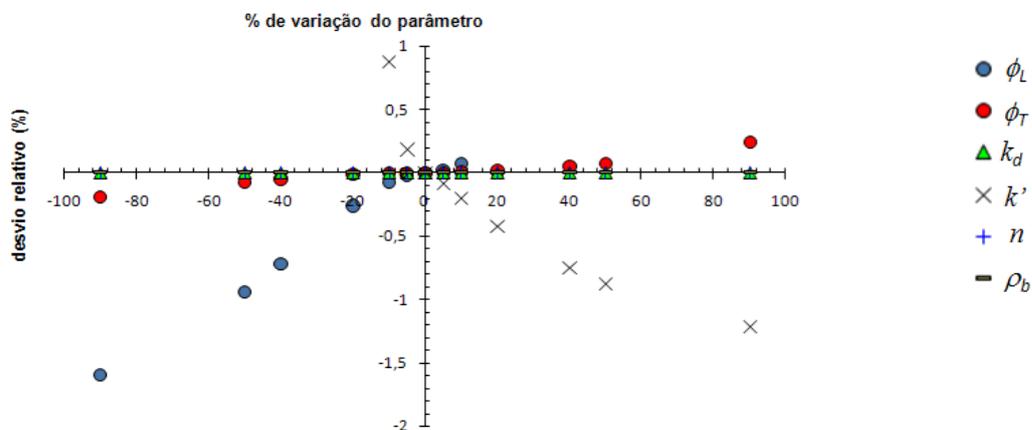
Figura 67 – Sensibilidade para desvios relativos máximos (maiores desvios positivos)



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Os desvios relativos médios são marcados por valores baixos, condicionados pelo fato da maioria dos nós do domínio não ser atingida pelas plumas poluentes. Isto leva a desvios relativos nulos em grande parte do domínio de cálculo. Com isto, a maioria dos parâmetros causa variações imperceptíveis nestes desvios médios, conforme ilustra a Figura 68. Mesmo assim, percebem-se que os parâmetros k' e ϕ_L são os que mais interferem neste tipo de resposta do modelo.

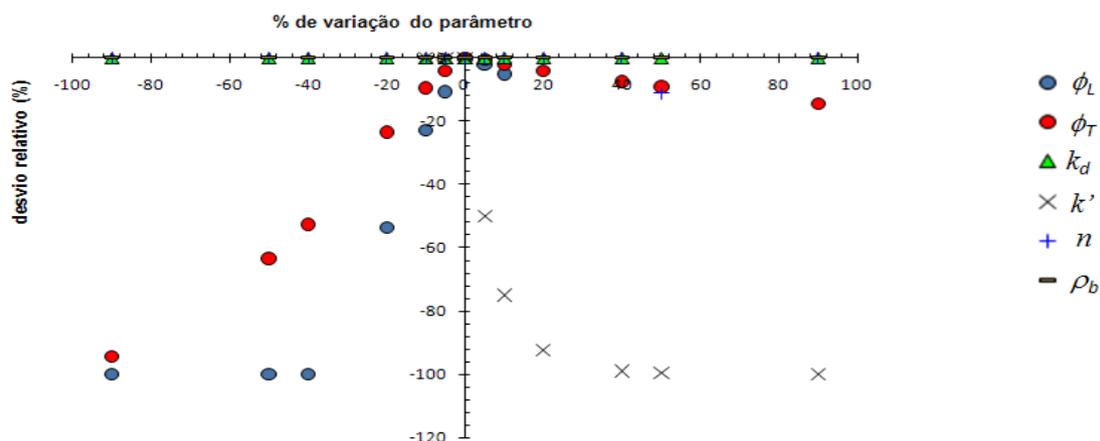
Figura 68 – Sensibilidade para desvios relativos médios



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Finalmente, os maiores desvios negativos (Figura 69) são influenciados principalmente por variações positivas de k' , secundariamente por variações negativas de ϕ_L e, com relevância terciária, por alterações percentuais negativas em ϕ_T . Nestes casos, os demais parâmetros têm influência irrisória.

Figura 69 – Sensibilidade para desvios relativos mínimos (maiores desvios negativos)



Fonte – Elaborada pelo autor com base nos resultados da simulação numérica

Enfim, os resultados das análises de sensibilidade permitem inferir que o modelo horizontal de advecção e dispersão de poluentes em aquíferos é mais sensível à constante de decaimento de primeira ordem (k'), apresentando grau de sensibilidade decrescente para o parâmetro regulador da dispersividade longitudinal (ϕ_L) e para o parâmetro regulador da dispersividade transversal (ϕ_T). Com efeitos menos relevantes, se considerarmos valores pequenos como os dados da situação padrão analisada, aparecem o coeficiente de partição (k_d) que regula o efeito da adsorção, a porosidade (n) e a massa específica do meio seco (ρ_b). Com isto, conclui-se que uma simulação realista carecerá de uma calibração mais minuciosa dos parâmetros k' , ϕ_L e ϕ_T . Os demais parâmetros (ρ_b , k_d e n), devem ser analisados para valores grandes a fim de afirmar se esses são sensíveis ou não- sensíveis na equação advecção-dispersão.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÃO

Neste trabalho, apresentou-se um modelo para simular o transporte de poluentes em águas subterrâneas, a fim de traçar a evolução espacial e temporal de plumas poluentes. O método foi aplicado com um código computacional construído em linguagem *Visual Basic for Applications*, dentro do ambiente do programa Excel. Foi utilizado o Método de Diferenças Finitas para tratamento numérico da equação advecção-dispersão, utilizando derivadas centrais de segunda ordem para os termos espaciais. No tratamento das derivadas temporais, utilizou-se o esquema semi-implícito de Crank-Nicolson, o que acarretou em considerável economia em tempo de processamento e maior estabilidade numérica do código, quando comparado com esquemas explícitos como os de Euler ou os de Adams Bashforth. O sistema linear que leva ao cálculo do campo de concentrações foi resolvido com o método iterativo dos Gradientes Bi-conjugados Estabilizado e Pré-condicionado. A aplicação deste método permitiu solucionar cada nível de tempo com um número pequeno de iterações (de uma a cinco, na maior parte dos casos simulados), contribuindo para a rapidez de processamento. Ainda no contexto do sistema linear, para economizar memória computacional, também utilizou-se o esquema de armazenamento esparsa (*Compressed Row Storage*) da matriz de coeficientes.

Os resultados apresentados neste trabalho, ainda que hipotéticos no contexto das condições de contorno internas e dos parâmetros relacionados com o poluente e o aquífero, demonstram que o código atende às demandas de uma representação de plumas poluentes, apresentando o padrão de transporte de poluentes em águas subterrâneas, seguindo a

direção e o sentido do fluxo. No entanto, observa-se que a pluma assume uma característica difusiva, onde o termo difusivo sobressai no código em relação ao termo advectivo, fato ocasionado pela escolha da discretização por diferenças centrais. Os resultados sugerem que a discretização por diferenças centrais em simulações de dispersão em águas subterrâneas favorece o espalhamento do poluente por difusão, para solucionar esse problema seria necessário discretizar o termo difusivo por diferenças centrais e o termo advectivo por diferenças regressivas ou progressivas, dependendo da direção do vetor velocidade. Ainda, a função Kernel deveria contemplar a direção do fluxo. Mesmo apresentando caráter difusivo, o código atende ao esperado quando considerada a inserção de poços de exploração, cenário comum em cidades que utilizam águas subterrâneas para abastecimento e que afeta de maneira marcante os campos de velocidade da água subterrânea. Como consequência, os poluentes tendem a migrar para os setores onde a concentração de poços é mais intensa, amplificando os riscos de poluição das águas de abastecimento.

Mesmo que as simulações aqui apresentadas tenham considerado um poluente genérico, os resultados revelam que injeções próximas de baterias de poços podem levar à migração relativamente rápida de solutos para os cones de depressão. Em casos mais graves, nota-se a tendência de acúmulo de poluentes dentro destes cones, de forma que, mantida a injeção na fonte poluidora, a qualidade da água captada nestes cones tende a piorar progressivamente. Ainda neste contexto, os resultados sugerem para um estudo mais detalhado do termo sumidouro G_2 , o qual modela a extração de água e consequentemente de poluentes pelos poços. Em alguns cenários simulados, este termo demonstrou-se incapaz de impedir acúmulos exagerados nos cones, levando a resultados numericamente espúrios e, na prática, inconsistentes.

A análise de sensibilidade mostrou que os parâmetros k_d , ρ_d e n não são parâmetros sensíveis na equação advecção-dispersão quando considerados na situação padrão analisada, mesmo para variações percentuais grandes em uma dada condição padrão pré-estabelecida. No entanto, esses parâmetros são extremamente importantes na equação advecção-dispersão e precisa-se de estudos mais detalhados para concluir a sensibilidade dos mesmos. Por outro lado, o modelo é sensível aos demais parâmetros analisados k' , ϕ_L e ϕ_T , cujas variações, mesmo que pequenas, causam grandes variações nas concentrações

finais. Observou-se que o modelo é mais sensível ao coeficiente de decaimento de primeira ordem k' e, secundariamente, ao parâmetro ϕ_L , regulador da dispersividade longitudinal do aquífero.

