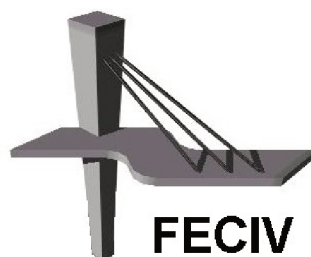


DISSERTAÇÃO DE MESTRADO

**CONSTRUÇÃO DE UM MODELO
COMPUTACIONAL PARA SIMULAÇÃO
DO TRANSPORTE DE POLUENTES EM
AQUÍFEROS**

CAROLINA ANGÉLICA GHELLI

UBERLÂNDIA, 27 DE MARÇO DE 2018



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



CAROLINA ANGÉLICA GHELLI

**CONSTRUÇÃO DE UM MODELO COMPUTACIONAL
PARA SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE POLUENTES
EM AQUÍFEROS**

Dissertação apresentada à Faculdade de Engenharia Civil da Universidade Federal de Uberlândia, como parte dos requisitos para obtenção do título de Mestre em Engenharia Civil.

Orientador: Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho

Uberlândia, 27 de março de 2018

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

G412c
2018 Ghelli, Carolina Angélica, 1991-
 Construção de um modelo computacional para simulação do
 transporte de poluentes em aquíferos [recurso eletrônico] / Carolina
 Angélica Ghelli. - 2018.

 Orientador: José Eduardo Alamy Filho.
 Dissertação (mestrado) - Universidade Federal de Uberlândia,
 Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil.
 Modo de acesso: Internet.
 Disponível em: <http://doi.org/10.14393/ufu.di.2021.6026>
 Inclui bibliografia.
 Inclui ilustrações.

 1. Engenharia civil. I. Alamy Filho, José Eduardo, 1976-, (Orient.).
 II. Universidade Federal de Uberlândia. Programa de Pós-Graduação em
 Engenharia Civil. III. Título.

CDU: 624

Rejâne Maria da Silva (Bibliotecária) – CRB6/1925



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 - PPGE**

ATA Nº: 211/2018

CANDIDATO: Carolina Angélica Ghelli

Nº. Matrícula: 11522ECV005

ORIENTADOR: Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho

TÍTULO: "Construção de um modelo computacional para simulação do transporte de poluentes em aquíferos".

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

LINHA DE PESQUISA: Recursos Hídricos e Saneamento

PROJETO DE PESQUISA: Gestão de Reservatórios

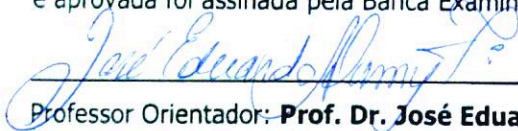
DATA DA DEFESA: 27 de março de 2018.

LOCAL: Sala de Projeções Prof. Celso Franco de Gouvêa, bloco 1Y.


HORÁRIO INÍCIO/TÉRMINO: 14:30 - 14:15

Reuniu-se na **Sala de Reuniões Prof. Celso Franco de Gouvêa, bloco 1Y - Campus Santa Mônica** da Universidade Federal de Uberlândia, a Banca Examinadora, designada pelo Colegiado do PPGE, assim composta: Professores Doutores: **Alice Rosa da Silva – FECIV/UFU; Klebber Teodomiro Martins Formiga – EECA/UFU e José Eduardo Alamy Filho** orientador da candidata. Ressalta-se que o **Prof. Dr. Klebber Teodomiro Martins Formiga** participou da defesa por meio de vídeo conferência desde a cidade de Goiânia (GO) e os demais membros da banca e a aluna participaram in loco.

Iniciando os trabalhos o presidente da mesa **Prof. Dr. José Eduardo Alamy Filho** apresentou a Comissão Examinadora e concedeu à discente a palavra para a exposição do trabalho. A seguir, o senhor presidente concedeu a palavra aos examinadores, que passaram a arguir a candidata. Ultimada a arguição, a Banca, em sessão secreta, atribuiu os conceitos finais. Em face do resultado obtido, a Banca Examinadora considerou a candidata APROVADA. Esta defesa de Dissertação de Mestrado Acadêmico é parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre. O competente diploma será expedido após cumprimento dos demais requisitos, conforme as normas do Programa, a legislação pertinente e a regulamentação interna da UFU. Nada mais havendo a tratar foram encerrados os trabalhos e foi lavrada a presente ata que após lida e aprovada foi assinada pela Banca Examinadora.


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


Membro externo: **Prof. Dr. Klebber Teodomiro Martins Formiga – EECA/UFU**


Membro interno: **Prof. Dr. Alice Rosa da Silva – FECIV/UFU**

Uberlândia, 27 de MARÇO de 2018.

AGRADECIMENTOS

Os primeiros agradecimentos são dedicados a Deus, pelo dom da vida. Pela saúde, força e coragem. Seus ensinamentos que sempre me levam a buscar ser uma pessoa melhor. A N. Sr^a da Abadia por sempre alimentar a minha fé e minhas esperanças.

Aos meus pais José e Claudia, que são meu maior incentivo. Fonte de inspiração, modelo de humildade, dedicação e trabalho a ser seguido. Que nunca pouparam esforços e que sempre fizeram o possível e impossível para que meus sonhos fossem realizados. A eles o meu muito obrigada.

Ao meu orientador, Professor Dr. José Eduardo Alamy Filho, quem levarei como exemplo de profissional a ser seguido. Por tanto conhecimento compartilhado, pelo apoio, paciência e horas dedicadas a elaboração desse trabalho.

Aos meus irmãos Islan e Ricardo e sobrinho José, que são a minha base. Que representam a alegria da minha vida, a quem eu amo tanto.

Ao meu namorado Antônio pelo apoio, paciência, incentivo e amor.

Aos familiares e amigos que me apoiaram, incentivaram e estiveram comigo ao longo dessa caminhada.

Aos professores e colegas do Programa de Pós-graduação da FECIV pelo conhecimento compartilhado, que permitiram o enriquecimento do conhecimento em todas as disciplinas ministradas. Especialmente a professora Dr^a Alice Rosa da Silva e Prof Dr. Jean Rodrigo Garcia pelas contribuições que permitiram a melhoria deste trabalho através do exame de qualificação.

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

Para finalizar, meus sinceros agradecimentos a todos que estiveram e fizeram parte desta etapa importante da minha vida que me possibilitou crescimento como pessoa e profissional.

Ghelli, C. A. Construção de um modelo computacional para simulação de escoamento e do transporte de poluentes em aquíferos. 120 p. Dissertação de Mestrado, Faculdade de Engenharia Civil, Universidade Federal de Uberlândia, 2018.

RESUMO

Devido ao aumento considerável da vulnerabilidade dos aquíferos, cresce a preocupação principalmente pelos municípios que dependem exclusivamente de água subterrânea para seu abastecimento. Com isso há necessidade de se prever a identificação da fonte de poluição e o movimento dos poluentes nos aquíferos. Portanto o objetivo deste trabalho foi apresentar um modelo computacional com intuito de simular o transporte de poluentes em aquíferos. Para isso, foi utilizado o Método de Diferenças Finitas para o tratamento numérico da equação advecção-dispersão, onde a discretização dos termos advectivos foi realizada por diferenças progressivas e regressivas em função das velocidades de escoamento e para os termos difusivos a discretização se deu por diferenças centrais de segunda ordem. No tratamento das derivadas temporais, utilizou-se o esquema totalmente implícito. Para resolução do sistema linear que leva ao cálculo do campo de concentrações foi utilizado o método iterativo dos Gradientes Bi-conjugados Estabilizado e Pré-condicionado. O modelo foi desenvolvido em linguagem de programação aplicada a planilhas eletrônicas e os resultados, apresentados em forma de gráficos, foram gerados no software *Surfer 10*. Foram realizadas simulações aplicadas a fontes pontuais únicas e pontuais lineares. Realizou-se a simulação da equação analítica apresentada por Bear (1979) com objetivo de comparar com os resultados encontrados nas simulações do modelo desenvolvido e uma simulação baseada em uma área real, considerando poços de exploração e injeção para remediação de aquíferos. Os resultados das simulações apresentam a evolução da pluma de poluentes com o decorrer do tempo, os valores das concentrações e indica que o transporte de poluentes em aquíferos é influenciado pela direção e sentido do fluxo subterrâneo.

Palavras-chave: Água subterrânea – Modelagem matemática – Modelagem computacional - Transporte de poluentes – Simulação computacional.

Ghelli, C. A. Construction of a computational model to simulate the transport and flow of pollutants e in aquifers. 120 p. MSc Dissertation, College of Civil Engineering, Federal University of Uberlândia, 2018.

ABSTRACT

Due to the considerable increase in the vulnerability of aquifers, the concern is growing mainly by municipalities that relies exclusively on groundwater for their supply. With this, it is necessary to predict the identification of the source of pollution and the movement of the pollutants in the aquifers. Therefore, the objective of this project was to show a computational model with the intention on simulating the transport of pollutants in aquifers. For this, the Finite Differences Method was used for the numerical treatment of the advection-dispersion equation, where the discretization of the advective terms was performed by progressive and regressive differences as a function of the flow velocities and for the diffusive terms the discretization was given by second order central differences. In the treatment of temporal derivatives, the totally implicit scheme was used. For the resolution of the linear system that leads to the calculation of the concentration field, the iterative method of Stabilized and Preconditioned Bi-conjugate Gradients was used. The model was developed in programming language applied to spreadsheets and the results, presented in graph form, were generated in Surfer 10 software. Simulations were applied to single and linear punctuals source. Were performed a simulation of the analytical equation presented by Bear (1979) in order to compare with the results found in the simulations of the developed model and a simulation based on a real area, considering wells of exploitation and injection for remediation of aquifers. The results of the simulations show the evolution of the pollutant plume over time, the concentration values and indicates that the transport of pollutants in aquifers is influenced by the direction of the underground flow.

Keywords: Groundwater - mathematical modeling – pollutant transport - computer simulation.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1-Ciclo hidrológico e as inter-relações entre os vários sistemas.....	20
Figura 2- Tipos de aquíferos quanto a pressão.....	23
Figura 3- Representação gráfica de heterogeneidade e anisotropia.....	25
Figura 4- Fluxo de água escoando em um meio poroso e atravessando um volume representativo.....	27
Figura 5 - Alternativas de descarte de resíduos.....	34
Figura 6 - Esquema de transferência de informações entre pontos amostrais e os nós de uma malha de discretização.....	57
Figura 7-Esquema de malha de discretização e sistema de indexação.....	58
Figura 8- Esquema de espalhamento da concentração injetada por uma fonte pontual até os nós.....	66
Figura 9- Esquema de espalhamento da vazão de um poço até os nós mais próximo.....	68
Figura 10-Esquema de domínio de cálculo com 20 nós e uma fonte injetora de poluente..	70
Figura 11-Detalhe do sistema linear $Ax=c$ na forma matricial.....	70
Figura 12 - Fluxograma do algoritmo para solução em regime de escoamento permanente e transporte de poluentes em regime transiente.....	72
Figura 13 -Pluma de poluentes gerada pela simulação da solução analítica proposta por Bear (1979), fonte pontual única de poluente.....	77
Figura 14 -Pluma de poluentes pela solução numérica por uma fonte pontual única de poluente.....	77

Figura 15 - Pluma de poluentes pela solução numérica por uma fonte pontual única de poluente.....	78
Figura 16 -Comparação da dispersão de poluente gerada entre a solução analítica e a solução numérica.....	79
Figura 17 - Cortes transversais feitos ao longo do eixo Y e perfis de concentração.....	80
Figura 18 -Plumas de poluente resultantes das soluções analítica e numérica.....	81
Figura 19 - Cortes transversais feitos ao longo do eixo Y e perfis de concentração.....	83
Figura 20 -Plumas de poluente resultantes das soluções analítica e numérica.....	85
Figura 21 - Cortes transversais feitos ao longo do eixo Y e perfis de concentração.....	86
Figura 22 - Plumas de poluente resultantes das soluções analítica e numérica.....	89
Figura 23 - Distribuição da superfície freática inicial.....	90
Figura 24 - Distribuição da espessura inicial do aquífero.....	90
Figura 25 - Distribuição da condutividade hidráulica no aquífero.....	91
Figura 26 - Fontes de poluente e vetores de velocidade de percolação.....	92
Figura 27 - Avanço da pluma de poluente para um horizonte de 7 dias.....	92
Figura 28 - Distribuição dos poços e dos campos de velocidade inicial.....	93
Figura 29 - Campos de concentração superpostos aos campos de cota piezométrica para diferentes instantes transcorridos após o início da operação dos poços.....	94
Figura 30 - Movimentação da frente da pluma ao longo do horizonte de 2 meses.	96
Figura 31Evolução temporal da pluma superposta à superfície do lençol freático.....	97
Figura 32 - Evolução temporal coeficientes de dispersão hidrodinâmica, nas direções X e Y, com linhas de bombeamento e injeção: horizontes de 1 dia, 1 mês e 2 meses.....	98
Figura 33 - Linhas de injeção sobrepostas ao campo de velocidade inicial da água subterrânea.....	100
Figura 34 - Campos de concentração superpostos aos campos de cota piezométrica para diferentes instantes transcorridos após o início da operação dos poços.....	102

Figura 35 - Campos de concentração superpostos à superfície freática para diferentes instantes transcorridos após o início da operação dos poços.....	105
Figura 36 - Superposição da pluma com campos de velocidade para o horizonte de simulação.....	108
Figura 37 - Movimentação da frente de poluição.....	109
Figura 38 - Variações no campo de dispersão hidrodinâmica ao longo do tempo.....	110

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Padrão microbiológico da água para consumo humano.....	32
Tabela 2 - Atividades antrópicas potencialmente geradoras de carga contaminante ao aquífero.....	37
Tabela 3 - Coordenadas das fontes poluidoras.....	81

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
d_{vol}	- Volume do fluido
$erf(x)$	- Função erro
g, \dot{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
vel_i	- Módulo do vetor velocidade na direção i
v_i	- Velocidade de percolação na direção i
u	- Velocidade de percolação na direção x
v	- Velocidade de percolação na direção y
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	- Coeficiente de dispersão hidrodinâmica
D_d	- Coeficiente de difusão
D_L	- Coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal
D_m	- Coeficiente de dispersão mecânica
D_0	- Difusividade molecular
D_T	- Coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal
D_{ij}	- Tensor de coeficiente de dispersão
D^*	- Coeficiente de difusão efetiva
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
N	- Porosidade do aquífero
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
 $Y1$ - Ordenada do limite inferior da fonte do poluente em $x = 0$
 $Y2$ - Ordenada do limite superior da fonte do poluente em $x = 0$
 α_L - Dispersividade do meio na direção longitudinal
 α_T - Dispersividade do meio na direção 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 - Ângulo de rotação médio
 ω - Coeficiente de tortuosidade das trajetórias do fluxo

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	15
1.1 JUSTIFICATIVA.....	16
1.2 OBJETIVOS.....	17
1.3 ESTRUTURA DO TRABALHO.....	17
2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	19
2.1 AQUÍFERO, AQUITARDE E AQUICLUDE.....	21
2.1.1 Tipos de Aquíferos.....	22
2.2 FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA.....	23
2.2.1 Lei de Darcy.....	23
2.2.2 Condutividade hidráulica.....	24
2.2.3 Coeficiente de armazenamento	24
2.2.4 Porosidade (n).....	25
2.3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO ESCOAMENTO SUBTERRÂNEO.....	26
2.4 POLUIÇÃO DE AQUÍFEROS.....	30
2.4.1 Meios de Poluição.....	30
2.4.2 Plumas pontual e difusa.....	36
2.5 MÉTODOS DE TRATAMENTO DE AQUÍFEROS.....	38
2.6 PROCESSOS QUE CONTROLAM OS TRANSPORTES DE SOLUTOS.....	39
2.6.1 Advecção.....	39
2.6.2 Difusão.....	40
2.6.3 Dispersão.....	41
2.6.4 Fator de Retardamento.....	42
2.7 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO TRANSPORTE DE POLUENTES EM AQUÍFEROS.....	43
2.8 MÉTODOS NUMÉRICOS E ANALÍTICOS.....	46
2.8.1 Métodos numéricos.....	48
2.8.2 Solução analítica em duas dimensões fornecida por Bear (1979).....	51
3 METODOLOGIA.....	53

3.1 EQUAÇÃO DA CARGA HIDRÁULICA EM AQUÍFEROS.....	53
3.1.1 Termos difusivos.....	53
3.1.2 Termos de recarga e retirada.....	54
3.1.3 Derivada Temporal.....	56
3.2 COEFICIENTES DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA.....	56
3.3 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO ADVECÇÃO DISPERSÃO.....	57
3.3.1 Termos Difusivos.....	59
3.3.2 Termos Advectivos.....	60
3.3.3 Termo fonte e sumidouro de 1ª ordem.....	62
3.3.4 Derivada Temporal.....	62
3.3.5 Sistema Linear.....	63
3.4 ESPALHAMENTO DE PROPRIEDADES PARA O NÓS.....	65
3.5 SOLUÇÃO DO SISTEMA LINEAR.....	69
3.6 IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO.....	71
4 RESULTADOS.....	53
4.1 SIMULAÇÃO COM UMA ÚNICA FONTE PONTUAL.....	76
4.2 SIMULAÇÃO COM VÁRIAS FONTES PONTUAIS COM COEFICIENTE DE DECAIMENTO NÃO NULO E ADSORÇÃO DESPREZÍVEL.....	81
4.3 SIMULAÇÃO COM VÁRIAS FONTES PONTUAIS COM COEFICIENTE DE DECAIMENTO E ADSORÇÃO DESPREZÍVEIS.....	85
4.4 SIMULAÇÃO COM VÁRIAS FONTES PONTUAIS COM COEFICIENTE DE DECAIMENTO NULO E ADSORÇÃO NÃO DESPREZÍVEL.....	88
4.5 SIMULAÇÃO BASEADA EM UMA ÁREA REAL.....	89
4.5.1 Simulação do avanço da pluma.....	91
4.5.2 Simulação considerando linhas de bombeamento e de injeção.....	93
4.5.3 Simulação considerando apenas linhas de injeção.....	98
5 CONCLUSÕES.....	112
REFERÊNCIAS.....	114

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Praticamente todos os países do mundo, utilizam água subterrânea para suprir suas necessidades, no abastecimento público seja ele total ou parcial e em atividades como irrigação, produção de energia, turismo, indústria entre outros. De acordo com levantamentos da Agência Nacional de Águas (ANA, 2017), no Brasil, em janeiro de 2008, haviam sido cadastradas aproximadamente 145 mil fontes de abastecimento de água subterrânea, sendo quase a totalidade representada por poços tubulares. Em outubro de 2016, os poços cadastrados totalizavam mais de 278 mil. Uma nova projeção da quantidade de poços tubulares existentes no país indica a ordem de 1,2 milhão, o que representa um aumento anual de mais de 22% em relação à estimativa de 2008.

Apesar da água subterrânea não causar um impacto visual quanto os mananciais superficiais, a interferência humana ao meio ambiente tem comprometido de forma negativa a sua qualidade, causando poluição principalmente devido ao crescimento urbano, industrial e agrícola. Esses poluentes podem ou não atingir as águas subterrâneas, o que dependerá das características físico-química dos poluentes. A poluição destas águas compromete a captação de água para consumo devido ao seu lento movimento e grande volume.

A proteção de aquíferos contra agentes poluidores e a busca por uma exploração racional que evite o esgotamento localizado desses mananciais, constituem uma das principais preocupações das cidades que utilizam águas subterrâneas como fonte de abastecimento. O

exacerbado uso das águas subterrâneas para abastecimento, a grande concentração de poços e de atividades potencialmente poluidoras dos aquíferos, chamam a atenção para a necessidade de se prever a identificação da fonte de poluição, o movimento dos poluentes e o estudo da dispersão das plumas de poluentes no fluxo de água subterrâneas. Para o estudo do transporte, concentração e dispersão de poluentes, torna-se necessário o desenvolvimento de modelos matemáticos que permitam compreender e mapear a dispersão de pluma de poluentes nos aquíferos contaminados.

Os modelos matemáticos que possibilitam a simulação da dispersão de poluentes nas águas subterrâneas são resolvidos através da equação do transporte de poluente em aquíferos. Para resolver a essa equação, são utilizados métodos analíticos e numéricos. Os métodos analíticos representam soluções exatas para a equação de transporte de soluto, no entanto apresentam restrições a sistemas de fluxo e propriedades hidrológicas uniformes. Por outro lado, a abordagem numérica é capaz de tratar geologia tanto anisotrópica quanto heterogênea, estes métodos são capazes de solucionar problemas matematicamente mais complexos.

Dentre os métodos numéricos mais utilizados para a resolução da equação advecção dispersão, se destacam o Método dos Elementos Finitos, Métodos de Diferenças Finitas, Método dos Volumes Finitos, entre outros. Este trabalho foi realizado através da resolução da equação advecção dispersão com aplicação de técnicas numéricas baseadas no Método de Diferenças Finitas.

1.1 JUSTIFICATIVA

Em razão de um aumento significativo da utilização dos recursos hídricos subterrâneos, seja ele para qualquer finalidade, consumo humano, abastecimento público, irrigação, criação de animais entre outros. Frente ao crescimento populacional considerável nas últimas décadas resultando em um aumento da quantidade de resíduos produzidos o que consequentemente gera um aumento no risco de contaminação dos aquíferos.

É de suma importância compreender o transporte de poluentes nas águas subterrâneas a fim de evitar, controlar e até mesmo remediar a contaminação dos aquíferos. Dessa forma a construção de um modelo matemático que possui a capacidade de representar a dispersão

dos poluentes, representa uma alternativa para trabalhar no controle da qualidade das águas subterrâneas.

A utilização do Método de Diferenças Finitas para realização da equação Advecção-Dispersão, se justifica por se tratar de um método que exige menor esforço matemático, além de ser mais fácil de ser esboçado e entendido. As derivadas espaciais foram calculadas por dois métodos, para os difusivos foram utilizadas as diferenças centradas de segunda ordem, apresentados em Santos (2015) mostrando resultados satisfatórios. Os termos advectivos foram resolvidos por diferenças progressivas e regressivas, esse método foi escolhido para que o termo advectivo se sobressaísse sobre o termo difusivo.

Para a resolução da derivada temporal foi utilizado o esquema totalmente implícito, entre os métodos testados, Crank Nicolson, Adams-Bashforth de ordem dois e semi-implícito foi o que apresentou melhora mais rápida convergência.

O modelo foi desenvolvido em linguagem de programação *Visual Basic for Applications* aplicado ao ambiente de planilhas eletrônicas e os gráficos foram gerados no software *Surfer 10* o que permite que outras pessoas, mesmo não possuindo afinidade com programação poderão aplicar este trabalho em outras regiões, apenas entrando com as informações específicas da região a ser estudada.

1.2 OBJETIVOS

O presente trabalho tem como objetivo principal, a modificação de um modelo de transporte de poluentes em aquíferos que permite simular a dispersão da pluma de poluentes apresentado por Santos (2015). Trata-se de um modelo bidimensional que utiliza o Método de Diferenças Finitas para a resolução da equação advecção dispersão.

. E os objetivos específicos apresentam-se da seguinte forma:

- Apresentar o modelo que simule o transporte de poluentes a partir de um código escrito em *Visual Basic* aplicado às planilhas eletrônicas;
- Mapear os campos de velocidades médias do fluxo subterrâneo;
- Traçar o movimento dos poluentes no fluxo de água subterrânea;

- Calcular as concentrações de poluentes e mapear o avanço espacial e temporal das plumas;
- Analisar o comportamento das plumas e a dispersão dos poluentes;
- Comparar os resultados com soluções analíticas encontradas na literatura.

1.3 ESTRUTURA DO TRABALHO

Este trabalho é constituído de cinco capítulos, organizados da seguinte maneira:

- Capítulo 1: Apresenta uma introdução sobre o tema de que se trata o presente trabalho, uma breve explicação do que irá se desenvolver ao longo do texto.
- Capítulo 2: Apresenta a revisão bibliográfica, uma breve explicação sobre água subterrânea e aquíferos, poluição de aquíferos e equações que descrevem o transporte de poluentes em aquíferos.
- Capítulo 3: Referente à metodologia do trabalho, apresenta a discretização da equação advecção dispersão e os detalhes para implementação do código.
- Capítulo 4: São apresentados os resultados obtidos após as realizações das simulações realizadas.
- Capítulo 5: Capítulo que apresenta as considerações finais após a análise detalhada dos resultados encontrados no trabalho.
- Capítulo 6: Apresenta as referências bibliográficas que embasaram e fundamentam a construção dessa pesquisa.
-

CAPÍTULO 2

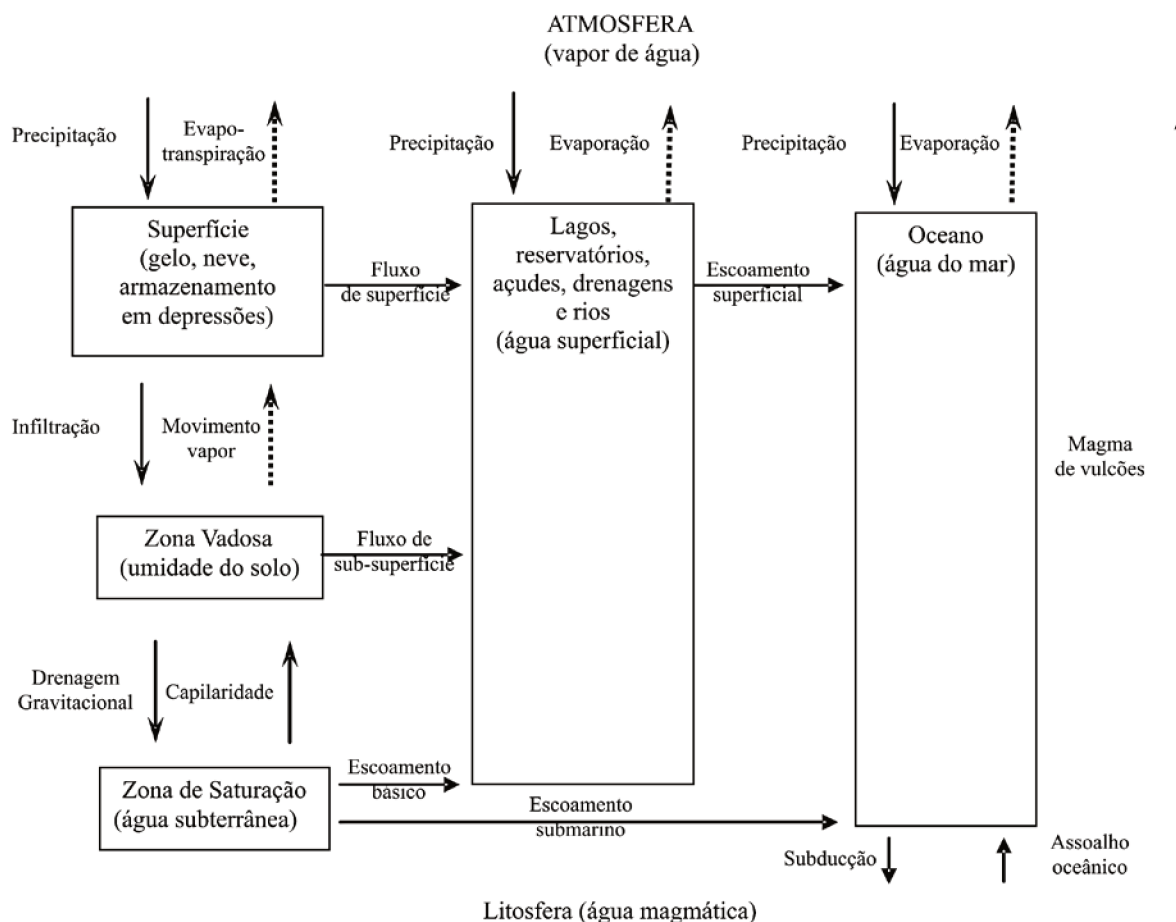
REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

A hidrogeologia é a ciência que estuda as águas subterrâneas. Domenico e Schwartz (1998) a define como sendo o estudo das leis que governam o movimento das águas subterrâneas, as interações mecânicas, físicas e termais dessa água com o sólido poroso, e o transporte de energia, constituintes químicos e a matéria particulada pelo fluxo. Em resumo, a água subterrânea faz parte de um processo do ciclo hidrológico, no qual a água circula do oceano para a atmosfera e da atmosfera para os continentes, de onde retorna, superficial e subterraneamente, ao oceano (FEITOSA; MANOEL FILHO, 2000). A figura 1 representa as etapas do ciclo da água.

De acordo Bear (1979) o termo água subterrânea é utilizado para indicar a água encontrada abaixo da superfície do solo, ou seja, na zona de saturação. Devido a presença de uma camada não saturada sobrejacente faz com que essas águas sejam naturalmente protegidas da poluição. Em se tratando da sua utilização, necessitam de um tratamento simplificado, em que é preciso geralmente o processo de desinfecção, ressaltado assim a importância qualitativa das águas subterrâneas se comparados aos recursos hídricos superficiais.

Para Leal (1999), a utilização de água subterrânea está relacionada a diversos fatores, sendo eles qualitativos, quantitativos e econômicos. O uso da água presentes nos aquíferos depende de aspectos físicos dos mesmos. A profundidade dos aquíferos tem influência econômica pois tornam mais elevados os custos de bombeamento. No entanto, com o passar do tempo o aproveitamento dos aquíferos tem se tornado mais eficazes devido a evolução das técnicas de construção de poços e dos meios de bombeamento, o que permite a exploração de águas subterrâneas em volumes e profundidades cada vez maiores.

Figura 1-Ciclo hidrológico e as inter-relações entre os vários sistemas



Fonte: Adaptado de Fetter (2001)

A disponibilidade hídrica de água doce do Brasil representa 12% em relação a água doce de todo o planeta. O País possui reservas de água subterrânea estimadas em 113 mil km³, um terço do território brasileiro possui área de recarga, ou seja, onde as águas das chuvas se infiltram ou deveriam fazê-lo. Segundo dados do IBGE, 61% do abastecimento humano no Brasil é feito por águas subterrâneas, além do uso para outras atividades como agropecuária, indústria, lazer e geração de energia (BICUDO et al., 2010).

Por apresentarem excelente qualidade, não exigirem a construção de extensas adutoras se comparado a utilização das captações superficiais e apresentarem um menor custo no tratamento, o uso de águas subterrâneas para fins potáveis tem sido cada vez maior (SANTOS, 2015). Em contrapartida, embora o uso do recurso hídrico subterrâneo seja crescente e extenso, a preocupação a respeito das águas subterrâneas é relativamente recente no Brasil.

De acordo com Ribeiro et al. (2007) a composição físico-química da água subterrânea é resultante do enriquecimento mineral de águas provenientes do ciclo hidrológico e do seu tempo de permanência no aquífero. As diferentes composições das rochas e solos hospedeiros e dos processos de mineralização resultam na diversidade composicional das águas subterrâneas.

Para Custodio e Llamas (1996) a contaminação das águas subterrâneas não é visível e sua exploração é muito distribuída, ao contrário das águas superficiais onde a contaminação é mais facilmente identificável. Este fato, dificulta a identificação e caracterização dos problemas de contaminação. Ainda segundo os autores, a ação protetora ou de interrupção da atividade contaminante é aplicada somente quando a contaminação se torna perceptível, assim já tendo atingido uma grande extensão.

2.1 AQUÍFERO, AQUITARDE E AQUICLUDE

As formações subterrâneas podem ser divididas em três tipos, de acordo com a capacidade de fornecer água. São elas aquífero, aquitarde e aquiclude.

Cleary (2007) define aquífero como uma formação geológica com permeabilidade suficiente e porosidade interconectada para armazenar e transmitir quantidades significativas de água, sob gradiente hidráulico naturais. Os aquíferos fornecem água com capacidade para suprir poços e nascentes. Nos períodos de estiagem os aquíferos alimentam os cursos de águas superficiais, mantendo-os estáveis.

Os aquitardes são unidades geológicas de baixa permeabilidade, eles armazenam quantidades significativas de água em áreas extensas, no entanto não podem suprir poços de bombeamento. São considerados formações semi impermeáveis. Os aquicludes são um exemplo extremo de um aquitarde, que é uma unidade geológica impermeável, praticamente incapaz de transmitir água (CLEARY,2007).

2.1.1 Tipos de Aquíferos

De acordo com a pressão da água armazenada, os aquíferos podem ser classificados em dois tipos principais: como confinados ou não confinados como ilustra a Figura 2, dependendo da presença ou ausência de um lençol freático. O lençol freático é a superfície acima da zona de saturação que está em contato direto com a pressão do ar atmosférico,

através dos espaços vazios na formação geológica que se encontra na parte superior da superfície.

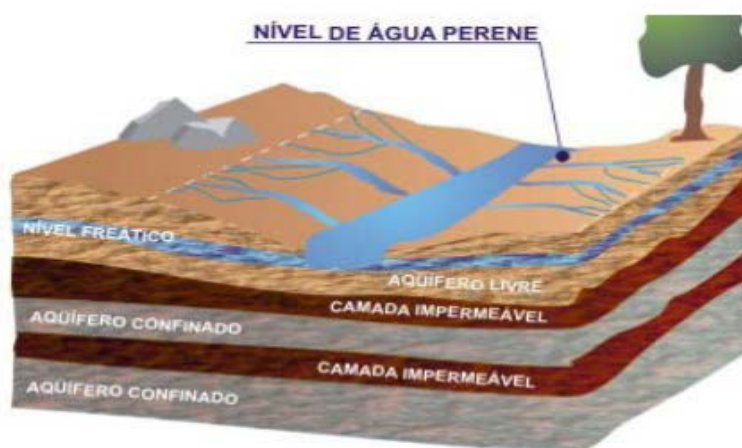
Segundo Cleary (2007), aquíferos confinados são formações geológicas permeáveis, que são contornadas abaixo e acima por materiais relativamente impermeáveis, e que estão sob pressões maiores do que a pressão atmosférica.

A recarga do aquífero confinado através das chuvas, ocorre preferencialmente nos locais onde a formação aflora à superfície. Os aquíferos confinados também podem receber suprimentos indiretos de água que escoam por drenança vertical através de formações superiores semipermeáveis. Sistemas aquíferos confinados quase sempre estão em locais onde ocorrem rochas sedimentares profundas (IGM, 2001).

O aquífero não confinado também denominado freático ou livre, é uma formação geológica permeável, limitada na parte superior pela superfície freática e totalmente saturada de água. A base é formada por uma camada impermeável ou semi impermeável. A superfície livre de água nesse aquífero equivale à superfície piezométrica e encontra-se sob pressão atmosférica. O regime de chuvas influencia diretamente no nível de água dos aquíferos freáticos, o que contribui para o aumento ou a redução do volume de água.

O aquífero livre é o aquífero mais comum e explotado para o abastecimento público, industrial e irrigação devido às pequenas profundidades, o que resulta em menores custos de execução e operação de poços tubulares. No entanto, são os que apresentam maiores problemas relacionados a poluição e contaminação.

Figura 2- Tipos de aquíferos quanto a pressão



Fonte: Miranda (2012).

2.2 FLUXO DE ÁGUA SUBTERRÂNEA

A água subterrânea está sempre em movimento, ela se move de áreas de alto potencial para áreas de baixo potencial. A potencialidade de um aquífero está relacionada com seus parâmetros hidrogeológicos. Representados pela porosidade total, porosidade efetiva, espessura saturada, condutividade hidráulica, transmissividade, coeficiente de armazenamento, rendimento específico, carga hidráulica e velocidade de percolação (MIRANDA, 2012).

