

MODELO TRANSP1D: desenvolvimento de um modelo unidimensional de transporte em meio poroso não saturado sob condição de fluxo permanente

Júlio Gomes¹ & Nelson Oswaldo Luna Caicedo²

RESUMO --- O presente artigo tem por objetivo apresentar o desenvolvimento e a avaliação de um modelo computacional que trata do problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob regime permanente. O modelo TRANSP1D foi avaliado segundo a sua sensibilidade às discretizações temporal (Δt) e espacial (Δz) e em comparação com a solução analítica de um caso particular de transporte unidimensional em meio poroso não saturado. Considerando-se os cenários usados nos testes do modelo, a análise de sensibilidade em relação à Δt mostrou que, para Δz igual a 10 cm (Cenários 01 a 03) e 5 cm (Cenário 04), os valores máximos de Δt resultaram em 24 h, 144 h e 1152 h para os valores de recarga de 0,2 cm/h, 500 mm/ano e 0,0 cm/h, respectivamente. A análise de sensibilidade em relação à Δz sugeriu um valor máximo de 20 cm, em função do coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L) adotado. Finalmente, a comparação entre as soluções numérica e analítica mostrou uma boa aproximação entre os resultados obtidos, considerando-se os valores de Δt , Δz e α_L usados nos testes.

ABSTRACT --- This paper presents the development and the evaluation of a computational model that deals with the problem of 1-dimensional transport in the vadose zone under a steady-state flux condition. The TRANSP1D model was evaluated according to its sensitivity to the temporal (Δt) and vertical (Δz) discretizations. Furthermore, the model results were compared to the analytical solution of a particular case of 1-dimensional vadose zone transport problem. According to the scenarios used for the model evaluation, the results showed that the maximum Δt values were 24 h, 144 h and 1152 h, considering recharge values of 0,2 cm/h, 500 mm/year and 0,0 cm/h, respectively, and Δz equal to 10 cm. In addition, the tests also showed a maximum Δz value equal to 20 cm as a function of the adopted longitudinal dispersivity coefficient (α_L). Finally, the comparison between the numerical and the analytical solutions showed a good agreement among the results, considering the Δt , Δz and α_L values used for the model evaluation.

Palavras-chave: modelagem matemática, transporte em meio poroso, zona vadosa.

1) Doutorando do Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental do IPH/UFRGS. Professor do Centro Universitário Positivo (UnicenP). Rua Prof. Pedro Viriato Parigot de Souza, 5300, Campo Comprido, Curitiba/PR, CEP 81280-330. Fone: (41) 3317 3256. Fax: (41) 3317 3030. e-mail: jgomes@unicenp.edu.br

2) Pós-Doutor. Pesquisador do IPH/UFRGS. Professor do Programa de Pós-Graduação em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental do IPH/UFRGS. Caixa Postal 15029, Porto Alegre/RS, CEP91501-970. Fone: (51) 3316 6416. Fax: (51) 3316 7509. e-mail: caicedo@iph.ufrgs.br

1 – INTRODUÇÃO

O presente artigo tem por objetivo discutir conceitos básicos relacionados ao problema de transporte de contaminantes em meio poroso não saturado e apresentar o desenvolvimento e a avaliação de um modelo computacional que trata do problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob condição de fluxo permanente.

Inicialmente, são discutidos aspectos teóricos relativos à formulação matemática do problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob regime de fluxo permanente. Apresenta-se também o esquema numérico adotado para a solução do problema e algumas considerações em relação ao modelo computacional desenvolvido, modelo TRANSP1D.