Propõe-se, para trabalhos futuros, a validação do modelo analítico para a equação advecção-dispersão, bem como simulações considerando diferentes tipos de matrizes porosas e a neutralização, aceleração ou retardamento do poluente nestes meios. Para isto, será utilizado um protótipo de aquífero experimental a ser construído pelo programa de pós-graduação em Engenharia Civil da UFU, podendo ser utilizado em pesquisas futuras. Neste caso, condições de contorno internas como as entradas de poluentes no aquífero podem ser melhor controladas, fator que dificilmente é conhecido em condições de campo. As interações com a zona não saturada, de onde advêm os poluentes, também surgem como propostas para estudos futuros.

Uma das vantagens do modelo implementado nesta pesquisa é a possibilidade das simulações serem executadas em computadores individuais simples, sem consumo exagerado de tempo e utilizando um programa amplamente difundido na prática das Engenharias.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ALAMY FILHO, J. E. **Modelagem Numérica de processos de sedimentação em escoamentos turbulentos e análise da ressuspensão em canais** - Tese (Doutorado em Hidráulica e Saneamento) – USP, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2006.
- ALAMY FILHO, J.E.; MIRANDA, M.C.; SALLA, M. R. **Um modelo para simulação de escoamento em aquíferos subjacentes a zonas urbanas**. Revista Brasileira de Recursos Hídricos, v. 18, n.4, p. 255-265, 2013.
- ALMEIDA, R. P.; **Reflexões sobre a água subterrânea na agricultura irrigada no município de Araguari - MG - Brasil - e outorga de direito de uso da água**. 2008. 96 f. Monografia (Bacharelado em Geografia) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2008.
- ALVES, R. P.; **Reflexões sobre a água subterrânea na agricultura irrigada no município de Araguari - MG - Brasil - e outorga de direito de uso da água**. 2008. 96 f. Monografia (Bacharelado em Geografia) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2008.
- ASSUNÇÃO, W. L. **Climatologia da Cafeicultura irrigada no Município de Araguari – MG** - Tese (Doutorado em Geografia) – UNESP, Faculdade de Ciências, Tecnologia, Presidente Prudente, 2002.
- BANDILLA, K. W.; RABIDEAU, A. J.; JANKOVIĆ. A parallel mesh-free contaminant transport model based on the Analytic Element and Streamline Methods. **Advances in Water Resources**, v.32, n.8, p. 1143-1153, 2009.
- BARBANTI, N. R.; PARENTE, K. S. Águas Subterrâneas: Alternativa para Abastecimento. In: XXVIII CONGRESSO INTERAMERICANO DE INGENIERIA SANITARIA Y AMBIENTAL, 2002, Cancún. **Anais...** Cancún: AIDIS, 2002, p.1-8.
- BARRET, R.; BERRY, M.; CHAN, T. F.; DEMMEL, J.; DONATO, J. M.; DONGARRA, J.; EIJKHOUT, V.; POZO, R.; ROMINE, C.; & VAN DER VORST, H. **Templates for the solution of linear systems: building blocks for iterative methods**. SIAM. Philadelphia / PA, 1994.
- BASSO, J. B. **Transporte e retenção de K^+ , Cu^{2+} e Cl^- em uma mistura compactada de solos lateríticos em barreiras selantes**: Procedimentos de homogeneização da mistura e

adaptações em equipamento de percolação em colunas. 2003. 215 f. Dissertação (Mestrado em Geotecnia) – Escola de Engenharia de São Carlos, São Carlos, 2003.

BEAR, J. **Hydraulics of Groundwater**. Nova York: McGraw – Hill Book Co, 1979.

BOUCHE, D.; BONNAUD, G.; RAMOS, D. Comparison of numerical schemes for solving the advection equation. **Applied Mathematics Letters**, v.16, n.2, p. 147-154, 2003.

BRASIL. Portaria nº 2914, de 12 de dezembro de 2011. Dispõe os procedimentos de controle e de vigilância da qualidade da água para consumo humano e seu padrão de potabilidade. **Diário Oficial da União**, Poder Executivo, Brasília, DF, 12 dez. 2011. Seção 1, p. 39-46.

CLEARY, Robert W. **Águas Subterrâneas**, 1989. Disponível em: <http://www.clean.com.br/Menu_Artigos/cleary.pdf >. Acesso em: 18 out. 2012.

COELHO, H. M. G.; SIMÕES, G. F.; LANGE, L. C.; FERREIRA, C. F. A. **Transporte de Contaminantes**. Disponível em: <<http://www.google.com.br/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&ved=0CCQQFjAA&url=http%3A%2F%2Fwww.ens.ufsc.br%2Fflabs%2FLivro%2520Prosab%2Fapendice02.doc&ei=nIybUI6UMpDC0AGKp4D4Dw&usq=AFQjCNERLtbRI7GW7HrEk9sd7MiduuI9fA&sig2=JEbUHaxemRrtVzaQM4vPSA>>. Acesso em: 08 nov. 2012.

CUSHMAN, D. J.; BALL, S. D. Ground Water Modeling for Risk Assessment Purposes: Use of a Gaussian-Distributed Transport Model and a Batch Flush Model. **Ground Water Monitoring & Remediation**, v.13, n.4, p. 162-172, 1993.

ELDHO, T. I.; RAO, B. V. Simulation of two-dimensional contaminant transport with dual reciprocity boundary elements. **Engineering Analysis with Boundary Elements**, Amsterdam, v.20, n.3, p. 213-228, 1997.

FERREIRA, M. B. **Estudo paramétrico do transporte e remediação de HPA em solo com o programa ModFlow**. 2010. 240 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Federal do Rio de Janeiro, RJ, 2010.

GELHAR, L. W., MONTGLOU A., WELTY C., REHFELDT K. R. A Review of Field Scale Physical Solute Transport Processes in Saturated and Insaturated Porous Media, Final Proj. Report, EPRI EA-4190. Electric Power Research Institute. Palo Alto, CA, 1985.

GELHAR, L.W.; WELTY, C.; REHFELDT, K. R. A critical review of data on field-scale dispersion in aquifers. **Water resources research**, v.28, n. 7, p. 1955-1974, 1992.

GUYONNET, C.; NEVILLE, C. Dimensionless analysis of two analytical solutions for 3-D solute transport in groundwater. **Journal contaminant hidrology**, v.75, p. 141-153, 2004.

HUANG, Y.; YEH, H. The use of sensitivity analysis in on-line aquifer parameter estimation. **Journal of Hydrology**, v.335, n.3-4, p. 406-418, 2007.

LI, S.; LIU, W. K. Meshfree and particle methods and their applications. **American Society of Mechanical Engineers**, New York, v.55, n.1, p. 1-34, 2002.

LINSLEY, R. K. **Engenharia de Recursos Hídricos**. Tradução de Luiz Americo Pastorino. São Paulo: Editora da Universidade de São Paulo, 1978.

LIU, J. J.; SONI, B. K. 2D Groundwater contaminant transport modeling by using the finite volume method on an unstructured grid system. **Applied Mathematics and Computation**, v.89, n.1-3, p. 199-211, 1998.

LOPES, D. F. **Transporte de contaminantes em meios porosos**: Aplicação da técnica da transformada integral. 2005. 130 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Química) – Universidade Federal do Pará, Belém, 2005.

HOSSAIN, M.A.; YONGE, D.I. Simulating advective-dispersive transport in groundwater: an accurate finite difference model. **Applied Mathematics and Computation**, v.105, n.2-3, p. 221-230, 1999.

JESUS, A. F. **Um estimulador de erro a posteriori para equação do transporte de contaminantes em regime de pequena advecção**. Tese (Doutorado Engenharia Hidráulica e Saneamento) – USP, Escola de Engenharia de São Carlos, São Carlos, 2010.

MANGIERI, V. R. L. **Estudo das alterações de propriedades físicas e químicas decorrentes da interação solo-lixiviado**. 2008. 168 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia de Saneamento e Edificações) – Universidade Estadual de Londrina, Londrina, 2008.

MEENAL, M.; ELDHO, T.I. Two-dimensional contaminant transport modeling using meshfree point collocation method (PCM). **Engineering Analysis with Boundary Elements**, Amsterdam, v.36, n.4, p. 551-561, 2012.

MIRANDA, M. C. **Modelagem e simulação do escoamento em aquíferos livres sotopostos a zonas urbanas**. 2012. 215 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2012.

OGATA, A. & BANKS, R.B. A solution of the differential equation of longitudinal dispersion on porous media. US Geological Survey Professional Paper, 411-A, 7 p., 1961.

OLIVEIRA, A. S.; FILHO, O. A. Análise e aplicação de modelos numéricos de simulação do fluxo da água subterrânea e dispersão de contaminantes em ambiente de sistema de informação geográfica (SIG). **Minerva**, v. 5, n.3, p. 267-276, 2008.

OLIVEIRA, L. A. Caracterização dos latossolos da chapada de Araguari : minerais argilosos, granulometria e evolução. **Caminhos de Geografia**, v. 3, n.7, p. 20-37, 2003.

OLIVEIRA, L. A.; CAMPOS, J.G. Parâmetros Hidrogeológicos do sistema aquífero Bauru na região de Araguari/MG: Fundamentos para a gestão do sistema de abastecimento de água. **Revista Brasileira de Geociências**, v. 34, n.2, p. 213-218, 2004.

PARK, E.; Zhan, H. Analytical solutions of contaminant transport from finite one-, two-, and three-dimensional sources in a finite-thickness aquifer. **Journal contaminant hidrology**, v.53, p. 41-61, 2001.