2.2.1 Lei de Darcy

A dinâmica do movimento da água subterrânea é explicada pela lei de Darcy (1856), que em resumo explica que seu movimento ocorre pela existência de diferença de cargas hidráulicas no aquífero e pela condutividade hidráulica. A Lei de Darcy pode ser definida nas três dimensões (x,y,z) definidas como coordenadas i , onde denomina a velocidade aparente como:

$$q_i = -K_i \frac{\partial h}{\partial i} \quad (1)$$

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].

O sinal negativo é devido ao gradiente hidráulico ser menor que zero.

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:

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

2.2.2 Condutividade hidráulica

Condutividade hidráulica (K), é o parâmetro que traduz a capacidade de transmissão de água entre dois pontos ao longo da formação geológica, expressa da seguinte forma:

$$K_i = k \left(\frac{\rho}{\mu} \cdot g \right) \quad (2)$$

Onde:

K_i é a condutividade hidráulica na direção i [LT^{-1}];

k é a permeabilidade intrínseca do meio poroso [L^2];

ρ é a massa específica do fluido [ML^{-3}];

μ é a viscosidade absoluta do fluido [$ML^{-1}T^{-1}$];

g é a aceleração da gravidade [LT^{-2}].

Quando a condutividade hidráulica se apresenta diferente de um ponto ao outro do aquífero, ou seja, sofre variações no espaço define-se um aquífero heterogêneo. A condutividade hidráulica também pode variar ao longo das direções, nesse caso o aquífero é anisotrópico. As formações heterogêneas são uma regra na natureza, pois a condutividade hidráulica varia de um local para outro no aquífero (MIRANDA,2012). A Figura 3, representa a heterogeneidade e anisotropia dos aquíferos.

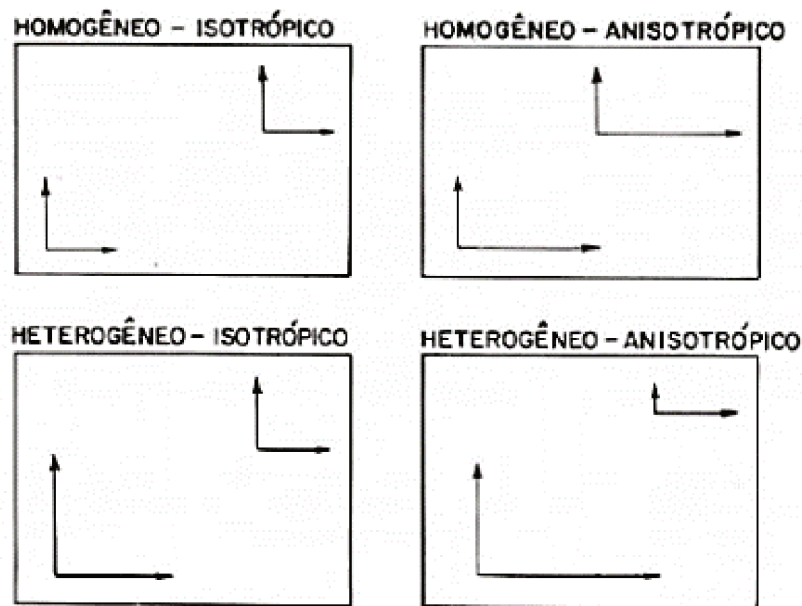
2.2.3 Coeficiente de armazenamento

É um parâmetro adimensional definido como a razão entre o volume de água absorvido ou expelido pelo aquífero por unidade de área superficial. O coeficiente de armazenamento (S) é um indicador do volume de água armazenado ou liberado em função de um acréscimo ou decréscimo de carga hidráulica no aquífero.

Cleary (2007) define armazenamento específico, (S_s), como um volume de água que um volume unitário do aquífero libera do armazenamento ou adiciona a ele, por descida ou subida unitária na carga média do volume unitário. Expresso a seguir:

$$S_s = \frac{dV_{\text{água}}}{V_{\text{aquífero}}} \frac{1}{dh}, [L^{-1}] \quad (3)$$

Figura 3- Representação gráfica de heterogeneidade e anisotropia



Fonte: Adaptado Freeze e Cherry (1979)

2.2.4 Porosidade (n)

Entende-se por porosidade como sendo um parâmetro adimensional definido pela razão entre o volume de vazios V_{vazios} e o volume total V_{total} de uma amostra, ou seja:

$$n = \frac{V_{vazios}}{V_{total}}, \text{ [adimensional]}. \quad (4)$$

E a razão entre o volume de água drenada e o volume total de água é a porosidade efetiva (n_e).

$$n_e = \frac{V_{drenado}}{V_{total}}, \text{ [adimensional]}. \quad (5)$$

2.3 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO ESCOAMENTO SUBTERRÂNEO

O equacionamento do escoamento se baseia na quantificação da carga hidráulica do aquífero. E essa variável é considerada fundamental pois através dela se podem extrair as velocidades de percolação, que são primordiais para previsão do transporte de poluentes nos aquíferos. A carga hidráulica, em um ponto no aquífero é definida como a soma das cargas potencial, de pressão e cinética, ou seja:

$$h = z + \frac{p}{\gamma} + \frac{v^2}{2g} \quad (6)$$

Onde:

z é a carga potencial em relação a um plano horizontal de referência [L];

$\frac{p}{\gamma}$ é a carga piezométrica, onde γ é o peso específico da água [L];

$\frac{v^2}{2g}$ é a carga cinética, onde g é a aceleração da gravidade [L].

A equação que governa o escoamento subterrâneo é baseada na aplicação do princípio de conservação de massa em um elemento de volume infinitesimal do aquífero. Para aplicar este princípio, previamente é importante definir grandezas como descarga e fluxo de massa. Entende-se por descarga de massa (\dot{M}) a massa de água (M) transferida entre dois pontos por unidade de tempo (t), desta forma:

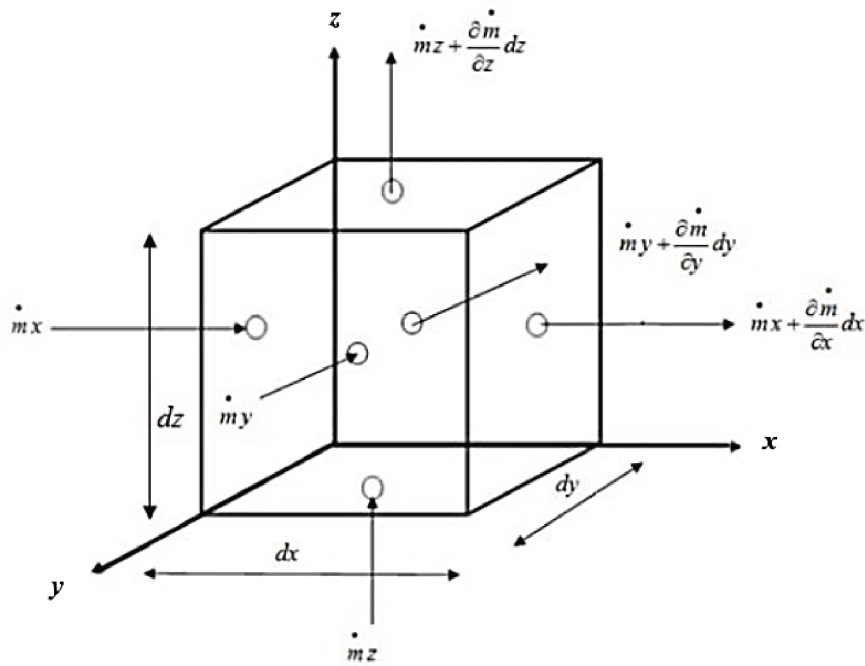
$$\dot{M} = \frac{M}{\Delta t}, [\text{MT}^{-1}] \quad (7)$$

E o fluxo de massa (\dot{m}) é a massa de água transferida por unidade de tempo e de área, ou seja:

$$\dot{m} = \frac{M}{\Delta t \cdot A} = \frac{\dot{M}}{A}, [\text{MT}^{-1}\text{L}^{-2}] \quad (8)$$

Para construção da equação diferencial governante, analisam-se fluxos de massa que atravessam as seis faces do elemento infinitesimal de volume aquífero, de acordo com a Figura 4.

Figura 4- Fluxo de água escoando em um meio poroso e atravessando um volume representativo



Fonte: Miranda (2012)

Aplicando o princípio de conservação de massa:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{M_{entra} - M_{sai}}{dt} = \dot{M}_{entra} - \dot{M}_{sai} = \dot{m}_{entra} \cdot \dot{A}_{entra} - \dot{m}_{sai} \cdot \dot{A}_{sai} \quad (9)$$

Escrevendo as descargas de massa em função dos fluxos de massa e substituindo na equação (9) tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{dM}{dt} = & (\dot{m}_x dydz + \dot{m}_y dxdz + \dot{m}_z dxdy) - \left(\dot{m}_x + \frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} dx \right) dydz - \left(\dot{m}_y + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} dy \right) dxdz - \left(\dot{m}_z + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} dz \right) dxdydz \end{aligned} \quad (10)$$

Rearranjando a equação (10), fica da seguinte forma:

$$\frac{dM}{dt} = - \left(\frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} \right) dxdydz \quad (11)$$

Quanto mais rápido a água atravessa uma determinada área, mais massa de água será conduzida através dessa área. Ou seja, os fluxos de água que passam pelo elemento infinitesimal de volume de aquífero são diretamente proporcionais à velocidade de escoamento. Dessa forma, pode-se escrever o fluxo de massa, em cada direção i , como o produto de uma constante de proporcionalidade, a massa específica da água (ρ_w), pela velocidade aparente de escoamento, dada pela Lei de Darcy (1856):

$$\dot{m}_i \propto q_i \rightarrow \dot{m}_i = cte. q_i = \rho_w q_i \rightarrow \dot{m}_i = -\rho_w \cdot K_i \frac{\partial h}{\partial x_i} \quad (12)$$

Onde:

\dot{m}_i é o fluxo de massa na direção i .

Na equação de conservação, equação (11), aplicando a Lei de Darcy para quantificar as velocidades aparentes nas três direções, tem-se:

$$\frac{dM}{dt} = - \left[\frac{\partial(\rho_w q_x)}{\partial x} + \frac{\partial(\rho_w q_y)}{\partial y} + \frac{\partial(\rho_w q_z)}{\partial z} \right] dxdydz \quad (13)$$

Evidenciando ρ_w e substituindo a equação (1) em (13):

$$\frac{dM}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right] \rho_w dxdydz \quad (14)$$

Onde:

h é a carga hidráulica [L];

Os termos K_i referem-se às condutividades hidráulicas [LT^{-1}].

No primeiro termo desta equação está representada a variação de massa de água, dentro do elemento de volume infinitesimal, em relação ao tempo. A partir de agora, baseia-se na possibilidade de relacionar esta variação com a carga hidráulica no aquífero. Portanto utilizará o conceito de armazenamento específico, já definido em seções anteriores, sendo assim:

$$S_s = \frac{dV_{\text{água}}}{V_{\text{aquífero}} dh} = \frac{dM}{\rho_w dxdydz} \cdot \frac{1}{dh} \rightarrow dM = S_s \cdot \rho_w dxdydz dh \quad (15)$$

Substituindo na equação (13):

$$S_s \frac{dh}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right] \quad (16)$$

Acrescentando os termos fonte e/ou sumidouro na equação (16), ou seja, a vazão de água injetada $g > 0$ ou retirada $g < 0$ por unidade de volume de aquífero, a equação diferencial final, pode ser escrita como:

$$S_s \frac{dh}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) \right] + g \quad (17)$$

A equação (17) refere-se a um modelo fundamental para o escoamento das águas subterrâneas. Um modelo matemático tridimensional que relaciona a carga hidráulica (h), com os parâmetros hidrogeológicos do aquífero, armazenamento específico e condutividade hidráulica. A equação citada também relaciona possíveis variáveis operacionais, como poços tubulares, cujo efeito de extração de água pode ser modelado pelo termo sumidouro g , bem como os suprimentos e água também podem ser modelados pela parcela g . Geralmente, as dimensões horizontais dos aquíferos são muitas ordens de grandeza superiores à sua dimensão vertical. Dessa forma a equação pode ser simplificada a partir da integração ao longo da espessura do aquífero, desde a cota de base (c_b) até a cota de topo (h), portanto:

$$\int_{c_b}^h S_s \frac{dh}{dt} = \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) dz + \int_{c_b}^h g dz \quad (18)$$

Ao realizar a integração da equação (18), tem-se:

$$\left(S_s \frac{dh}{dt} \right) (h - c_b) = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) \right] (h - c_b) + \left[\frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) \right] (h - c_b) + g(h - c_b) \quad (19)$$

O coeficiente de armazenamento do aquífero é calculado como o produto do armazenamento específico (S_s) pela espessura saturada (B), $S = S_s B$. O resultado é uma equação bidimensional, válida para modelagem horizontal do escoamento em aquíferos:

$$S \cdot \frac{dh}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(B \cdot K_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(B \cdot K_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + g(x, y, t) \quad (20)$$

Onde:

S é o coeficiente de armazenamento do aquífero [adimensional];

B é a espessura saturada do aquífero [L];

K_x, K_y são as condutividades hidráulicas nas direções x e y [LT^{-1}];

$g(x, y, t)$ é o termo fonte ou sumidouro para um instante t em um ponto do aquífero localizado por coordenadas horizontais $\bar{X} = x, y$ [$L^3T^{-1}L^{-2}$];

Para aquíferos livres, o contorno superior é representado pela superfície do lençol. Portanto, a espessura saturada do aquífero depende do valor da carga hidráulica, temporalmente variável, ou seja, a espessura saturada é calculada como $h - c_b = B = B'$.

O conceito de armazenamento específico pode ser substituído pelo conceito de rendimento específico, ou cujo valor é equivalente à porosidade efetiva da formação geológica.

$$S_y \frac{dh}{dt} = \frac{\partial}{\partial x} \left(B' \cdot K_x \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(B' \cdot K_y \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + g_1(x, y, t) \quad (21)$$

Onde:

S_y é o rendimento específico do aquífero livre [adimensional];

B' é a espessura saturada do aquífero livre [L].

2.4 POLUIÇÃO DE AQUÍFEROS

A recarga dos aquíferos ocorre, em sua grande maioria, devido à infiltração da água da chuva em excesso no solo, as atividades realizadas neste solo podem ameaçar a qualidade da água subterrânea. A poluição de aquíferos ocorre onde o descarte da carga contaminante gerada por atividades antrópicas sejam elas urbana, industrial, agrícola, mineradora são realizadas inadequadamente e alguns componentes excedem a capacidade de atenuação das camadas do solo (FOSTER et al., 2002).

A vulnerabilidade de um aquífero pode ser definida o quanto ele está protegido naturalmente às prováveis ameaças de contaminação, isso vai depender das características litológicas e hidrogeológicas dos estratos que o separam da fonte de contaminação (geralmente superficial), e dos gradientes hidráulicos que determinam os fluxos e o transporte das substâncias contaminantes através dos sucessivos estratos e dentro do aquífero (ABAS, 2002). A contaminação ocorre pela ocupação inadequada de uma área que não considera a sua vulnerabilidade, ou seja, a capacidade do solo em degradar as substâncias tóxicas introduzidas no ambiente, principalmente na zona de recarga dos aquíferos.

2.4.1 Meios de Poluição

Segundo Bear (1979) os principais agentes causadores de poluição das águas subterrâneas são devido a práticas impróprias com produtos com potencial de poluição. Eles ocorrem normalmente em:

- Fossas sépticas e negras;
- Infiltração de efluentes industriais;

- Fugas da rede de esgoto e galerias de águas pluviais;
- Vazamentos de postos de combustíveis;
- Por aterros sanitários e lixões;
- Uso indevido de fertilizantes nitrogenados;
- Depósitos de lixo próximos dos poços mal construídos ou abandonados.

Entretanto, a mais perigosa, é a contaminação provocada por produtos químicos, que acarretam danos muitas vezes irreversíveis, causando enormes prejuízos, à medida que impossibilita o uso das águas subterrâneas em grandes áreas.

2.4.1.1 Construção de poços

Para garantir a qualidade da água explorada e a melhor eficiência da operação do poço a construção do poço deve ser realizada da melhor forma possível. Segundo a Agência Nacional de Águas ANA (2007), essa questão encontra-se regulamentada por meios de Normas Técnicas da Associação Brasileira de Normas Técnicas. O projeto de poço para captação de água subterrânea é regulamentado pela norma 12.212, onde prevê a elaboração de especificações técnicas de construção, planilha orçamentária e croquis construtivos (ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS, 2006). O projeto executivo deve seguir as normas técnicas para construção de poços, apresentada na norma 12.244 (ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS, 2006).

A construção de poços sem critérios técnicos adequados coloca em risco a qualidade das águas subterrâneas, pois cria uma conexão entre as águas mais rasas, mais vulneráveis a poluição com as águas mais profundas. De acordo com ANA (2007) se destacam os seguintes fatores que colocam em risco os aquíferos devido a má construção dos poços:

- Não isolamento das camadas indesejáveis durante a perfuração;
- Ausência de laje de proteção sanitária e altura inadequada da boca do poço;
- Proximidade com pontos potencialmente contaminantes da água, como fossas, postos de gasolina e lixões;
- Não desinfecção do poço após a construção;
- Não cimentação do espaço anelar entre o furo e o poço, que facilita a entrada de águas superficiais.

2.4.1.2 Saneamento

A falta de saneamento não só influencia a qualidade das águas dos rios bem como impacta diretamente as águas subterrâneas, principalmente na zona urbana., devido a infiltração através de fossas negras, ao escoamento superficial que infiltra no solo e através de vazamento da rede de esgoto. O impacto do lançamento de esgoto na qualidade das águas subterrâneas pode ser detectado através de elevadas concentrações de nitrato e do surgimento de bactérias patogênicas e vírus (ANA, 2007). Para identificação de contaminação são usados os coliformes fecais presentes nas águas subterrâneas.

Segundo o Ministério da Saúde, no Brasil tolera-se a presença de coliformes totais em poços, fonte e nascentes, no entanto devem ser investigadas as origens da ocorrência e tomadas providências imediatas de caráter corretivo e preventivo e realizar nova análise de coliformes. De acordo com a portaria nº 2.914, de 12 de dezembro de 2011 do Ministério da Saúde o padrão microbiológico da água para consumo humano está apresentado na Tabela 1.

Tabela 1- Padrão microbiológico da água para consumo humano

Tipo de água		Parâmetro	VMP ⁽¹⁾
Água para consumo humano		Escherichia coli ⁽²⁾	Ausência em 100 mL
Água tratada	Na saída do tratamento	Coliformes totais ⁽³⁾	Ausência em 100 mL
	No sistema de distribuição (reservatórios e rede	Escherichia coli	Ausência em 100 mL
		Coliformes totais ⁽⁴⁾	Sistemas ou Apenas uma amostra, entre alternativas as amostras coletivas que examinadas no abastecem mês, poderá

menos de apresentar
20.000 resultado
habitantes positivo

Sistemas ou Ausência em
soluções 100 mL em
alternativas 95% das
coletivas que amostras
abastecem a examinadas no
partir de 20.000 mês.
habitantes

NOTAS:

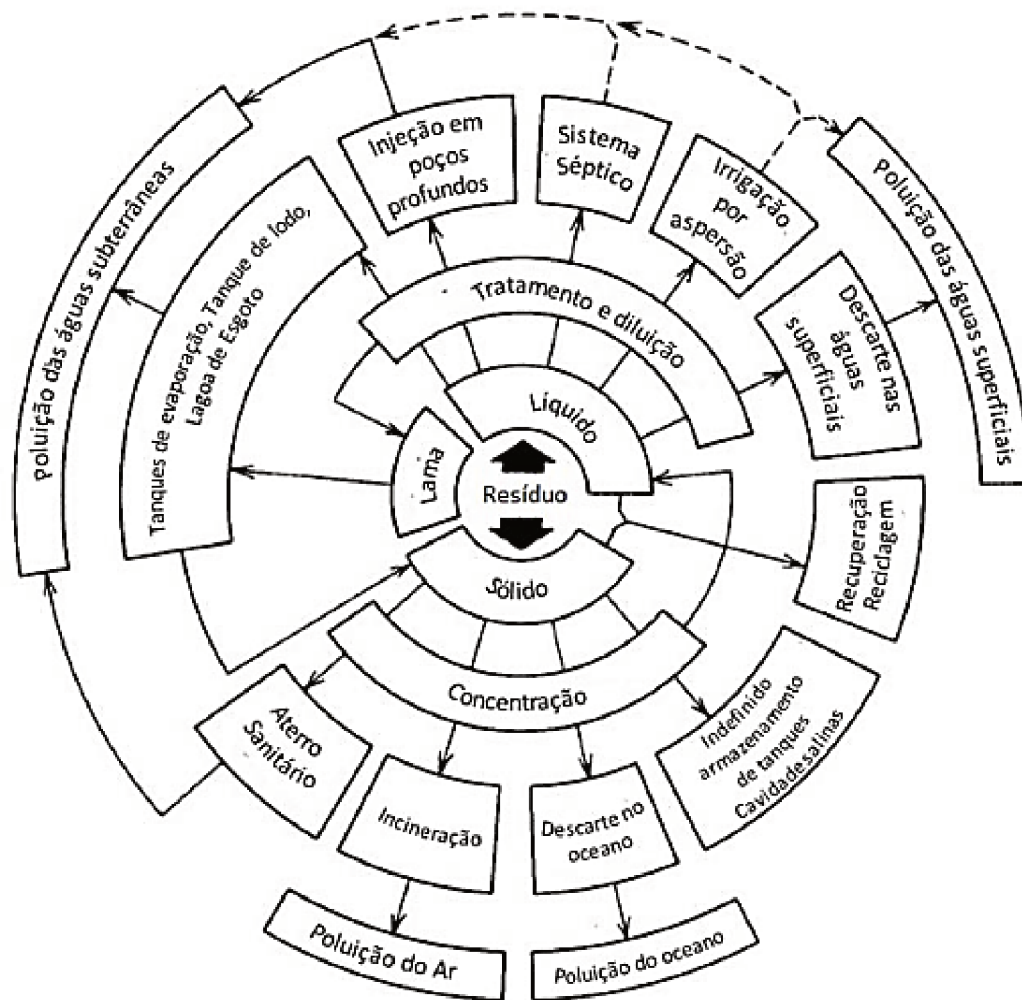
- (1) Valor máximo permitido.
- (2) Indicador de contaminação fecal.
- (3) Indicador de eficiência de tratamento.
- (4) Indicador de integridade do sistema de distribuição (reservatório e rede).

Fonte: Ministério da Saúde (2011)

2.4.1.3 Disposição de Resíduos

O crescimento da população e da produção industrial e agrícola somado com as exigências para o desenvolvimento energético produzem quantidades de resíduos maiores às que o ambiente tem capacidade para absorver. A escolha do método de descarte de resíduos tornou-se um caso de escolher o jeito menos prejudicial a partir de várias alternativas questionáveis. Como representa a figura 5 não existem métodos de descarte de lixo em grande escala que não tenham o potencial de grave poluição de alguma parte do meio ambiente. As técnicas de descarte mais utilizadas, utilização de aterros sanitários e a injeção de resíduos líquidos em poços profundos possuem grande possibilidades de causarem a contaminação das águas subterrâneas (FREEZE; CHERRY, 1979).

Figura 5-Alternativas de descarte de resíduos



Fonte: Adaptada de Freeze; Cherry (1979)

2.4.1.4 Agricultura

Para que a agricultura conseguisse acompanhar o crescimento populacional, foi necessário um aumento da área cultivada e da produtividade que está diretamente associada ao aumento no uso de fertilizantes e agrotóxicos. Os principais nutrientes necessários pelas culturas são o nitrogênio, potássio e o fósforo. Nota-se o aparecimento desses compostos nas águas subterrâneas. Em destaque, o nitrogênio, sendo o elemento que causa maior impacto sobre a água subterrânea e ocorre principalmente na forma de nitrato. Por apresentar elevada mobilidade, este composto pode contaminar extensas áreas.

Experiências internacionais mostram que nas áreas de alta intensidade agrícola próximas às zonas de recargas dos aquíferos, é comum a ocorrência de agrotóxicos na água subterrânea.

Vários países regulamentam as concentrações máximas permissíveis de pesticidas em águas para o consumo humano. No Brasil, o Decreto no 4.074, de 4 de janeiro de 2002, regulamenta a Lei no 7.802, de 11 de julho de 1989, que dispõe, entre outros, sobre a pesquisa, a experimentação e a produção de agrotóxicos, seus componentes e afins. A Portaria no 518, de 25 de março de 2004, que estabelece os procedimentos e responsabilidades relativas ao controle e vigilância da qualidade da água para consumo humano e o seu padrão de potabilidade, que inclui as concentrações máximas de alguns pesticidas organoclorados em água para abastecimento humano. A Resolução no 20 do CONAMA, de 18 de junho de 1986, determina o limite máximo de alguns pesticidas organoclorados, organofosforados e carbamatos que podem estar presentes nas águas de classe 1. Contudo, muitos inseticidas, fungicidas e grande parte dos herbicidas, que são utilizados rotineiramente nas áreas agricultáveis do Brasil, não foram normatizados por essas legislações (BARRETO *et al.*, 2004). Mais recentemente, a Resolução no 357 do CONAMA, de 17 de março de 2005, que substitui a Resolução no 20, acrescentou alguns pesticidas a categorias de águas de classe 1, como a atrazina, simazina e alacloro (ANA, 2007. P. 99)

2.4.1.5 Indústria e Postos de combustíveis

Os contaminantes provenientes das indústrias atingem os solos e os rios, podendo atingir também as águas subterrâneas, o que vai depender das condições de vulnerabilidade do aquífero. Os fatores que influenciam os aquíferos são, o tipo de solo, a profundidade do nível da água, entre outros.

Os tanques de armazenamento de combustíveis ficam enterrados, por diversas causas, como por exemplo a segurança principalmente em casos de explosões. O vazamento de tanques que armazenam os combustíveis pode ser considerado como a principal forma de contaminação do subsolo por derivados do petróleo. Esses vazamentos geralmente podem estar relacionados a problemas de instalação ou, à corrosão dos tanques. Estudos realizados nos Estados Unidos, relatam que o vazamento dos tanques de combustível é a principal fonte da contaminação da água subterrânea (LOUREIRO *et al.*, 2002).

2.4.1.6 Mineração

Apesar da contaminação de águas subterrâneas por mineração ainda ser pouco estudada no Brasil, sabe-se que a atividade pode interferir na qualidade do manancial subterrâneo nas diversas etapas do processo.

Nas minas, principalmente de metal, o problema ocorre devido à dissolução de metais pesados na água durante os processos de lavra. Outro problema está relacionado com os rejeitos líquidos ou até mesmo sólido da mineração, os mais perigosos são produzidos pelas minas de carvão e de metais, destacando-se a oxidação de sulfetos. Os teores de cloretos poderão ser muito elevados quando se verifica a extração de águas conatas (REBOUÇAS, 1996).

2.4.1.7 Cemitérios

A alteração da qualidade das águas subterrâneas por cemitérios está condicionada à presença de microrganismos existentes nos corpos em decomposição. Doenças como hepatite, leptospirose, a febre tifoide e a cólera podem ser causadas por ingestão de água subterrânea contaminada em regiões próximas aos cemitérios (KEMERICH, 2010).

Reconhecendo os cemitérios como fonte potencial de contaminação, em 2003, o CONAMA publicou a Resolução no 335, que dispõe sobre licenciamento ambiental de cemitérios, estabelecendo, entre outros, distância mínima de 1,5 m entre o fundo das sepulturas e o nível freático máximo, e obrigando a destinação ambiental e sanitariamente adequada dos resíduos sólidos em cemitérios (ANA, 2007, P.103).

2.4.2 Plumas pontual e difusa

Segundo Ribeiro et al. (2007) em uma análise das atividades antrópicas que são passíveis de gerar uma carga contaminante no subsolo é de fundamental importância reconhecer quais fontes são de emissão pontual e quais são de emissão difusa. As fontes de poluição pontual são normalmente mais fáceis de serem identificadas, pois causam plumas de contaminação mais concentradas e mais definidas. No entanto, quando essas atividades são pequenas e múltiplas podem se apresentar, essencialmente, como fontes difusas, com consequente dificuldade de identificação e controle. As fontes de poluição difusa geralmente não apresentam plumas de contaminação definidas, impactam uma área maior, consequentemente um maior volume do aquífero. A Tabela 1 apresenta um resumo das

atividades potencialmente geradoras de carga de poluição, assinalando a distribuição de ocorrência das mesmas.

O termo plumas de contaminação ou também chamadas de plumas de poluentes é utilizado quando uma determinada região do aquífero encontra-se degradada. O formato e o volume das mesmas vão depender das características do poluente e do aquífero, possui uma expansão previsível influenciada pela direção e sentido do fluxo subterrâneo.

Tabela 2-Atividades antrópicas potencialmente geradoras de carga contaminante ao aquífero

<i>Atividade</i>	<i>Distribuição do contaminante</i>
URBANA	
<i>Saneamento “in situ”</i>	Pontual/ Difuso
<i>Vazamento de esgotos</i>	Pontual/ Linear
<i>Lagoas de oxidação</i>	Pontual
<i>Aplicação de águas residuais em superfície</i>	Pontual/Difuso
<i>Lixiviado de lixões/aterros sanitários</i>	Pontual
<i>Tanques de combustível</i>	Pontual/ Difuso
<i>Drenos de rodovias</i>	Pontual/ Difuso
INDÚSTRIA	
<i>Vazamento de tanques/tubos</i>	Pontual/ Difuso
<i>Derramamento acidental</i>	Pontual/ Difuso
<i>Lagoas de efluentes</i>	Pontual
<i>Lançamento de efluentes em superfície</i>	Pontual/ Difuso
<i>Canais e rios receptores</i>	Pontual/Linear
<i>Lixiviado de resíduos sólidos</i>	Pontual
<i>Drenos de pátios</i>	Pontual
<i>Material em suspensão e gases</i>	Difuso
AGRÍCOLA	
a. Área de cultivo	
- com agroquímicos	Difuso
- com irrigação	Difuso
- com lodos/resíduos	Difuso

- com irrigação de águas residuais	Difuso
b. Beneficiamento/criação de gado e animais	
- lagoas de efluentes sem revestimento	Pontual
- lançamento em superfície	Pontual/ Difuso
- canais e rios receptores de efluentes	Pontual/ Linear

EXTRAÇÃO MINERAL

Desmonte hidráulico	Pontual/ Difuso
Descarga de água de drenagem	Pontual/ Difuso
Lagoa de decantação	Pontual
Lixiviado de resíduos sólidos	Pontual

Fonte: Adaptada Ribeiro et al. (2007)

2.5 MÉTODOS DE TRATAMENTO DE AQUÍFEROS

Identificado a presença de poluentes nas águas subterrâneas, deve-se mapear a dispersão dos mesmos e providenciar métodos de remediação ou de recuperação dos aquíferos. Estão presentes na literatura diversos métodos com esse objetivo, e sua eficiência pode variar com as características dos poluentes.

De acordo com Gusmão, et. al (2004), a primeira medida em engenharia para remediar um problema de contaminação de aquífero compreende a implementação dos sistemas de controle visando a imobilização da fonte de contaminação e o sistema de controle da pluma de poluentes. Ainda segundo o autor, os sistemas de controle efetivos na prevenção da migração das plumas são realizados através dos usos de poços de bombeamento (barreiras hidráulicas), podendo injetar ou não o recurso tratado.

Yager e Heywood (2014) conduziram um estudo onde simularam os efeitos do bombeamento no fluxo e na vulnerabilidade à contaminação dos poços de abastecimento público nos municípios de Albuquerque, estado do Novo México e no município de Modesto na Califórnia. Os resultados indicaram que as qualidades das águas em ambos os casos poderiam ser melhoradas pelo aumento das taxas médias de bombeamento no período de inverno, pois induziram mais o fluxo lateral de partes do aquífero que contenham água de melhor qualidade. Como por exemplo, a água explorada com índices

de 95% de nitrato e urânio poderiam ser reduzidas para 65%, se triplicasse a taxa média de bombeamento.

Um método recente utilizado no tratamento de aquíferos, baseado no tratamento *in situ*, visando acelerar o processo de remoção da massa de contaminantes é o uso de metais zero valentes, como o ferro atuando como barreiras reativas. No entanto, deve-se atentar aos contaminantes, pois alguns não apresentam nenhuma degradação, já outros, possuem tempo de semivida muito alto o que pode tornar essa tecnologia não efetiva. (GUSMÃO, et. al, 2004).

Outro método popular utilizado para o tratamento de aquíferos contaminados, neste caso por solventes clorados, é a oxidação química com base na injeção de permanganato de potássio. Henderson, et. al. (2009) desenvolveram um modelo tridimensional de transporte reativo de oxidação de solvente clorado por permanganato de potássio, onde desenvolveram o estudo espacial e mapearam a evolução temporal dos processos geoquímicos que ocorrem em resposta a injeções de permanganato em uma região contaminada. O modelo conceitual permitiu, obterem uma base de trabalho para novas investigações sobre a tecnologia.

2.6 PROCESSOS QUE CONTROLAM OS TRANSPORTES DE SOLUTOS

Segundo Thomé e Knop (2012) para simular plumas de poluentes, é necessário conhecer os fatores que exercem influência no transporte de solutos no meio hídrico. O processo de dispersão dos poluentes ao longo das camadas do solo até chegar na zona saturada é diretamente influenciado pela natureza do poluente e do tipo de solo, determinando a dimensão da movimentação dos poluentes no meio poroso. O movimento dos compostos não depende somente do fluxo do fluido onde estas substâncias se dissolvem, mas também de mecanismos que por sua vez dependem de processos físicos, químicos e biológicos que estas substâncias estão submetidas.

Os processos físicos que controlam o transporte de solutos são advecção, difusão e dispersão. Os processos bio-físico-químicos envolvem as diversas reações que podem ocorrer entre o poluente e o meio poroso. Dessa forma, após a injeção de poluente no aquífero, a pluma irá se deslocar e pode ser atenuada por dispersão, diluição, biodegradação, adsorção e outros mecanismos (SANTOS, 2015).

2.6.1 Advecção

Advecção é o mecanismo de transporte ocasionado pelo fluxo de água, onde os solutos presentes se deslocam na direção das linhas de fluxo com a velocidade, em princípio, igual à velocidade média linear da água e sem alterar sua concentração na solução. Ou seja, se a água se move, o poluente é arrastado pelo processo de transporte físico chamado de advecção de fluxo de massa ou fluxo convectivo (PIZARRO, 2009).

A equação diferencial do transporte por advecção, no caso unidimensional, é dada por Bouche et al (2003):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_x \frac{\partial c}{\partial x} \quad (22)$$

Em duas dimensões, a equação de transporte por advecção é escrita, como se segue:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -v_x \frac{\partial c}{\partial x} - v_y \frac{\partial c}{\partial y} \quad (23)$$

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 [L.T^{-2}].