Finalmente, são apresentados os testes realizados com o modelo TRANSP1D, procurando avaliar a sua performance. Os testes realizados procuraram avaliar a sensibilidade do modelo em relação à discretização temporal (Δt) e à discretização espacial (Δz) e confrontar os resultados do modelo com resultados obtidos a partir da solução analítica de um problema particular de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

2 – EQUACIONAMENTO E DEFINIÇÃO DO MODELO MATEMÁTICO PARA TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL EM MEIO POROSO NÃO SATURADO

Uma revisão interessante sobre o processo básico de transporte de contaminantes em meio poroso não saturado pode ser encontrada em Nielsen *et al.* (1986). Os referidos autores apresentam a equação clássica utilizada para descrever o transporte unidimensional de contaminantes em meio poroso não saturado, considerando-se regime transitório, conforme reproduzida a seguir:

$$\frac{\partial(\theta c)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho s)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\theta D \frac{\partial c}{\partial z} - qc \right) + \sum_i \phi_i(c, s, \dots) \quad (1)$$

onde: c e s = concentrações nas fases aquosa e sólida, respectivamente [M/L^3];

θ = conteúdo volumétrico [L^3/L^3];

ρ = densidade aparente do solo [M/L^3];

D = coeficiente de dispersão [L^2/T];

q = fluxo volumétrico de água (velocidade de Darcy) [L/T];

ϕ_i = fonte/sumidouro externo [$M/L^3/T$].

A Equação 1 considera explicitamente somente os processos de difusão e advecção (convecção), representados respectivamente pelos primeiro e segundo termos do lado direito da

equação. Nielsen *et al.* (1986) comentam que o parâmetro D é usado como um parâmetro empírico que inclui todos os mecanismos de dispersão não incluídos diretamente na Equação 1. Contudo, destacam que o referido parâmetro é comumente utilizado para representar apenas a difusão molecular (ou iônica) e a dispersão mecânica.

Assumindo-se, por hipótese, a ausência de fontes/sumidouros externos e considerando-se as definições de densidade aparente (ρ) e de conteúdo volumétrico (θ), como função da porosidade (ϕ) e do grau de saturação (S), a Equação 1 pode ser reescrita como:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi S c + \rho_s(1-\phi)s) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\phi S D \frac{\partial c}{\partial z}\right) - \frac{\partial(qc)}{\partial z} \quad (2)$$

onde ρ_s representa a densidade dos grãos do solo e as demais variáveis como já definidas.

O transporte de contaminantes no solo constitui um problema de transporte de uma substância química em um sistema multi-fásico, onde uma questão fundamental é como as concentrações da substância nas diferentes fases se relacionam entre si (Charbeneau, 2000).

A abordagem mais simples e usual para o estabelecimento das relações entre as concentrações nas diferentes fases, ainda segundo Charbeneau (2000), é assumir que a taxa de transporte de massa através do solo dentro de uma fase é lenta comparada à taxa de transferência entre fases que estão localmente em contato. Esta hipótese é chamada de hipótese de equilíbrio local.

Nielsen *et al.* (1986) destacam que a abordagem mais usual para modelar o termo de sorção é assumir adsorção ou troca instantânea (hipótese de equilíbrio local) e uma relação linear entre a concentração na fase sólida (s) e a concentração na fase aquosa (c), dada por:

$$s = K_d c \quad (3)$$

onde K_d é um coeficiente de distribuição.

Discussões a respeito de K_d e do processo de partição de um contaminante entre as fases sólida e aquosa podem ser encontradas em vários textos relativos ao transporte de contaminantes em meio poroso, como por exemplo, Marsily (1986), Spitz e Moreno (1996) e Charbeneau (2000). O coeficiente K_d é obtido normalmente através da relação (Cota, 2000):

$$K_d = f_{oc} K_{oc} \quad (4)$$

onde: K_{oc} = coeficiente de partição em relação ao carbono orgânico;

f_{oc} = fração de carbono orgânico presente na matriz do solo.