SCHNEIDER, M.R.; AMORIM, A. P.; CORSEUIL, H. X. Avaliação dos métodos para determinação dos coeficientes de biodegradação dos compostos BTEX e Etanol em águas subterrâneas contaminadas por gasolina. In: XXII CONGRESSO BRASILEIRO DE ÁGUAS SUBTERRÂNEAS, 2002, São Paulo. **Anais...** São Paulo: eISSN 2179-9784, 2002.

SHEU, T. W. H.; CHEN, Y. H. Finite element analysis of contaminant transport in groundwater. **Applied Mathematics and Computation**, v.127, n.1, p. 23-43, 2002.

SCHULZ, H. E. **O essencial em fenômenos de transportes**. São Paulo: EESC, 2003.

TAUXE, J. D. **Porous medium advection-dispersion modeling in a geographic information system**. 1994. 202 f. Tese – University of Texas, Texas, 1994.

THOMÉ, Antônio; KNOP, Alexandre. **Movimento de Contaminantes no Solo**. Disponível em: < <http://www.upf.br/coaju/download/contaminantesII.pdf>>. Acesso em: 07 nov. 2012.

VAQUEIRO, R. L. C. **Avaliação do potencial de contaminação de aquíferos porosos a partir da perfuração de poços de petróleo utilizando fluido n-parafina**. 2006. 129 f. Dissertação (Mestrado em Recursos Minerais e Hidrogeologia) – Universidade de São Paulo, São Paulo, 2006.

WINTER, H. **Numerical advection schemes in two dimensions**. Disponível em: <<http://www.lancs.ac.uk/~winterh/advectionCS.pdf>>. Acesso em: 19 nov. 2012.

YOUNG, R. N.; MOHAMED, A.M.O; WARKENTIN, B. P.; Principles of contaminant transport in soils. **Journal of Hydrology**, v.152, n.1-4, p. 217-218, 1992.

ZHANG, Q.; LAN, S.; WANG, Y.; XU, Y. A new numerical method for groundwater flow and solute transport using velocity field. **Journal of Hydrodynamics**, Amsterdam, v.20, n.3, p. 356-364, 2008.

ZHANG, K.; ACHARI, G. Fuzzy-stochastic characterization of site uncertainty and variability in groundwater flow and contaminant transport through a heterogeneous aquifer. **Journal of Contaminant Hydrology**, v.106, n.1-2, p. 73-82, 2009.

ZHENG, C.; WANG, P. P. **MT3D - A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion and Chemical Reaction of Contaminants in Groundwater Systems**. U.S. Army Corps of Engineers. Department of Geological Sciences, University of Alabama, 1999.

APÊNDICE A

TRECHO DE CÓDIGO EM *VISUAL BASIC FOR APPLICATIONS* PARA ARMAZENAMENTO ESPARSO CRS DA MATRIZ DE COEFICIENTES E SOLUÇÃO DO SISTEMA LINEAR PELO *PBiCGSTAB*

```
'DECLARAÇÃO DE MATRIZES E VETORES:
'=====
'Vetores e matrizes para o sistema linear:
Dim d(100000) As Double
Dim val(500000), diag(500000) As Variant
Dim col_ind(500000), row_ptr(500000) As Variant
Dim xx(100000), Ax(100000), r(100000), rtil(100000) As Double
Dim pp(100000), vv(100000), pc(100000) As Double
Dim s(100000), sc(100000), t(100000) As Double

'CÁLCULO PRELIMINARES À MONTAGEM DOS VETORES CRS:
'=====
For i = 1 To Ny
For j = 1 To Nx
  'POSIÇÕES DAS PARTÍCULAS:
  '~~~~~
  indx = Int((xpt(i, j) - xo) / dx)
  indy = Int((ypt(i, j) - yo) / dy)
  soma1 = 0
  soma2 = 0
  soma3 = 0
  For ix = (indx - 1) To (indx + 1)
  For iy = (indy - 1) To (indy + 1)
    If (ix > 0 And ix <= Nx And iy > 0 And iy <= Ny) Then
      dist = Sqr((xpt(i, j) - x(iy, ix)) ^ 2 + (ypt(i, j) - y(iy, ix)) ^ 2)
      soma1 = soma1 + u(iy, ix) / dist
      soma2 = soma2 + v(iy, ix) / dist
      soma3 = soma3 + 1 / dist
      If (soma3 <> 0) Then
        upt = soma1 / soma3
        vpt = soma2 / soma3
      Else
        upt = upt
        vpt = vpt
      End If
    End If
  Next iy
End If
Next j
Next i
xpt(i, j) = xpt(i, j) + dt * upt
ypt(i, j) = ypt(i, j) + dt * vpt
Lpluma = Sqr((xpt(i, j) - x(i, j)) ^ 2 + (ypt(i, j) - y(i, j)) ^ 2)
'COEFICIENTES DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA:
'~~~~~
'Dispersividades hidrodinâmicas longitudinal e vertical:
alfaL = fii_L(i, j) * Lpluma
alfaT = fii_T(i, j) * alfaL
'Coeficientes de dispersão hidrodinâmica:
Vx = u(i, j)
Vy = v(i, j)
Vres = Sqr(Vx ^ 2 + Vy ^ 2)
If (Vres > 0) Then
  Dxx(i, j) = alfaL * Vx ^ 2 / Vres + alfaT * Vy ^ 2 / Vres + Dmol
  Dyy(i, j) = alfaL * Vy ^ 2 / Vres + alfaT * Vx ^ 2 / Vres + Dmol
  Dxy(i, j) = (alfaL - alfaT) * Vx * Vy / Vres + Dmol
Else
```

```

        Dxx(i, j) = Dmol
        Dyy(i, j) = Dmol
        Dxy(i, j) = Dmol
    End If
    'ESPESSURA DO AQUÍFERO:
    '~~~~~
    b(i, j) = ho(i, j) - base(i, j)
    If (b(i, j) <= 0) Then
        b(i, j) = 0.1
    End If
Next
Next

'ARMAZENAMENTO ESPARSO CRS:
'=====
Ni = (Ny - 2) 'somente armazenamento de nós internos
Nj = (Nx - 2) 'somente armazenamento de nós internos
n = Ni * Nj
i = 1
fator1 = 1
fator2 = 2
fator3 = 1
fator4 = Ni * Nj - Ni + 2
ii = 2
jj = 2
For linha = 1 To n
    'Varredura da malha:
    If ((linha - 1) > 0 And (linha - 1) Mod Ni = 0) Then
        ii = 2
        jj = jj + 1
    Else
        ii = ii + 1
    End If
    'Coeficientes não nulos da matriz cheia (A):
    A1 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii - 1, jj) * v(ii - 1, jj) / (2 * dy)
+ (b(ii, jj) + b(ii - 1, jj)) * (Dyy(ii, jj) + Dyy(ii - 1, jj)) / (4 * dy ^ 2))
    A2 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii, jj - 1) * u(ii, jj - 1) / (2 * dx)
+ (b(ii, jj) + b(ii, jj - 1)) * (Dxx(ii, jj) + Dxx(ii, jj - 1)) / (4 * dx ^ 2))
    aux1 = -(b(ii, jj + 1) + b(ii, jj)) * (Dxx(ii, jj + 1) + Dxx(ii, jj)) / (4 * dx * dx)
    aux2 = -(b(ii, jj - 1) + b(ii, jj)) * (Dxx(ii, jj - 1) + Dxx(ii, jj)) / (4 * dx * dx)
    aux3 = -(b(ii + 1, jj) + b(ii, jj)) * (Dyy(ii + 1, jj) + Dyy(ii, jj)) / (4 * dy * dy)
    aux4 = -(b(ii - 1, jj) + b(ii, jj)) * (Dyy(ii - 1, jj) + Dyy(ii, jj)) / (4 * dy * dy)
    A3 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (aux1 + aux2 + aux3 + aux4 - lambda(ii,
jj) * b(ii, jj) - Qret(ii, jj) / Ainf) - 1
    A4 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii, jj + 1) * u(ii, jj + 1) / (2 * dx)
+ (b(ii, jj) + b(ii, jj + 1)) * (Dxx(ii, jj) + Dxx(ii, jj + 1)) / (4 * dx ^ 2))
    A5 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii + 1, jj) * v(ii + 1, jj) / (2 * dy)
+ (b(ii, jj) + b(ii + 1, jj)) * (Dyy(ii, jj) + Dyy(ii + 1, jj)) / (4 * dy ^ 2))
    'Primeiro Bloco:
    If (linha = 1) Then
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A3 + A2 + A1
            val(i + 1) = A5
            val(i + 2) = A4
            col_ind(i) = 1
            col_ind(i + 1) = 2
            col_ind(i + 2) = Ni + 1
            row_ptr(linha) = i
            diag(fator1) = val(i)
            fator1 = fator1 + 1
            i = i + 3
        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = 1
            row_ptr(linha) = i
            diag(fator1) = val(i)
            fator1 = fator1 + 1
            i = i + 1
        End If
    ElseIf (linha = fator2 And linha <= Ni) Then
        If (linha < Ni) Then
            If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
                val(i) = A1
                val(i + 1) = A3 + A2