2.6.2 Difusão

O transporte de poluentes por difusão molecular, ocorre devido ao gradiente de concentração existente em um fluido, ou seja, o soluto dissolvido em água desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, onde o objetivo é igualar a concentração em toda a massa de fluido. O que ocorre independente da velocidade do fluido, no entanto é acentuado pela turbulência resultante dos mecanismos de mistura mecânica (PIZARRO, 2009). Segundo Coelho (2012) a difusão molecular ou simplesmente difusão, pode ser expressa pela primeira lei de Fick, ou seja:

$$F = -D_d \frac{dc}{dx} \quad (24)$$

Onde:

F é o fluxo de difusão do soluto [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$];

D_d é o coeficiente de difusão [L^2T^{-1}];

$\frac{dc}{dx}$ é o gradiente de concentração [ML^{-4}];

Considerando que a concentração varia com o tempo, a difusão molecular é dada pela segunda lei de Fick:

$$\frac{dc}{dt} = -D_d \frac{d^2 c}{dx^2} \quad (25)$$

Onde:

Há dados que mostram que a difusão é consideravelmente menor em meios porosos de granulometria fina (LOPES, 2005), devido à tortuosidade das trajetórias de fluxo (MITCHELL, 1991). Então, usa-se um coeficiente de difusão efetiva D^* , dado por:

$$D^* = \omega D_d \quad (26)$$

2.6.3 Dispersão

De acordo com Bear (1972) a dispersão ou transporte por mistura mecânica é o processo de diluição e redução de concentração de soluto quando o mesmo é carregado por advecção através do meio poroso. É causada pela soma da difusão molecular e da dispersão mecânica. O transporte por dispersão é caracterizado pelo espalhamento transversal do poluente ao longo da trajetória do fluxo do fluido (BASSO, 2003).

A substância percorre uma distância com velocidade média e se espalha, então o coeficiente de dispersão é descrito pela equação que segue:

$$D = D_0 + D_m \quad (27)$$

Onde:

D é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}];

D_0 é a difusividade molecular [L^2T^{-1}];

D_m é o coeficiente de dispersão mecânica [L^2T^{-1}];

A dispersão que ocorre na direção do fluxo é denominada de dispersão longitudinal e a que ocorre na direção perpendicular ao fluxo é chamada de dispersão transversal, como segue

nas equações (28) e (29). O processo de difusão molecular não pode ser separado da dispersão mecânica no fluxo de água. Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica longitudinal (D_L) e transversal (D_T), dado em $[L^2T^{-1}]$, são:

$$D_L = \alpha_L v_x + D_0 \quad (28)$$

$$D_T = \alpha_T v_y + D_0 \quad (29)$$

Onde:

α_L é a dispersividade do meio na direção longitudinal [L];

α_T é a dispersividade do meio na direção transversal [L].

$\alpha_L v_x$ e $\alpha_T v_y$ coeficientes de dispersão mecânica longitudinal e transversal, respectivamente $[L^2T^{-1}]$;

v_x velocidade da água nos poros na direção x $[LT^{-1}]$;

D_0 é a difusividade molecular $[L^2T^{-1}]$.

2.6.4 Fator de Retardamento

A ocorrência de reação ou degradação entre o poluente e o meio poroso, implica em mudanças na concentração do soluto e desempenham um papel fundamental no fenômeno de transportes desses poluentes. Como o objetivo deste trabalho não é a análise de todos os processos químicos e biológicos que ocorrem no mecanismo de transporte de poluentes, será analisado apenas, o processo que faz parte da equação diferencial que rege o transporte de solutos deste trabalho.

O fator de retardamento (R) é a grandeza utilizada para modelar a retenção do poluente no meio poroso, ele varia de acordo com o meio no qual o poluente é inserido e, de acordo com Ferreira (2010), pode variar em função de 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.

O fator de retardamento para Coelho (2012) é definido como:

$$R = 1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \quad (30)$$

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 [L^3M^{-1}].

A capacidade do solo em reter os poluentes é limitada. Se a fonte de contaminação tiver alimentação contínua, a taxa de retenção tende a diminuir com o tempo, podendo zerar (YONG et al.,1992). O fator de retardo varia de um até o infinito, sendo que retardo igual a um corresponde à situação mais crítica (OLIVEIRA e FILHO, 2008), onde o poluente avança pelo meio poroso sem sofrer adsorção.

2.7 EQUAÇÕES GOVERNANTES DO TRANSPORTE DE POLUENTES EM AQUÍFEROS

Assim como a equação governante em aquíferos, a equação de transporte de substâncias em aquíferos também deriva da aplicação do princípio de conservação de massa em um elemento infinitesimal de volume. Neste caso, o princípio físico é aplicado para a massa de poluente que se desloca com o escoamento. Dessa forma, a conservação de massa de poluente no elemento de volume de fluido é:

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

Onde:

\dot{M}_{gerado} é uma descarga gerada por unidade de volume de fluido.

Dessa forma, considerando o mesmo raciocínio da demonstração de escoamento, tem-se:

$$\frac{dM}{dt} = - \left(\frac{\partial \dot{m}_x}{\partial x} + \frac{\partial \dot{m}_y}{\partial y} + \frac{\partial \dot{m}_z}{\partial z} + \dot{g} \right) dxdydz \quad (32)$$

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

$$\frac{dM}{dt} = \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \dot{g} \right] dxdydz \quad (33)$$

Onde:

\dot{g} , sendo considerado um termo fonte se $\dot{g} > 0$ ou sumidouro se $\dot{g} < 0$.

Como a massa M do poluente depende da posição e do tempo, $M(x,y,z,t)$. Por derivadas parciais, aplica-se a regra da cadeia, assim:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial M}{\partial x} \frac{dx}{dt} + \frac{\partial M}{\partial y} \frac{dy}{dt} + \frac{\partial M}{\partial z} \frac{dz}{dt} + \frac{\partial M}{\partial t} \quad (34)$$

Se $\frac{dx}{dt}$, $\frac{dy}{dt}$, $\frac{dz}{dt}$ são as componentes de velocidade de percolação do fluido ao longo das direções x, y e z , assim:

$$\frac{dM}{dt} = \frac{\partial M}{\partial x} v_x + \frac{\partial M}{\partial y} v_y + \frac{\partial M}{\partial z} v_z + \frac{\partial M}{\partial t} \quad (35)$$

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

$$c = \frac{M}{dvol} \rightarrow c = \frac{M}{dxdydz} \rightarrow M = cdxdydz \quad (36)$$

Assim, a equação (35) fica:

$$\frac{dM}{dt} = \left(\frac{\partial c}{\partial x} v_x + \frac{\partial c}{\partial y} v_y + \frac{\partial c}{\partial z} v_z + \frac{\partial c}{\partial t} \right) dxdydz \quad (37)$$

Da igualdade de (33) e (37), obtém-se:

$$\frac{\partial c}{\partial x} v_x + \frac{\partial c}{\partial y} v_y + \frac{\partial c}{\partial z} v_z + \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) + \dot{g} \quad (38)$$

Para Santos (2015) o transporte de poluentes em águas subterrâneas inclui os fenômenos clássicos de dispersão hidrodinâmica, advecção, massas de soluto dissolvida na água que entra ou sai do volume simulado. A estes mecanismos também se adicionam as reações de decaimento e o fenômeno de adsorção, os quais contribuem para atenuar o avanço de plumas poluentes em sistemas de fluxo de água subterrânea. Assim a equação diferencial parcial que descreve o transporte de poluentes é:

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

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

$$\dot{g} = -k'c - \frac{\rho_d}{n} \frac{\partial S}{\partial t} - \frac{\rho_d k'}{n} S \quad (40)$$

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 *apud* SANTOS, 2015);

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 [adimensional].

Dessa forma,

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial k_d c}{\partial t} = k_d \frac{\partial c}{\partial t} \quad (41)$$

Substituindo (41) em (40) e rearranjando os termos da equação, segue:

$$\dot{g} = -k' c \left(1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \right) - \frac{\rho_d}{n} k_d \frac{\partial c}{\partial t} \quad (42)$$

Substituindo \dot{g} na equação (39) e evidenciando $\frac{\partial c}{\partial t}$, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial c}{\partial t} \left(1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \right) &= \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial c}{\partial x} v_x - \frac{\partial c}{\partial y} v_y - \frac{\partial c}{\partial z} v_z - \\ &k' c \left(1 + \frac{\rho_d k_d}{n} \right) \end{aligned} \quad (43)$$

Considerando que $R = 1 + \frac{\rho_d k_d}{n}$ e $v_z \cong 0$ e integrando a equação (43) ao longo da espessura do aquífero, ou seja, desde a cota de base (c_b) até a cota de topo (h):

$$\begin{aligned} \int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial t} R dz &= \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) dz + \int_{c_b}^h \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial c}{\partial z} \right) dz - \\ &\int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial x} v_x dz - \int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial y} v_y dz - \int_{c_b}^h \frac{\partial c}{\partial z} v_z dz - \int_{c_b}^h k' c dz \end{aligned} \quad (44)$$

Ao integrar a equação (44):

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

Em duas dimensões, a equação se reduz a:

$$R \frac{\partial(B'c)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(B' D_{xx} \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(B' D_{yy} \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (B' v_x c) - \frac{\partial}{\partial y} (B' v_y c) - k' B' c \quad (46)$$

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 nas 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].

2.8 MÉTODOS NUMÉRICOS E ANALÍTICOS

Modelo segundo Wendland e Rüber (1998) é um sistema que é capaz de reproduzir, pelo menos em parte, o comportamento de qualquer fenômeno natural. Cujo objetivo é prever ou prever cenários onde estão envolvidas variáveis desconhecidas, como, a variação da carga hidráulica ou até mesmo a distribuição de concentrações de poluentes em aquíferos, tanto no tempo quanto no espaço (BEDIENT et al., 1994).

Os modelos podem ser físicos, analógicos ou matemáticos (PIZARRO, 2009). De acordo com Tucci (1998) o modelo físico é a reprodução através de um protótipo, em menor escala, de um sistema. O modelo analógico, é baseado na analogia de diferentes fenômenos na escolha do sistema mais conveniente. Os modelos matemáticos são ferramentas matemáticas para representar uma versão simplificada de um problema real, ou seja, através de termos matemáticos, procura-se entender os processos físicos, químicos e biológicos (PIZARRO, 2009).

Modelos matemáticos têm sido utilizados desde o século XIX para tratar do escoamento das águas subterrâneas, nesse caso, o modelo matemático consiste em conjunto de

equações que visam governar o fluxo das águas subterrâneas (ALAMY FILHO, 2002). Os modelos matemáticos podem ser solucionados através de métodos analíticos ou numéricos.

As soluções analíticas representam as soluções matemáticas exatas para a equação de transporte de soluto (WEXLER, 1992). Essas soluções são largamente utilizadas para estimar o potencial de transporte de contaminantes na água subterrânea e envolvem soluções de equações diferenciais parciais. Normalmente as considerações necessárias à solução analítica de um modelo matemático são bastante restritivas (ALAMY FILHO, 2002). Elas necessitam que os aquíferos possuam sistemas simples de fluxo e propriedades hidrológicas relativamente uniformes, ou seja, homogêneo e isotrópico.

Em sistemas hidrogeológicos complexos, as simulações empregando soluções analíticas ainda podem ser úteis para o hidrólogo, porque elas podem fornecer estimativas das taxas de soluto que se espalhou e, assim, orientar os esforços de coleta de dados e da qualidade da água e do comportamento em águas subterrâneas.

A principal vantagem das soluções analíticas comparadas às soluções numéricas, como por exemplo, a técnica de Diferença de Elementos Finitos é que não há necessidade de discretizar o domínio do escoamento. Dessa forma, pode-se representar o escoamento nas proximidades do poço e, da mesma forma, representar características do escoamento regional a distâncias consideráveis do mesmo (ALAMY FILHO, 2002).

Em contrapartida, segundo Cleary (2007) a abordagem numérica é o único método capaz de tratar geologia tanto anisotrópica quanto heterogênea, daí a importância dos métodos numéricos como alternativa para solucionar problemas matematicamente complexos. O objetivo dos modelos numéricos é dar sustentação às decisões no gerenciamento dos recursos hídricos, conhecendo a distribuição de carga hidráulica e a concentração de poluentes em função do espaço e do tempo.

2.8.1 Métodos numéricos

A partir da década de 60, com o aumento da disponibilidade de computadores, formas aproximadas através de técnicas numéricas têm sido amplamente utilizadas nos estudos de águas subterrâneas. Atualmente, a maioria dos modelos utilizados são numéricos.

Os métodos numéricos analisam todo o campo de fluxo, em um determinado instante, fornecendo soluções para todos os pontos que forem solicitados. A área de interesse é

subdividida em áreas menores, conhecidas como células ou elementos, e a equação do transporte de poluentes em aquíferos é calculada para cada célula pelo balanço de entrada e saída (OLIVEIRA, 2002).

Os principais métodos numéricos para a resolução da equação do transporte de poluentes em águas subterrâneas encontrados na literatura, são: Método das diferenças Finitas, Método dos Elementos Finitos, Método dos Volumes Finitos, Método dos Elementos Analíticos, Método de Elementos de Contorno e Abordagem de Conjuntos Fuzzy.

Dentro dos métodos citados acima, os mais utilizados são os Métodos de Diferenças Finitas e o Método dos Elementos Finitos. Os dois métodos apresentam vantagens e desvantagens, a depender do caso onde serão aplicados.

Os Métodos de Diferenças Finitas prevalecem na prática da hidrogeologia, por exigir menor esforço matemático, ser mais fácil de ser esboçado e entendido. Foi o primeiro método a ser utilizado para solução de problemas de águas subterrâneas. Os fundamentos matemáticos foram estabelecidos por Taylor e Lagrange (GOMES, 2000). No método discretiza-se a região simulada em uma malha regular e para cada nó da malha é construída uma equação algébrica. A velocidade em preparar o sistema linear de equações algébricas e a simplicidade das operações que ocorrem no processo, são consideradas vantagens da aplicação do método.

Como exemplo da aplicação do Método de Diferenças Finitas, pode-se citar o trabalho de Olsthoorn (1999), que apresenta uma comparação feita entre os modelos de diferenças finitas e modelos analíticos usados no acompanhamento do fluxo da água subterrânea em Amsterdã, capital da Holanda. Hossain e Younge (1999) também simularam a equação para transporte em águas subterrâneas pelo método de diferença finitas e compararam os resultados com os encontrados em soluções analíticas.

Santos (2015) apresentou um modelo para simular o transporte de poluentes em águas subterrâneas, com intuito de traçar a evolução espacial e temporal de plumas poluentes. 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. Para resolução do sistema linear que leva ao cálculo do campo de concentrações

foi utilizado o método iterativo dos Gradientes Bi-conjugados Estabilizado e Pré-condicionado.

No entanto o modelo apresentado por Santos (2015), a pluma assume uma característica difusiva, onde o termo difusivo sobressai no código em relação ao termo advectivo, devido a escolha da discretização por diferenças centrais.

Para Fetter (1993) o Método dos Elementos finitos ao contrário do Método das Diferenças Finitas não utiliza malha retangular com nós, nesse caso são utilizados malha em triângulos e quadrados ou tetraedros. Nos pontos de interseção dos triângulos irregulares encontram-se os nós que serão calculados para estimar o transporte de cada elemento. As soluções resultantes são descritas em todo o domínio.

Os Modelos de Elementos Finitos são mais adaptáveis, principalmente quando é necessário ter maior semelhança com a geometria do aquífero (OLIVEIRA, 2002). Como exemplo da aplicação dos Métodos de Elementos Finitos, Pinder e Gray (1977) fazem parte das principais referências nos estudos de águas subterrâneas.

No Método de Volumes Finitos, é importante ressaltar 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 (SANTOS, 2015).

O Método de Elementos Analíticos soluções elementares analíticas, não necessita de contornos artificiais. É baseado no princípio da 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. (SANTOS, 2015)

O Método de Elementos de Contorno é muito utilizado para simular o transporte de poluentes. Eldho e Rao (1997) sugeriram uma simulação usando este 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 satisfatórios os resultados encontrados.

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 complexa em problemas de escoamentos cujo domínio seja de geometria complicada, problemas não lineares ou problemas dependentes do tempo. Dessa forma, alguns pesquisadores na tentativa de solucionar tal problema, tem utilizado métodos que não utilizam malhas, chamadas de 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 (SANTOS, 2015). Como não existe malha, o método é de fácil aplicação em dimensões maiores. 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.

Por fim, a Abordagem de Conjuntos Fuzzy tem sido bastante aplicada 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 (SANTOS, 2015). Zhang e Achari (2009) simularam 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.

2.8.2 Solução analítica em duas dimensões fornecida por Bear (1979)

A solução analítica em duas dimensões apresentada por Bear (1979), se aplica para aquífero de extensão de área infinita com uma fonte pontual contínua, quando o fluido é injetado a uma taxa de concentração constante.

A solução pode ser responsável por decaimento do soluto de primeira ordem.

A solução em duas dimensões apresentada por Bear (1979) considera as seguintes restrições:

1. O fluido é de densidade e viscosidade constante;
2. O soluto pode ser sujeito a transformação química de primeira ordem (considerando um poluente conservativo, $\lambda=0$);
3. O fluxo é apenas na direção x , e a velocidade é constante (sem fluxo radial);
4. Os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal (D_x , e D_y) são constantes.

Portanto a solução analítica em duas dimensões apresentada por Bear (1979):

$$C(x, y, t) = \frac{c_0 Q'}{4n\pi\sqrt{D_x D_y}} \exp\left[\frac{V(x-X_c)}{2D_x}\right] \int_0^t \frac{1}{\tau} * \exp\left[-\left(\frac{V^2}{4D_x} + k'\right)\tau - \frac{(x-X_c)^2}{4D_x\tau} - \frac{(y-Y_c)^2}{4D_y\tau}\right] d\tau \quad (47)$$

Onde:

τ é uma variável de integração para o tempo integral;

c_0 é a fonte de concentração inicial [ML^{-3}];

Q' é taxa de injeção de fluido por unidade de espessura do aquífero [$MT^{-1}L^{-1}$];

n é porosidade do aquífero [adimensional];

v é a velocidade média linear [MT^{-1}];

X_c, Y_c são as coordenadas do ponto de origem;

D_x, D_y são os coeficientes de dispersão nas direções x, y [L^2T^{-1}];

k' é a constante de decaimento de primeira ordem $[T^{-1}]$.

Vale a pena frisar que, pela solução analítica, os eixos x e y são perpendiculares entre si, mas a direção x é obrigatoriamente paralela ao vetor de velocidade resultante. Portanto, estudos práticos que utilizam coordenadas cartesianas nas direções Norte e Leste, como o sistema *Universal Transversa de Mercator* (UTM), por exemplo, exigem a rotação de eixos para obtenção da solução analítica.

CAPÍTULO 3

METODOLOGIA

Para a construção do modelo computacional e realização das simulações hipotéticas é necessário resolver a equação advecção-dispersão, para o cálculo de transporte de poluentes em águas subterrâneas já apresentada no capítulo anterior. O modelo foi desenvolvido em linguagem de programação *Visual Basic for Applications* e os gráficos foram gerados no software *Surfer 10*. Desta forma, a metodologia se divide em:

1. Equação da carga hidráulica em aquíferos;
2. Estimativa dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica;
3. Discretização da equação advecção-dispersão;
4. Espalhamento de propriedades para os nós;
5. Solução do sistema linear;
6. Implementação do código.

3.1 EQUAÇÃO DA CARGA HIDRÁULICA EM AQUÍFEROS

Para o cálculo das cargas hidráulicas foram utilizados estudos de esquemas temporais implícitos, e derivadas espaciais por diferenças centradas de segunda ordem. Dessa forma, a equação para o cálculo das cargas hidráulicas é:

$$S \cdot \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(k_x \cdot b \cdot \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(k_y \cdot b \cdot \frac{\partial h}{\partial y} \right) + g_1 + g_2 + g_3 \quad (48)$$

Onde:

g_1 representa a recarga direta [m/h];

g_2 representa a recarga indireta [m/h];

g_3 a retirada através de poços [m/h].

3.1.1 Termos difusivos

O termo difusivo em x calculado por diferenças centradas de segunda ordem, é:

$$\begin{aligned} Difx_{i,j} = & \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot [(b_{i,j+1} + b_{i,j}) \cdot (Kx_{i,j+1} + Kx_{i,j})] \cdot h_{i,j+1} + \left[-\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j+1} + \right. \\ & b_{i,j}) \cdot (Kx_{i,j+1} + Kx_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Kx_{i,j} + Kx_{i,j-1}) \left. \right] \cdot h_{i,j} + \\ & \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Kx_{i,j} + Kx_{i,j-1}) \cdot h_{i,j-1} \end{aligned} \quad (49)$$

Afim de simplificar as equações, chamaremos o seguinte termo da equação (49)

$$\left[\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j+1} + b_{i,j}) \cdot (Kx_{i,j+1} + Kx_{i,j}) \right] \text{ de } a_1, \text{ o termo } \left[-\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j+1} + b_{i,j}) \cdot (Kx_{i,j+1} + Kx_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Kx_{i,j} + Kx_{i,j-1}) \right] \text{ de } a_2 \text{ e o termo } \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Kx_{i,j} + Kx_{i,j-1}) \text{ de } a_3.$$

O termo difusivo em x pode ser substituído por:

$$Difx_{i,j} = a_1 \cdot h_{i,j+1} + a_2 \cdot h_{i,j} + a_3 \cdot h_{i,j-1} \quad (50)$$

O termo difusivo em y por diferenças centradas de segunda ordem:

$$\begin{aligned} Dify_{i,j} = & \left[\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + b_{i,j}) \cdot (Ky_{i+1,j} + Ky_{i,j}) \right] \cdot h_{i+1,j} + \left[-\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + \right. \\ & b_{i,j}) \cdot (Ky_{i+1,j} + Ky_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Ky_{i,j} + Ky_{i-1,j}) \left. \right] \cdot C_{i,j} + \\ & \left[\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Ky_{i,j} + Ky_{i-1,j}) \right] \cdot h_{i-1,j} \end{aligned} \quad (51)$$

Chamando os seguintes termos da equação (51) $\left[\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + b_{i,j}) \cdot (Ky_{i+1,j} + Ky_{i,j}) \right]$

de a_4 , o termo $-\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + b_{i,j}) \cdot (Ky_{i+1,j} + Ky_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Ky_{i,j} + Ky_{i-1,j})$ de a_5 e $\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Ky_{i,j} + Ky_{i-1,j})$ de a_6 .

O termo difusivo em y será:

$$Dify_{i,j} = a_4 \cdot h_{i+1,j} + a_5 \cdot h_{i,j} + a_6 \cdot h_{i-1,j} \quad (52)$$

3.1.2 Termos de recarga e retirada

A recarga direta, é uma constante para cada instante ou uma função do tempo previamente imposta.

$$g1_{i,j} = RD \quad (53)$$

A recarga indireta, representada por $g2_{i,j}$ se dá:

$$g2_{i,j} = \frac{K1_{i,j}}{b1_{i,j}} \cdot (h1_{i,j} - h_{i,j}) \quad (54)$$

Reorganizando a equação:

$$g2_{i,j} = \frac{K1_{i,j}}{b1_{i,j}} (h1_{i,j}) - \frac{K1_{i,j}}{b1_{i,j}} (h_{i,j}) \quad (55)$$

Onde:

$K1$ é a condutividade hidráulica vertical do aquítarde [LT^{-1}];

$b1$ é a espessura do aquítarde [L];

$h1$ a carga hidráulica do aquítarde [L].

Fazendo, $\frac{K1_{i,j}}{b1_{i,j}} (h1_{i,j})$ igual a $AQ1$ e $-\frac{K1_{i,j}}{b1_{i,j}}$ igual a $a7$

Então, tem-se:

$$g2_{i,j} = AQ1 + a7 \cdot h_{i,j} \quad (56)$$

E por final, o termo dos poços calculado pela equação (57), é positivo se o poço está injetando ou negativo se o poço está bombeando água para o aquífero.

$$g3_{i,j} = \pm \frac{Q_{i,j}}{A_{inf}} \quad (57)$$

Onde:

$Q_{i,j}$ é a vazão do nó i,j

A_{inf} é área de influência do poço

Fazendo $\pm \frac{Q_{i,j}}{A_{inf}}$ igual a $POÇO$, então:

$$g3_{i,j} = POÇO \quad (58)$$

3.1.3 Derivada Temporal

Portanto a resolução da equação para o cálculo das cargas hidráulicas se dará pelo esquema numérico totalmente implícito. Dessa forma:

$$S \cdot \frac{dh}{dt} = (dif_x + dif_y + g_1 + g_2 + g_3)_{i,j}^{n+1} \quad (59)$$

$$\frac{dh}{dt} = h_{i,j}^n + \frac{1}{s_{i,j}} (dif_x + dif_y + g_1 + g_2 + g_3)_{i,j}^{n+1} \quad (60)$$

$$h_{i,j}^{n+1} = h_{i,j}^n + \frac{\Delta t}{s_{i,j}^{n+1}} (dif_x + dif_y + g_1 + g_2 + g_3)_{i,j}^{n+1} \quad (61)$$

Montando o sistema linear, tem-se:

$$A_1 h_{i-1,j}^{n+1} + A_2 h_{i,j-1}^{n+1} + A_3 h_{i,j}^{n+1} + A_4 h_{i,j+1}^{n+1} + A_5 h_{i+1,j}^{n+1} = d_{i,j}^n \quad (62)$$

Em que:

$$A_1 = \frac{\Delta t}{s_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_6) \quad (63)$$

$$A_2 = \frac{\Delta t}{s_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_3) \quad (64)$$

$$A_3 = \frac{\Delta t}{s_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_2 + a_5 + a_7) - 1 \quad (65)$$

$$A_4 = \frac{\Delta t}{s_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_1) \quad (66)$$

$$A_5 = \frac{\Delta t}{s_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_4) \quad (67)$$

$$d_{i,j}^n = -RD - AQ1 - POÇO - h_{i,j}^n \quad (68)$$

Se o nó i,j te a carga hidráulica prescrita, como por exemplo, devido à presença de um corpo de água superficial interconectado ao aquífero, há uma condição de contorno interna que é descrita como:

$$0 \cdot h_{i-1,j}^{n+1} + 0 \cdot h_{i,j-1}^{n+1} + 0 \cdot h_{i,j}^{n+1} + 0 \cdot h_{i,j+1}^{n+1} + 0 \cdot h_{i+1,j}^{n+1} = NA \quad (69)$$

Onde NA é nível do curso de água superficial.

3.2 COEFICIENTES DE DISPERSÃO HIDRODINÂMICA

Para Bear (1979), a dispersão hidrodinâmica é o termo usado para denotar o espalhamento de poluentes, em nível macroscópico, resultante da dispersão mecânica e da difusão molecular. A dispersão mecânica é o espalhamento condicionado por variações de velocidade, tanto em direção quanto em magnitude, dentro dos interstícios do aquífero. Fatores como a distribuição e tamanho dos vazios, a tortuosidade das trajetórias criadas pelas suas intercomunicações e a heterogeneidade da formação interferem na dispersão mecânica. Por sua vez, a difusão molecular depende das naturezas do meio disperso (poluente) e contínuo (aquífero), agindo independentemente da existência de escoamento. A difusão molecular somente é relevante quando as velocidades de escoamento são muito baixas, de forma que, em geral, seu valor é muitas ordens de grandeza inferior ao da dispersão mecânica. Assim, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica podem ser calculados como:

$$D_x = \alpha_L \cdot \frac{v_x^2}{|V|} + \alpha_T \cdot \frac{v_y^2}{|V|} + D_0 \quad (70)$$

$$D_y = \alpha_L \cdot \frac{v_y^2}{|V|} + \alpha_T \cdot \frac{v_x^2}{|V|} + D_0 \quad (71)$$

Onde:

α_L e α_T são respectivamente, as dispersividades do meio nas direções longitudinal e transversal [L];

D_0 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 $10^{-6} \text{ cm}^2/\text{s}$;

A direção longitudinal é considerada como o alinhamento do fluxo dominante ou preferencial; $[\text{L}^2\text{T}^{-1}]$

$|V|$ é o módulo do vetor velocidade de percolação $[\text{L}.\text{T}^{-1}]$.

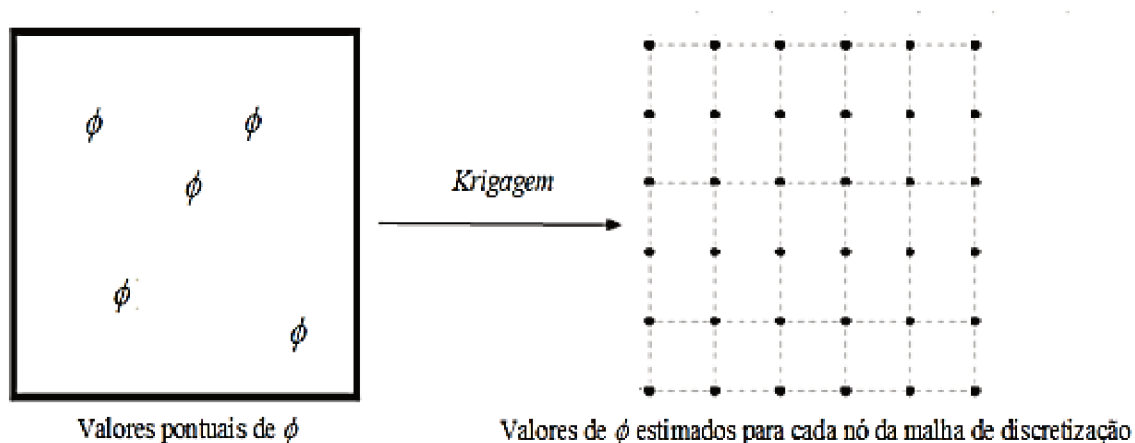
As dispersividades α_L e α_T serão determinadas e ajustadas para cada caso específico das simulações e com isso pode-se verificar a influência desses parâmetros na dispersão da pluma de poluente.

3.3 DISCRETIZAÇÃO DA EQUAÇÃO ADVECÇÃO DISPERSÃO

A direção Norte foi chamada neste trabalho de 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, enquanto j representa a posição do nó na direção Leste.

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 6 (MIRANDA, 2012 apud SANTOS, 2015). 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 1 - 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 o tratamento numérico da equação advecção-dispersão, as derivadas espaciais para o termo advectivo foram discretizadas por diferenças progressivas e regressivas de primeira ordem e as derivadas espaciais para o termo difusivo se mantiveram de acordo com Santos (2015), por diferenças centradas de segunda ordem.

A equação de transporte de poluentes, descrita no capítulo anterior, 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. A equação pode ser resumidamente escrita como:

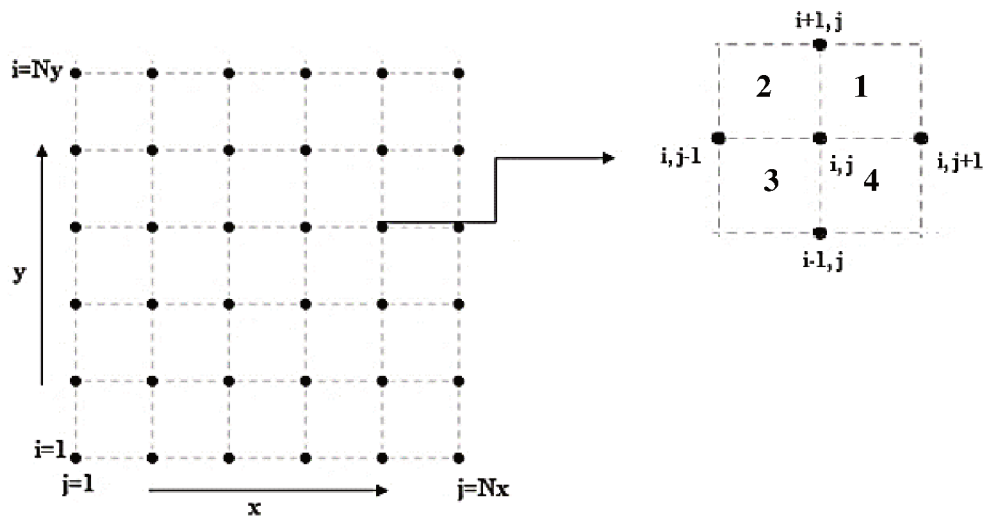
$$R \frac{\partial(bc)}{\partial t} = Dif_x + Dif_y + Adv_x + Adv_y + G_1 + G_2 \quad (72)$$

Ou seja:

$$R \frac{\partial(bc)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(B \cdot D_{xx} \cdot \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(B \cdot D_{yy} \cdot \frac{\partial c}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (B \cdot u \cdot C) - \frac{\partial}{\partial y} (B \cdot v \cdot C) + g \quad (73)$$

O termo advectivo será resolvido por diferenças progressivas e regressivas de primeira ordem, portanto, de acordo com a Figura 7 o termo advectivo será calculado para quatro casos que variam de acordo com as velocidades.

Figura 2-Esquema de malha de discretização e sistema de indexação



Fonte: Adaptado de Miranda (2012).

3.3.1 Termos Difusivos

O termo difusivo em x, calculado por diferenças centradas é:

$$\begin{aligned} Difx_{i,j} = & \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot [(b_{i,j+1} + b_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j})] \cdot c_{i,j+1} + \left[-\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j+1} + \right. \\ & b_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1}) \left. \right] \cdot c_{i,j} + \\ & \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1}) \cdot c_{i,j-1} \end{aligned} \quad (74)$$

Afim de simplificar as equações, chamaremos o seguinte termo da equação (74) $\left[\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j+1} + b_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j}) \right]$ de a_1 , o termo $\left[-\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j+1} + b_{i,j}) \cdot (Dx_{i,j+1} + Dx_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1}) \right]$ de a_2 e o termo $\frac{1}{4\Delta x^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i,j-1}) \cdot (Dx_{i,j} + Dx_{i,j-1})$ de a_3 .

O termo difusivo em x pode ser substituído por:

$$Difx_{i,j} = a_1 \cdot c_{i,j+1} + a_2 \cdot c_{i,j} + a_3 \cdot c_{i,j-1} \quad (75)$$

O termo difusivo em y por diferenças centradas:

$$\begin{aligned} Dify_{i,j} = & \left[\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + b_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) \right] \cdot c_{i+1,j} + \left[-\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + \right. \\ & b_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j}) \left. \right] \cdot c_{i,j} + \left[\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + \right. \\ & b_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j}) \left. \right] \cdot c_{i-1,j} \end{aligned} \quad (76)$$

Chamando os seguintes termos da equação (76) $\left[\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + b_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) \right]$ de a_4 , o termo $-\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i+1,j} + b_{i,j}) \cdot (Dy_{i+1,j} + Dy_{i,j}) - \frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j})$ de a_5 e $\frac{1}{4\Delta y^2} \cdot (b_{i,j} + b_{i-1,j}) \cdot (Dy_{i,j} + Dy_{i-1,j})$ de a_6 .

O termo difusivo em y será:

$$Dify_{i,j} = a_4 \cdot c_{i+1,j} + a_5 \cdot c_{i,j} + a_6 \cdot c_{i-1,j} \quad (77)$$

3.3.2 Termos Advectivos

Os termos advectivos em x, calculados por diferenças progressivas e regressivas em função da velocidade do escoamento, são:

- Progressivo, se a velocidade na direção x for maior que zero, ou seja, se $u > 0$.

$$advx_{i,j} = \frac{b_{i,j} \cdot u_{i,j}}{\Delta x} \cdot c_{i,j} - \frac{b_{i,j+1} \cdot u_{i,j+1}}{\Delta x} \cdot c_{i,j+1} \quad (78)$$

Se chamarmos $\frac{b_{i,j} \cdot u_{i,j}}{\Delta x}$ de a_7^p e $-\frac{b_{i,j+1} \cdot u_{i,j+1}}{\Delta x}$ de a_8^p .