Substituindo-se as Equações 3 e 4 na Equação 2, obtém-se a equação de transporte de contaminantes dissolvidos em fase aquosa na zona não saturada, tal como apresentada no trabalho de Cota (2000), e que é reproduzida a seguir:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left[\phi \left(S + \frac{(1-\phi)}{\phi} \rho_s f_{oc} K_{oc} \right) c \right] = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi S D \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial (qc)}{\partial z} \quad (5)$$

A Equação 5, portanto, descreve o problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob as hipóteses de equilíbrio local e relação linear entre as concentrações nas fases sólida (s) e aquosa (c). Admitindo-se, ainda, que o parâmetro D representa apenas os mecanismos de difusão molecular (ou iônica) e a dispersão mecânica, tem-se que a Equação 5 é aplicável somente a problemas envolvendo substâncias não reativas.

A expressão contida nos parênteses internos do termo à esquerda da igualdade na Equação 5 pode ser escrita em termos do fator de retardo (R), como definido em Nielsen *et al.* (1986) e Marshall *et al.* (2000). Deste modo, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} [\phi R c] = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi S D \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial (qc)}{\partial z} \quad (6)$$

A Equação 6, também apresentada em Cota (2000), descreve a variação da concentração de um contaminante não reativo na fase aquosa (c) em função do tempo (t) e da posição na coluna de solo (z), considerando-se a condição de regime transitório, ou seja, o fluxo volumétrico de água (q) varia em função do tempo e, ainda, sob as hipóteses de equilíbrio local e relação linear entre as concentrações nas fases sólida (s) e aquosa (c).

Wierenga (1977), Beese e Wierenga (1980) e Marshall *et al.* (2000) investigaram o problema do efeito da variabilidade temporal de curto-termo no transporte de longo-termo de contaminantes em solos. Os resultados obtidos mostraram que a frente de contaminação média, originada a partir de uma longa seqüência de chuvas geradas aleatoriamente, tende à frente de contaminação obtida a partir da consideração de uma taxa constante de infiltração.

O uso de taxas constantes de infiltração, segundo Marshall *et al.* (2000), ao invés de taxas de infiltração variáveis ao longo de muitos anos não resultará em erros significativos na estimativa do transporte de longo termo. Ainda segundo os referidos autores, esta conclusão pode resultar em uma economia em esforço computacional e em coleta de dados, uma vez que dados médios anuais e intervalos de tempo de cálculo (discretização temporal) maiores devem ser adequados para a estimativa de transporte de substâncias conservativas no solo para simulações de longo-termo.

Considerando-se o exposto, é razoável admitir o fluxo volumétrico (q) constante ao longo do tempo e do espaço. Esta hipótese também implica em fator de retardo (R) e grau de saturação (S) constantes no tempo. Adicionalmente, considerando-se o meio poroso não saturado como indeformável, ou seja, ϕ constante no tempo, a Equação 6 pode ser reescrita como:

$$\phi SR \frac{\partial c}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi SD \frac{\partial c}{\partial z} \right) - q \frac{\partial c}{\partial z} \quad (7)$$

A Equação 7 representa a variação da concentração de um contaminante na fase aquosa como função do tempo (t) e da posição na coluna de solo (z), considerando-se a condição de regime permanente, ou seja, o fluxo volumétrico de água (q) constante no tempo e no espaço.

As condições iniciais necessárias para a solução do problema de transporte em meio não saturado são os valores de concentração do contaminante na fase aquosa para t igual a zero, ou seja, $c(z,t) = c(z,0)$. Marsily (1986) discute genericamente as condições de contorno para problemas de transporte em meio poroso (saturado e não saturado), destacando que as condições de contorno devem ser estabelecidas levando-se em consideração as condições de fluxo junto ao contorno.

2.1 – Solução numérica da equação de transporte em meio não saturado

A discussão sobre a solução numérica da equação de transporte em meio não saturado na condição de fluxo em regime permanente, Equação 7, se inicia a partir do esquema numérico adotado por Cota (2000) para a solução da Equação 6, que representa a condição de fluxo em regime transitório, apresentado pela equação a seguir:

$$\frac{\phi_i S_i^{t+1} R_i^{t+1} c_i^{t+1} - \phi_i S_i^t R_i^t c_i^t}{\Delta t} = \left[\frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i^*} \left(\frac{c_{i+1}^{t+1} - c_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i^*} \left(\frac{c_i^{t+1} - c_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{q_{i+1/2}^{t+1} c_{i+1/2}^{t+1} - q_{i-1/2}^{t+1} c_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i^*} \right) \quad (8)$$