```

```

        val(i + 2) = A5
        val(i + 3) = A4
        col_ind(i) = fator2 - 1
        col_ind(i + 1) = fator2
        col_ind(i + 2) = fator2 + 1
        col_ind(i + 3) = fator2 + Ni
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 1)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 4
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If
Else
    If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
        val(i) = A1
        val(i + 1) = A3 + A2 + A5
        val(i + 2) = A4
        col_ind(i) = fator2 - 1
        col_ind(i + 1) = fator2
        col_ind(i + 2) = fator2 + Ni
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 1)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 3
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If
End If
fator2 = fator2 + 1
'Segundo bloco
ElseIf (linha = fator2 And linha < (Ni * Nj - Ni + 1)) Then
    If (linha = (Ni * fator3 + 1)) Then
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A2
            val(i + 1) = A3 + A1
            val(i + 2) = A5
            val(i + 3) = A4
            col_ind(i) = linha - Ni
            col_ind(i + 1) = linha
            col_ind(i + 2) = linha + 1
            col_ind(i + 3) = linha + Ni
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i + 1)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 4
            fator3 = fator3 + 1
        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 1
        End If
    ElseIf (linha < (Ni * fator3)) Then
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A2
            val(i + 1) = A1
            val(i + 2) = A3
            val(i + 3) = A5
            val(i + 4) = A4
            col_ind(i) = linha - Ni
            col_ind(i + 1) = linha - 1
            col_ind(i + 2) = linha

```

```

        col_ind(i + 3) = linha + 1
        col_ind(i + 4) = linha + Ni
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 2)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 5
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If
Else
    If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
        val(i) = A2
        val(i + 1) = A1
        val(i + 2) = A3 + A5
        val(i + 3) = A4
        col_ind(i) = linha - Ni
        col_ind(i + 1) = linha - 1
        col_ind(i + 2) = linha
        col_ind(i + 3) = linha + Ni
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 2)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 4
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If

    End If
    fator2 = fator2 + 1
'Terceiro Bloco
ElseIf (linha = Ni * Nj - Ni + 1) Then
    If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
        val(i) = A2
        val(i + 1) = A3 + A1 + A4
        val(i + 2) = A5
        col_ind(i) = linha - Ni
        col_ind(i + 1) = linha
        col_ind(i + 2) = linha + 1
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 1)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 3
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If
ElseIf (linha = fator4 And linha < (Ni * Nj)) Then
    If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
        val(i) = A2
        val(i + 1) = A1
        val(i + 2) = A3 + A4
        val(i + 3) = A5
        col_ind(i) = linha - Ni
        col_ind(i + 1) = linha - 1
        col_ind(i + 2) = linha
        col_ind(i + 3) = linha + 1
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 2)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 4
        fator4 = fator4 + 1
    End If

```

```

        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 1
            fator4 = fator4 + 1
        End If
    ElseIf (linha = (Ni * Nj)) Then
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A2
            val(i + 1) = A1
            val(i + 2) = A3 + A4 + A5
            col_ind(i) = linha - Ni
            col_ind(i + 1) = linha - 1
            col_ind(i + 2) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i + 2)
        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 1
        End If
    End If
Next linha
nnz = i + 2
row_ptr(n + 1) = nnz + 0

'VETOR DE RESULTADOS (d):
'=====
linha = 1
For j = 2 To Nx - 1
For i = 2 To Ny - 1
    g2 = 0
    If (indica_f(i, j) = 0) Then 'nós internos não adjacentes à fonte
        'Termos advectivos:
        advx = 0.5 / dx * (b(i, j + 1) * u(i, j + 1) * Co(i, j + 1) - b(i, j - 1) * u(i, j
- 1) * Co(i, j - 1))
        advy = 0.5 / dy * (b(i + 1, j) * v(i + 1, j) * Co(i + 1, j) - b(i - 1, j) * u(i -
1, j) * Co(i - 1, j))
        'Termo difusivo em X:
        be = 0.5 * (b(i, j + 1) + b(i, j))
        bw = 0.5 * (b(i, j) + b(i, j - 1))
        Dxxe = 0.5 * (Dxx(i, j + 1) + Dxx(i, j))
        Dxxw = 0.5 * (Dxx(i, j) + Dxx(i, j - 1))
        difx = 1 / dx * (be * Dxxe * (Co(i, j + 1) - Co(i, j)) / dx - bw * Dxxw * (Co(i, j)
- Co(i, j - 1)) / dx)
        'Termo difusivo em Y:
        bn = 0.5 * (b(i + 1, j) + b(i, j))
        bs = 0.5 * (b(i - 1, j) + b(i, j))
        Dyye = 0.5 * (Dyy(i + 1, j) + Dyy(i, j))
        Dyyw = 0.5 * (Dyy(i - 1, j) + Dyy(i, j))
        dify = 1 / dy * (bn * Dyye * (Co(i + 1, j) - Co(i, j)) / dy - bs * Dyyw * (Co(i, j)
- Co(i - 1, j)) / dy)
        'Termo sumidouro (decaimento de primeira ordem):
        g1 = -lambda(i, j) * b(i, j) * Co(i, j)
        'Termo sumidouro (retirada de poluente por poços ativados):
        g2 = Qret(i, j) * Co(i, j) / Ainf
        'fn(i,j):
        fn(i, j) = 1 / retardo(i, j) * (difx + dify - advx - advy + g1 - g2)
        'vetor de resultados propriamente dito (d):
        d(linha) = -bo(i, j) * Co(i, j) / b(i, j) - dt / (2 * b(i, j)) * fn(i, j)
    ElseIf (indica_f(i, j) = 2) Then 'Condições de Contorno Internas: concentrações
prescritas
        somac = 0
        For k = 1 To Nfontes
            dist = Sqr((xf(k) - x(i, j)) ^ 2 + (yf(k) - y(i, j)) ^ 2)
            If (dist <= 1 * delta) Then
                somac = Kernel(dist, delta) * Cf(k) + somac
            Else
                somac = somac
            End If
        Next k
    End If
End For
End For

```

```

        End If
    Next
    d(linha) = somac
End If
linha = linha + 1
Next
Next

' SOLUÇÃO DO SISTEMA PELO PBiCGSTAB:
'=====
ii = 2
jj = 2
'Campo inicial de concentrações (arbitrário):
For i = 1 To n
    If ((i - 1) > 0 And (i - 1) Mod Ni = 0) Then
        ii = 2
        jj = jj + 1
    Else
        ii = ii + 1
    End If
    xx(i) = Co(ii, jj)
Next
'Produto A.xx:
For i = 1 To n
    Ax(i) = 0#
    For j = row_ptr(i) To (row_ptr(i + 1) - 1)
        Ax(i) = Ax(i) + val(j) * xx(col_ind(j))
    Next
Next
'Resíduos iniciais:
For i = 1 To n
    r(i) = d(i) - Ax(i)
    rtil(i) = r(i)
Next
ite = 1
indica = 0
cont_linha = 1
Sheets("R2").Range(Cells(2, 39), Cells(20000, 41)).ClearContents
Do
    soma = 0#
    For i = 1 To n
        soma = soma + rtil(i) * r(i)
    Next
    ro = soma
    If (ite = 1) Then
        For i = 1 To n
            pp(i) = r(i)
        Next
    Else
        beta = (ro / r2) * (alfa / w)
        soma = 0#
        For i = 1 To n
            pp(i) = r(i) + beta * pp(i) - beta * w * vv(i)
        Next
    End If
    'Pré-condicionamento:
    For i = 1 To n
        pc(i) = pp(i) / diag(i)
    Next
    'Produto A.pc:
    For i = 1 To n
        vv(i) = 0#
        For j = row_ptr(i) To (row_ptr(i + 1) - 1)
            vv(i) = vv(i) + val(j) * pc(col_ind(j))
        Next
    Next
    soma = 0#
    For i = 1 To n
        soma = rtil(i) * vv(i) + soma
    Next
    alfa = ro / soma
    For i = 1 To n
        s(i) = r(i) - alfa * vv(i)
    Next
    'Norma de s():

```

```
soma = 0#
For i = 1 To n
    soma = soma + Abs(s(i))
Next
norma = soma
If (norma < tol) Then
    For i = 1 To n
        xx(i) = xx(i) + alfa * pc(i)
        indica = 1
    Next
End If
'Pré-condicionamento:
For i = 1 To n
    sc(i) = s(i) / diag(i)
Next
'Produto A.sc:
For i = 1 To n
    t(i) = 0#
    For j = row_ptr(i) To (row_ptr(i + 1) - 1)
        t(i) = t(i) + val(j) * sc(col_ind(j))
    Next
Next
soma1 = 0#
soma2 = 0#
For i = 1 To n
    soma1 = soma1 + t(i) * s(i)
    soma2 = soma2 + t(i) * t(i)
Next
w = soma1 / soma2
If (indica <> 1) Then
    For i = 1 To n
        xx(i) = xx(i) + alfa * pc(i) + w * sc(i)
        r(i) = s(i) - w * t(i)
    Next
    resid = 0#
    For i = 1 To n
        If (Abs(r(i)) > resid) Then
            resid = Abs(r(i))
        End If
    Next
    ite = ite + 1
End If
r2 = ro
'Liberando resultados de convergência na planilha:
Sheets("R2").Cells(cont_linha + 1, 39) = ite
Sheets("R2").Cells(cont_linha + 1, 40) = resid
Sheets("R2").Cells(cont_linha + 1, 41) = norma
Macrol
cont_linha = cont_linha + 1
Loop Until (norma < tol Or resid < tol)

Sheets("R2").Cells(16, 3) = ite
```