Então:

$$advx_{i,j} = a_7^p \cdot c_{i,j} + a_8^p \cdot c_{i,j+1} \quad (79)$$

- Regressivo, caso a velocidade na direção x for menor que zero, ou seja, se $u < 0$.

$$advx_{i,j} = -\frac{b_{i,j} \cdot u_{i,j}}{\Delta x} \cdot c_{i,j} + \frac{b_{i,j-1} \cdot u_{i,j-1}}{\Delta x} \cdot c_{i,j-1} \quad (80)$$

Chamando, $-\frac{b_{i,j} \cdot u_{i,j}}{\Delta x}$ de a_7^r e $\frac{b_{i,j-1} \cdot u_{i,j-1}}{\Delta x}$ de a_8^r , assim:

$$advx_{i,j} = a_7^r \cdot c_{i,j} + a_8^r \cdot c_{i,j-1} \quad (81)$$

Os termos advectivos em y, calculados por diferenças progressivas e regressivas:

- Progressivo de a velocidade na direção y for maior que zero, ou seja, se $v > 0$.

$$advy_{i,j} = \frac{b_{i,j} \cdot v_{i,j}}{\Delta y} \cdot c_{i,j} - \frac{b_{i+1,j} \cdot v_{i+1,j}}{\Delta y} \cdot c_{i+1,j} \quad (82)$$

Chamando o termo $\frac{b_{i,j} \cdot v_{i,j}}{\Delta y}$ de a_9^p e $-\frac{b_{i+1,j} \cdot v_{i+1,j}}{\Delta y}$ de a_{10}^p .

Tem-se:

$$advy_{i,j} = a_9^p \cdot c_{i,j} + a_{10}^p \cdot c_{i+1,j} \quad (83)$$

- Regressivo caso a velocidade na direção y for menor que zero, ou seja, se $v < 0$.

$$advy_{i,j} = -\frac{b_{i,j} \cdot v_{i,j}}{\Delta y} \cdot c_{i,j} + \frac{b_{i-1,j} \cdot v_{i-1,j}}{\Delta y} \cdot c_{i-1,j} \quad (84)$$

Fazendo o termo $-\frac{b_{i,j} \cdot v_{i,j}}{\Delta y}$ igual a a_9^r e $\frac{b_{i-1,j} \cdot v_{i-1,j}}{\Delta y}$ a a_{10}^r .

Daí:

$$adv_{i,j} = a_9^r \cdot c_{i,j} + a_{10}^r \cdot c_{i-1,j} \quad (85)$$

Nas equações de (72) a (84), u e v 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.

3.3.3 Termo fonte e sumidouro de 1ª ordem

O termo g_1 é utilizado para modelar o eventual decaimento de primeira ordem do poluente por reações químicas ou bioquímicas. Para o decaimento usa-se o sinal negativo, dessa forma:

$$g1_{i,j} = (\pm k'_{i,j} \cdot b_{i,j}) \cdot c_{i,j} \quad (86)$$

Chamando o termo $(\pm k'_{i,j} \cdot b_{i,j})$ de fs_1 , tem se:

$$g1_{i,j} = fs_1 \cdot c_{i,j} \quad (87)$$

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 da área de influência do poço, para estes pontos, pode ser calculado como:

$$g2_{i,j} = - \frac{Q_{poço i,j} \cdot c_{i,j}}{A_{inf}} \quad (88)$$

Chamando o termo $-\frac{Q_{poço i,j}}{A_{inf}}$ de fs_2 , logo:

$$g2_{i,j} = fs_2 \cdot c_{i,j} \quad (89)$$

Onde,

k' é o coeficiente de decaimento de primeira ordem [T^{-1}];

A_{inf} é área de influência do poço [L^2], sendo $A_{inf} = \pi R_{inf}^2$ ou $A_{inf} = \Delta x \cdot \Delta y$;

Q é a parcela de vazão que o poço retira do nó i,j [L^3T^{-1}].

3.3.4 Derivada Temporal

Para o tratamento da derivada temporal da equação advecção-dispersão, foi aplicado o esquema totalmente implícito. 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 e dos valores dos nós vizinhos que são, a priori, desconhecidos no instante $(n+1)$. Esta característica direciona a solução numérica para a montagem e resolução de um sistema linear.

O esquema temporal totalmente implícito, aplicado para as equações, pode ser escrito como:

$$R \frac{\partial(bc)}{\partial t} = dif_x + dif_y + adv_x + adv_y + g_1 + g_2 \quad (90)$$

$$\frac{\partial(bc)}{\partial t} = \frac{1}{R_{i,j}} (dif_x + dif_y + adv_x + adv_y + g_1 + g_2)_{i,j}^{n+1} \quad (91)$$

Trabalhando com um passo de tempo Δt , a equação é discretizada a seguir:

$$\frac{(b_{i,j} \cdot c_{i,j})^{n+1} - (b_{i,j} \cdot c_{i,j})^n}{\Delta t} = \frac{1}{R_{i,j}} (dif_x + dif_y + adv_x + adv_y + g_1 + g_2)_{i,j}^{n+1} \quad (92)$$

Dessa forma:

$$c_{i,j}^{n+1} = \frac{b_{i,j}^n \cdot c_{i,j}^n}{b_{i,j}^{n+1}} + \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} (dif_x + dif_y + adv_x + adv_y + g_1 + g_2)_{i,j}^{n+1} \quad (93)$$

3.3.5 Sistema Linear

Rearranjando as equações (93) e (74) a (89), obtém-se um sistema linear final que deve ser resolvido para o cálculo do campo de concentrações de poluentes. O sistema se dá por $A \times c = d$, onde A representa a matriz de coeficientes, c o vetor de concentrações (são as incógnitas do problema) e d o vetor resultado. O sistema linear pode ser genericamente escrito como:

$$A_1 c_{i-1,j}^{n+1} + A_2 c_{i,j-1}^{n+1} + A_3 c_{i,j}^{n+1} + A_4 c_{i,j+1}^{n+1} + A_5 c_{i+1,j}^{n+1} = d_{i,j}^n \quad (94)$$

Em que os coeficientes da matriz A, apresentam diferentes arranjos. Os quais podem ser montados observando-se as quatro situações de acordo com os sinais das componentes de velocidade em x e y, ou seja, u e v.

- Se progressivo em x e y, ou seja, $u_{i,j} > 0$ e $v_{i,j} > 0$, tem-se:

$$A_1 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_6 \quad (95)$$

$$A_2 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_3 \quad (96)$$

$$A_3 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_2 + a_5 + ap_7 + ap_9 + fs_1 + fs_2) - 1 \quad (97)$$

$$A_4 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_1 + ap_8) \quad (98)$$

$$A_5 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_4 + ap_{10}) \quad (99)$$

$$d_{i,j}^n = -b_{i,j}^n \cdot \frac{c_{i,j}^n}{b_{i,j}^{n+1}} \quad (100)$$

- Se regressivo em x e progressivo em y, ou seja, $u_{i,j} < 0$ e $v_{i,j} > 0$, tem-se:

$$A_1 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_6 \quad (101)$$

$$A_2 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_3 + ar_8) \quad (102)$$

$$A_3 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_2 + a_5 + ar_7 + ap_9 + fs_1 + fs_2) - 1 \quad (103)$$

$$A_4 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_1 \quad (104)$$

$$A_5 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_4 + ap_{10}) \quad (105)$$

$$d_{i,j}^n = -b_{i,j}^n \cdot \frac{c_{i,j}^n}{b_{i,j}^{n+1}} \quad (106)$$

- Se regressivo em x e y, ou seja, $u_{i,j} < 0$ e $v_{i,j} < 0$, tem-se:

$$A_1 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_6 + ar_{10}) \quad (107)$$

$$A_2 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_3 + ar_8) \quad (108)$$

$$A_3 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_2 + a_5 + ar_7 + ar_9 + fs_1 + fs_2) - 1 \quad (109)$$

$$A_4 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_1 \quad (110)$$

$$A_5 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_4 \quad (111)$$

$$d_{i,j}^n = -b_{i,j}^n \cdot \frac{c_{i,j}^n}{b_{i,j}^{n+1}} \quad (112)$$

- Se progressivo em x e regressivo em y, ou seja, $u_{i,j} > 0$ e $v_{i,j} < 0$, tem-se:

$$A_1 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_6 + ar_{10}) \quad (113)$$

$$A_2 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_3 \quad (114)$$

$$A_3 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_2 + a_5 + ar_7 + ar_9 + fs_1 + fs_2) - 1 \quad (115)$$

$$A_4 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot (a_1 + ap_8) \quad (116)$$

$$A_5 = \frac{\Delta t}{b_{i,j}^{n+1} \cdot R_{i,j}^{n+1}} \cdot a_4 \quad (117)$$

$$d_{i,j}^n = -b_{i,j}^n \cdot \frac{c_{i,j}^n}{b_{i,j}^{n+1}} \quad (118)$$

Dessa forma, o sistema linear geral assume a seguinte forma:

$$A_1 c_{i-1,j}^{n+1} + A_2 c_{i,j-1}^{n+1} + A_3 c_{i,j}^{n+1} + A_4 c_{i,j+1}^{n+1} + A_5 c_{i+1,j}^{n+1} = d_{i,j}^n \quad (119)$$

O sistema dever ser montado observando-se as quatro situações, de acordo como os sinais das componentes de velocidade (u,v).

Se o nó i,j recebe poluente da fonte e tem concentração prescrita atende a condição de contorno interna, dessa forma:

$$0 \cdot c_{i-1,j}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j-1}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j+1}^{n+1} + 0 \cdot c_{i+1,j}^{n+1} = C_{prescrita} \quad (120)$$

Para os nós fronteiros, serão usados os contornos $\frac{\partial C}{\partial x_{normal}} = 0$.

3.4 ESPALHAMENTO DE PROPRIEDADES PARA O NÓS

Devido ao uso do método de diferenças finitas para resolução da equação de transporte de poluentes em aquíferos, utiliza-se uma malha estruturada regular e os cálculos são feitos para os nós. Portanto, uma fonte pontual de poluição bem como um poço que extrai água do aquífero só seriam percebidos pelo modelo se a coordenada de tal fonte ou poço fosse coincidente com o nó da malha de discretização. No entanto, ao se fazer a varredura da malha, é comum que existam fontes poluidoras e poços que se encontram dentro das células, ou seja, suas posições não coincidem com os nós. Dessa forma, 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.

Como em Santos (2015), a função implementada no código para espalhamento de propriedades para os nós foi denominada função indicadora. A atribuição indicadora aos nós foi dada para as fontes poluidoras e pela retirada de poluentes por meio dos poços. Dessa forma, para a fonte poluidora iremos considerar a função $indica(i,j)_{fonte}$, que é dada por:

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

Se $indica(i,j)_{fonte} = 0$, utiliza-se a equação advecção-dispersão para o cálculo da concentração no nó i,j . Se $indica(i,j)_{fonte} = 2$, utilizam-se condições de contorno internas com concentrações prescritas, aplicando uma função Kernel, definida na equação (121), para espalhar a concentração de poluentes a partir do ponto de injeção até o nó i,j .

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

$$Kernel(r) \begin{cases} 1 - |r|, se |r| \leq 1 \\ 0, se |r| > 1 \end{cases} \quad (121)$$

Onde:

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

$$r = \frac{dist}{delta} = \frac{\sqrt{(x_{pol}-x)^2 + (y_{pol}-y)^2}}{\sqrt{dx^2 + dy^2}}, \text{ para fontes de poluição.} \quad (122)$$

Onde:

(x_{pol}, y_{pol}) são coordenadas da fonte de poluição.

De acordo com Santos (2015), a função Kernel estabelece uma ponderação em relação à distância relativa entre a fonte poluidora e o nó. Dessa forma, quanto menor for a distância entre a fonte e o nó, este recebe uma quantidade maior de concentração da fonte. É importante ressaltar, que apenas os nós com função indicadora igual a dois recebem a parcela de poluente da fonte, devido a definição da distância adimensional ou raio de influencia (r). Então, considerando a possibilidade de possuir mais de uma fonte, os nós com $indica(i,j)_{fonte}=2$ recebem a seguinte concentração da fonte:

$$c_{i,j} = \sum_{N_{fontes}} \{kernel(r).C_f\} \quad (123)$$

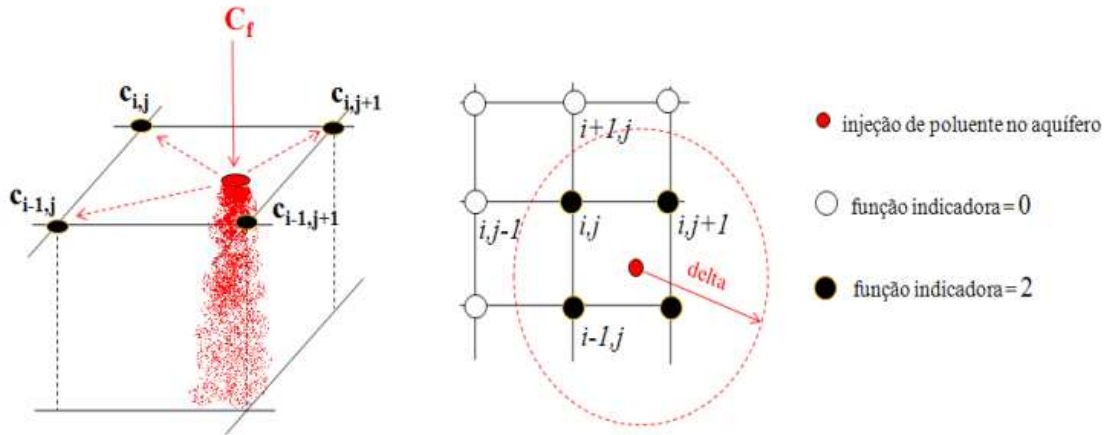
Onde:

C_f é a concentração introduzida no aquífero pela fonte poluidora [L^3T^{-1}];

N_{fontes} é a quantidade total de fontes vizinhas ao nó i,j .

A Figura 8 ilustra o esquema de espalhamento de concentrações.

Figura 3- Esquema de espalhamento da concentração injetada por uma fonte pontual até os nós



Fonte: Santos (2015)

Em relação à presença de poços que ao bombearem água do aquífero, o raciocínio é semelhante para o caso das fontes injetoras de poluentes, pois, considera a retirada de poluentes por meio desses poços. Dessa forma, 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 . No entanto, se $indica(i,j)_{poço}=1$ então o poço retira os poluentes juntamente com a exploração da água e tem-se $Q_{i,j}$ diferente de zero. Como para a injeção de uma fonte pontual, o espalhamento da vazão do poço para os nós mais próximos também se utiliza a função Kernel, definida na equação (121), neste caso, o raio de influência do espalhamento é dado da seguinte maneira:

$$r = \frac{dist}{delta} = \frac{\sqrt{(x_{água}-x)^2 + (y_{água}-y)^2}}{\sqrt{dx^2 + dy^2}}, \text{ para exploração de poços.} \quad (124)$$

Onde:

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

Caso o nó esteja mais próximo de um poço, este recebe uma parcela maior de vazão do poço. Apenas os nós com função indicadora igual a 1 recebem a parcela de vazão do poço.

Considerando a possibilidade de possuir mais de um poço dos nós com $indica(i,j)_{poço}=1$, as vazões são retiradas como segue:

$$Q_{i,j} = \sum_{N_{poços}} \{Kernel(r).Q_p\} \quad (125)$$

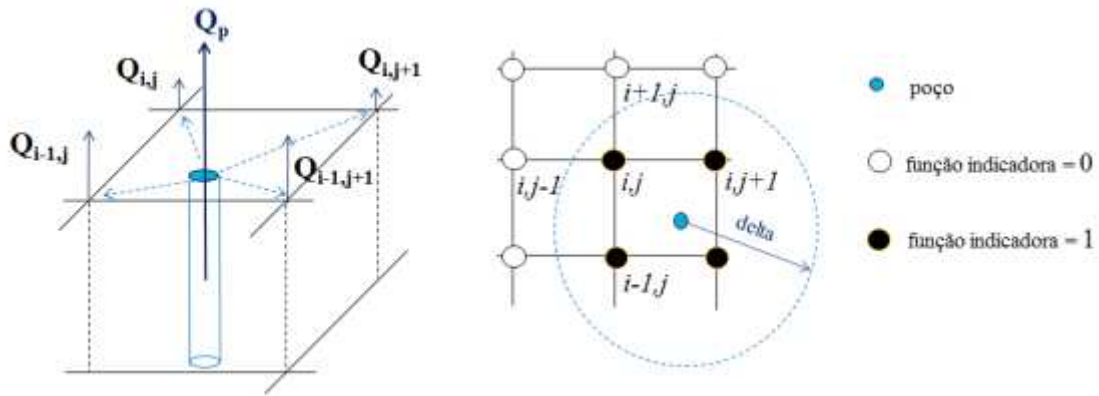
Onde:

Q_p é a vazão de cada poço [L^3T^{-1}]

$N_{poços}$ é a quantidade total de poços vizinhos ao nó i,j .

A Figura 9 representa o esquema de espalhamento de vazões do poço.

Figura 4- Esquema de espalhamento da vazão de um poço até os nós mais próximos



Fonte: Santos (2015)

A descarga de massa retirada de cada nó com função indicadora igual a 1 pode ser calculada por (SANTOS,2105):

$$\dot{M} = Q_{i,j} \cdot c_{i,j} \quad (126)$$

Assim, utiliza-se a equação advecção-dispersão, adicionando o termo sumidouro G_2 . Para tornar o termo sumidouro compatível com as outras parcelas da equação (46), é necessário dividir G_2 por uma área de influência. Dessa forma, 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 (127):

$$G_2 = -Q_{i,j} \cdot c_{i,j} \cdot \frac{1}{\pi \cdot R_{inf}^2} \quad (127)$$

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

$$R_{inf} = \sqrt{\left(\frac{\Delta x}{2}\right)^2 + \left(\frac{\Delta y}{2}\right)^2} \quad (128)$$

3.5 SOLUÇÃO DO SISTEMA LINEAR

Para resolver sistemas de equações lineares da forma $A \cdot x = d$, onde A é uma matriz quadrada não simétrica, é usado o método de gradientes biconjugados estabilizado (BiCGSTAB). O método de gradientes biconjugados estabilizado e pré-condicionado (PBiCGSTAB) é uma variação do BiCG que normalmente apresenta convergência mais regular, com menor susceptibilidade a instabilidades. O pré condicionamento da matriz de coeficientes A tem por objetivo acelerar a convergência do método (SANTOS, 2015). Neste trabalho em questão, foi utilizado o PBiCGSTAB com pré condicionador de Point Jacobi e o algoritmo de solução do sistema, retratado por Barret et al. (1994).

É possível observar que a matriz de coeficientes do sistema linear exposto pela equação (119) 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, $N_x \cdot N_y$ são respectivamente, a quantidade de nós nas direções X (Leste) e Y (Norte). Nos problemas bidimensionais, a matriz contém cinco diagonais com elementos não nulos, sendo que a maioria dos espaços são nulos. Dessa forma, antes de continuar com a solução do sistema linear, foi necessário implementar um método de armazenamento esparsa da matriz A , o que representou uma economia considerável no armazenamento em comparação com a matriz cheia (SANTOS, 2015).

Baseado na técnica de armazenamento esparsa *Compressed Row Storage* (CRS), apresentada em Barret et al. (1994), foi possível reescrever a matriz por meio da construção de três vetores: um para números de pontos flutuantes denominado *val* e outros dois para números inteiros denominados *col_ind* e *row_ptr* (ALAMY FILHO, 2006) onde:

- *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*.

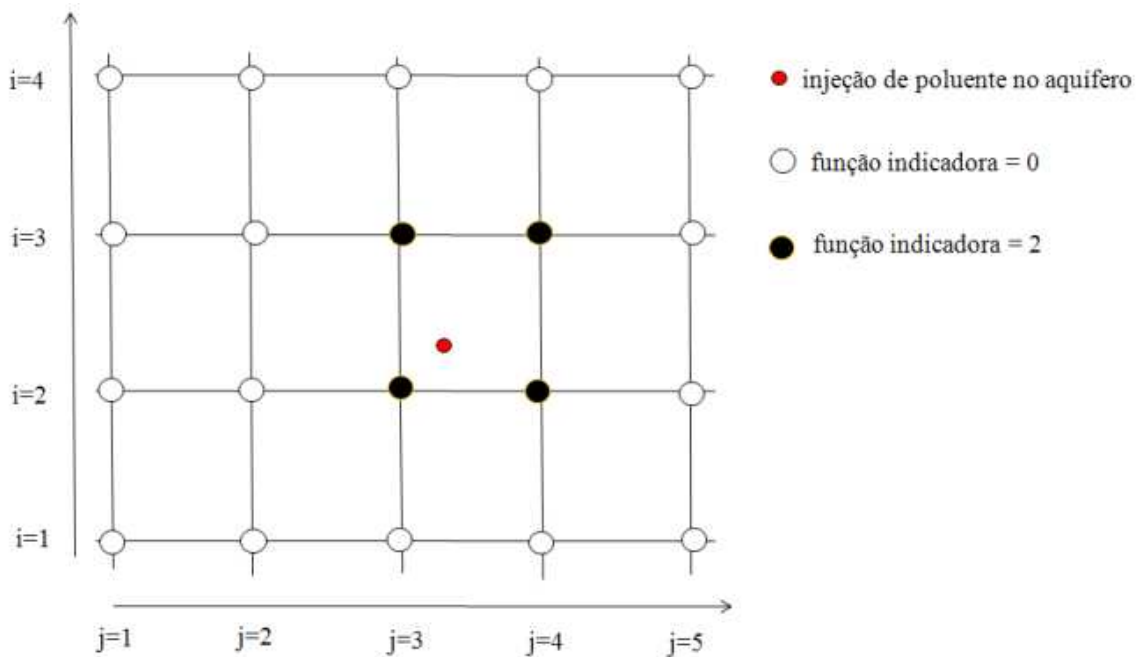
A matriz *A* é construída considerando a função indicadora *indica (i,j)_fonte* descrita no item 3.4. Para isto, devem ser verificados quais são os nós diretamente afetados pelas fontes poluidoras, onde são impostos contornos internos de concentrações prescritas ($C_{i,j}^p$), e também os nós distantes destas fontes, onde é aplicada a equação de advecção-dispersão. O sistema linear então, pode ser escrito segundo as seguintes condicionantes:

$$\text{Se } indica(i,j)_{fonte} = 0: A_1 c_{i-1,j}^{n+1} + A_2 c_{i,j-1}^{n+1} + A_3 c_{i,j}^{n+1} + A_4 c_{i,j+1}^{n+1} + A_5 c_{i+1,j}^{n+1} = d_{i,j}^n \quad (129)$$

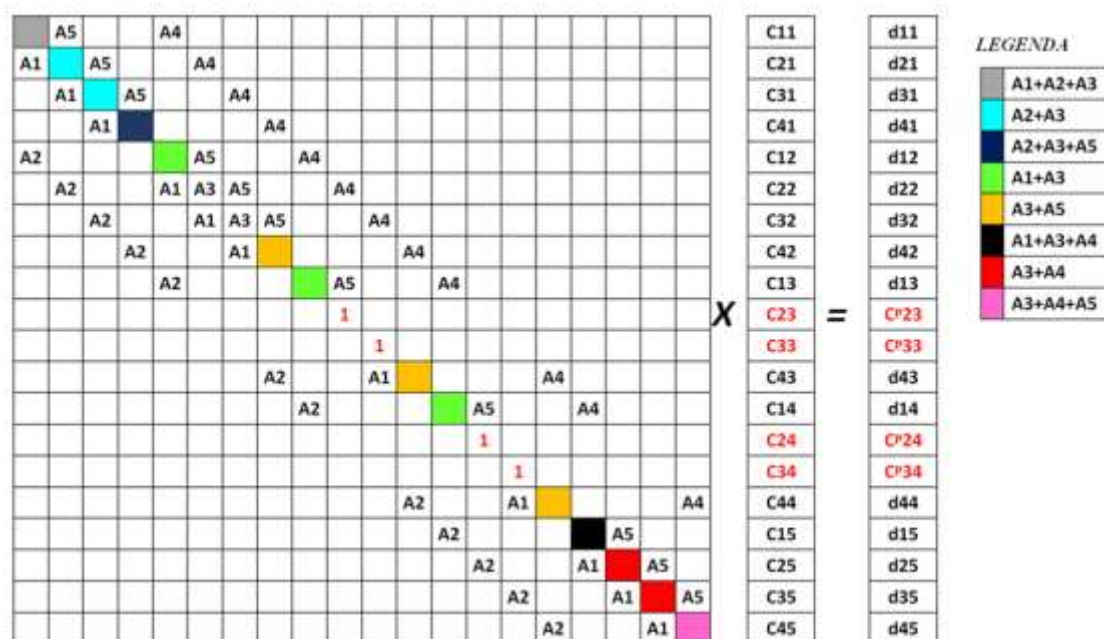
$$\text{Se } indica(i,j)_{fonte} = 2: 0 \cdot c_{i-1,j}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j-1}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j}^{n+1} + 0 \cdot c_{i,j+1}^{n+1} + 0 \cdot c_{i+1,j}^{n+1} = C_{i,j}^p \quad (130)$$

Considerando então, como exemplo, um domínio de cálculo simples, discretizado por uma malha de $N_x=5$ nós e $N_y=4$ nós, conforme representado na Figura 10, têm-se uma matriz de coeficientes *A* com 400 elementos na sua forma cheia. O sistema linear resultante é ilustrado pela Figura 11. Neste caso, condições fronteiriças de derivadas normais nulas foram impostas nos limites sul, norte, leste e oeste do domínio.

Figura 5-Eschema de domínio de cálculo com 20 nós e uma fonte injetora de poluente



Fonte: Santos (2015).

Figura 6-Detalhe do sistema linear $Axc=d$ na forma matricial

Fonte: Santos (2015)

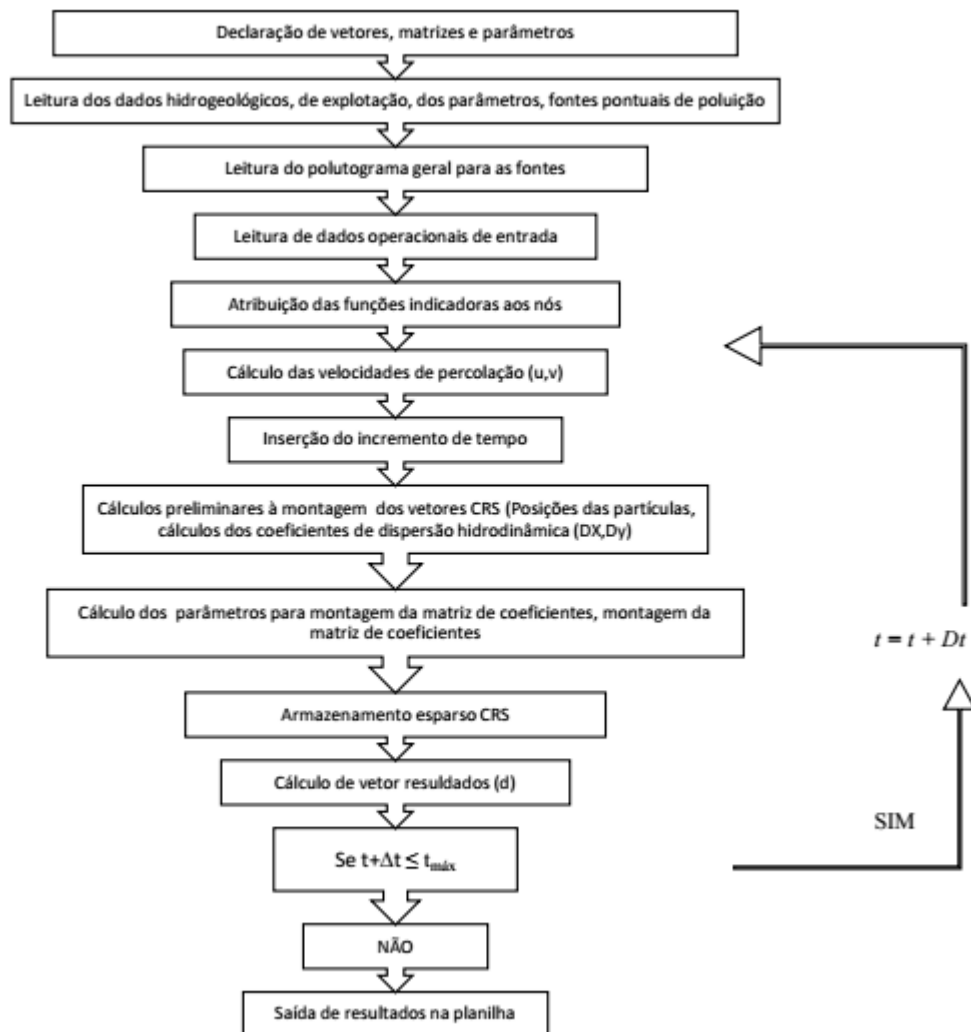
3.6 IMPLEMENTAÇÃO DO CÓDIGO

Definidas as coordenadas e as informações básicas para análise da área de estudo, foram calculadas as cargas hidráulicas (h_{ij}^{n+1}) e espessuras do aquífero (b_{ij}^{n+1}). Na sequência velocidades de percolação em x (u_{ij}^{n+1}) e y (v_{ij}^{n+1}) através da Lei de Darcy, bem como os coeficientes de dispersão hidrodinâmica 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 totalmente implícito.

Todos os dados de entrada e calculados foram organizados em planilhas eletrônicas. Os resultados foram expressos em formas de gráficos desenvolvidos no *Software Surfer 10*, onde foram mapeadas as plumas de poluição.

A Figura 12, ilustra o fluxograma geral do código que soluciona a equação advecção-dispersão para cálculo do transporte de poluentes no aquífero.

Figura 12- Fluxograma do algoritmo para solução em regime de escoamento permanente e transporte de poluentes em regime transiente



Fonte: Elaborada pelo autor (2018).

CAPÍTULO 4

RESULTADOS

Na sequência deste trabalho foram realizadas simulações para aplicar o modelo matemático/numérico descrito no capítulo anterior e prever a dispersão de plumas de poluentes em aquíferos. Neste contexto, as simulações não abrangeram poluentes específicos, cujo espalhamento no aquífero depende de parâmetros e de coeficientes que muitas vezes apresentam validade restrita aos experimentos ou testes de campo para os quais foram calibrados. Optou-se por simular um poluente genérico, muito mais para verificar o comportamento do modelo proposto em relação às plumas por ele estimadas.

Em um primeiro momento, foram realizadas simulações em ambientes mais simplificados onde foi possível comparar a solução analítica com a solução da equação do transporte de poluentes através do Método Numérico de Diferenças finitas. Salienta-se que o transporte de solutos em meios porosos saturados apresenta algumas soluções analíticas, mas todas elas limitadas a situações muito particulares e, via de regra, simplificadas quando comparadas com problemas reais, onde os aquíferos apresentam heterogeneidade e anisotropia. Este é o caso da solução analítica apresentada em Bear (1979), que foi descrita no capítulo 2 (Equação 47). Esta solução é válida para casos onde o campo de velocidades é permanente e uniforme e para meios saturados homogêneos, embora admita anisotropia referente aos coeficientes de dispersão hidrodinâmica (D_x e D_y diferentes, mas invariáveis ao longo do domínio espacial analisado). Assim, condições como estas foram aplicadas em um sistema hipotético, com o propósito de comparar a solução numérica, apresentada neste trabalho, com a solução analítica.

Num segundo momento, também foram realizadas simulações em ambientes mais complexos, mais próximos de situações reais, onde se pode observar o comportamento da pluma de poluentes em função de campos hidrodinâmicos que variam no tempo e no espaço. Neste contexto, ainda foram realizadas simulações considerando a extração e injeção de água no aquífero, a fim de verificar o comportamento da pluma de poluente, a partir dos valores de concentrações iniciais e finais.

O modelo desenvolvido neste trabalho relaciona, na equação de advecção-dispersão, variáveis que indicam o transporte advectivo da pluma, que são os campos de velocidade (V_x e V_y), com variáveis difusivas, que indicam o transporte sem direção preferencial que são os coeficientes de dispersão hidrodinâmica (D_x e D_y). Portanto, fazendo uma análise da equação diferencial governante e das equações auxiliares, é possível 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];
- α_L : dispersividade longitudinal [m];
- α_T : dispersividade transversal [m];
- ρ_B : 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 , α_L , α_T são de difícil determinação prática. Para isso, 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. Santos (2015) comenta que 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 em problemas reais. Realidades como estas acabaram por conduzir este trabalho para a aplicação em sistemas hipotéticos, vinculados a valores genéricos impostos para os parâmetros k' , k_d , α_L , α_T , ρ_B e n .

4.1 SIMULAÇÃO COM UMA ÚNICA FONTE PONTUAL

A primeira simulação realizada tem o objetivo principal de comparar os resultados da aplicação do método numérico com uma solução analítica, proposta por Bear (1979) para o cálculo do transporte de poluentes em aquíferos. A comparação tem o propósito de validar o método numérico desenvolvido neste trabalho.

A região da simulação é uma área hipotética com dimensões de (1km x 1km), discretizada em uma malha de 50x50 nós. Tanto a solução numérica, quanto a analítica foram computadas em todos estes nós. Foi considerada, neste caso uma fonte pontual única de poluentes, com concentração inicial de 300 mg/L posicionada nas coordenadas $X=300\text{m}$ e $Y=500\text{m}$. A concentração do poluente nesta fonte foi mantida constante durante toda a simulação, e a injeção ocorreu sob uma descarga de massa de 300 g/h.