O valor de $\bar{D}_{i\pm 1/2}^{t+1}$, presente na Equação 8, é definido a partir da Equação 9, apresentada a seguir (Cota, 2000):

$$\bar{D}_{i\pm 1/2} = \frac{\phi_i S_i D c_i + \phi_{i\pm 1} S_{i\pm 1} D c_{i\pm 1}}{2} \quad (9)$$

Na Equação 9, o parâmetro $D_{c_{i\pm 1}}$ representa o coeficiente de dispersão hidrodinâmico corrigido. Bear e Verruijt (1987) apresentam discussão teórica sobre a dispersão numérica introduzida pelos diferentes esquemas de diferenças finitas. No caso do uso de um esquema de diferenças central para o espaço e de diferenças ascendente para o tempo, D_c pode ser calculado através de (Bear e Verruijt, 1987):

$$D_{c_i} = D_m + \alpha_L \frac{q_i}{\phi_i S_i} - \frac{1}{2} \Delta t \left(\frac{q_i}{\phi_i S_i} \right)^2 \quad (10)$$

onde: D_m = coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa [L^2/T];

α_L = dispersividade longitudinal do meio [L] e demais variáveis já definidas anteriormente.

O último termo da Equação 10 representa um fator de correção do coeficiente de dispersão para atenuar problemas de oscilação e dispersão numérica, possíveis de ocorrer na simulação de casos onde o fluxo advectivo é predominante (Cota, 2000). Voltando a comentar a Equação 8, o valor de Δz_i^* , presente na referida equação, é dado por (Cota, 2000):

$$\Delta z_i^* = \frac{z_{i+1} - z_{i-1}}{2} \quad (11)$$

A partir das hipóteses de fluxo volumétrico (q), fator de retardo (R), grau de saturação (S) e porosidade (ϕ) constantes no tempo e com as devidas manipulações algébricas, a Equação 8 pode ser reescrita de forma a isolar os valores de concentrações na linha de tempo ($t+1$), valores desconhecidos, dos valores da linha de tempo t , valores conhecidos. Deste modo, tem-se:

$$\left(-\frac{\bar{D}_{i-1/2}}{\Delta z_i^* (z_i - z_{i-1})} - \frac{q}{2\Delta z_i^*} \right) c_{i-1}^{t+1} + \left(\frac{\bar{D}_{i-1/2}}{\Delta z_i^* (z_i - z_{i-1})} + \frac{\bar{D}_{i+1/2}}{\Delta z_i^* (z_{i+1} - z_i)} + \frac{\phi_i S_i R_i}{\Delta t} \right) c_i^{t+1} + \left(-\frac{\bar{D}_{i+1/2}}{\Delta z_i^* (z_{i+1} - z_i)} + \frac{q}{2\Delta z_i^*} \right) c_{i+1}^{t+1} = \frac{\phi_i S_i R_i}{\Delta t} c_i^t \quad (12)$$

A Equação 12 representa um sistema de equações com $(n-1)$ equações e $(n+1)$ variáveis, onde n representa o número de células utilizadas para representar a coluna de solo. Portanto, para a solução do sistema, são necessárias duas equações adicionais, que são fornecidas pelas condições de

contorno. Além disso, para cada instante de tempo ($t+1$), a solução no instante de tempo t é requerida. A Figura 1 apresenta o esquema de discretização espacial para a solução do problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

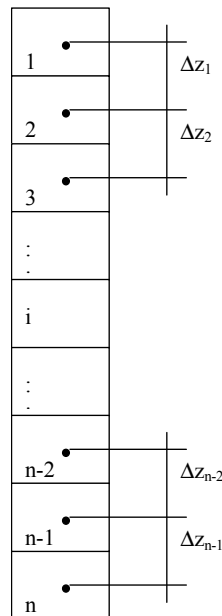


Figura 1 – Esquema de discretização espacial para a solução do problema de transporte de contaminantes em meio poroso não saturado

Por questão de compatibilidade, o esquema de discretização espacial adotado junto à base da coluna de solo no modelo TRANSP1D foi igual ao adotado no modelo FLUXO1D, apresentado em Gomes e Caicedo (2007) e representado na Figura 2.