APÊNDICE B

CÓDIGO GERAL

```

Sub GERAL()
'=====
' CÓDIGO PARA SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE POLUENTES EM AQUÍFEROS
'=====
'=====
' MODELO 2DH DE SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE SOLUTOS EM AQUÍFEROS
' MODELO EULERIANO BASEADO NA APLICAÇÃO DA EQ. ADV-DISP EM TODO O DOMÍNIO
' MODELO LAGRANGEANO AUXILIAR PARA LOCAÇÃO DE PARTÍCULAS PONTEIRO E ESTIMATIVA DAS
DISPERSIVIDADES
'=====
' REGIME PERMANENTE PARA O ESCOAMENTO (SUPERFÍCIE PIEZOMÉTRICA)
' REGIME TRANSIENTE PARA O POLUENTE
'=====
' ESQUEMA DE CRANK-NICOLSON
'=====

'DECLARAÇÃO DE MATRIZES E VETORES:
'=====
'Hidrogeologia:
Dim x(300, 300), y(300, 300), kx(300, 300), ky(300, 300), Sy(300, 300) As Double
Dim ho(300, 300), terreno(300, 300), base(300, 300), poros(300, 300), roo_b(300, 300) As
Double
Dim b(300, 300), bo(300, 300) As Double
Dim u(300, 300), v(300, 300), vel(300, 300) As Double

'Exploração:
Dim poço(500) As String
Dim xp(500), yp(500), Qp(500) As Double
Dim topo_filtro(500), base_filtro(500) As Double
Dim situação(500) As Integer
Dim Qret(300, 300) As Double

'Dispersão:
Dim Co(300, 300), lambda(300, 300), kd(300, 300) As Double
Dim fii_L(300, 300), fii_T(300, 300) As Double
Dim Dxx(300, 300), Dyy(300, 300), Dxy(300, 300) As Double
Dim fn(300, 300) As Double
Dim retardo(300, 300) As Double

'Fontes pontuais:
Dim xf(5000), yf(5000), Rlib(5000), tf_máx(5000), Cf_máx(5000) As Double
Dim Cf(5000) As Double
Dim nomef(5000) As String
Dim tpolut(50), Cpolut(50) As Double

'Partículas do modelo lagrangeano: uma partícula por nó
Dim xpt(300, 300), ypt(300, 300) As Double
Dim TT(300, 300) As Double

'Funções indicadoras:
Dim indica_p(300, 300), indica_f(300, 300) As Integer

'Outras variáveis simples:
Dim i, j, k As Double
Dim ix, iy, indx, indy As Integer
Dim ind, lin As Double
Dim Nx, Ny, Npt, Nfontes, Npoços, Np_ativos As Integer

```

```

'Vetores e matrizes para o sistema linear:
Dim d(100000) As Double
Dim val(500000), diag(500000) As Variant
Dim col_ind(500000), row_ptr(500000) As Variant
Dim xx(100000), Ax(100000), r(100000), rtil(100000) As Double
Dim pp(100000), vv(100000), pc(100000) As Double
Dim s(100000), sc(100000), t(100000) As Double

Sheets("R2").Range(Cells(2, 18), Cells(20000, 41)).ClearContents
início = Time
Sheets("R2").Range("C17").Value = início

'PARÂMETROS DO PROBLEMA:
'=====
Pi = 3.141593
Dmol = 5 * 0.0000001 'difusividade molecular (m2/h)
CFL = 0.25
fatemp = 0
tol = 0.0001 'tolerância para sistema linear
Climite = Sheets("R2").Cells(8, 3) 'concentração máxima limite (mg/L) para encerrar a
execução

'LEITURA DOS DADOS HIDROGEOLÓGICOS:
'=====
'Identificação do tamanho da malha geral:
j = 1
While (Sheets("1").Cells(j + 2, 2) > Sheets("1").Cells(j + 1, 2))
    j = j + 1
Wend
Nx = j
i = 1
ind = 0
While (Sheets("1").Cells(i + 1, 3) <> "")
    If (Sheets("1").Cells(i + 1, 3) <> Sheets("1").Cells(i + 2, 3)) Then
        ind = ind + 1
    End If
    i = i + 1
Wend
Ny = ind
'Sheets("R").Cells(2, 4) = Nx
'Sheets("R").Cells(3, 4) = Ny
'Leitura propriamente dita:
ind = 1
For i = 1 To Ny
    For j = 1 To Nx
        x(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 2)
        y(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 3)
        kx(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 4)
        ky(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 5)
        Sy(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 6)
        ho(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 7)
        terreno(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 8)
        base(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 9)
        poros(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 10)
        roo_b(i, j) = Sheets("1").Cells(ind + 1, 11)
        bo(i, j) = ho(i, j) - base(i, j)
        If (bo(i, j) <= 0) Then
            bo(i, j) = 0.1
        End If
        indica_p(i, j) = 0
        indica_f(i, j) = 0
        ind = ind + 1
    Next
Next
xo = x(1, 1)
yo = y(1, 1)
dx = x(1, 2) - x(1, 1)
dy = y(2, 1) - y(1, 1)

'LEITURA DOS DADOS DE EXPLOTAÇÃO:
'=====
ind = 1
Np_ativos = 0
While (Sheets("2").Cells(ind + 1, 4) <> "")

```

```

poço(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 2)
xp(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 4)
yp(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 5)
situação(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 6)
If (situação(ind) = 1) Then
    Np_ativos = Np_ativos + 1
End If
Qp(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 7)
topo_filtro(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 8)
base_filtro(ind) = Sheets("2").Cells(ind + 1, 9)
ind = ind + 1
Wend
Npoços = ind - 1
'Sheets("R").Cells(2, 7) = Npoços
'Sheets("R").Cells(3, 7) = Np_ativos

'LEITURA DOS PARÂMETROS DE DISPERSÃO DO AQUÍFERO:
'=====
ind = 1
For i = 1 To Ny
For j = 1 To Nx
    Co(i, j) = Sheets("3").Cells(ind + 1, 3)
    lambda(i, j) = Sheets("3").Cells(ind + 1, 4)
    kd(i, j) = Sheets("3").Cells(ind + 1, 5)
    fii_L(i, j) = Sheets("3").Cells(ind + 1, 6)
    fii_T(i, j) = Sheets("3").Cells(ind + 1, 7)
    Dxx(i, j) = Dmol
    Dyy(i, j) = Dmol
    Dxy(i, j) = Dmol
    'retardo(i, j) = (1 + roo_b(i, j) * kd(i, j) / poros(i, j))
    ind = ind + 1
Next
Next

'LEITURA DAS FONTES PONTUAIS DE POLUIÇÃO:
'=====
ind = 1
Nfontes = 0
While (Sheets("4").Cells(ind + 1, 4) <> "")
    nomef(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 3)
    xf(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 4)
    yf(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 5)
    Rlib(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 6)
    tf_máx(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 7)
    Cf_máx(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 8)
    ind = ind + 1
Wend
Nfontes = ind - 1
'Sheets("R").Cells(2, 10) = Nfontes

'LEITURA DO POLUTOGRAMA GERAL PARA AS FONTES:
'=====
ind = 1
While (Sheets("4").Cells(ind + 1, 12) <> "")
    tpolut(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 12)
    cpolut(ind) = Sheets("4").Cells(ind + 1, 13)
    ind = ind + 1
Wend
Npolut = ind - 1

'LEITURA DE DADOS OPERACIONAIS DE ENTRADA:
'=====
tempo_final = Sheets("R2").Cells(6, 3) * (365 * 24) 'tempo final da simulação (h)
dt_entrada = Sheets("R2").Cells(7, 3) 'incremento de tempo da
simulação (h)
Npt = 1 'número de partículas por nó

'ATRIBUIÇÃO DAS FUNÇÕES INDICADORAS AOS NÓS:
'=====
delta = Sqr(dx ^ 2 + dy ^ 2)
'Para poços:
For k = 1 To Npoços
    indx = Int((xp(k) - x(1, 1)) / dx)
    indy = Int((yp(k) - y(1, 1)) / dy)
    For i = (indy - 2) To (indy + 2)