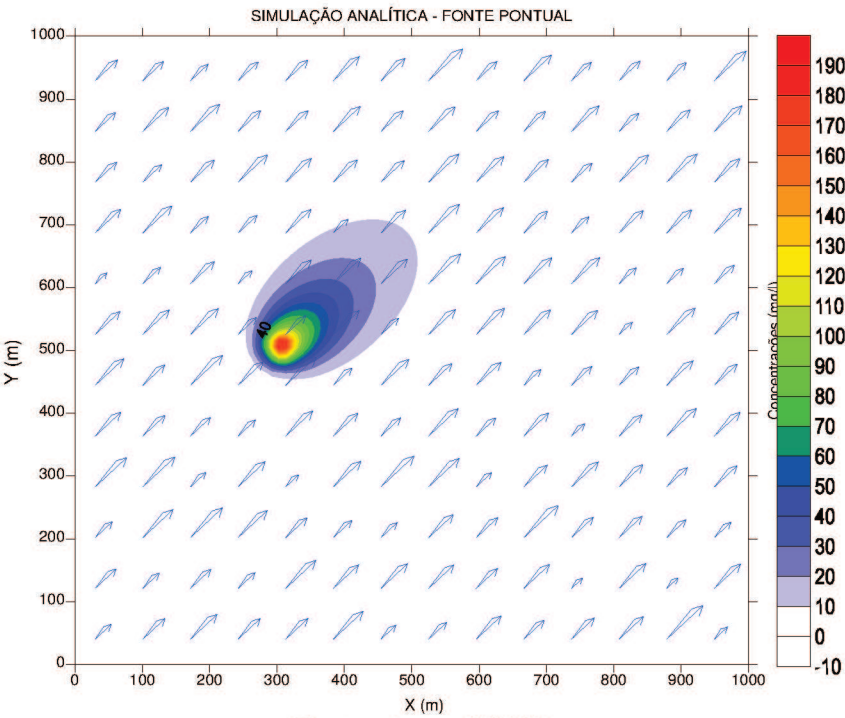
No tocante aos parâmetros da equação de advecção-dispersão, foram atribuídos os seguintes valores constantes no decorrer das simulações:

$$k': [0,001 \text{ h}^{-1}]; \alpha_L: [20 \text{ m}]; \alpha_T: [10 \text{ m}]; v_x: [0,1 \text{ m/h}]; v_y: [0,1 \text{ m/h}]; \rho_B: [1,8];$$

$$k_d: [0]; n: [0,15].$$

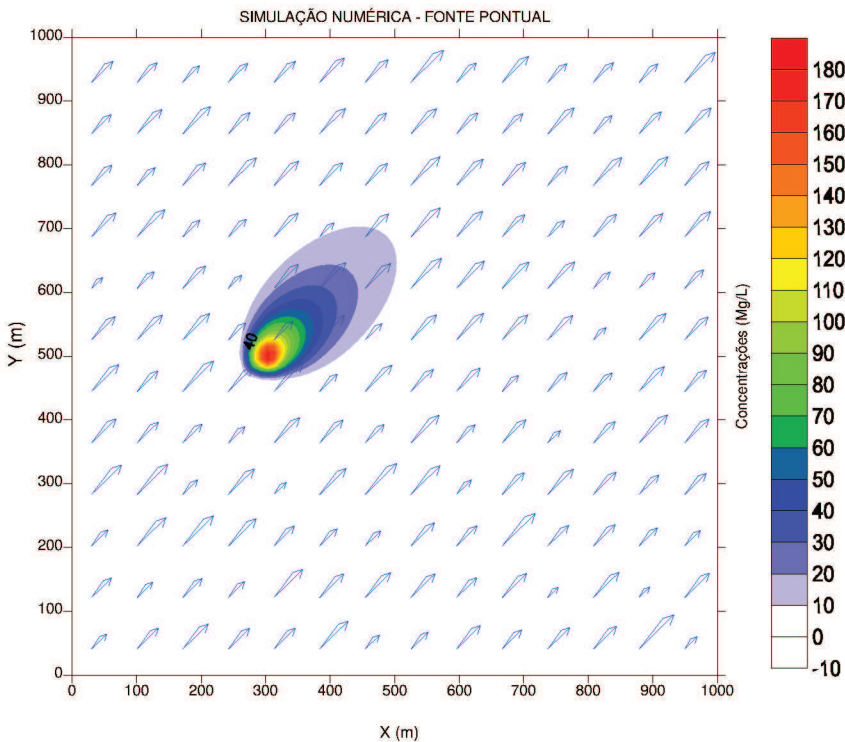
Dessa forma segue nas Figuras 13 e 14, a pluma de poluentes gerada através dos resultados das simulações realizadas para o ambiente descrito. Estes resultados referem-se ao horizonte de 1 ano após a liberação do poluente no aquífero.

Figura 13- Pluma de poluentes gerada pela simulação da solução analítica proposta por Bear (1979), fonte pontual única de poluente



Fonte: Autor (2018).

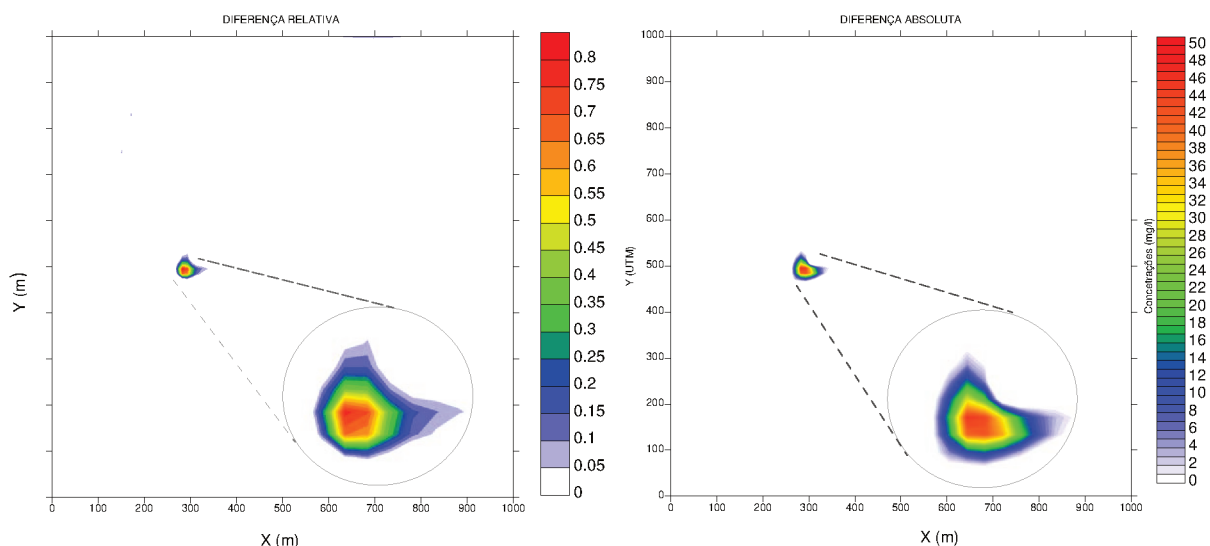
Figura 14- Pluma de poluentes pela solução numérica por uma fonte pontual única de poluente



Fonte: Autor (2018).

Na figura 15, são apresentadas as diferenças relativas (em frações de 0 a 1) e absolutas (em mg/L) em relação aos resultados da solução numérica e analítica. As diferenças relativas são adimensionais que medem o quanto a solução numérica se distancia, proporcionalmente, da solução analítica. As diferenças absolutas registram este distanciamento, mas na unidade mg/L. De uma maneira geral, nota-se que estas diferenças surgem nas proximidades da fonte poluidora o que, em parte, pode ser explicado pela forma singular de modelar esta fonte na solução numérica. No modelo numérico, a fonte poluidora é representada pelo espalhamento das concentrações entre os quatro nós mais próximos, utilizando uma função Kernel de transferência. No modelo analítico, a concentração é calculada diretamente nestes quatro nós. Em função desta partição das concentrações injetadas no aquífero, a solução numérica tem gerado concentrações menores do que a analítica na vizinhança imediata da fonte poluidora.

Figura 15 - Diferença relativa e absoluta encontrada entre a solução numérica e analítica



Fonte: Autor (2018).

A despeito das diferenças nos setores adjacentes à fonte poluidora, as discrepâncias entre as duas soluções praticamente desaparecem quando as distâncias ao foco poluidor se ampliam. Isto é um indício de que a solução numérica proposta fornece resultados coerentes com a solução exata, na grande maioria do domínio espacial analisado.

A Figura 15 representa uma comparação em os dois resultados obtidos pelas simulações. No caso, a simulação analítica está representada pelas plumas preenchidas

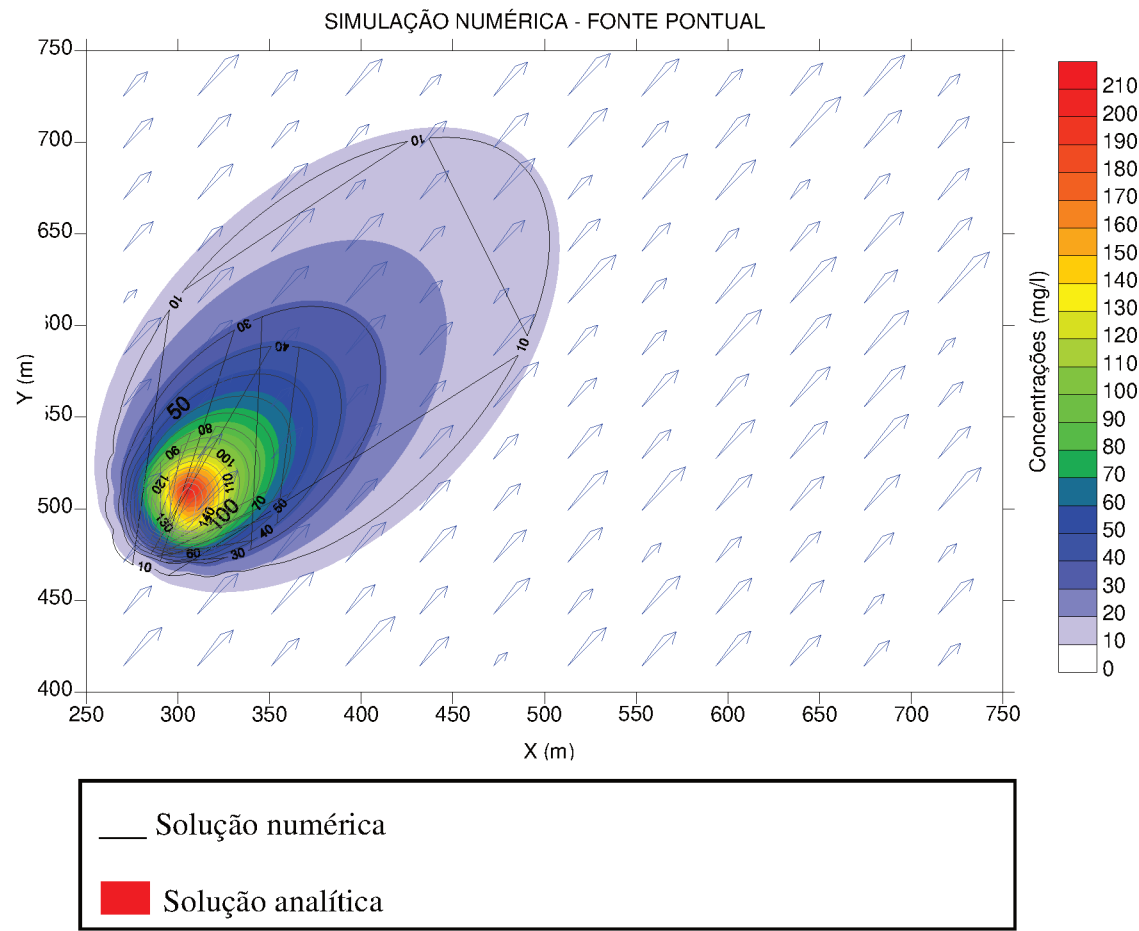
pelas cores e a solução numérica pela pluma representada pelas isolinhas pretas. A proximidade entre as isolinhas e a pluma preenchida corrobora a observância da solução numérica proposta, em relação à solução analítica.

As setas azuis, nas figuras 13, 14 e 16 representam os campos de velocidades. É importante ressaltar que as simulações foram realizadas em um ambiente no qual os campos de velocidades são constantes no tempo e no espaço. Neste caso, observa-se que as soluções analítica e numérica apresentam plumas de poluente que se espalham de acordo com os campos de velocidade, os valores para concentração estão bem próximos entre os dois casos simulados. O transporte advectivo do poluente fica claro, uma vez que a pluma se desenvolve preferencialmente na direção e no sentido do campo de velocidade. Isto revela que a solução numérica apresenta comportamento que respeita a velocidade preferencial da água subterrânea, sem apresentar difusão visualmente excessiva. O transporte difusivo também fica evidente na abertura lateral (ou transversal) da pluma.

Na comparação da Figura 16, pode-se concluir que a solução numérica ficou bem próxima da solução analítica, tanto na dispersão das plumas quanto nos valores das concentrações. No entanto, a dispersão da pluma de poluentes gerada pela simulação da equação de advecção-dispersão apresenta uma dispersão menor do que a simulação analítica proposta por Bear (1979). Suspeita-se que a partição do poluente, para injetar as concentrações nos quatro nós mais próximos da fonte poluidora real, seja a causa mais provável destas concentrações que são ligeiramente inferiores em relação àquelas computadas analiticamente.

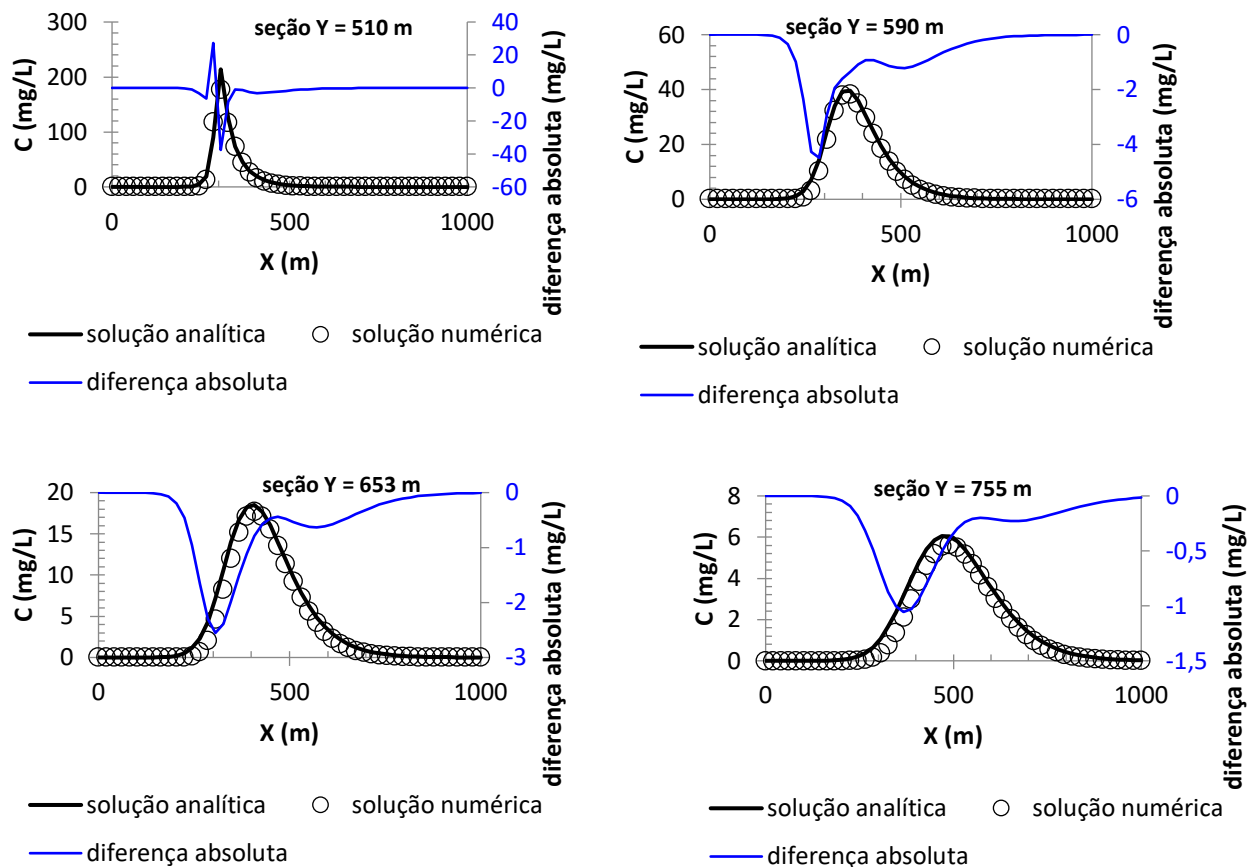
No intuito de visualizar os dois tipos de resultados, foram realizados alguns perfis na extensão do domínio espacial. A Figura 17 apresenta um corte transversal realizado ao longo do eixo y, onde é possível comparar os resultados obtidos das duas soluções. Foram feitas quatro seções em $y = 510$ m, $y = 590$ metros, $y = 653$ m e $y = 755$ m. Onde é possível observar os valores das concentrações e a diferença absoluta gerada pelas duas situações. Note-se que estes perfis indicam boa aderência entre as curvas analíticas e as soluções numéricas.

Figura 16 - Comparação da dispersão de poluente gerada entre a solução analítica e a solução numérica



Fonte: Autor (2018).

Figura 17 - Cortes transversais feitos ao longo do eixo Y e perfis de concentração



Fonte: Autor (2018).

4.2 SIMULAÇÃO COM VÁRIAS FONTES PONTUAIS COM COEFICIENTE DE DECAIMENTO NÃO NULO E ADSORÇÃO DESPREZÍVEL

A segunda simulação foi realizada também com o objetivo principal de comparar os resultados do método numérico com uma solução analítica para o cálculo do transporte de poluentes em aquíferos proposta por Bear (1979). Neste caso, a solução analítica original é válida para uma única fonte poluidora pontual, mas o princípio da superposição de efeitos pode ser utilizado para problemas com mais de uma fonte.

Nesta aplicação, a região da simulação é uma área hipotética com dimensões de (1kmx1km) discretizada em uma malha de 60x60 nós. Utilizaram-se quatro fontes poluidoras cujos centros e características de injeção estão discriminados na Tabela 3.

Tabela 3 - Coordenadas das fontes poluídoras

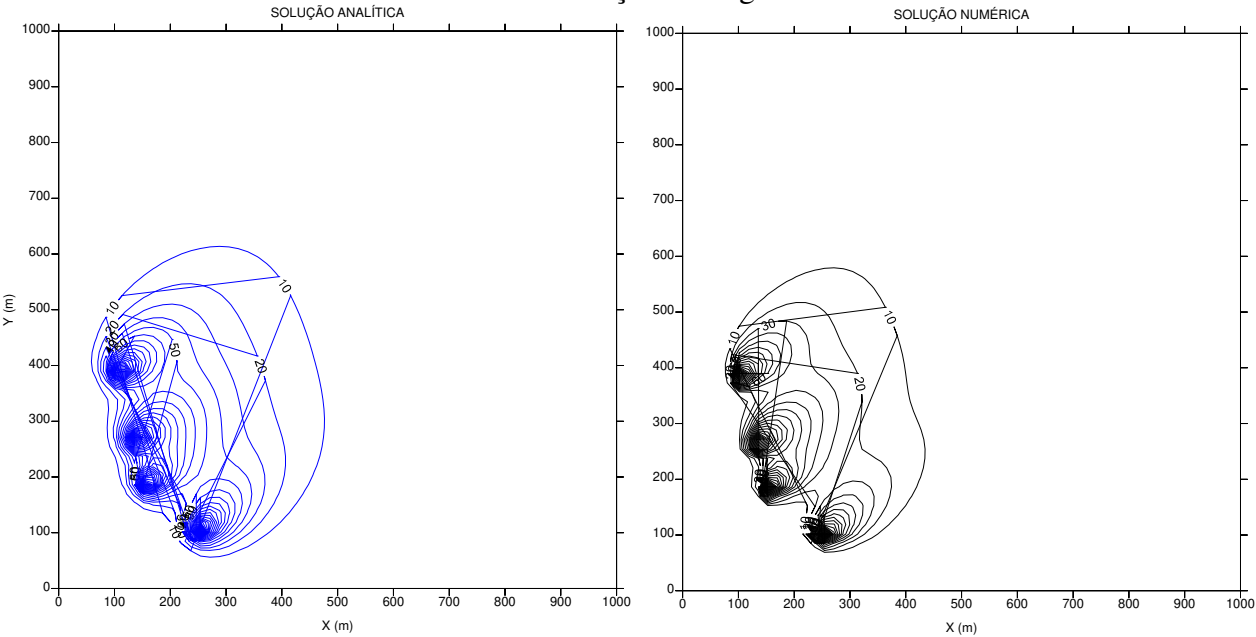
FONTES POLUIDORAS				
id	x fonte (m)	y fonte (m)	Q injeção (m3/h)	C injeção (mg/L)
1	250,17	103,48	1	300
2	157,34	185,99	1	300
3	135,57	263,92	1	300
4	106,92	385,39	1	300

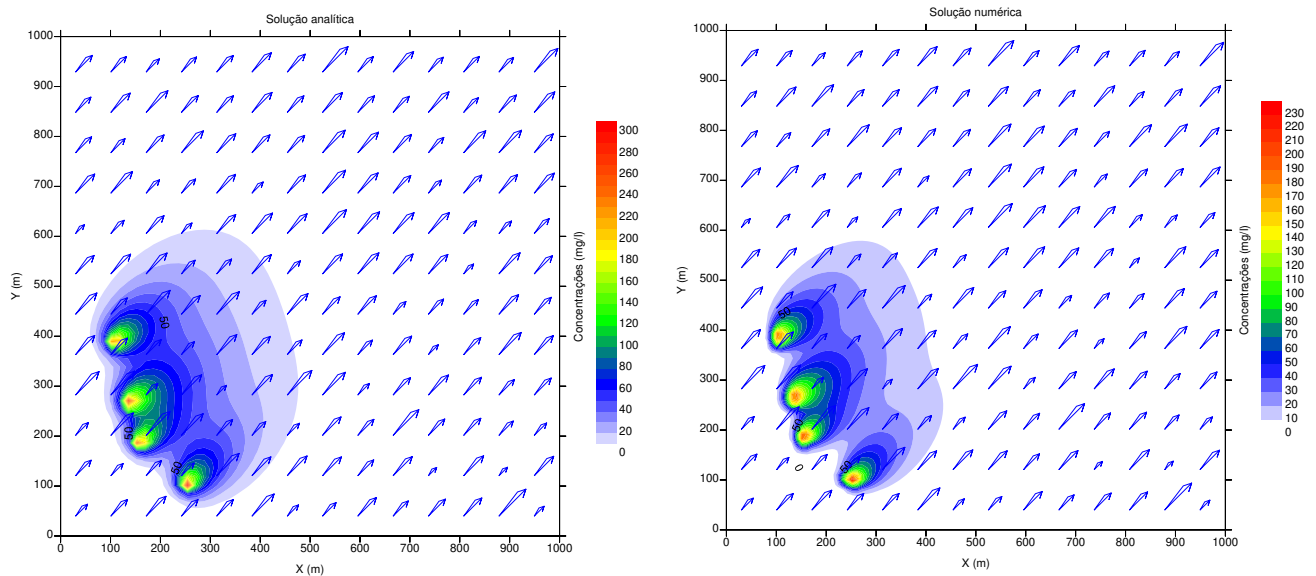
Em relação ao aquífero, foram atribuídos valores constantes aos parâmetros a seguir utilizados no decorrer das simulações:

k' : [0,001 h⁻¹]; α_L : [20 m]; α_T : [10 m]; v_x : x [0,1 m/h]; v_y : [0,1 m/h]; ρ_B : [1,8];
 k_d : [0]; n : [0,15].

As plumas resultantes das soluções analíticas e numéricas, obtidas para um horizonte de simulação de 1 ano, são ilustradas pela Figura 18. As linhas de isoconcentração fornecem valores na unidade mg/L.

Figura 18 – Plumais de poluente resultantes das soluções analítica e numérica.
Valores de concentração em mg/L.





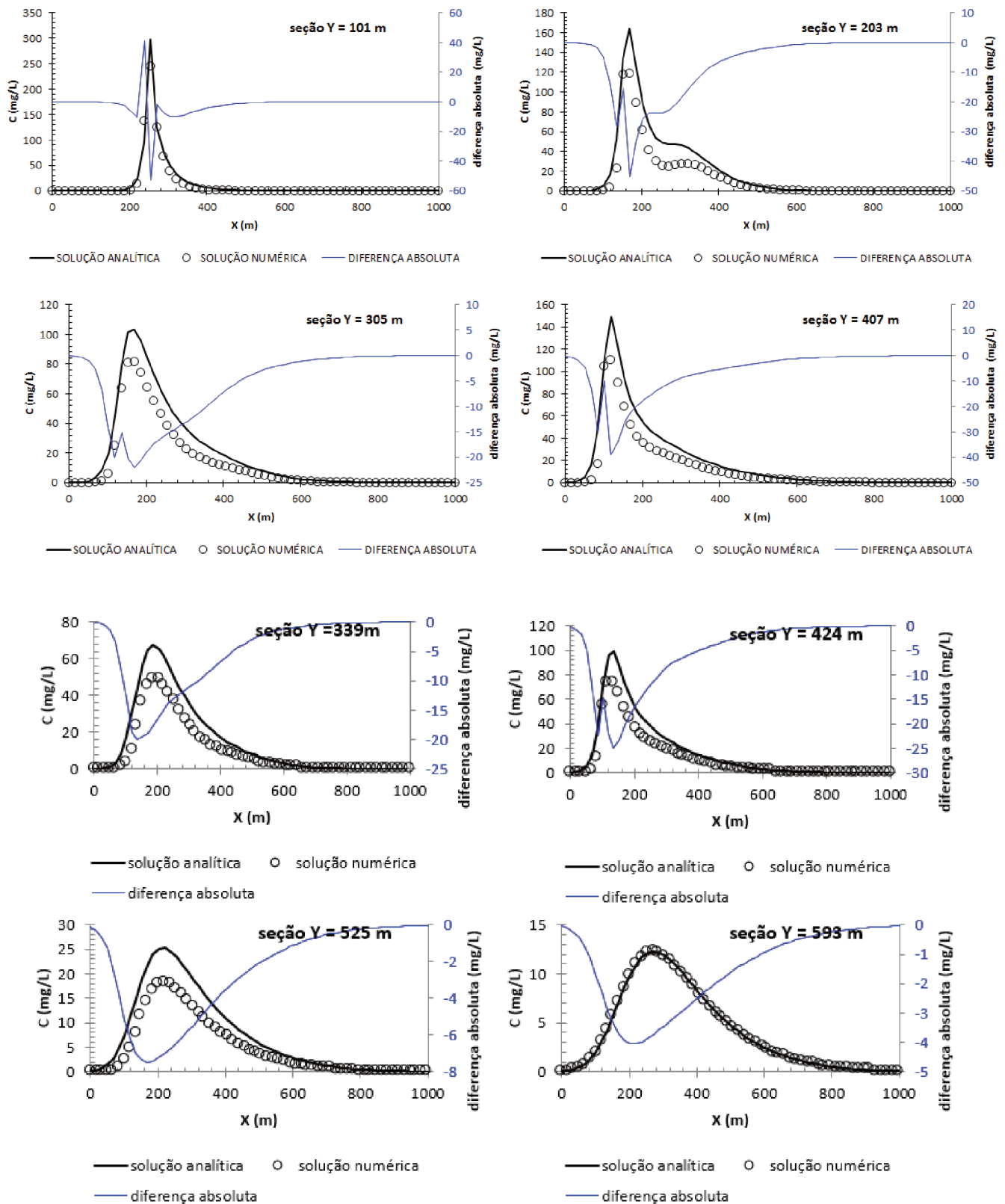
Fonte: Autor (2018).

Note-se que a proximidade relativa entre as fontes pontuais produz um conjunto de plumas individuais que tendem a se fundir em uma pluma resultante única. Este efeito é mais destacado para posições distantes dos pontos de injeção de poluentes. Na modelagem analítica a pluma resultante é obtida pela superposição das 4 soluções individuais, o que indica uma coalescência cujo efeito gera uma mancha poluidora mais larga, mas que segue os campos de velocidade na direção longitudinal. Este mesmo efeito de fusão de plumas é verificado na solução numérica.

De uma maneira geral, nota-se que a pluma numérica apresenta um espalhamento sutilmente inferior ao da pluma analítica, a qual tende a avançar mais pelo domínio. Assim como no item anterior, atribui-se esta diferença à modelagem numérica do termo fonte, que é feita pela da partição das concentrações de injeção nos nós mais próximos do foco de poluente. Não obstante, os comportamentos globais das duas plumas são similares.

Os perfis de concentração, ilustrados pela Figura 19, fornecem uma noção acerca dos resultados numérico e analítico.

Figura 19 - Cortes transversais feitos ao longo do eixo Y e perfis de concentração.



Fonte: Autor (2018).

É interessante notar que, neste caso, há diferenças que são refletidas em posições mais distantes das fontes. Mantém-se aqui a hipótese de que seja a partição da concentração das fontes, na solução numérica, que potencialmente acentua as diferenças. Isto é visível quando há mais de uma fonte injetora de forma que elas estejam próximas o suficiente para permitir a coalescência das plumas. Como as concentrações fonte são particionadas, o efeito global se estende ao longo do domínio, resultando em uma pluma numérica com avanço mais lento do que a analítica. As melhores aderências entre os perfis analíticos e numéricos apresentam-se justamente nas bordas da pluma resultante, onde os efeitos de fusão são menos pronunciados.

4.3 SIMULAÇÃO COM VÁRIAS FONTES PONTUAIS COM COEFICIENTE DE DECAIMENTO E ADSORÇÃO DESPREZÍVEIS

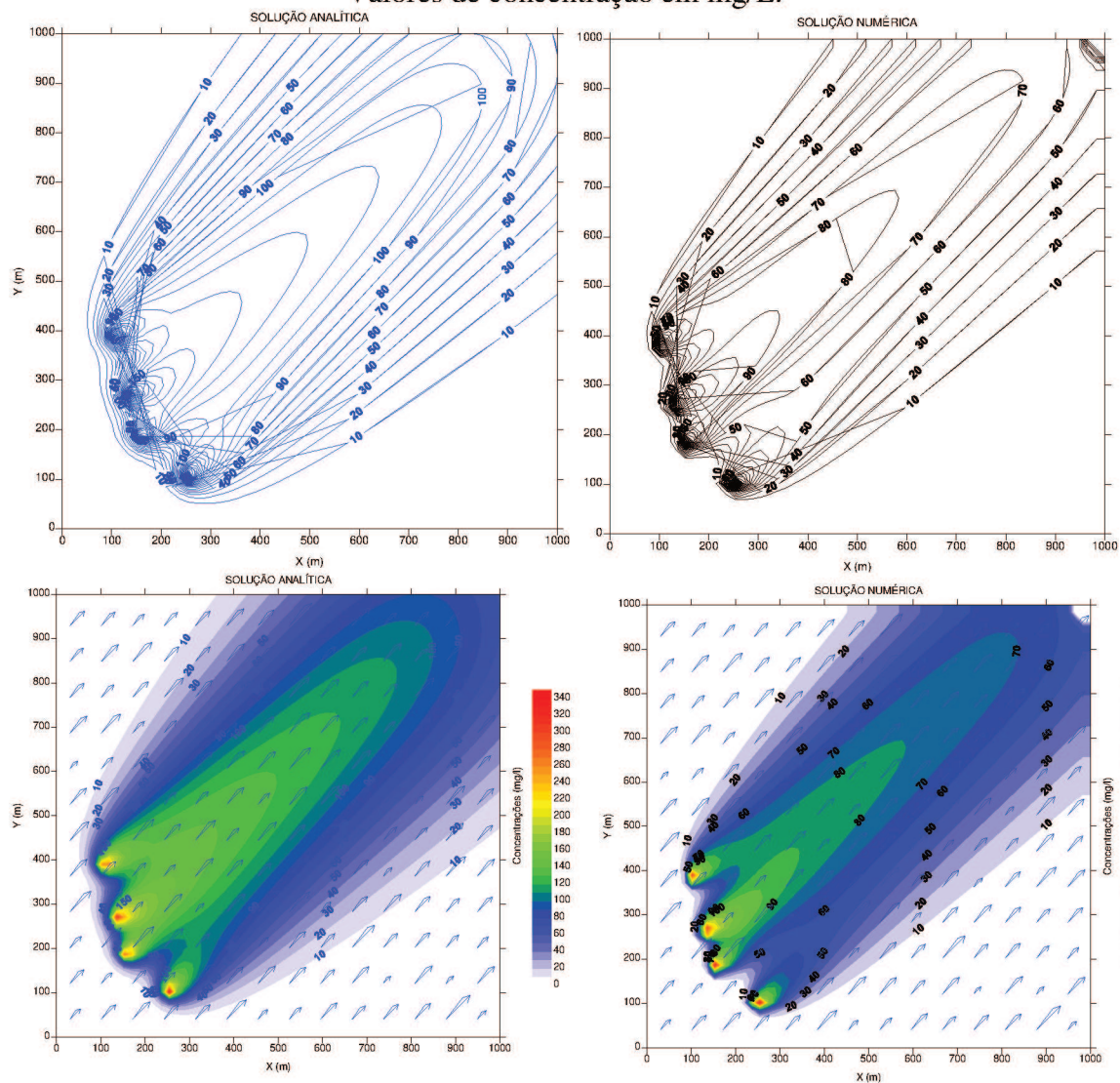
Neste exemplo, manteve-se o mesmo posicionamento dos focos pontuais de poluição, mas liberou-se o avanço da pluma, anulando-se os termos retardantes que são os coeficientes de decaimento e de partição. Fora isto, em relação ao item anterior, as mesmas condições foram impostas para o aquífero, inclusive para as dimensões da malha de discretização e os espaçamentos entre os nós. Em relação ao aquífero, foram atribuídos valores constantes aos parâmetros a seguir utilizados no decorrer das simulações:

$$k': [0]; \alpha_L: [20 \text{ m}]; \alpha_T: [10 \text{ m}]; v_x: x [0,1 \text{ m/h}]; v_y: [0,1 \text{ m/h}]; \rho_B: [1,8];$$

$$k_d: [0]; n: [0,15].$$

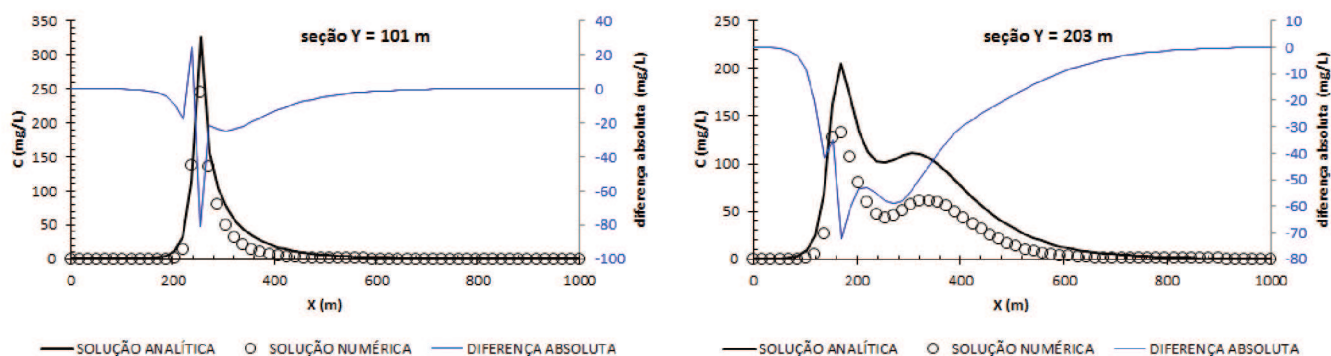
As plumas resultantes são ilustradas nos mapas de isolinhas da Figura 20. No caso, ambas as simulações revelaram plumas que se desenvolvem com mais facilidade no aquífero, com espalhamentos longitudinais, ditados pelo campo de velocidade, muito mais destacados do que nos casos em que o coeficiente de decaimento (k') era diferente de zero. Confirmando as suspeitas levantadas na simulação anterior, a fusão mais evidente das plumas, neste caso, conduz para resultados numéricos inferiores aos analíticos. Isto pode ser destacado nos perfis de concentração, ilustrados na Figura 21.