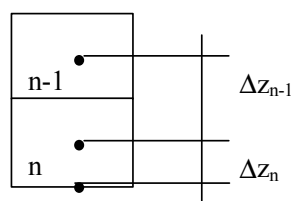


Figura 2 – Esquema de discretização espacial para a solução do problema de transporte de contaminantes em meio poroso não saturado. Detalhe da representação da célula n .

2.2 – Discussão do sistema de equações e método de solução

A solução do problema de transporte em meio não saturado, como discutido no item anterior, consiste na solução de um sistema de equações para cada instante de tempo. A dimensão do sistema de equações é definida pelo valor de Δz adotado para a representação da coluna de solo em análise.

Considerando-se n células para representação da coluna de solo e o esquema de discretização apresentado pelas Figuras 1 e 2, o sistema de equações tem dimensões $(n+1) \times (n+1)$. Um número

de $(n-1)$ equações resulta diretamente do uso da Equação 12 e as duas equações restantes resultam das condições de contorno no topo e na base da coluna de solo.

No presente estudo, a condição de contorno adotada para o topo da coluna de solo foi uma condição do tipo Dirichlet, ou seja, os valores de concentração são conhecidos ao longo do tempo. Deste modo, tem-se a função $C_1^t = f(t)$ conhecida. Esta condição implica em valor de C_1 constante para cada instante de tempo t e, por conseqüência, na seguinte equação adicional:

$$C_1^t = C_0(t) \quad (13)$$

Já para a base da coluna de solo, a condição de contorno adotada foi uma condição do tipo Neumann, ou seja, o gradiente de concentração ($\partial C/\partial z$) junto ao contorno é conhecido ao longo do tempo. Para o presente trabalho, adotou-se gradiente de concentração nulo junto à base da coluna. Numericamente, esta hipótese pode ser aproximada por:

$$\frac{\partial C}{\partial z} \cong \frac{C_{n+1}^t - C_n^t}{\Delta z_n} = 0 \quad \text{ou} \quad -C_n^t + C_{n+1}^t = 0 \quad (14)$$

Este tipo de condição de contorno adotada para a base da coluna de solo implica em concentrações constantes na interface entre os meios não saturado e saturado, desprezando os prováveis efeitos de diluição devidos a um maior volume de água no meio saturado.

As Equações 12 a 14 definem um sistema de equações com uma matriz de coeficientes banda tridiagonal. O algoritmo utilizado para a solução do sistema foi o apresentado em Press *et al.* (1992). O referido algoritmo utiliza 3 vetores com $(n+1)$ elementos cada para representar a matriz de coeficientes que, por definição, teria $(n+1) \times (n+1)$ elementos. Além disso, o algoritmo utiliza o procedimento de decomposição LU, diminuindo o número de operações para a solução do sistema. Finalmente, adotou-se, como condição inicial, valores nulos de concentração ao longo da coluna de solo.

3 – AVALIAÇÃO DO MODELO COMPUTACIONAL TRANSP1D

Neste item são apresentados alguns testes realizados para verificar a performance do modelo TRANSP1D que trata do problema de transporte unidimensional em meio poroso não saturado sob regime de fluxo permanente. O referido modelo considera, como condição inicial, valores nulos de concentração ao longo da coluna de solo e, como condições de contorno, concentração constante no

topo da coluna ao longo do tempo e gradiente de concentração nulo junto à base da coluna de solo. Importante destacar que o programa TRANSP1D utiliza os dados gerados pelo programa FLUXO1D, apresentado em Gomes e Caicedo (2007), que trata do problema de fluxo permanente unidimensional em meio não saturado.