```

```

For j = (indx - 2) To (indx + 2)
  If (i >= 1 And i <= Ny And j >= 1 And j <= Nx) Then
    dist = Sqr((xp(k) - x(i, j)) ^ 2 + (yp(k) - y(i, j)) ^ 2)
    If (dist <= 1 * delta) Then
      indica_p(i, j) = 1
    End If
  End If
Next
Next
Next
'Para fontes poluidoras:
For k = 1 To Nfontes
  indx = Int((xf(k) - x(1, 1)) / dx)
  indy = Int((yf(k) - y(1, 1)) / dy)
  For i = (indy - 2) To (indy + 2)
    For j = (indx - 2) To (indx + 2)
      If (i >= 1 And i <= Ny And j >= 1 And j <= Nx) Then
        dist = Sqr((xf(k) - x(i, j)) ^ 2 + (yf(k) - y(i, j)) ^ 2)
        If (dist <= 1 * delta) Then
          indica_f(i, j) = 2
        End If
      End If
    End If
  Next
Next
Next
Next
'VAZÕES RETIRADAS DE CADA NÓ:
'=====
For i = 1 To Ny
  For j = 1 To Nx
    If (indica_p(i, j) = 0) Then
      Qret(i, j) = 0
    Else
      Qret(i, j) = 0
      For k = 1 To Npoços
        dist = Sqr((xp(k) - x(i, j)) ^ 2 + (yp(k) - y(i, j)) ^ 2)
        If (dist <= 1 * delta) Then
          Qret(i, j) = Kernel(dist, delta) * Qp(k) + Qret(i, j)
        Else
          Qret(i, j) = Qret(i, j)
        End If
      Next
    End If
  Next
Next
Next
'CÁLCULO EM REGIME PERMANENTE PARA O ESCOAMENTO
'VELOCIDADES DE PERCOLAÇÃO:
'=====
lin = 1
For i = 1 To Ny
  For j = 1 To Nx
    'componente em X:
    If (j > 1 And j < Nx) Then 'nós internos
      qx = -kx(i, j) * (ho(i, j + 1) - ho(i, j - 1)) / (2 * dx)
    ElseIf (j = 1) Then
      qx = -kx(i, j) * (ho(i, j + 1) - ho(i, j)) / (1 * dx)
    ElseIf (j = Nx) Then
      qx = -kx(i, j) * (ho(i, j) - ho(i, j - 1)) / (1 * dx)
    End If
    u(i, j) = qx / Sy(i, j)
    'componente em Y:
    If (i > 1 And i < Ny) Then 'nós internos
      qy = -ky(i, j) * (ho(i + 1, j) - ho(i - 1, j)) / (2 * dy)
    ElseIf (i = 1) Then
      qy = -ky(i, j) * (ho(i + 1, j) - ho(i, j)) / (1 * dy)
    ElseIf (i = Ny) Then
      qy = -ky(i, j) * (ho(i, j) - ho(i - 1, j)) / (1 * dy)
    End If
    v(i, j) = qy / Sy(i, j)
    'velocidade resultante:
    vel(i, j) = Sqr(u(i, j) ^ 2 + v(i, j) ^ 2)
    'anexação dos campos de velocidade e das funções indicadoras:
    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 27) = x(i, j)
    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 28) = y(i, j)
  Next
Next

```

```

    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 29) = indica_p(i, j)
    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 30) = indica_f(i, j)
    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 31) = u(i, j)
    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 32) = v(i, j)
    Sheets("R2").Cells(lin + 1, 33) = vel(i, j)
    lin = lin + 1
Next
Next

'POSIÇÕES INICIAIS DAS PARTÍCULAS:liberação de uma partícula em cada nó
'=====
For i = 1 To Ny
For j = 1 To Nx
    xpt(i, j) = x(i, j) + 0.1
    ypt(i, j) = y(i, j) + 0.1
Next
Next

'LEITURA DE DADOS PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE DO COEFICIENTE DE DECAIMENTO:
'=====
'Sheets("S").Activate
cont = 1
coluna = 9
colu = 12
While (Sheets("S").Cells(cont + 1, coluna) <> "")
    cont = cont + 1
Wend
Nanálise_sens = cont - 1

'-----> LAÇO ITERATIVO PARA ATRIBUIÇÃO DOS PARÂMETROS DO MODELO ----->
linh = 2
For conta = 1 To Nanálise_sens
    For i = 1 To Ny
        For j = 1 To Ny
            poros(i, j) = Sheets("S").Cells(linh, 9)
            lambda(i, j) = Sheets("S").Cells(linh, 4)
            kd(i, j) = Sheets("S").Cells(linh, 5)
            retardo(i, j) = (1 + roo_b(i, j) * kd(i, j) / poros(i, j))
            fii_L(i, j) = Sheets("S").Cells(linh, 6)
            fii_T(i, j) = Sheets("S").Cells(linh, 7)
            roo_b(i, j) = Sheets("S").Cells(linh, 8)
        Next
    Next
Next

'-----> LAÇO ITERATIVO TEMPORAL ----->

tempo = 0
nível = 0
fatemp = 5 * dt
Rinf = Sqr((dx / 2) ^ 2 + (dy / 2) ^ 2)
Ainf = Pi * Rinf ^ 2
Sheets("R2").Cells(3, 2) = "CRANK-NICOLSON"
Sheets("R2").Cells(15, 3) = nível
contador = 1

Do

'CONTROLE DO PASSO DE TEMPO:
'~~~~~
Difmax = -1
For i = 1 To Ny
For j = 1 To Nx
    If (Dxx(i, j) > Dyy(i, j)) Then
        If (Dxx(i, j) > Difmax) Then
            Difmax = Dxx(i, j)
        End If
    Else
        If (Dyy(i, j) > Difmax) Then
            Difmax = Dyy(i, j)
        End If
    End If
Next
Next
dt_est = CFL * delta ^ 2 / Abs(Difmax)
If (dt_est < dt_entrada) Then

```

```

    dt = dt_est
    Else
    dt = dt_entrada
End If

If (nível < 10) Then
    dt = dt
    Else
    dt = dt + dt * (nível / 0.5)
End If
If dt > 120 Then
    dt = 120
End If

Sheets("R2").Cells(10, 3) = dt
Sheets("R2").Cells(11, 3) = tempo
Sheets("R2").Cells(12, 3) = tempo / 24
Sheets("R2").Cells(13, 3) = tempo / (30 * 24)
Sheets("R2").Cells(14, 3) = tempo / (365 * 24)
Sheets("R2").Cells(15, 3) = nível

'POLUTOGRAMA DAS FONTES:
'~~~~~
For i = 1 To Nfontes
    t_ = tempo / (tf_máx(i) * 365 * 24)
    For n = 1 To (Npolut - 1)
        If (t_ >= tpolut(n) And t_ < tpolut(n + 1)) Then
            C_ = (t_ - tpolut(n)) / (tpolut(n + 1) - tpolut(n)) * (Cpolut(n + 1) -
Cpolut(n)) + Cpolut(n)
            Cf(i) = C_ * Cf_máx(i) * 0.001 'concentração na fonte (kg/m3)
            GoTo 1
        End If
    Next
Next
1
Next

'CÁLCULO PRELIMINARES À MONTAGEM DOS VETORES CRS:
'=====
For i = 1 To Ny
For j = 1 To Nx
    'POSIÇÕES DAS PARTÍCULAS:
    '~~~~~
    indx = Int((xpt(i, j) - xo) / dx)
    indy = Int((ypt(i, j) - yo) / dy)
    soma1 = 0
    soma2 = 0
    soma3 = 0
    For ix = (indx - 1) To (indx + 1)
    For iy = (indy - 1) To (indy + 1)
        If (ix > 0 And ix <= Nx And iy > 0 And iy <= Ny) Then
            dist = Sqr((xpt(i, j) - x(iy, ix)) ^ 2 + (ypt(i, j) - y(iy, ix)) ^ 2)
            soma1 = soma1 + u(iy, ix) / dist
            soma2 = soma2 + v(iy, ix) / dist
            soma3 = soma3 + 1 / dist
            If (soma3 <> 0) Then
                upt = soma1 / soma3
                vpt = soma2 / soma3
            Else
                upt = upt
                vpt = vpt
            End If
        End If
    Next
    Next
    Next
    'upt = soma1 / soma3
    'vpt = soma2 / soma3
    xpt(i, j) = xpt(i, j) + dt * upt
    ypt(i, j) = ypt(i, j) + dt * vpt
    Lpluma = Sqr((xpt(i, j) - x(i, j)) ^ 2 + (ypt(i, j) - y(i, j)) ^ 2)

'COEFICIENTES DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA:
'~~~~~
'Dispersividades hidrodinâmicas longitudinal e vertical:
alfaL = fii_L(i, j) * Lpluma