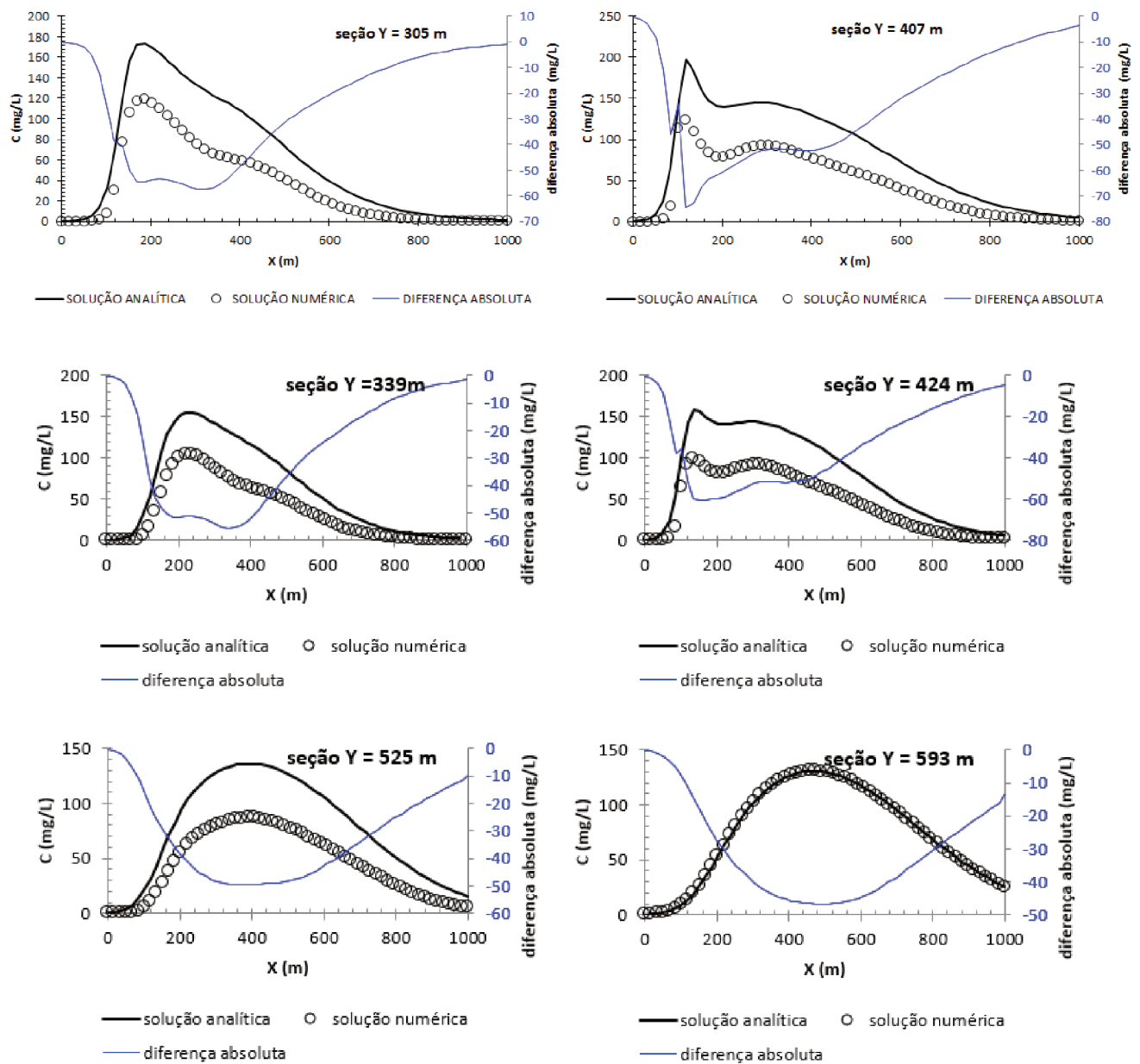
Figura 20 – Plumas de poluente resultantes das soluções analítica e numérica.
Valores de concentração em mg/L.



Fonte: Autor (2018).

Figura 21- Cortes transversais feitos ao longo do eixo Y e perfis de concentração.





Fonte: Autor (2018).

Neste caso, a despeito das diferenças, os comportamentos gerais das plumas foram similares nas duas situações, com efeitos advectivos e difusivos nítidos. Mesmo as maiores diferenças absolutas de concentração, que foram verificadas nas preferencialmente nas adjacências das fontes, não superaram 80 mg/L em uma circunstância onde cada fonte pontual injeta 300 mg/L.

4.4 SIMULAÇÃO COM VÁRIAS FONTES PONTUAIS COM COEFICIENTE DE DECAIMENTO NULO E ADSORÇÃO NÃO DESPREZÍVEL

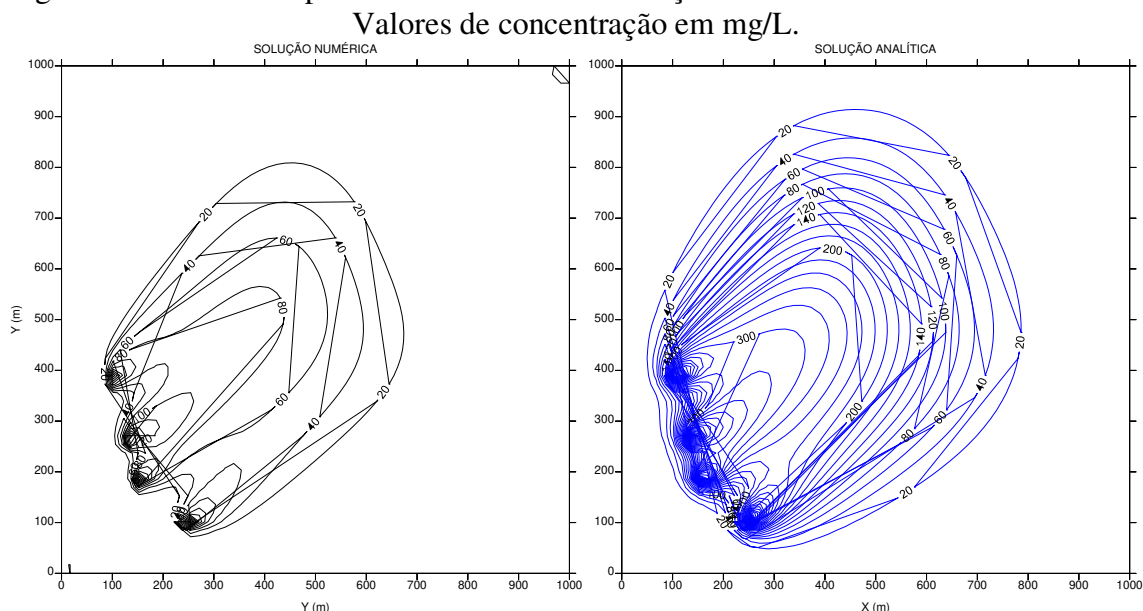
Alguns tipos específicos de poluentes podem ficar aderidos na superfície sólida da matriz porosa, seja por efeitos químicos ou eletrostáticos. Matematicamente isto é modelado com coeficientes de partição (k_d) diferentes de zero. Este parâmetro representa fisicamente a fração de poluente que fica retida na matriz graças ao efeito da adsorção. Enfim, a adsorção incita o achatamento da pluma, retardando seu avanço na direção longitudinal. Este comportamento foi evidenciado nesta quarta simulação, na qual foram mantidas as mesmas condições anteriores, exceto pela atribuição de um coeficiente de partição não nulo. O horizonte de simulação também foi especificado como de 1 ano. Em relação ao aquífero, foram atribuídos valores constantes aos parâmetros, conforme a seguinte especificação:

$$k': [0]; \alpha_L: [20 \text{ m}]; \alpha_T: [10 \text{ m}]; v_x: x [0,1 \text{ m/h}]; v_y: [0,1 \text{ m/h}]; \rho_B: [1,8];$$

$$k_d: [0,10]; n: [0,15].$$

Os resultados são ilustrados pela Figura 22. Nota-se, nesta situação, que além do avanço longitudinal mais contido, a solução numérica também gerou plumas contidas na transversal. Em linhas gerais, as duas soluções apresentaram discrepâncias mais significativas do que nos casos anteriores. Isto sugere que, nos casos em que há adsorção significativa, a modelagem numérica precisa ser mais detalhada, seja com refinamento de malha, seja com o refinamento do passo temporal.

Figura 22 – Plumas de poluente resultantes das soluções analítica e numérica.



Fonte: Autor (2018).

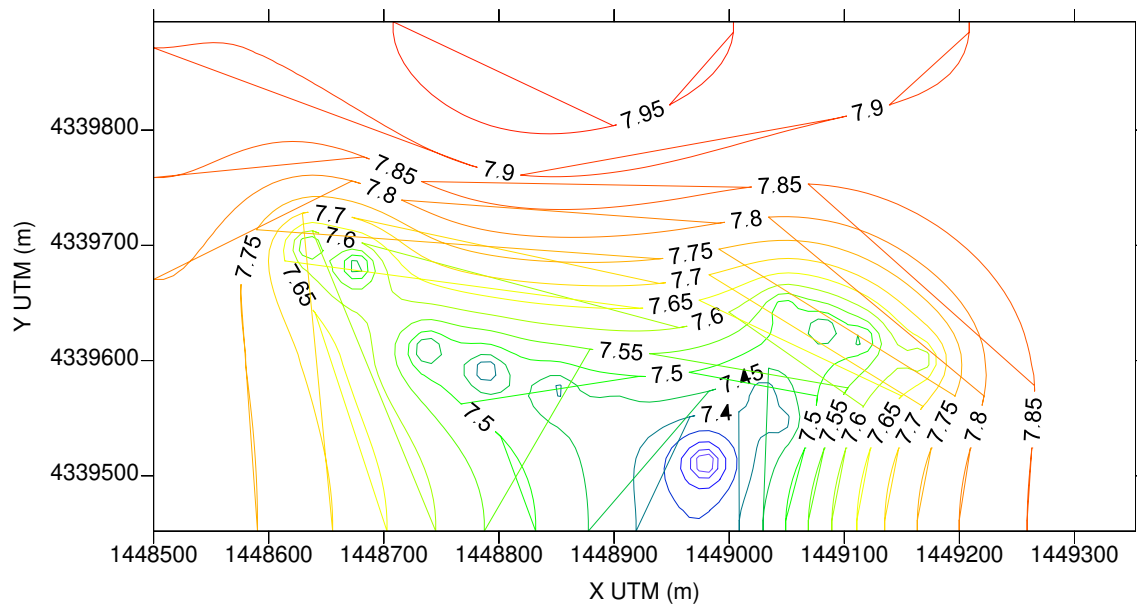
4.5 SIMULAÇÃO BASEADA EM UMA ÁREA REAL

Foram realizadas simulações em uma área real, onde utiliza-se poços com a finalidade de recuperar um aquífero poluído na área ex Alumix, situada em Portovesme, que é uma localidade do município de Portoscuso, na província italiana da Sardenha. Esta região, conforme destaca Figus (2010), é uma área caracterizada por uma contaminação muito aguda decorrente da metalurgia de alumínio. O solo e a água subterrânea estão poluídos por diversas substâncias como cloro, cromo, flúor, alumínio, chumbo, níquel, manganês, ferro, entre outros. Segundo este autor, esta área está atualmente submetido a processo de recuperação do aquífero, a partir de uma linha de bombeamento que conta com 13 poços. Estes poços retiram água poluída do aquífero e a veiculam até uma galeria de água pluvial que deságua no mar Mediterrâneo. Nesta região, uma rede de piezômetros permite monitorar os níveis freáticos e a qualidade da água subterrânea.

No presente trabalho, os dados geométricos e hidrogeológicos foram extraídos dos estudos de Figus (2010), relativos a um aquífero heterogêneo arenoso, com espessura variável entre 12 e 27 metros, com condutividades hidráulicas variáveis. A porosidade efetiva do aquífero é, em média, igual a 0,13. O nível freático está entre 9 e 11m acima do nível do mar. Na base, o aquífero possui um leito rochoso vulcânico com 70 a 80 m de espessura. Os poços operam com extração individual média de 2,2 m³/h/poço. A

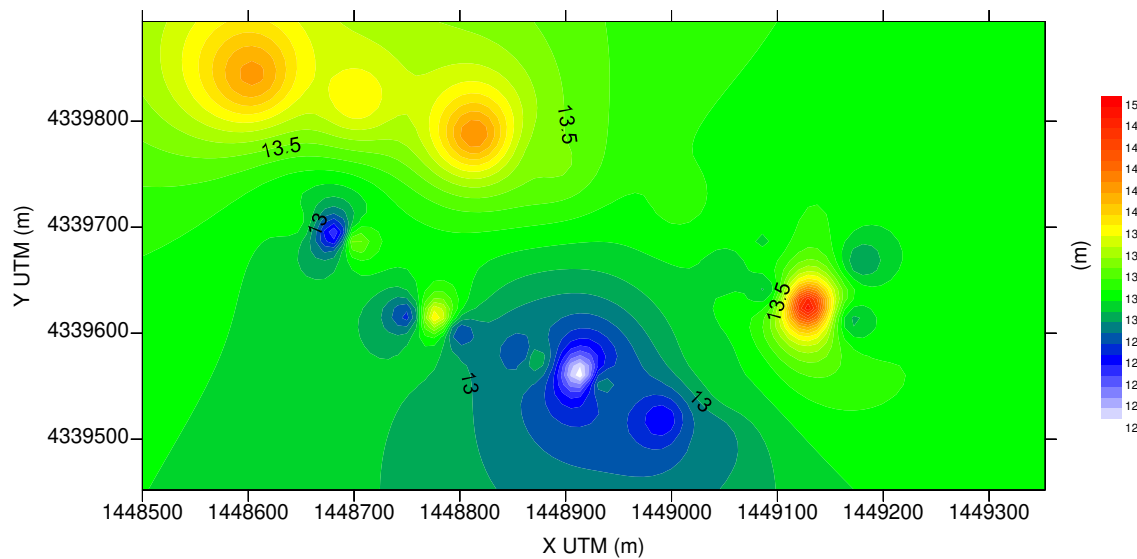
partir destes dados e do monitoramento dos níveis piezométricos nos poços, foi possível estabelecer uma condição inicial para o problema de simulação de pluma. Estas condições iniciais são ilustradas pelas Figuras 23 a 25. Na simulação numérica, o domínio foi discretizado por 100 nós, na direção Leste; e 50 nós, na direção Norte.

Figura 23 - Distribuição da superfície freática inicial



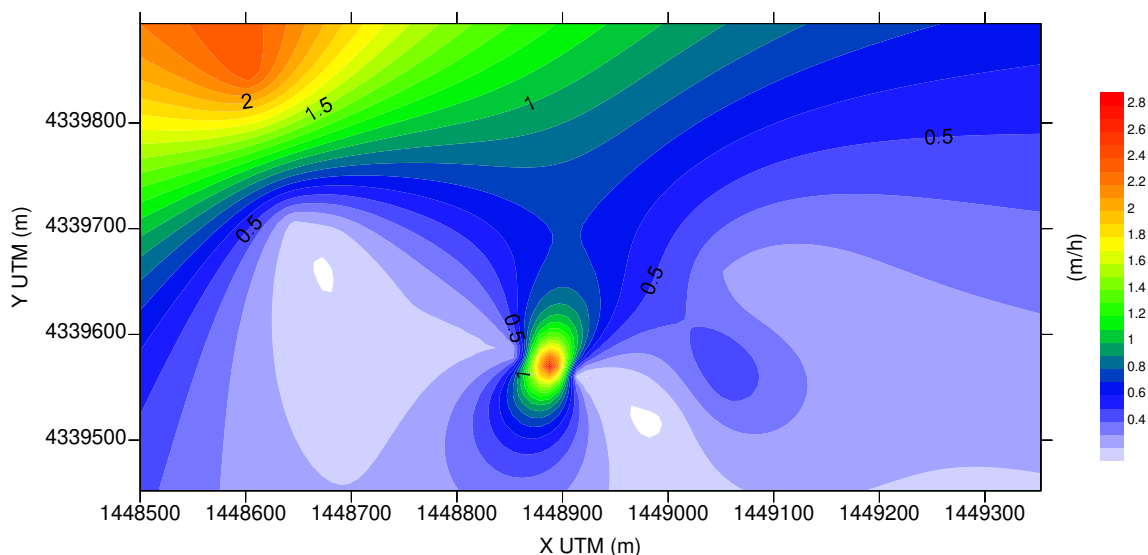
Fonte: Autor (2018).

Figura 24 - Distribuição da espessura inicial do aquífero



Fonte: Autor (2018).

Figura 25 - Distribuição da condutividade hidráulica no aquífero



Fonte: Autor (2018).

Note-se que a variação espacial da condutividade hidráulica condiciona a heterogeneidade do aquífero; além disto, os campos de cota freática revelam a presença de cones de depressão resultantes da operação de poços. Consequentemente, os campos de velocidade são variáveis no espaço e no tempo, de forma que todas estas condições descartam a aplicação das soluções analíticas para avaliar a movimentação da pluma poluente. Isto, de certa forma, reforça a necessidade de modelos numéricos, como o apresentado neste trabalho.

Apesar da grande quantidade de dados resultantes do monitoramento do aquífero local, muitos parâmetros da equação de advecção-dispersão são desconhecidos. Por isto, na presente simulação hipotética, foram aplicados os seguintes valores:

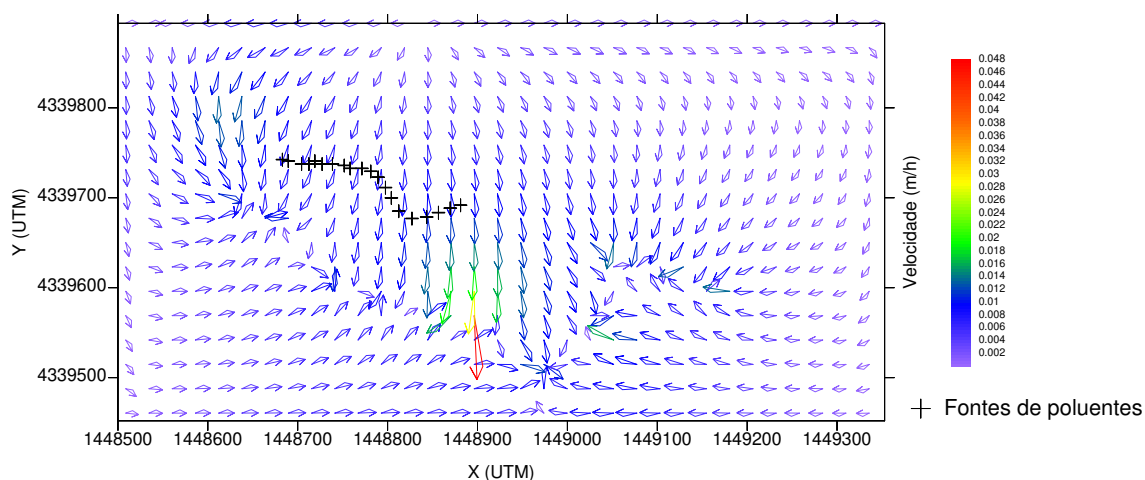
$$k': [0,001]; \alpha_L: [20 \text{ m}]; \alpha_T: [10 \text{ m}]; \rho_B: [1,8]; k_d: [0]; n: [0,13].$$

4.5.1 Simulação do avanço da pluma

Foi realizada uma simulação baseada na área ex Alumix, com a finalidade de analisar o avanço da pluma de poluentes devido a injeção de um poluente genérico através de uma fonte linear, constituída por 20 fontes pontuais descritas na Figura 26. Tal fonte linear é hipotética, porém localizada na zona mais contaminada da área. Nesta Figura também são representados os campos de velocidade média de percolação do aquífero, na situação inicial da simulação. Note-se a convergência destes vetores nas porções sul,

oeste e central do mapa, indicando a presença de cones de depressão induzidos pelo bombeamento de poços.

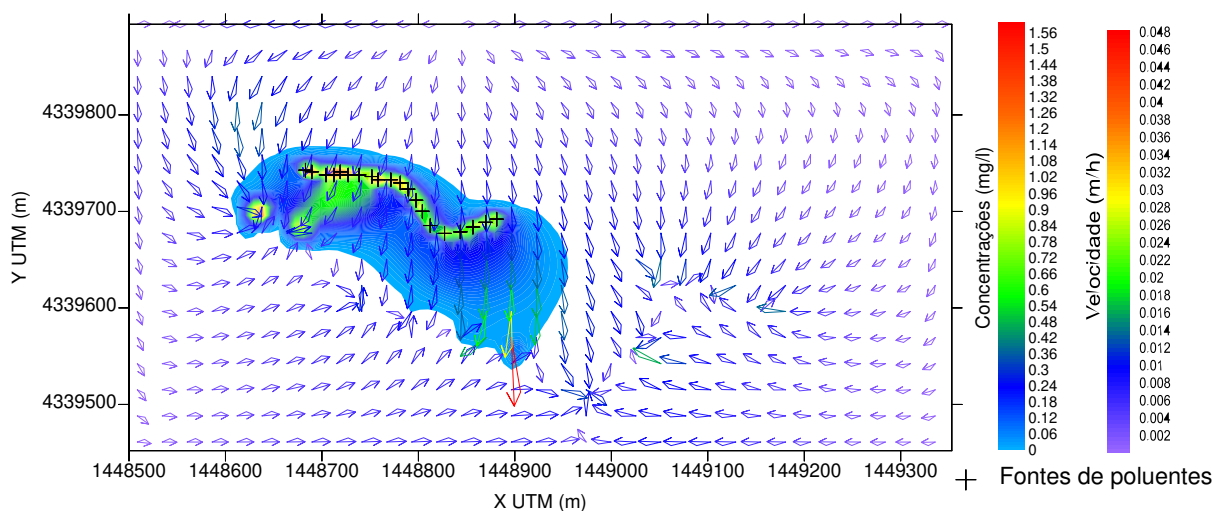
Figura 26 -Fontes de poluente e vetores de velocidade de percolação



Fonte: Autor (2018).

Para simulações, considerou-se que as fontes introduziram uma concentração de 1 mg/L de um poluente genérico, sendo que este valor vigorou para um horizonte de 7 dias. Assim, durante uma semana o poluente foi injetado no aquífero, resultando em uma pluma final ilustrada pela Figura 27.

Figura 27 - Avanço da pluma de poluente para um horizonte de 7 dias.



Fonte: Autor (2018).

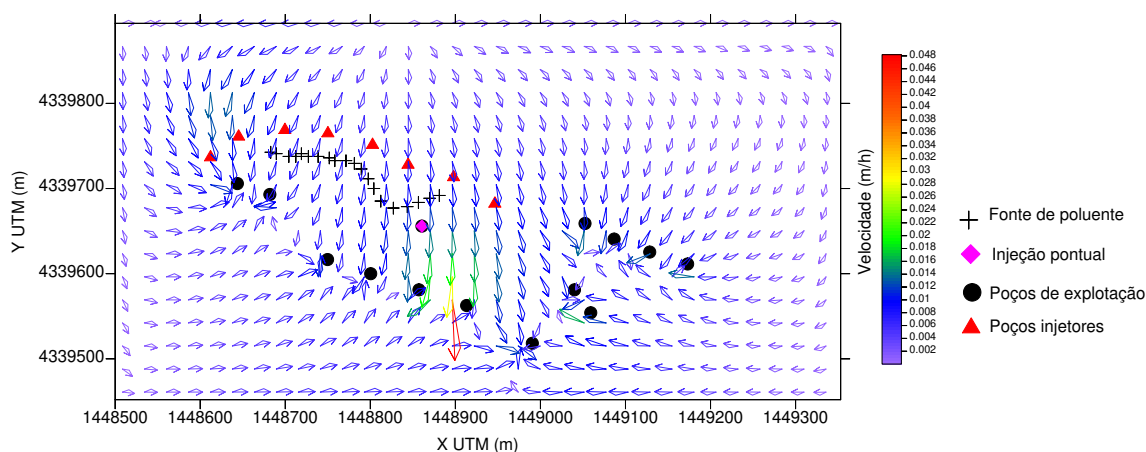
Através desta simulação, pode-se verificar que a pluma de poluentes acompanha os campos de velocidade, migrando em direção às linhas de bombeamento, situadas ao sul

e a oeste da área. Esta configuração de pluma foi utilizada como condição inicial para as simulações seguintes, onde tanto os poços de bombeamento quanto novos poços de injeção entrarão em operação.

4.5.2 Simulação considerando linhas de bombeamento e de injeção

A simulação realizada neste caso, considerou o bombeamento dos 13 poços existentes na região de Portovesme, mas com vazão individual quase que duplicada ($4 \text{ m}^3/\text{h}/\text{poço}$) em relação à caso anterior. A injeção de água limpa foi imposta através de oito poços dispostos de forma linear, ao norte da fonte poluidora, e um de forma pontual, a vazão injetada foi de $5,7 \text{ m}^3/\text{h}$. A Figura 28 representa a localização dos poços em relação aos campos de velocidade e as fontes de poluentes.

Figura 28- Distribuição dos poços e dos campos de velocidade inicial



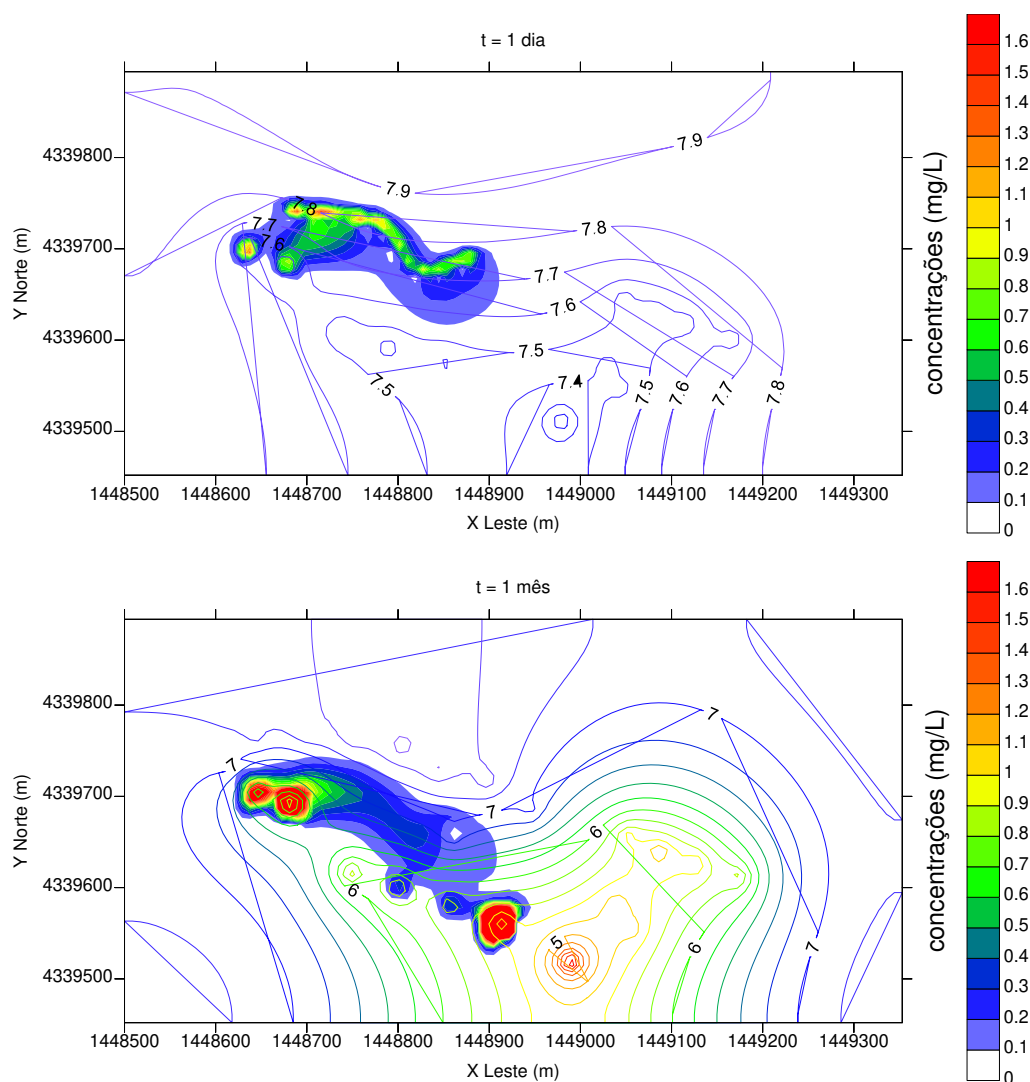
Fonte: Autor (2018).

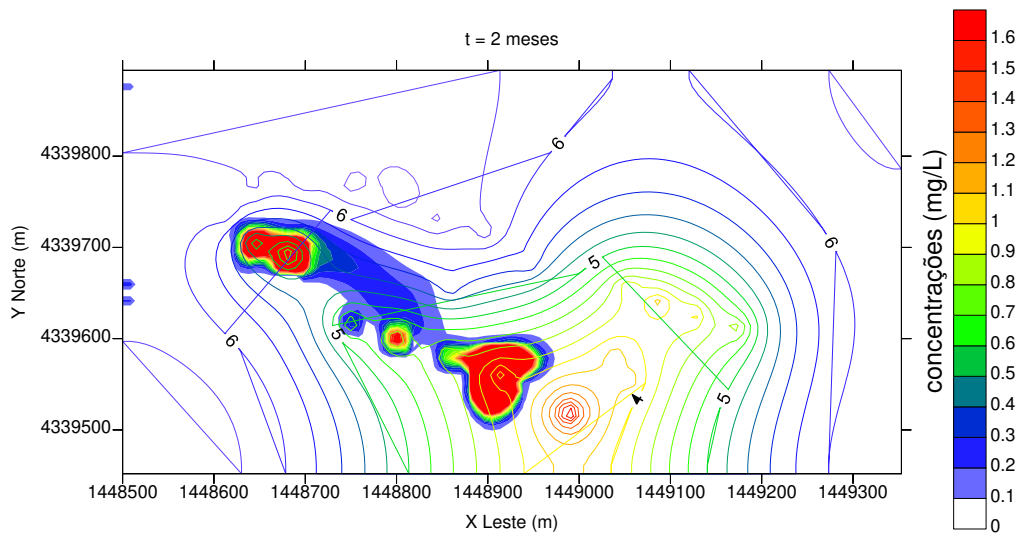
Como já foi mencionado, para esta simulação utilizou-se a pluma de poluentes apresentada na seção anterior, simulada para 7 dias de injeção de poluente e considerada como concentração inicial. Após o início da simulação, a fonte linear permaneceu ativa por mais 1 dia, depois do qual foram anuladas as concentrações de injeção. Nesta circunstância, a pluma de poluente dispersa-se no local, sem a introdução de novas concentrações. Seria como uma correção no possível vazamento que ocasionou a poluição do lençol freático. Essa simulação representa uma situação hipotética, onde foi detectado e corrigido, por exemplo, um vazamento de poluente no segundo dia.

Uma potencialidade desta simulação é verificar a eficiência do método de recuperação de aquíferos composto por poços coletores e injetores operando simultaneamente.

Outro ponto importante desta simulação é poder determinar a concentração de poluentes em relação ao tempo de bombeamento dos poços. Ou seja, tanto os campos de carga hidráulica, quanto os de velocidade e concentração são transientes. Nestes casos, pode-se verificar o quanto as alterações nos campos hidrodinâmicos contribuem para deslocar a pluma poluente. Neste contexto, a Figura 29 ilustra a variação dos campos de cota freática e de concentração. Note-se que a pluma migra em direção aos cones de depressão impelidos pela linha de poços de bombeamento.

Figura 29 – Campos de concentração superpostos aos campos de cota piezométrica para diferentes instantes transcorridos após o início da operação dos poços.

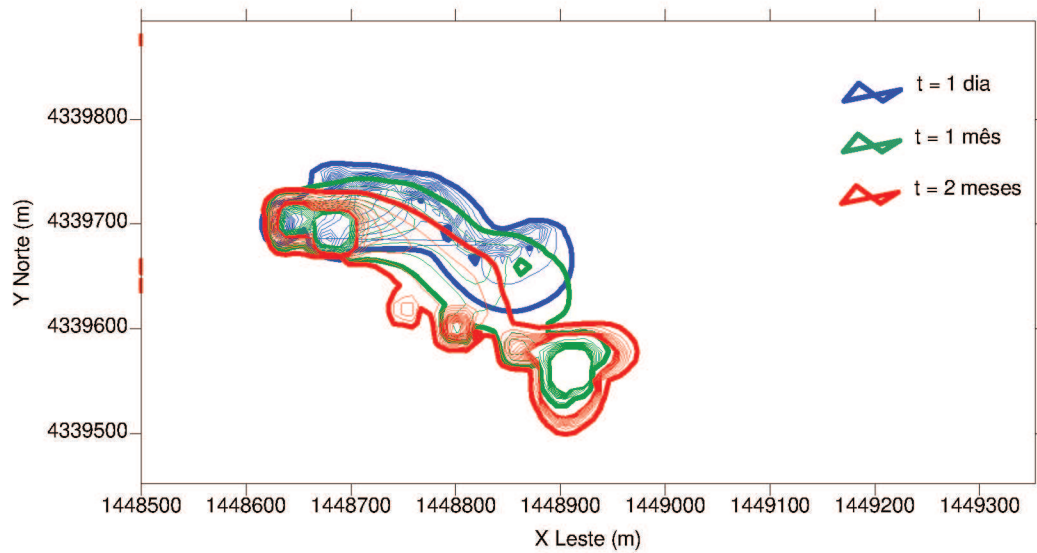




Fonte: Autor (2018).

A movimentação da pluma também pode ser visualizada pela superposição dos resultados ao longo do horizonte de simulação (Figura 30). Nota-se que há uma tendência geral de movimentação no sentido norte-sul, desde a fonte linear de injeção até a linha de poços de bombeamento. Os resultados revelam que há capturas de poluente pelos cones de depressão, o que é evidenciado pelo aumento das concentrações com aprisionamento do poluente dentro destes cones. Apesar disto, há uma tendência de aumento das concentrações nestes setores, indicando que o termo sumidouro, que modela a retirada de massa de poluente pelos poços ($-Q_{ret}(i,j) \cdot C(i,j)/A_{mf}$), não consegue remover quantidades significativas de concentração dos nós (i,j) situados dentro dos cones. Isto sugere que este termo ainda precisa ser objeto de averiguações mais detalhadas. É possível que a partição da vazão dos poços para os nós mais próximos tenha gerado retiradas de massa com descargas ($-Q_{ret}(i,j) \cdot C(i,j)$) pequenas em cada um dos pontos o que, somado aos campos de velocidade convergentes, tenha dificultado a saída do poluente destes setores.

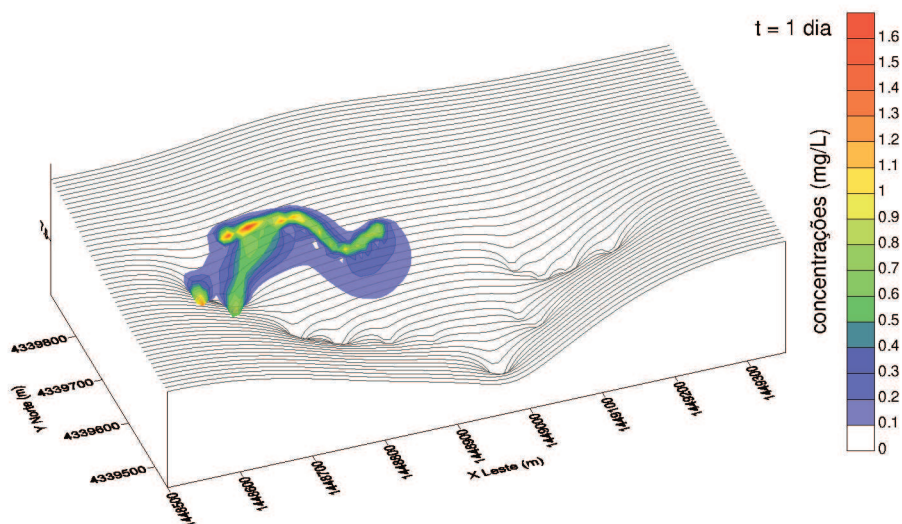
Figura 30 – Movimentação da frente da pluma ao longo do horizonte de 2 meses.

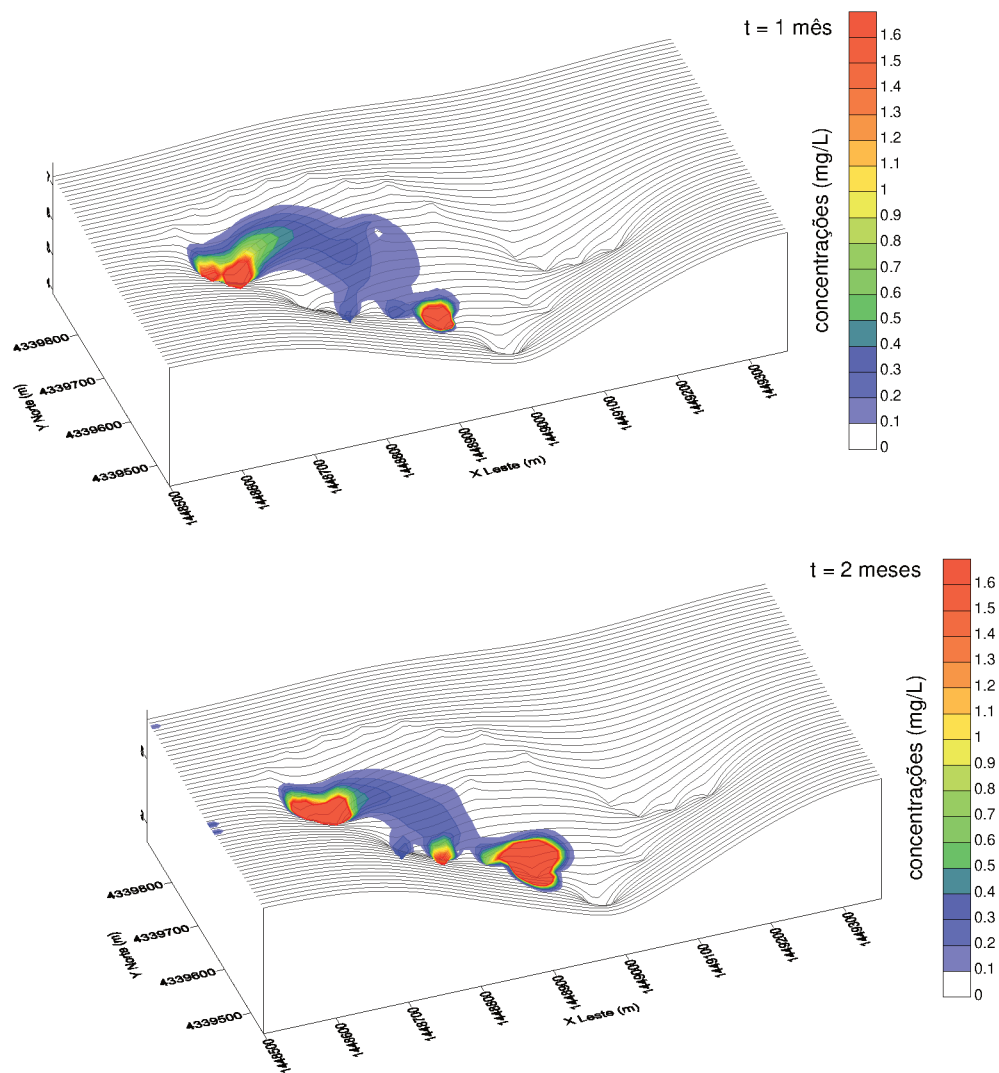


Fonte: Autor (2018).

A linha de poços de injeção de água limpa, situada a montante da fonte poluidora original, também influencia na dispersão da pluma, impelindo-a em direção aos poços de bombeamento situados a jusante. Isto ocorre pela elevação local da superfície freática, gerando cones invertidos, conforme pode-se observar no conjunto da Figura 31, que apresenta as plumas superpostas às superfícies freáticas.

Figura 31 – Evolução temporal da pluma superposta à superfície do lençol freático.

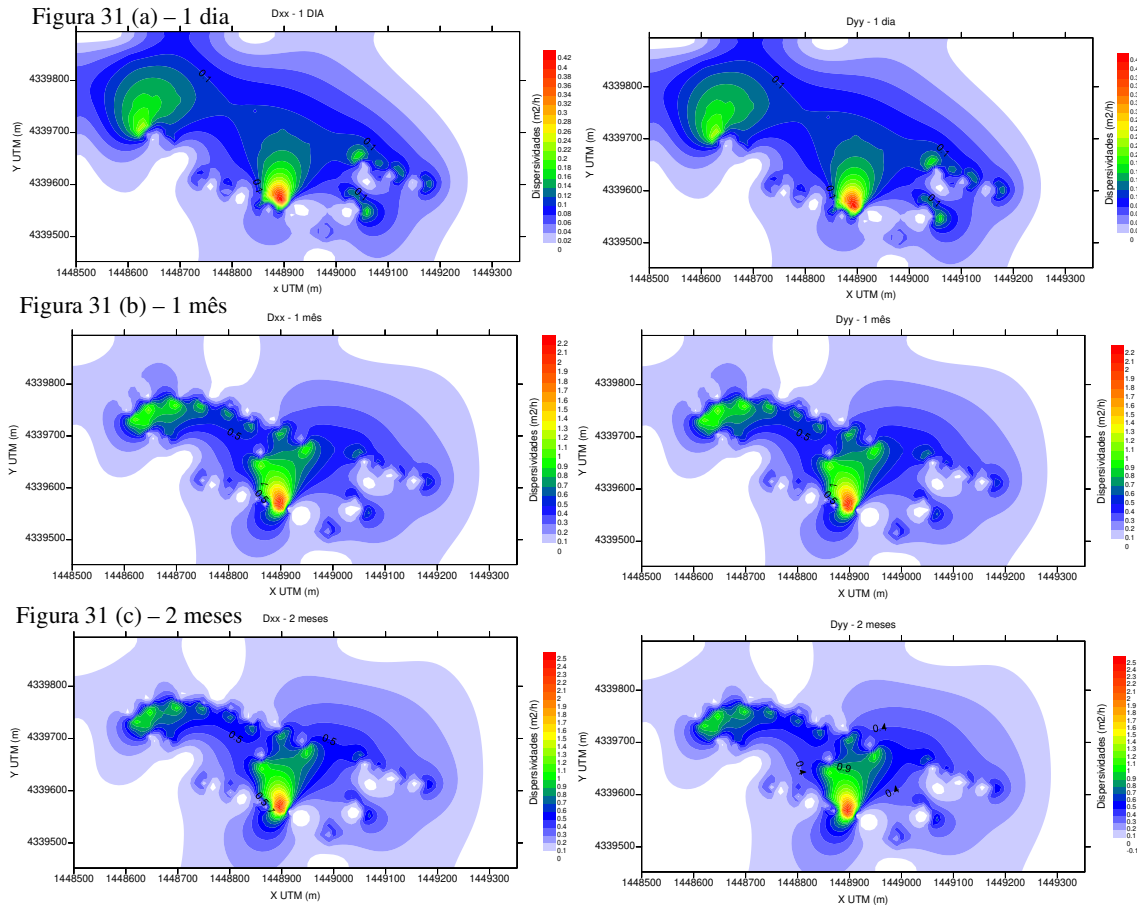




Fonte: Autor (2018).

A alteração temporal da carga hidráulica, devido ao efeito do bombeamento e da injeção por poços, também modifica os coeficientes de dispersão hidrodinâmica. Isto ocorre porque estes parâmetros são diretamente dependentes dos campos de velocidade de percolação da água subterrânea. Nos gráficos da Figura 32 é possível identificar mudanças nos campos de dispersão, os quais tendem a ser maiores em setores onde as velocidades possuem maior magnitude.

Figura 32 – Evolução temporal coeficientes de dispersão hidrodinâmica, nas direções X e Y, com linhas de bombeamento e injeção: horizontes de 1 dia, 1 mês e 2 meses



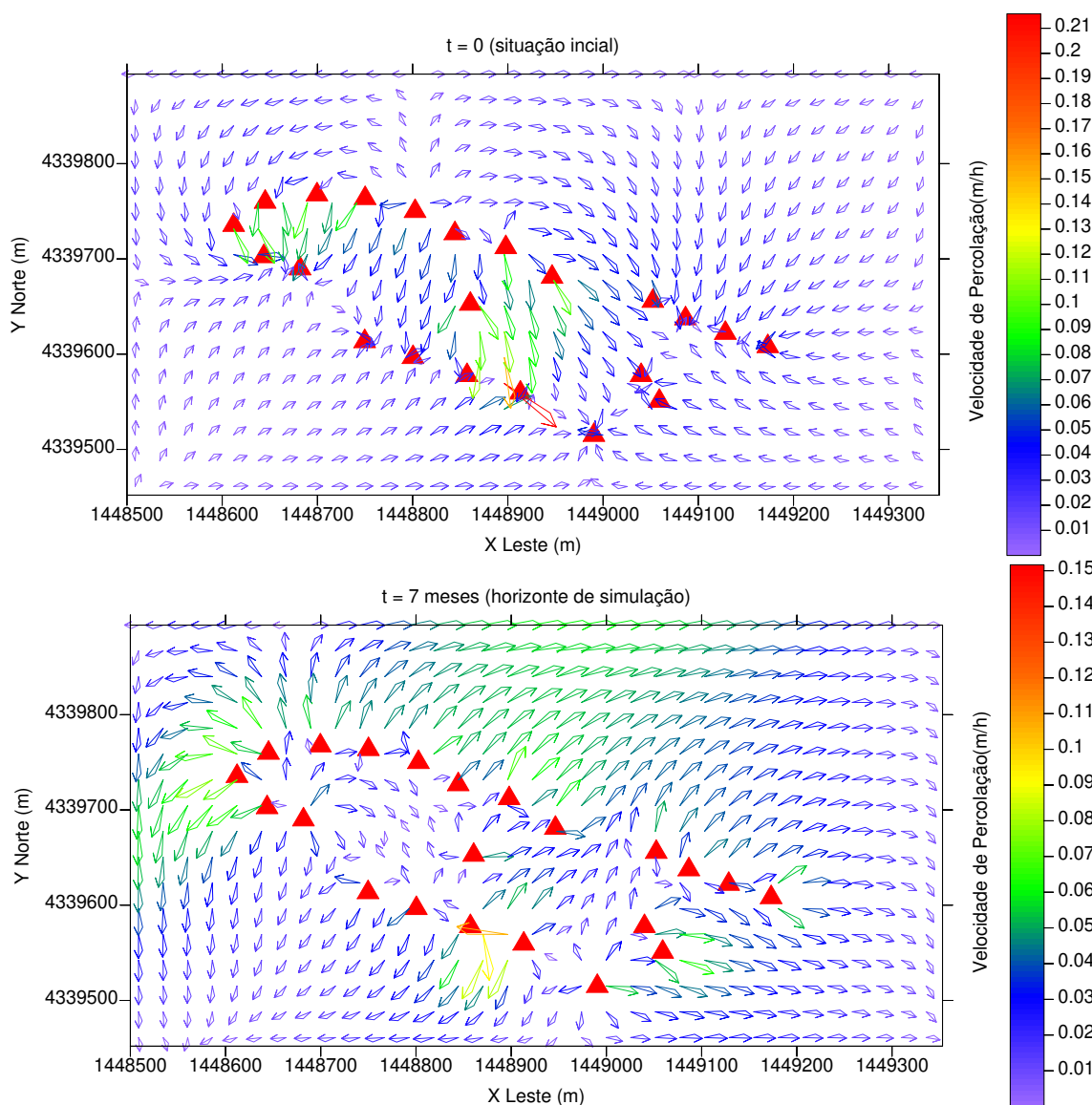
Fonte: Autor (2018).

4.5.3 Simulação considerando apenas linhas de injeção

Com intuito de verificar o comportamento da pluma diante de uma bateria de poços exclusivamente de injeção de água limpa, foi realizada outra simulação para a mesma área. Nestes casos, o método de remediação do aquífero foi a apenas por poços de injeção. Nesta simulação, os referidos poços injetam água isenta do poluente com uma vazão de $4 \text{ m}^3/\text{h}/\text{poço}$. Assim como no caso anterior, a operação destes poços foi considerada contínua, sem qualquer interrupção ao longo do horizonte de tempo simulado. Esta bateria de poços é ilustrada pela Figura 33. Nesta Figura, são apresentados os campos de velocidade de percolação da água subterrânea na situação inicial ($t = 0$ início de operação da bateria de poços) e no horizonte final da simulação ($t = 7\text{meses}$ após o acionamento dos poços).

Ainda como no item anterior, o campo de concentração inicial se desenvolveu através da disseminação de poluentes pelas mesmas fontes pontuais lineares, injetando 1 mg/L durante um dia, com a evolução da pluma até sete dias. Após este instante, a bateria de poços de injeção inicia sua operação. Para considerar a interrupção do vazamento de poluente que ocasionou a poluição do aquífero, as concentrações nas fontes são suprimidas 24 horas após o acionamento dos poços de injeção.

Figura 33- Linhas de injeção sobrepostas ao campo de velocidade inicial da água subterrânea



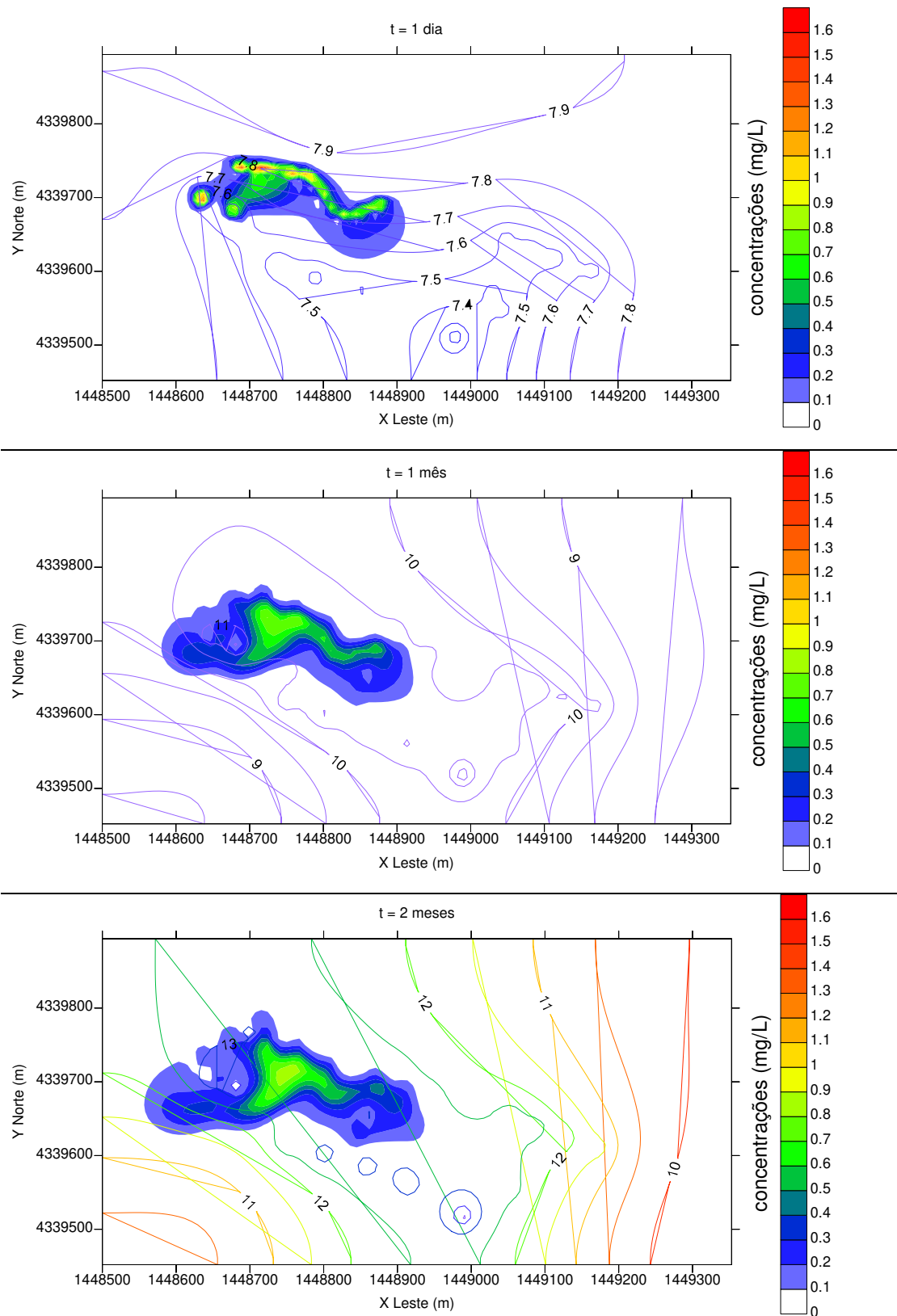
Fonte: Autor (2018).

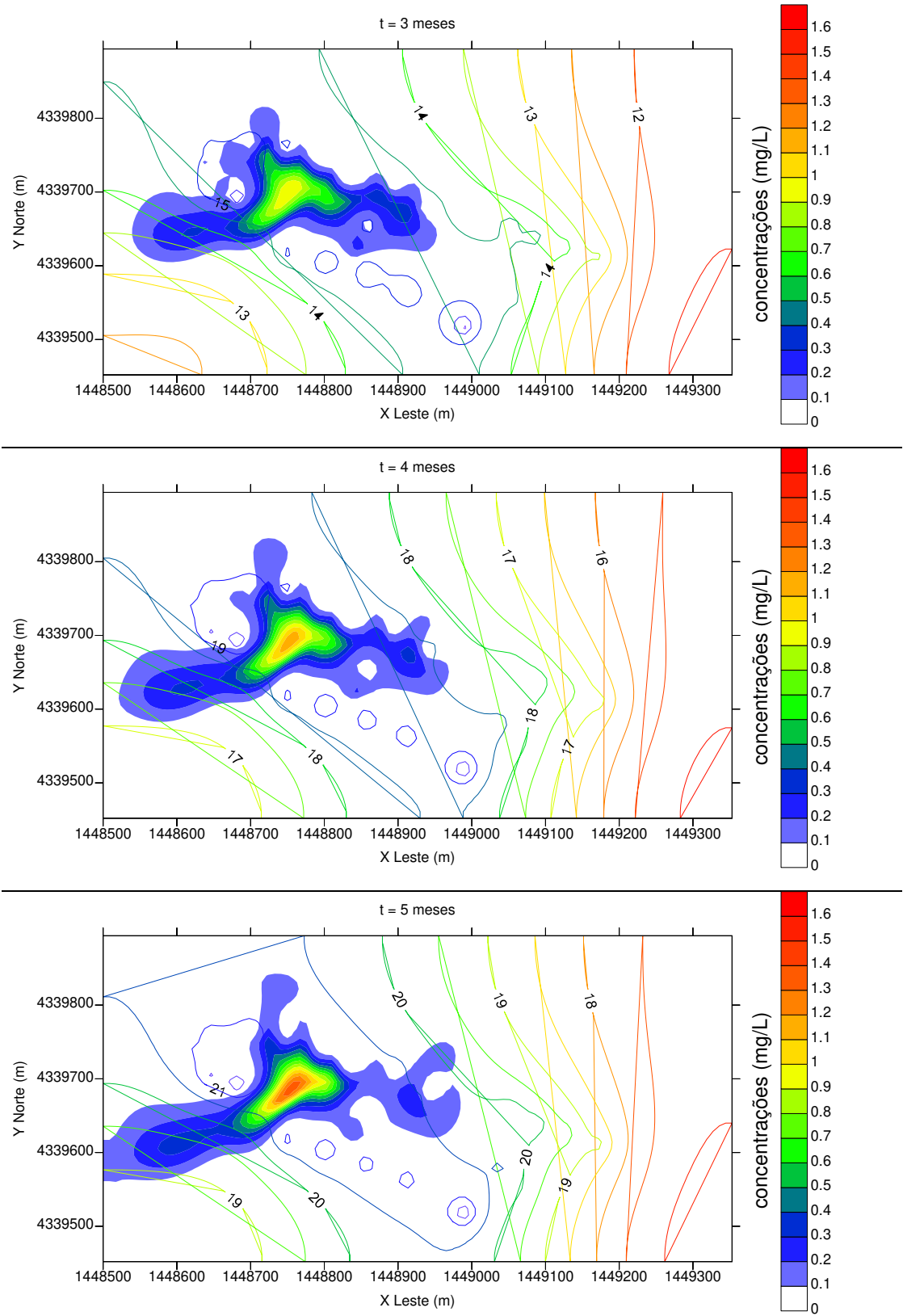
Percebe-se que a injeção artificial de água no aquífero altera completamente os campos de velocidade iniciais. A modificação mais imediata consiste no desaparecimento de zonas de convergência de fluxo e a substituição destas por zonas de fluxo radialmente divergente, em função dos cones invertidos originados a partir dos pontos de injeção de água. Na situação final, surgem alguns setores particularmente singulares que são determinantes para o comportamento da pluma de poluente:

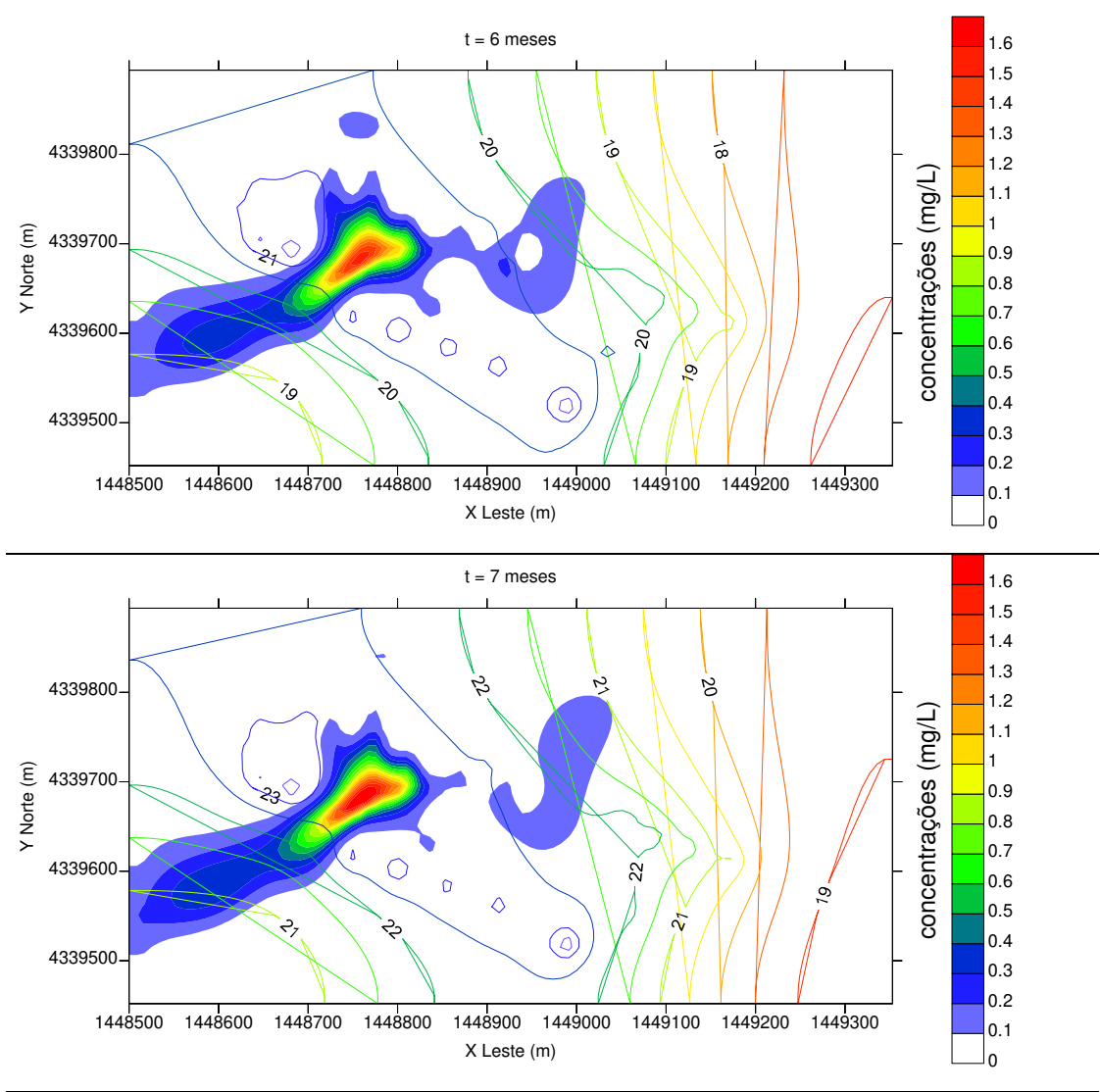
- Nas bordas das linhas de poços de injeção há zonas de escape que funcionam como se fossem jatos instalados entre dois poços consecutivos. Estes jatos arrastam, para fora, o poluente que estava inicialmente disperso na zona interna da bateria;
- Na zona centro-oeste, mais especificamente nas adjacências das coordenadas (144870 m Leste; 43397680 m Norte) surge uma zona de recirculação de água subterrânea. Isto decorre do aprisionamento da água em função das injeções das linhas de poços norte e sul, mas principalmente pelo poço de injeção isolado, que está situado entre estas duas linhas. Esta recirculação de água será determinante para a manutenção do poluente dentro da bateria, aumentando seu tempo de residência neste setor. Trata-se de um efeito hidrodinâmico indesejado, haja vista que o fluxo de água não consegue empurrar as concentrações para fora da área afetada.

A evolução da pluma de poluente, superposta às isolinhas de cota freática, é ilustrada pelo conjunto de Figuras 34 e 35. Nesta análise, verifica-se o quanto o campo de carga hidráulica é modificado relativamente rápido (dentro do primeiro mês) pela injeção de água pela bateria de poços. Já nestes instantes iniciais, os cones de depressão tornam-se invertidos em decorrência da injeção contínua de água pelos poços. Nos meses subsequentes, o comportamento é de elevação da superfície freática, surgindo uma tendência de estabilização das cargas hidráulicas entre os dois últimos meses de simulação.

Figura 34 – Campos de concentração superpostos aos campos de cota piezométrica para diferentes instantes transcorridos após o início da operação dos poços.

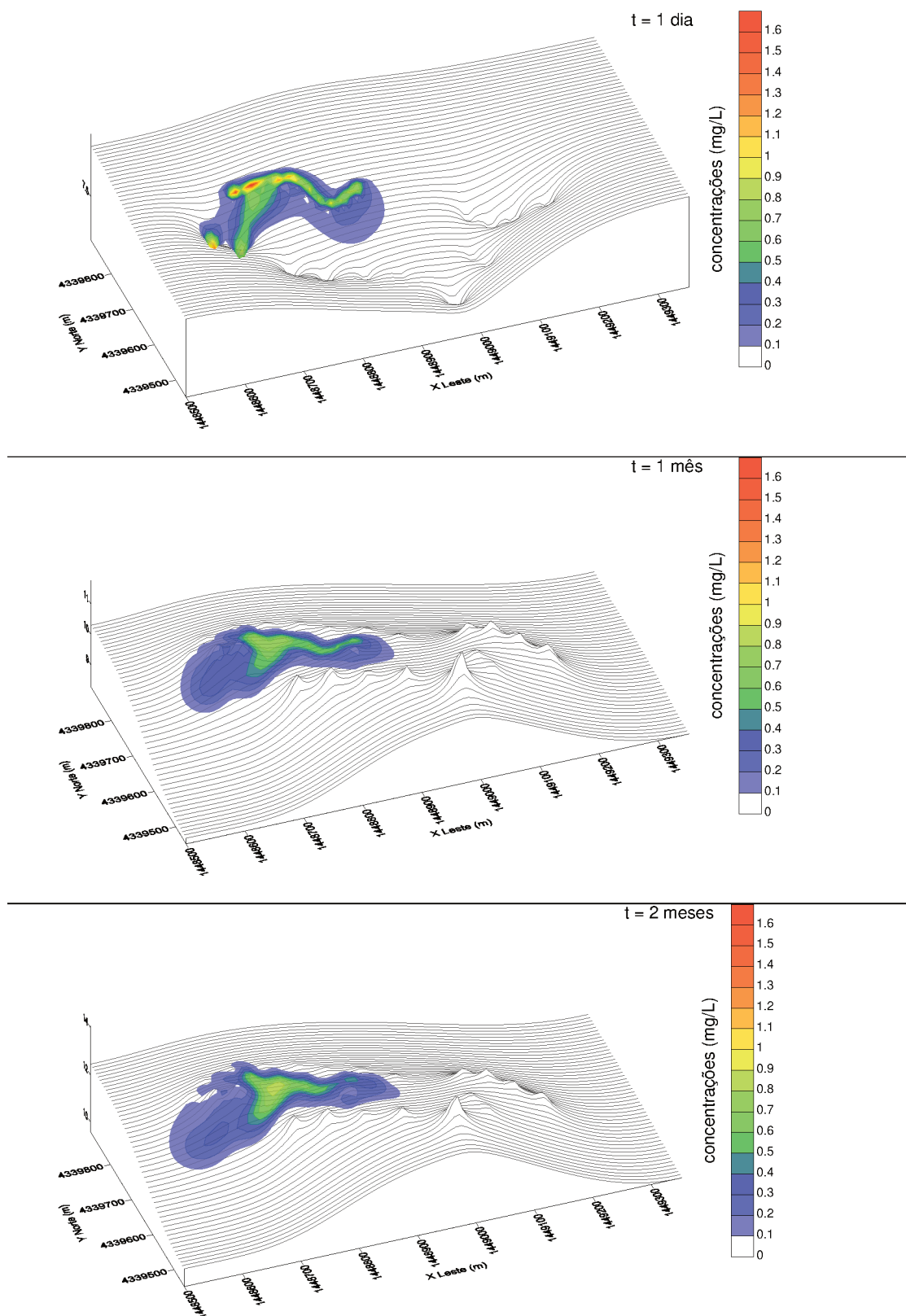


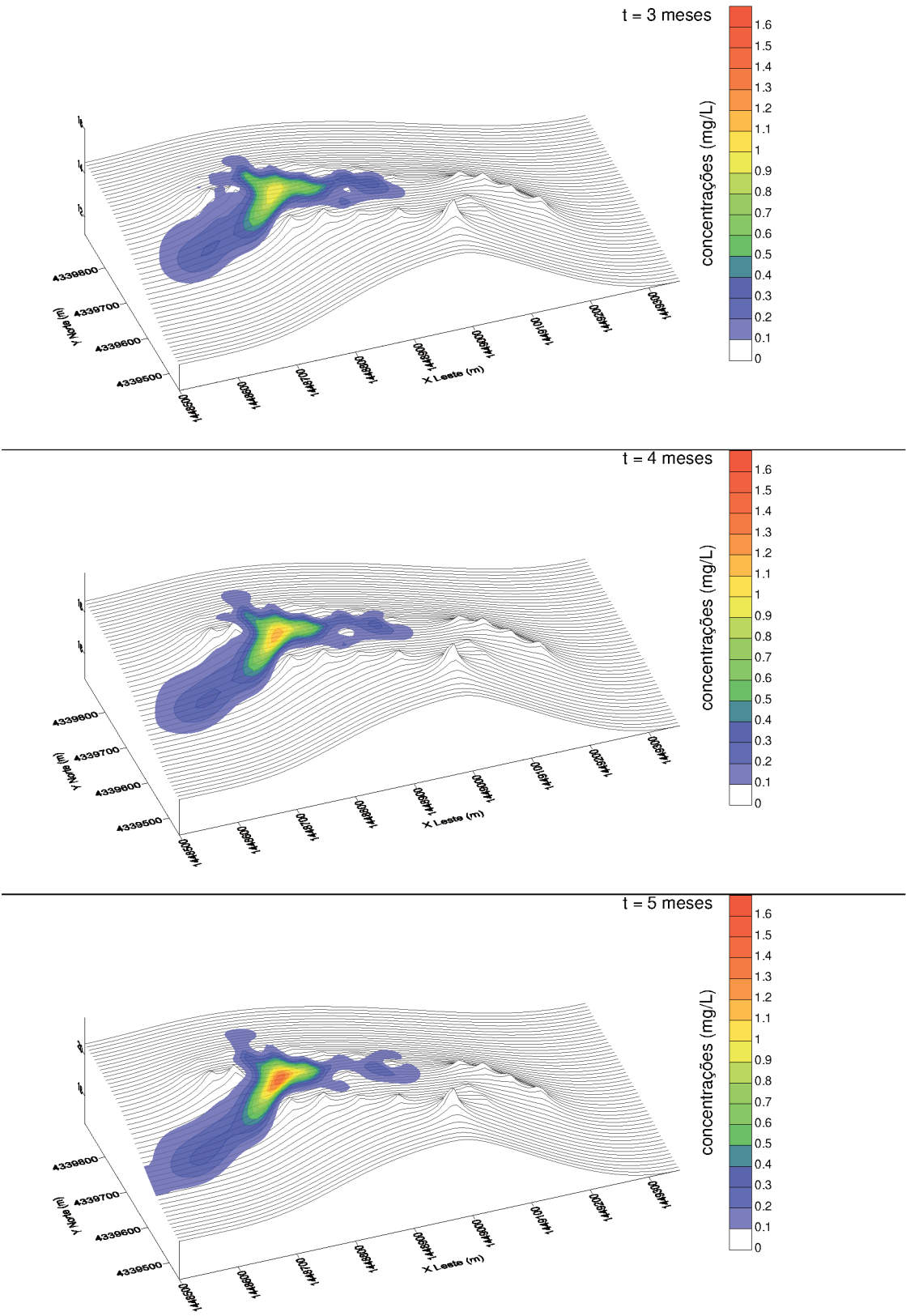


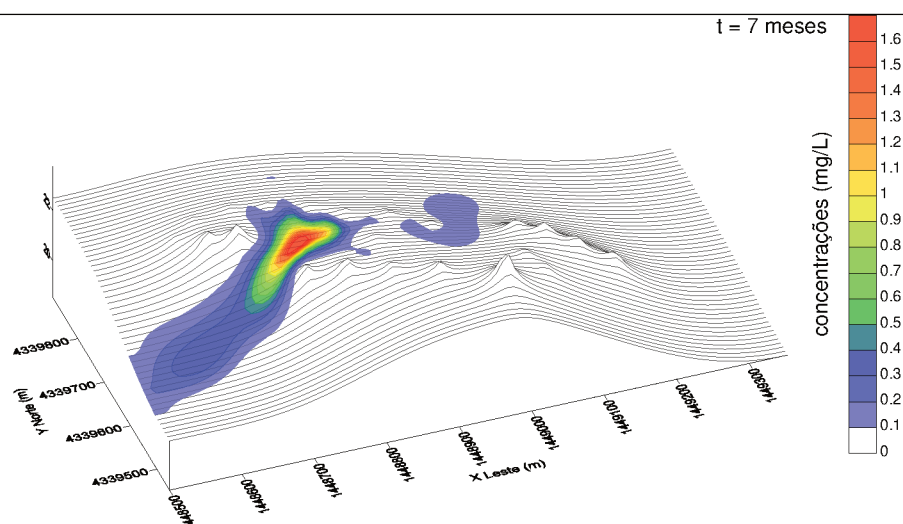
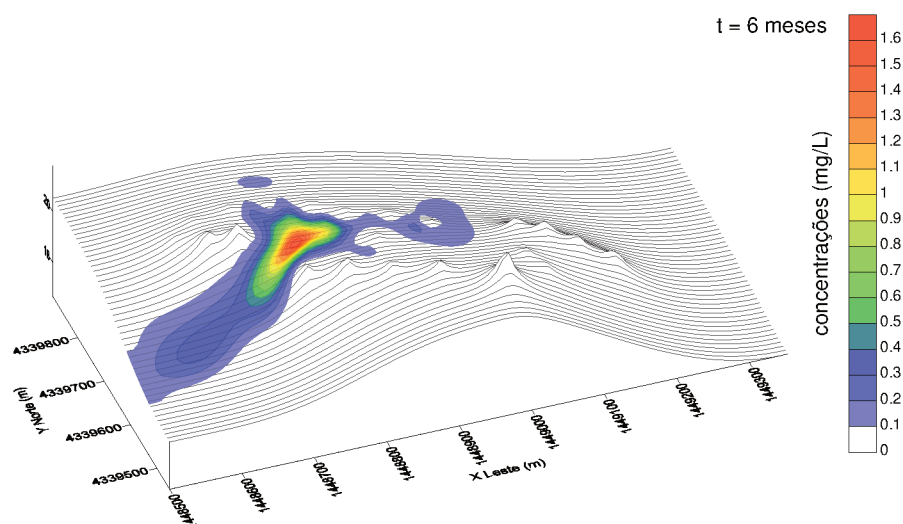


Fonte: Autor (2018).