```

```

alfaT = fii_T(i, j) * alfaL
'Coeficientes de dispersão hidrodinâmica:
Vx = u(i, j)
Vy = v(i, j)
Vres = Sqr(Vx ^ 2 + Vy ^ 2)
If (Vres > 0) Then
  Dxx(i, j) = alfaL * Vx ^ 2 / Vres + alfaT * Vy ^ 2 / Vres + Dmol
  Dyy(i, j) = alfaL * Vy ^ 2 / Vres + alfaT * Vx ^ 2 / Vres + Dmol
  Dxy(i, j) = (alfaL - alfaT) * Vx * Vy / Vres + Dmol
Else
  Dxx(i, j) = Dmol
  Dyy(i, j) = Dmol
  Dxy(i, j) = Dmol
End If

'ESPESSURA DO AQUÍFERO:
'~~~~~
b(i, j) = ho(i, j) - base(i, j)
If (b(i, j) <= 0) Then
  b(i, j) = 0.1
End If
Next
Next

'ARMAZENAMENTO ESPARSO CRS:
'=====
Ni = (Ny - 2) 'somente armazenamento de nós internos
Nj = (Nx - 2) 'somente armazenamento de nós internos
n = Ni * Nj
i = 1
fator1 = 1
fator2 = 2
fator3 = 1
fator4 = Ni * Nj - Ni + 2
ii = 2
jj = 2
For linha = 1 To n
  'Varredura da malha:
  If ((linha - 1) > 0 And (linha - 1) Mod Ni = 0) Then
    ii = 2
    jj = jj + 1
  Else
    ii = ii + 1
  End If
  'Coeficientes não nulos da matriz cheia (A):
  A1 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii - 1, jj) * v(ii - 1, jj) / (2 * dy)
+ (b(ii, jj) + b(ii - 1, jj)) * (Dyy(ii, jj) + Dyy(ii - 1, jj)) / (4 * dy ^ 2))
  A2 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii, jj - 1) * u(ii, jj - 1) / (2 * dx)
+ (b(ii, jj) + b(ii, jj - 1)) * (Dxx(ii, jj) + Dxx(ii, jj - 1)) / (4 * dx ^ 2))
  aux1 = -(b(ii, jj + 1) + b(ii, jj)) * (Dxx(ii, jj + 1) + Dxx(ii, jj)) / (4 * dx * dx)
  aux2 = -(b(ii, jj - 1) + b(ii, jj)) * (Dxx(ii, jj - 1) + Dxx(ii, jj)) / (4 * dx * dx)
  aux3 = -(b(ii + 1, jj) + b(ii, jj)) * (Dyy(ii + 1, jj) + Dyy(ii, jj)) / (4 * dy * dy)
  aux4 = -(b(ii - 1, jj) + b(ii, jj)) * (Dyy(ii - 1, jj) + Dyy(ii, jj)) / (4 * dy * dy)
  A3 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (aux1 + aux2 + aux3 + aux4 - lambda(ii,
jj) * b(ii, jj) - Qret(ii, jj) / Ainf) - 1
  A4 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii, jj + 1) * u(ii, jj + 1) / (2 * dx)
+ (b(ii, jj) + b(ii, jj + 1)) * (Dxx(ii, jj) + Dxx(ii, jj + 1)) / (4 * dx ^ 2))
  A5 = dt / (2 * b(ii, jj) * retardo(ii, jj)) * (b(ii + 1, jj) * v(ii + 1, jj) / (2 * dy)
+ (b(ii, jj) + b(ii + 1, jj)) * (Dyy(ii, jj) + Dyy(ii + 1, jj)) / (4 * dy ^ 2))
  'Primeiro Bloco:
  If (linha = 1) Then
    If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
      val(i) = A3 + A2 + A1
      val(i + 1) = A5
      val(i + 2) = A4
      col_ind(i) = 1
      col_ind(i + 1) = 2
      col_ind(i + 2) = Ni + 1
      row_ptr(linha) = i
      diag(fator1) = val(i)
      fator1 = fator1 + 1
      i = i + 3
    Else
      val(i) = 1
      col_ind(i) = 1
    End If
  End If
Next

```

```

        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If
ElseIf (linha = fator2 And linha <= Ni) Then
    If (linha < Ni) Then
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A1
            val(i + 1) = A3 + A2
            val(i + 2) = A5
            val(i + 3) = A4
            col_ind(i) = fator2 - 1
            col_ind(i + 1) = fator2
            col_ind(i + 2) = fator2 + 1
            col_ind(i + 3) = fator2 + Ni
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i + 1)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 4
        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 1
        End If
    Else
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A1
            val(i + 1) = A3 + A2 + A5
            val(i + 2) = A4
            col_ind(i) = fator2 - 1
            col_ind(i + 1) = fator2
            col_ind(i + 2) = fator2 + Ni
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i + 1)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 3
        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 1
        End If
    End If
    fator2 = fator2 + 1
'Segundo bloco
ElseIf (linha = fator2 And linha < (Ni * Nj - Ni + 1)) Then
    If (linha = (Ni * fator3 + 1)) Then
        If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
            val(i) = A2
            val(i + 1) = A3 + A1
            val(i + 2) = A5
            val(i + 3) = A4
            col_ind(i) = linha - Ni
            col_ind(i + 1) = linha
            col_ind(i + 2) = linha + 1
            col_ind(i + 3) = linha + Ni
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i + 1)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 4
            fator3 = fator3 + 1
        Else
            val(i) = 1
            col_ind(i) = linha
            row_ptr(linha) = i
            diag(fatord) = val(i)
            fatord = fatord + 1
            i = i + 1
        End If
    End If

```

```

ElseIf (linha < (Ni * fator3)) Then
  If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
    val(i) = A2
    val(i + 1) = A1
    val(i + 2) = A3
    val(i + 3) = A5
    val(i + 4) = A4
    col_ind(i) = linha - Ni
    col_ind(i + 1) = linha - 1
    col_ind(i + 2) = linha
    col_ind(i + 3) = linha + 1
    col_ind(i + 4) = linha + Ni
    row_ptr(linha) = i
    diag(fatord) = val(i + 2)
    fatord = fatord + 1
    i = i + 5
  Else
    val(i) = 1
    col_ind(i) = linha
    row_ptr(linha) = i
    diag(fatord) = val(i)
    fatord = fatord + 1
    i = i + 1
  End If
Else
  If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
    val(i) = A2
    val(i + 1) = A1
    val(i + 2) = A3 + A5
    val(i + 3) = A4
    col_ind(i) = linha - Ni
    col_ind(i + 1) = linha - 1
    col_ind(i + 2) = linha
    col_ind(i + 3) = linha + Ni
    row_ptr(linha) = i
    diag(fatord) = val(i + 2)
    fatord = fatord + 1
    i = i + 4
  Else
    val(i) = 1
    col_ind(i) = linha
    row_ptr(linha) = i
    diag(fatord) = val(i)
    fatord = fatord + 1
    i = i + 1
  End If

  End If
  fator2 = fator2 + 1
'Terceiro Bloco
ElseIf (linha = Ni * Nj - Ni + 1) Then
  If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
    val(i) = A2
    val(i + 1) = A3 + A1 + A4
    val(i + 2) = A5
    col_ind(i) = linha - Ni
    col_ind(i + 1) = linha
    col_ind(i + 2) = linha + 1
    row_ptr(linha) = i
    diag(fatord) = val(i + 1)
    fatord = fatord + 1
    i = i + 3
  Else
    val(i) = 1
    col_ind(i) = linha
    row_ptr(linha) = i
    diag(fatord) = val(i)
    fatord = fatord + 1
    i = i + 1
  End If
ElseIf (linha = fator4 And linha < (Ni * Nj)) Then
  If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
    val(i) = A2
    val(i + 1) = A1
    val(i + 2) = A3 + A4

```

```

        val(i + 3) = A5
        col_ind(i) = linha - Ni
        col_ind(i + 1) = linha - 1
        col_ind(i + 2) = linha
        col_ind(i + 3) = linha + 1
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 2)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 4
        fator4 = fator4 + 1
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
        fator4 = fator4 + 1
    End If
ElseIf (linha = (Ni * Nj)) Then
    If (indica_f(ii, jj) = 0) Then
        val(i) = A2
        val(i + 1) = A1
        val(i + 2) = A3 + A4 + A5
        col_ind(i) = linha - Ni
        col_ind(i + 1) = linha - 1
        col_ind(i + 2) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i + 2)
    Else
        val(i) = 1
        col_ind(i) = linha
        row_ptr(linha) = i
        diag(fatord) = val(i)
        fatord = fatord + 1
        i = i + 1
    End If
End If
Next linha
nnz = i + 2
row_ptr(n + 1) = nnz + 0

'VETOR DE RESULTADOS (d):
'=====
linha = 1
For j = 2 To Nx - 1
For i = 2 To Ny - 1
    g2 = 0
    If (indica_f(i, j) = 0) Then 'nós internos não adjacentes à fonte
        'Termos advectivos:
        advx = 0.5 / dx * (b(i, j + 1) * u(i, j + 1) * Co(i, j + 1) - b(i, j - 1) * u(i, j
- 1) * Co(i, j - 1))
        advy = 0.5 / dy * (b(i + 1, j) * v(i + 1, j) * Co(i + 1, j) - b(i - 1, j) * u(i -
1, j) * Co(i - 1, j))
        'Termo difusivo em X:
        be = 0.5 * (b(i, j + 1) + b(i, j))
        bw = 0.5 * (b(i, j) + b(i, j - 1))
        Dxxe = 0.5 * (Dxx(i, j + 1) + Dxx(i, j))
        Dxxw = 0.5 * (Dxx(i, j) + Dxx(i, j - 1))
        difx = 1 / dx * (be * Dxxe * (Co(i, j + 1) - Co(i, j)) / dx - bw * Dxxw * (Co(i, j)
- Co(i, j - 1)) / dx)
        'Termo difusivo em Y:
        bn = 0.5 * (b(i + 1, j) + b(i, j))
        bs = 0.5 * (b(i - 1, j) + b(i, j))
        Dyye = 0.5 * (Dyy(i + 1, j) + Dyy(i, j))
        Dyyw = 0.5 * (Dyy(i - 1, j) + Dyy(i, j))
        dify = 1 / dy * (bn * Dyye * (Co(i + 1, j) - Co(i, j)) / dy - bs * Dyyw * (Co(i, j)
- Co(i - 1, j)) / dy)
        'Termo sumidouro (decaimento de primeira ordem):
        g1 = -lambda(i, j) * b(i, j) * Co(i, j)
        'Termo sumidouro (retirada de poluente por poços ativados):
        g2 = Qret(i, j) * Co(i, j) / Ainf
        'fn(i,j):
        fn(i, j) = 1 / retardo(i, j) * (difx + dify - advx - advy + g1 - g2)
        'vetor de resultados propriamente dito (d):

```

```

    d(linha) = -bo(i, j) * Co(i, j) / b(i, j) - dt / (2 * b(i, j)) * fn(i, j)
    ElseIf (indica_f(i, j) = 2) Then 'Condições de Contorno Internas: concentrações
prescritas
        somac = 0
        For k = 1 To Nfontes
            dist = Sqr((xf(k) - x(i, j)) ^ 2 + (yf(k) - y(i, j)) ^ 2)
            If (dist <= 1 * delta) Then
                somac = Kernel(dist, delta) * Cf(k) + somac
            Else
                somac = somac
            End If
        Next
        d(linha) = somac
    End If
    linha = linha + 1
Next
Next

' BiCGSTAB:
'=====
ii = 2
jj = 2
'Campo inicial de concentrações (arbitrário):
For i = 1 To n
    If ((i - 1) > 0 And (i - 1) Mod Ni = 0) Then
        ii = 2
        jj = jj + 1
    Else
        ii = ii + 1
    End If
    xx(i) = Co(ii, jj)
    'If (nível < 2) Then
    '    xx(i) = 0.5
    'End If
Next
'Produto A.xx:
For i = 1 To n
    Ax(i) = 0#
    For j = row_ptr(i) To (row_ptr(i + 1) - 1)
        Ax(i) = Ax(i) + val(j) * xx(col_ind(j))
    Next
Next
'Resíduos iniciais:
For i = 1 To n
    r(i) = d(i) - Ax(i)
    rtil(i) = r(i)
Next
ite = 1
indica = 0
cont_linha = 1
Sheets("R2").Range(Cells(2, 39), Cells(20000, 41)).ClearContents
Do
    soma = 0#
    For i = 1 To n
        soma = soma + rtil(i) * r(i)
    Next
    ro = soma
    If (ite = 1) Then
        For i = 1 To n
            pp(i) = r(i)
        Next
    Else
        beta = (ro / r2) * (alfa / w)
        soma = 0#
        For i = 1 To n
            pp(i) = r(i) + beta * pp(i) - beta * w * vv(i)
        Next
    End If
    'Pré-condicionamento:
    For i = 1 To n
        pc(i) = pp(i) / diag(i)
    Next
    'Produto A.pc:
    For i = 1 To n
        vv(i) = 0#

```

```

        For j = row_ptr(i) To (row_ptr(i + 1) - 1)
            vv(i) = vv(i) + val(j) * pc(col_ind(j))
        Next
    Next
    soma = 0#
    For i = 1 To n
        soma = rtil(i) * vv(i) + soma
    Next
    alfa = ro / soma
    For i = 1 To n
        s(i) = r(i) - alfa * vv(i)
    Next
    'Norma de s():
    soma = 0#
    For i = 1 To n
        soma = soma + Abs(s(i))
    Next
    norma = soma
    If (norma < tol) Then
        For i = 1 To n
            xx(i) = xx(i) + alfa * pc(i)
            indica = 1
        Next
    End If
    'Pré-condicionamento:
    For i = 1 To n
        sc(i) = s(i) / diag(i)
    Next
    'Produto A.sc:
    For i = 1 To n
        t(i) = 0#
        For j = row_ptr(i) To (row_ptr(i + 1) - 1)
            t(i) = t(i) + val(j) * sc(col_ind(j))
        Next
    Next
    soma1 = 0#
    soma2 = 0#
    For i = 1 To n
        soma1 = soma1 + t(i) * s(i)
        soma2 = soma2 + t(i) * t(i)
    Next
    w = soma1 / soma2
    If (indica <> 1) Then
        For i = 1 To n
            xx(i) = xx(i) + alfa * pc(i) + w * sc(i)
            r(i) = s(i) - w * t(i)
        Next
        resid = 0#
        For i = 1 To n
            If (Abs(r(i)) > resid) Then
                resid = Abs(r(i))
            End If
        Next
        ite = ite + 1
    End If
    r2 = ro
    'Liberando resultados de convergência na planilha:
    Sheets("R2").Cells(cont_linha + 1, 39) = ite
    Sheets("R2").Cells(cont_linha + 1, 40) = resid
    Sheets("R2").Cells(cont_linha + 1, 41) = norma
    Macro1
    cont_linha = cont_linha + 1
    Loop Until (norma < tol Or resid < tol)

Sheets("R2").Cells(16, 3) = ite

'ATUALIZAÇÕES:
'=====
Dxxmáx = 0
Dyymáx = 0
Dxxmín = 10000000
Dyymín = 10000000
Cmín = 1000000
Cmáx = 0
k = 1

```

```

For j = 2 To Nx - 1
For i = 2 To Ny - 1
  Co(i, j) = xx(k)
  If (Co(i, j) < 1E-20) Then
    Co(i, j) = 0
  End If
  'Atualização e verificação de máximos e mínimos:
  If (Co(i, j) > Cmax) Then
    Cmax = Co(i, j)
  End If
  If (Co(i, j) < Cmin) Then
    Cmin = Co(i, j)
  End If
  If (Dxx(i, j) > Dxxmax) Then
    Dxxmax = Dxx(i, j)
  End If
  If (Dyy(i, j) > Dyymax) Then
    Dyymax = Dyy(i, j)
  End If
  If (Dxx(i, j) < Dxxmin) Then
    Dxxmin = Dxx(i, j)
  End If
  If (Dyy(i, j) < Dyymin) Then
    Dyymin = Dyy(i, j)
  End If
  k = k + 1
Next
Next
'Contornos fronteiros:
For i = 1 To Ny
  Co(i, 1) = Co(i, 2)
  Co(i, Nx) = Co(i, Nx - 1)
Next
For j = 1 To Nx
  Co(1, j) = Co(2, j)
  Co(Ny, j) = Co(Ny - 1, j)
Next

'ANEXAÇÃO DE CONTROLES:
'=====
If (nível Mod 5 = 0) Then
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 18) = nível
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 19) = ite
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 20) = Dxxmax
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 21) = Dxxmin
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 22) = Dyymax
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 23) = Dyymin
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 24) = Cmax * 1000 'mg/L
  Sheets("R2").Cells(contador + 1, 25) = Cmin * 1000 'mg/L
  contador = contador + 1
End If

'ANEXAÇÃO DE RESULTADOS DE CONCENTRAÇÕES E DISPERSÃO:
'=====
If (tempo > fatempo Or Cmax * 1000 >= Climite) Then
  fatempo = fatempo + 24 * 30 * 12
  lin = 1
  For i = 1 To Ny
    For j = 1 To Nx
      'Na planilha R2:
      Sheets("R2").Cells(lin + 1, 34) = Dxx(i, j)
      Sheets("R2").Cells(lin + 1, 35) = Dyy(i, j)
      Sheets("R2").Cells(lin + 1, 36) = ""
      Sheets("R2").Cells(lin + 1, 37) = Co(i, j) * 1000 'mg/L
      Sheets("R1").Cells(i + 1, j + 1) = Co(i, j) * 1000 'em mg/L
      lin = lin + 1
    Next
  Next
  Next
  ActiveWorkbook.Save
  If (Cmax * 1000 >= Climite) Then
    GoTo 38
  End If
End If

tempo = tempo + dt

```

```

nível = nível + 1

'Chama a atualização de barra:
  Percentual = tempo / tempo_final
AtualizaBarra (Percentual)

'Marca a duração da simulação:
fim = Time + TimeValue("00:00:01")
duração = fim - início
Sheets("R2").Range("C18") = duração
Sheets("R2").Range("C18").Select
Selection.NumberFormat = "[$-F400]h:mm:ss AM/PM"

Loop Until tempo > (tempo_final) '<-----FINAL DO LAÇO TEMPORAL

'frmProcesso.Hide
'ActiveWorkbook.Save
38
Per_ana_sens = conta / Nanálise_sens * 100
Sheets("R2").Cells(19, 3) = Per_ana_sens
linea = 1
Sheets("S").Cells(1, colu) = conta
Sheets("S").Cells(1, colu) = tempo / 8760 'tempo em anos
Sheets("S").Cells(2, colu + 1) = lambda(1, 1)
Sheets("S").Cells(3, colu + 1) = kd(1, 1)
Sheets("S").Cells(4, colu + 1) = fii_L(1, 1)
Sheets("S").Cells(5, colu + 1) = fii_T(1, 1)
Sheets("S").Cells(6, colu + 1) = roo_b(1, 1)
Sheets("S").Cells(7, colu + 1) = porös(1, 1)
For i = 1 To Ny
For j = 1 To Nx
  'Na planilha S:
  Sheets("S").Cells(linea + 1, colu + 2) = Dxx(i, j)
  Sheets("S").Cells(linea + 1, colu + 3) = Dyy(i, j)
  Sheets("S").Cells(linea + 1, colu + 4) = Co(i, j) * 1000 'mg/L
  linea = linea + 1
  'Reinicializando os campos de concentração:
  Co(i, j) = 0
  'Reinicializando as posições iniciais das partículas:
  xpt(i, j) = x(i, j) + 0.1
  ypt(i, j) = y(i, j) + 0.1
Next
Next

frmProcesso.Hide
ActiveWorkbook.Save
colu = colu + 6
linh = linh + 1
Next conta '<----- FINAL DO LAÇO PARA ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

End Sub



---


Function Kernel(dist, delta)
  If (dist <= 1 * delta) Then
    Kernel = 1 - dist / delta
  Else
    Kernel = 0
  End If
End Function



---



```