Figura 35 – Campos de concentração superpostos à superfície freática para diferentes instantes transcorridos após o início da operação dos poços.





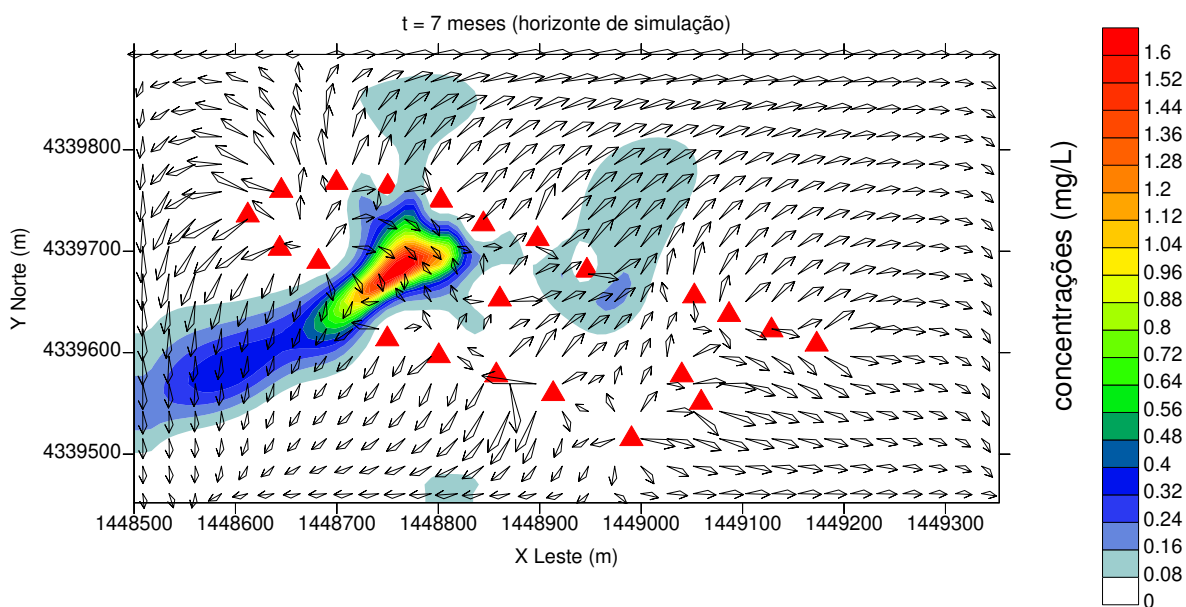


Fonte: Autor (2018).

Os resultados revelam relativa dispersão da pluma, a qual tem sua conformação inicial visivelmente alterada pelos campos de carga hidráulica e, consequentemente, de velocidade. Pelas Figuras 35 e 36, percebe-se o acúmulo de concentrações no setor centro-oeste, na posição da zona de recirculação induzida pela injeção artificial de água. O elevado tempo de residência do poluente, neste setor, contribui para um aumento sutil das concentrações resultantes, de tal forma que o balanço supera o decaimento da substância poluidora. Lembre-se que, nesta simulação, o poluente não é conservativo, pois sofre decaimento de primeira ordem com taxa igual a $-k'.C$ (com $k'=10^{-3} \text{ h}^{-1}$).

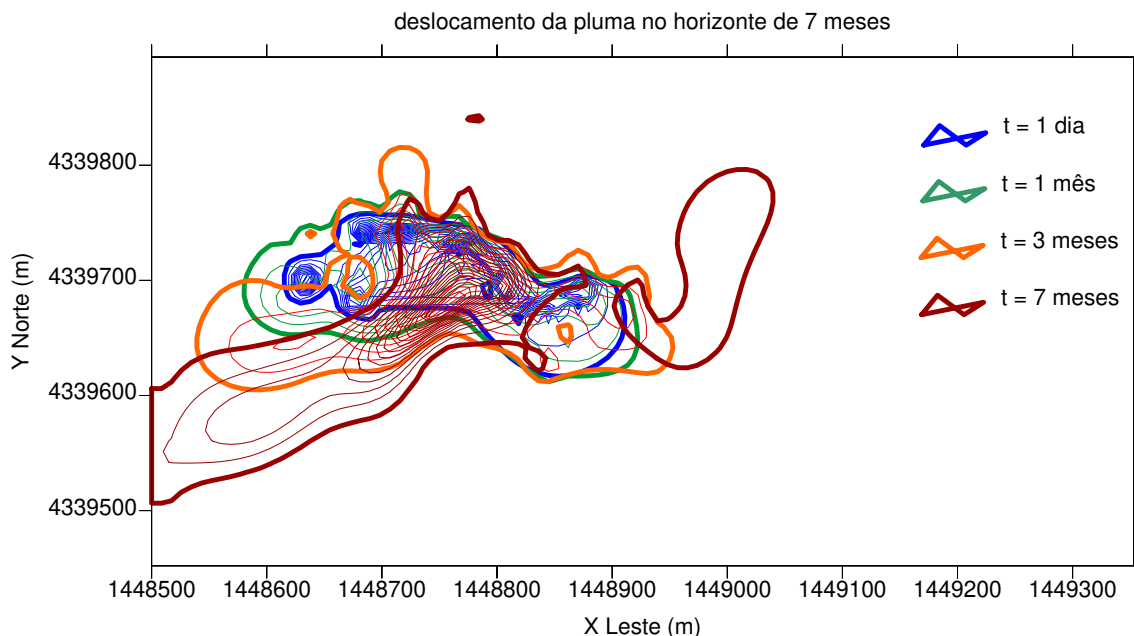
O lançamento do poluente para fora da área interpoços também é verificado na forma de jatos que ramificam-se nos espaços entre pontos de injeção consecutivos. Neste contexto, o lançamento mais evidente ocorre no sentido centro-sudoeste onde, notadamente, os gradientes hidráulicos são mais acentuados. Também foram capturados lançamentos importantes no sentido centro-norte e centro-nordeste. De certa forma, não fosse pela zona de recirculação induzida pelo poço isolado central, nota-se que o poluente tende a ser impelido para fora da área interpoços. É possível que a desativação deste poço seja benéfica para reduzir as concentrações nesta área. Estas observações podem ser visualizadas, com mais detalhe, quando se projetam os campos de concentração sobre os campos de velocidade – conforme ilustra a Figura 36 – e pelo deslocamento da frente de poluição – conforme ilustra a Figura 37.

Figura 36 – Superposição da pluma com campos de velocidade para o horizonte de simulação.



Fonte: Autor (2018).

Figura 37 – Movimentação da frente de poluição.

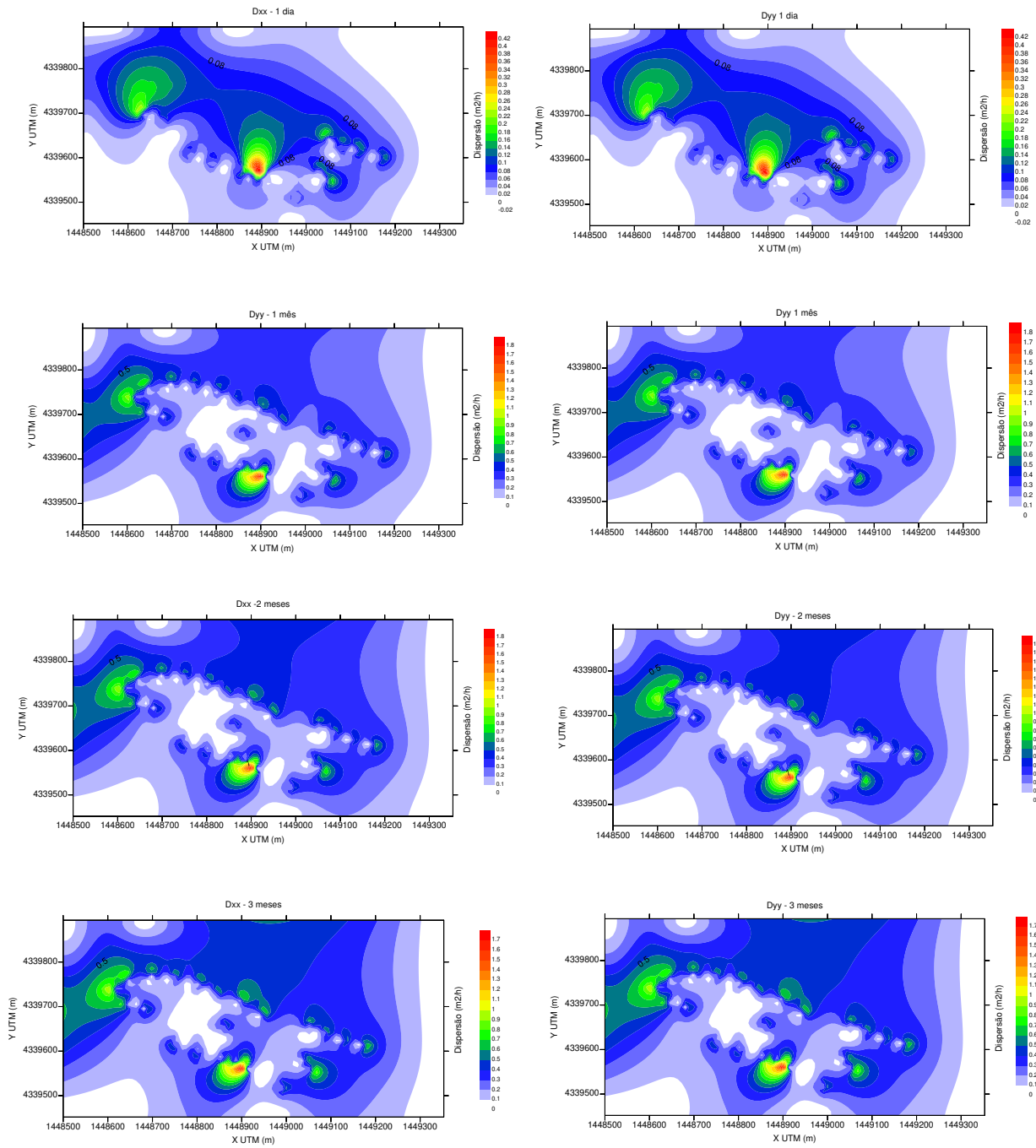


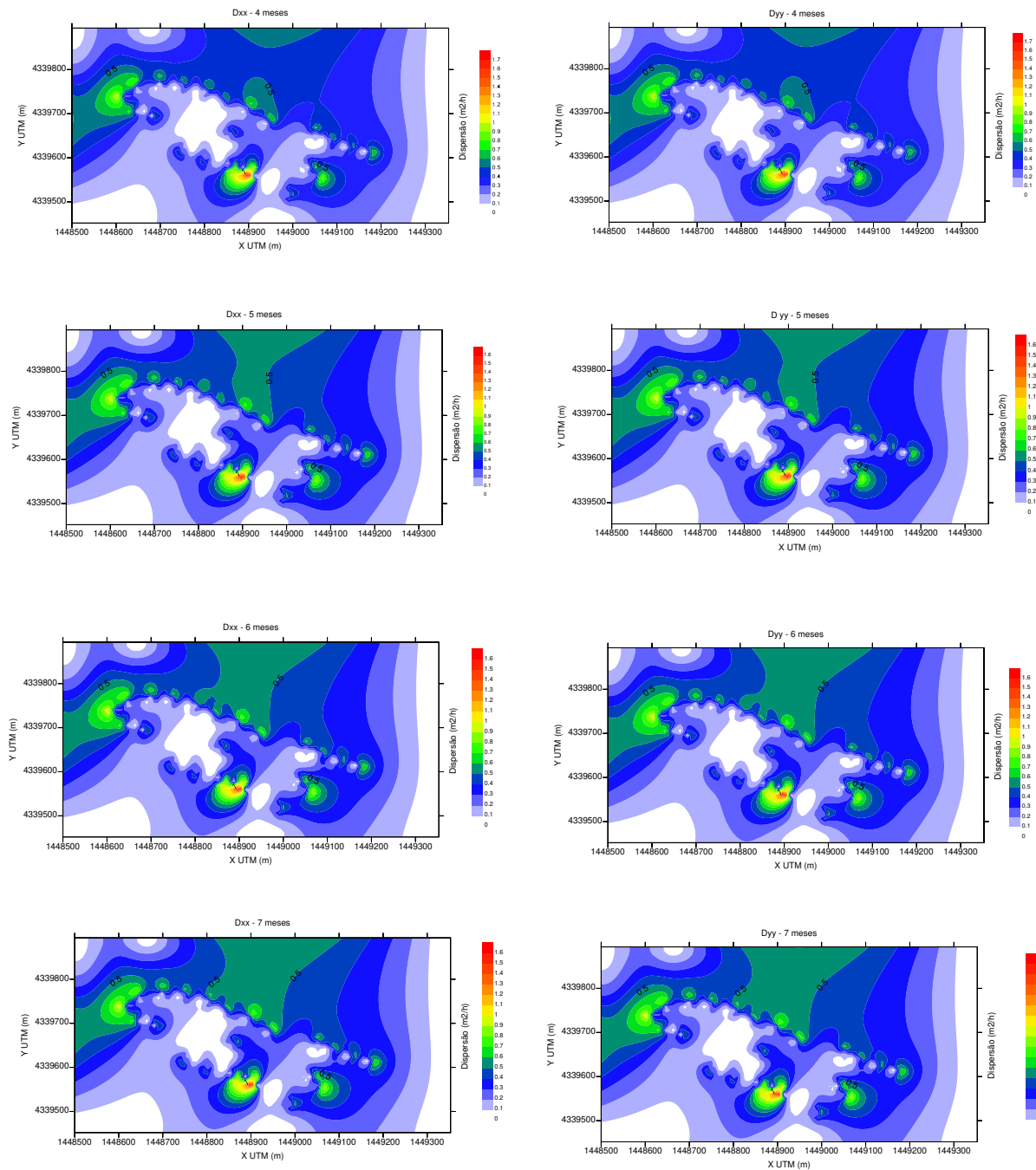
Fonte: Autor (2018).

Ainda como no item anterior, o campo de concentração inicial se desenvolveu através da disseminação de poluentes pelas mesmas fontes pontuais lineares, injetando 1 mg/L durante um dia com a evolução da pluma até sete dias. Após este instante, a bateria de poços de injeção inicia sua operação. Para considerar a interrupção do vazamento de poluente que ocasionou a poluição do aquífero, as concentrações nas fontes são suprimidas 24 horas após o acionamento dos poços de injeção.

Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica estão representados na Figura 38. Como os mesmos são dependentes dos campos de velocidade, as modificações mais sensíveis destes parâmetros ocorrem durante o primeiro mês de operação da bateria de poços. Conforme já se comentou, é neste intervalo que surgem as mudanças mais drásticas na superfície freática, incluindo a inversão dos cones de depressão. À medida que os campos de carga hidráulica tendem para o regime permanente, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica tendem para a estabilização dos seus valores.

Figura 38 - Variações no campo de dispersão hidrodinâmica ao longo do tempo.





Fonte: Autor (2018).

Por fim, discute-se que estas simulações foram hipotéticas, embora utilizassem os dados físicos do aquífero granular subjacente à área ex Alumix, em Portovesme. Dentre estes dados reais, citam-se as cotas freáticas iniciais, os campos de condutividade hidráulica, a porosidade efetiva e, aproximadamente, as cotas de fundo do aquífero (ou de topo do embasamento rochoso vulcânico que o sustenta). Também são reais as linhas de poços de bombeamento, situadas ao sul e a leste da fonte poluidora. Apesar disto, foram

introduzidas muitas hipóteses como a de isotropia para as condutividades hidráulicas, além da imposição de parâmetros como as dispersividades e os coeficientes de decaimento e de partição. No caso da área ex Alumix, a fonte de poluição é mais difusa, porém tem-se noções acerca da área mais atingida pela penetração de poluentes diversos e esta área situa-se aproximadamente onde se alocou a fonte linear das presentes simulações. Nas simulações também foram adotadas as concentrações de injeção e as condições de existência/extinção da fonte linear, além das características operacionais dos poços (vazões e operação contínua). Os poços de injeção também não existem na localidade. Atualmente, a recuperação deste aquífero ocorre exclusivamente com as linhas de bombeamento (13 poços), extraíndo uma vazão média de 2,2 m³/h por poço. De acordo com Figus (2010), mesmo operando apenas com linhas de retirada de água poluída, o monitoramento contínuo da área tem revelado decaimento das concentrações de poluentes ao longo dos anos.

As simulações apresentadas, mesmo que alimentadas por algumas condições hipotéticas, têm potencial de indicar alternativas que incrementam o tratamento do aquífero, como é o caso da linha de injeção a montante da fonte poluidora. Estas elevam a superfície freática a montante e, somadas a uma linha de bombeamento a jusante (conforme existe de fato), amplificam os gradientes hidráulicos que tendem a carrear, mais rapidamente, o poluente para fora da área contaminada. Por outro lado, também podem-se apontar alternativas que não são eficazes, como foi a implantação de um poço de injeção central ou, até mesmo, de toda a linha de injeção de jusante. Tem-se, enfim, uma ferramenta que pode auxiliar na locação de poços para projetos de recuperação de aquíferos degradados.

CAPÍTULO 5

CONCLUSÕES

A proposta desta pesquisa foi construção de um modelo computacional com a finalidade de simular a dispersão de poluentes em águas subterrâneas podendo assim traçar a evolução de plumas de poluentes no espaço e no tempo. Para tanto, utilizou-se o Método Numérico de Diferenças Finitas para o tratamento da equação do transporte de poluentes em aquíferos, a equação advecção-dispersão. As derivadas espaciais para o termo advectivo foram discretizadas por diferenças progressivas e regressivas de primeira ordem e as derivadas espaciais para o termo difusivo por diferenças centradas de segunda ordem. A escolha desse método para resolução das derivadas espaciais, foi proposta por Santos (2015), que utilizou derivadas centrais de segunda ordem para os termos advectivos e difusivos. No tratamento das derivadas temporais, utilizou-se o esquema totalmente implícito, este foi o método que melhor respondeu em relação ao tempo de processamento e a estabilidade numérica do código. A discretização da equação levou a um sistema linear final para o cálculo das concentrações, este foi resolvido através do método iterativo dos Gradientes Bi-conjugados Estabilizado e Pré-condicionado. Com a aplicação do método isso foi possível solucionar cada nível de tempo com um número pequeno de iterações (de um a cinco, na maior parte dos casos simulados), o que permitiu uma maior rapidez de processo. Utilizou-se também para resolução do sistema linear, o esquema de armazenamento esparso (CRS) da matriz de coeficiente com a finalidade de economizar memória computacional.

Para validação do método usado, foram realizadas simulações para a equação analítica do transporte de poluentes em águas subterrâneas desenvolvida por Bear (1979). Os resultados da simulação desta solução permitiram comparar com os resultados da solução numérica desenvolvida, no entanto a aplicação da solução analítica se restringiu a um ambiente onde as velocidades e os coeficientes de dispersão são constantes. Portanto,

foram encontrados resultados hipotéticos no contexto do ambiente utilizado, das condições de contorno internas e dos parâmetros relacionados com o poluente e o aquífero. A comparação realizada entre as duas soluções, numéricas e analíticas mostraram que solução numérica proposta fornece resultados coerentes com a solução exata, na grande maioria do domínio espacial analisado. O transporte advectivo do poluente ficou evidente, pois a pluma se desenvolveu preferencialmente na direção e no sentido do campo de velocidade.

Realizado a validação do método numérico, o aplicou a uma situação baseada em uma área real, com dados como cotas freáticas iniciais, campos de condutividade hidráulica a porosidade efetiva e as cotas de fundo do aquífero. Ainda assim, os resultados assumem caráter hipotéticos pois novamente as condições de contorno internas e os parâmetros relacionados com o poluente foram atribuídos, devido a dificuldade de se obter estes valores em campo. Os resultados encontrados para esta simulação, demonstram que a pluma de poluentes em águas subterrâneas formada através da injeção dos mesmos, seguem a direção e o sentido do fluxo. Ainda nesse caso simulou a presença de bateria poços exploradores e injetores de água limpa, onde verificou-se a eficiência dos mesmos para tratamento de aquíferos poluídos. Dessa forma pôde indicar alternativas que incrementam o tratamento de aquíferos com a capacidade de auxiliar na locação de poços para projetos de recuperação de aquíferos degradados.

A aplicação do modelo computacional se torna válida e vantajosa, pois apresenta resultados satisfatórios e aplicabilidade do método se desenvolve de maneira simples e sem custos. Pois podem ser executados em computadores individuais simples, sem consumo demasiado de tempo e utilizando um programa bastante conhecido e utilizado na prática das Engenharias.

REFERÊNCIAS

ABAS (Associação Brasileira de Águas Subterrâneas). XII Congresso de Águas Subterrâneas, 2002. **Pode faltar água no planeta azul. Fábrica de Comunicação.** Disponível em: <[http:// www.abas.org/cabas/nt_0008. php\\$](http://www.abas.org/cabas/nt_0008.php)>. Acesso em: dezembro de 2015.

ANA (Agência Nacional de Águas). **Conjuntura dos recursos hídricos no Brasil 2017:** relatório pleno / Agência Nacional de Águas. -- Brasília: ANA, 2017.

ANA (Agência Nacional de Águas). **Disponibilidade e Demanda de Recursos Hídricos no Brasil.** Cadernos de Recursos Hídricos. Brasília, maio de 2005.

ANA (Agência Nacional de Águas). **Panorama da qualidade das águas Subterrâneas no Brasil.** Cadernos de Recursos Hídricos 5. Brasília, maio de 2007.

ALAMY FILHO, J. E. **Determinação de rebaixamentos em sistemas de poços tubulares através da construção e aplicação de programa específico.** Dissertação de Mestrado, Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2002.

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. <https://doi.org/10.21168/rbrh.v18n4.p255-265>

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 12.212: Projeto de poço para captação de água subterrânea.** Rio de Janeiro, 2006.

ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **NBR 12.244: Construção de poço para captação de água subterrânea.** Rio de Janeiro, 2006.

- 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. <https://doi.org/10.1016/j.advwatres.2008.08.009>
- 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. <https://doi.org/10.1137/1.9781611971538>
- BARRETO, F. M.; ARAÚJO, J.C.; NASCIMENTO, R.F. **Caracterização preliminar da carga de agrotóxico presente na água subterrânea em tianguá-ceará (brasil)**. XIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas. São Paulo, 2004. Disponível em < <https://aguassubterraneas.abas.org/asubterraneas/article/viewFile/23402/15491> >
- BASSO, J. B. **Transporte e retenção de K⁺, Cu²⁺ 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. Some experiments on dispersion. **Dynamics of fluids in porous media**. New York: Elsevier, 1972.
- BEAR, J. **Hydraulics of Groundwater**. Nova York: McGraw – Hill Book Co, 1979.
- BEDIENT, P.B.; RIFAI, H.S.; NEWELL, C.J. **Groundwater Contamination: Transport and Remediation**. New Jersey: Prentice-Hall, 1994. 560.p.
- BICUDO, C.E.M.; TUNDISI, J.G.; SCHUEUENTUHI, M.C.B. **Águas do Brasil: análises estratégicas**. 224p. São Paulo, Instituto de Botânica, 2010.
- BORGHETTI, N.; BORGHETTI, J. R.; ROSA, E.F.F. **Aquífero Guarani – A verdadeira integração dos países do Mercosul**. Curitiba, 2004.
- 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. [https://doi.org/10.1016/S0893-9659\(03\)80024-1](https://doi.org/10.1016/S0893-9659(03)80024-1)
- BRASIL. Decreto no 4.074 de 04 de janeiro de 2002, regulamenta a lei nº 7.802, de 11 de julho de 1989 que dispõe sobre a pesquisa, a experimentação, a produção, a embalagem e rotulagem, o transporte, o armazenamento, a comercialização, a

propaganda comercial, a utilização, a importação, a exportação, o destino final dos resíduos e embalagens, o registro, a classificação, o controle, a inspeção e a fiscalização de agrotóxicos, seus componentes e afins, e dá outras providências. Diário Oficial [da] República Federativa do Brasil. Brasília. Publicação DOU: 08/01/2002. Seção I, p. 1.

BRASIL. Portaria no 518 de 25 de março de 2004. Aprova a Norma de Qualidade da Água para Consumo Humano, que dispõe sobre procedimentos e responsabilidades inerentes ao controle e à vigilância da qualidade da água para consumo humano, estabelece o padrão de XIII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas. Diário Oficial [da] República Federativa do Brasil. Brasília. Publicação DOU: 26/03/2004. Seção I, p. 266.

BRASIL. Resolução nº. 20 do Conselho Nacional do Meio Ambiente de 18 de junho de 1986. Dispõe sobre a classificação das águas doces, salobras e salinas do Território Nacional. Diário Oficial [da] República Federativa do Brasil. Brasília. Publicação DOU: 30/07/1986.

BRASIL. Portaria Nº 2.914, de 12 de dezembro de 2011. Dispõe sobre os procedimentos de controle e de vigilância da qualidade da água para consumo humano e seu padrão de potabilidade. Brasília: Ministério da Saúde, 2011.

CLEARY, Robert W. **Águas Subterrâneas**, 2007. Disponível em: <http://www.clean.com.br/Menu_Artigos/cleary.pdf>. Acesso em: 15 jan. 2017.

COELHO, H. M. G.; SIMÕES, G. F.; LANGE, L. C.; FERREIRA, C. F. A. **Transporte de Contaminantes**. 2012. Disponível em: <<http://www.google.com.br/url?sa=t&rct=j&q=&esrc=s&source=web&cd=1&ved=0CQQFjAA&url=http%3A%2F%2Fwww.ens.ufsc.br%2Fflabs%2FLivro%2520Prosab%2Fpendice02.doc&ei=nIybUI6UMpDC0AGKp4D4Dw&usg=AFQjCNERLtbRl7GW7HrE9sd7MiduuI9fA&sig2=JEbUHaXemRrtVzaQM4vPSA>>. Acesso em: 08 nov. 2016.

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. <https://doi.org/10.1111/j.1745-6592.1993.tb00460.x>

- CUSTODIO, E.; LLAMAS, M.R. **Contaminación de las aguas subterráneas**. In_____. **Hidrologia Subterránea**. 2. ed. Barcelona: Ediciones Omega, 1996. cap.18.3, p.1905.
- DARCY, H. **Les fontaines publiques de la ville de Dijon**. Victor Dalmont, Paris, 1856.
- DOMENICO, P. A.; SCHWARTZ, F. W.; **Physical and Chemical Hydrogeology**, 2nd ed., John Wiley: New York, 1998.
- 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. [https://doi.org/10.1016/S0955-7997\(97\)00086-6](https://doi.org/10.1016/S0955-7997(97)00086-6)
- FEITOSA, F. A. C.; MANOEL FILHO, J.; **Hidrogeologia: conceitos e aplicações**, 2nd ed., CPRM, UFP, LABHID: Fortaleza, 2000.
- 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.
- FETTER, C.W.; **Applied Hydrogeology**, 4th ed., Prentice Hall: New York, 2001.
- FETTER, C.W. **Contaminant Hydrogeology**. New York: Macmillan Publishing Company, 1993. 458p.
- FIGUS, S. **Esperienze operative sul sistema integrato di monitoraggio continuo e trattamento acque di falda nel sito ex alumix di Portovesme (ci)**. Tesi di Laurea. Università degli studi di cagliari, facoltà d'ingegneria, dipartimento di geoingegneria e tecnologie ambientali. Cagliari, Italia, (2010).
- FOSTER, S.; HIRATA, R.; GOMES, D.; D'edlia, M.; Paris, M.; **Groundwater Quality Protection: a guide for water utilities, municipal authorities, and environment agencies**, The World Bank: Washington, 2002. <https://doi.org/10.1596/0-8213-4951-1>
- FREEZE, R.A; CHERRY, A.J. **Groundwater**. Prentice-Hall, Inc., Englewood Cliffs, New Jersey, 1979.
- GOMES, C.C.; **Método de elementos analíticos para modelagem matemática de fluxo hídrico subterrâneo regional**. 2000. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2000.

- 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. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2004.06.004>
- GUSMÃO, A.D., DE CAMPOS, T.M.P., NOBRE, M.D.M.M., VARGAS, E.D.A. **Laboratory tests for reactive barrier design**. In Journal of Hazardous Materials, pp. 105–112, 2004. <https://doi.org/10.1016/j.jhazmat.2004.02.043>
- HENDERSON, T. H., MAYER, K. U., PARKER, B. L., AL, T. A. **Three-dimensional density-dependent flow and multicomponent reactive transport modeling of chlorinated solvent oxidation by potassium permanganate**. Journal of Contaminant Hydrology, 106(3–4), 195–211, 2009. <https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2009.02.009>
- 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. [https://doi.org/10.1016/S0096-3003\(98\)10105-4](https://doi.org/10.1016/S0096-3003(98)10105-4)
- IGM - Instituto Geológico e Mineiro (2001). **Água Subterrânea: Conhecer para Preservar o Futuro**. Disponível em: <http://eeo.ineti.pt/geociencias/edicoes_online/diversos/agua_subterranea/indice.htm>. Acesso em: 30 de junho de 2011.
- KEMERICH, P.D.C; DESCOVI FILHO, L.L.V; UCKER, F.E; CORREIO, C.V.F. **Influência dos cemitérios na contaminação da água subterrânea em Santa Maria – RS**. Águas subterrâneas, v24, n1, p115-127. São Paulo, 2010. <https://doi.org/10.14295/ras.v24i1.20341>
- LEAL, A. de S. **As águas subterrâneas no Brasil: ocorrências, disponibilidades e usos**. In: FREITAS, Marcos Aurélio Vasconcelos de (org). O Estado das Águas no Brasil. Brasília: Agência Nacional de Energia Elétrica; superintendência de Estudos e Informações hidrológicas; Ministério do Meio Ambiente; Secretaria de Recursos Hídricos; Ministério de Minas e Energia, 1999.
- 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. [https://doi.org/10.1016/S0096-3003\(97\)81658-X](https://doi.org/10.1016/S0096-3003(97)81658-X)
- 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.

LOUREIRO, C.O; OLIVEIRA, L.I; RODRIGUES, O. O. A; COSTA, W.D. **Postos distribuidores de combustíveis e o problema ambiental em Belo Horizonte, MG.** XII Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas. Belo Horizonte, 2002.

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.
<https://doi.org/10.1016/j.enganabound.2011.11.001>

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.

MITCHELL, J. K. **Conduction phenomena: from theory to geotechnical practice.** *Géotechnique*, Cana, v.41, n.3, p. 299-340, 1991.

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, J. N. **Ferramental de Gestão de águas subterrâneas para a cidade de São José do Rio Preto, SP.** 2002. 116 f. Tese (Doutorado em Hidráulica e Saneamento) – Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo. São Carlos, 2002.

OLSTHOORN, T. N. **A comparative review of analytic and finite difference models used at the Amsterdam Water Supply.** *Journal of Hydrology*, v 226, p 139-143, 1999.
[https://doi.org/10.1016/S0022-1694\(99\)00181-X](https://doi.org/10.1016/S0022-1694(99)00181-X)

PINDER, G.F.; GRAY, W.G. **Finite Element Simulation in surface and subsurface Hydrology.** New York: Academic Press, 1977. 295 p. in: PIZARRO, M. L. P.; **Simulação de fluxo de água e transporte de solutos na zona não-saturada do solo pelo método de elementos finitos adaptativo.** 2009. Tese (Doutorado – programa de pós-graduação e área de concentração em ciências da Engenharia Ambiental) Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009

PIZARRO, M. L. P.; **Simulação de fluxo de água e transporte de solutos na zona não-saturada do solo pelo método de elementos finitos adaptativo.** 2009. Tese (Doutorado – programa de pós-graduação e área de concentração em ciências da Engenharia Ambiental) Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

- REBOUÇAS, A. C; BRAGA, B; TUDINISI, J. G. **Águas doces no Brasil: Capital ecológico, uso e conservação**. 2.ed. rev. e ampl. São Paulo: Escrituras, 2002. 702p.
- REBOUÇAS, A.C. **Diagnóstico do setor de hidrogeologia**. Caderno técnico da Associação Brasileira de Águas Subterrâneas - ABAS. 46 p. 1996. São Paulo-SP.
- RIBEIRO, M. L; LOURENCETTI, C., I; PEREIRA, S. Y; MARCHI, M. R. R. **Contaminação de águas subterrâneas por pesticidas: avaliação preliminar**. Quím. Nova vol.30 no.3 São Paulo. 2007. <https://doi.org/10.1590/S0100-40422007000300031>
- SAGAR, B. **Dispersion in three dimensions: approximate analytical solutions**. ASCE, Journal of Hydraulics Division 108 (HY1), 47–62. 1982. <https://doi.org/10.1061/JYCEAJ.0005809>
- SANTOS, L.M. **Modelagem matemática da dispersão de plumas poluentes em aquíferos**. 2015. 156f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2015
- THOMÉ, A; KNOP, A. **Movimento de contaminantes no solo**, 2012. Disponível em: <<http://cbhpf.upf.br/phocadownload/2seminario/contaminantesii.pdf>>. Acesso em 20 fev. 2017.
- TUCCI, C.E.M. **Modelos Hidrológicos**. Porto Alegre: Editora da Universidade/ UFRGS, 1998. 669p.
- WENDLAND, E.; RÜBER, O. **Hydrogeologische Modelle, Lehrstuhl für Angewandte Hydrogeologie**. Ruhr: Universität Bochum, 1998. 141 p.
- WEXLER, E. J. **Analytical Solutions for One-, Two-, and Three-Dimensional Solute Transport in Ground Water Systems with Uniform Flow**. In: Techniques of Water Resources Investigations of the United States Geological Survey. Chapter B-7 in Book 3, Applications of Hydraulics. 1992.
- YAGER, R. M., HEYWOOD, C. E. **Simulation of the effects of seasonally varying pumping on intraborehole flow and the vulnerability of public-supply wells to contamination**. Ground Water, 52, 40–52, 2014. <https://doi.org/10.1111/gwat.12150>
- YONG, R. N. et al. **Principles of contaminant transport in soils**. Development in geotechnical Engineering. /netherlandas: Elsevier Science Publishers, 1992. N. 73, 327p.

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.
<https://doi.org/10.1016/j.jconhyd.2009.01.003>