Os testes realizados procuraram avaliar a sensibilidade do modelo em relação à discretização temporal (Δt) e à discretização espacial (Δz) e confrontar os seus resultados com a solução analítica de um problema particular de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

Para a avaliação do esquema numérico e do programa computacional implementado, os testes utilizaram os mesmos dados e cenários usados na avaliação do modelo FLUXO1D (Gomes e Caicedo, 2007), e que são apresentados nas Tabelas 1 e 2. Destaca-se que os parâmetros característicos dos solos foram extraídos de Cota (2000).

Tabela 1 – Parâmetros característicos dos solos utilizados nas simulações do modelo TRANSP1D

Variável	Solo 1	Solo 2	Solo 3
Tipo de solo	Areia	Areia	Silte-argiloso
Porosidade (ϕ)	0,368	0,39	0,42
α	0,0335 cm ⁻¹	0,059 cm ⁻¹	0,0004 cm ⁻¹
N	2,0	1,48	1,65
Grau de saturação residual (S_r)	0,2772	0,1	0,0357
Condutividade hidráulica saturada (K_s)	0,5532 cm/min	1,3 cm/h	0,972 cm/h

Fonte: Cota (2000)

Tabela 2 – Cenários utilizados para a avaliação do modelo TRANSP1D

Característica do cenário	CENÁRIO			
	01	02	03	04
Tipo de solo	Solo 1	Solo 2	Solo 3	Solo 3/Solo 1
Comprimento da coluna	200 cm	200 cm	200 cm	100 cm (20 cm/80 cm)
Condição de contorno no topo da coluna	Recarga Constante	Recarga constante	Recarga Constante	Recarga Constante
Condição de contorno na base da coluna	Tensão capilar nula	Tensão capilar nula	Tensão capilar nula	Tensão capilar Nula

Fonte: Gomes e Caicedo (2007)

A Tabela 3 apresenta os dados relacionados mais especificamente ao problema de transporte em meio não saturado e que foram utilizados nos testes de avaliação do modelo TRANSP1D. Por questão de simplicidade, os parâmetros apresentados na Tabela 3 foram considerados iguais para os diferentes tipos de solo. Adicionalmente, adotou-se a concentração no topo da coluna como sendo constante ao longo do tempo e tendo um valor igual a 100 g/cm³. A unidade de representação da concentração foi estabelecida em razão da compatibilização das unidades e o valor 100 pode ser

considerado como um valor “unitário” de concentração. Foram ainda utilizados os mesmos valores de recarga usados nos testes do modelo FLUXO1D (Gomes e Caicedo, 2007), a saber: 0,2 cm/h; 500 mm/ano e 0,0 cm/h. Portanto, estabeleceu-se um total de 12 testes para avaliar a performance do modelo, ou seja, 4 cenários e 3 valores de recarga por cenário.

Tabela 3 – Valores dos parâmetros característicos dos solos e do contaminante usados nos testes do modelo TRANSP1D

Parâmetro	Símbolo	Unidade	Valor
Densidade dos grãos do solo	ρ_s	g/cm ³	2,65
Fração de carbono orgânico no solo	f_{oc}	---	0,001
Dispersividade longitudinal do meio poroso	α_L	cm	10
Coefficiente de partição do contaminante em relação ao carbono orgânico	K_{oc}	cm ³ /g	100
Coefficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa	D_m	cm ² /h	6×10^{-4}

3.1 – Discussão sobre critérios de estabilidade numérica

Discussões sobre a estabilidade de métodos numéricos em problemas de transporte unidimensional podem ser encontradas em Huyakorn e Pinder (1983), Noorishad *et al.* (1992) e Perrochet e Berod (1993). Quando o domínio espaço-temporal (z, t) é discretizado, o tamanho dos elementos da grade, definidos por Δz e Δt , são estabelecidos a partir da análise dos números de Peclet (Pe) e Courant (Cr), número adimensionais e que podem ser assim definidos:

$$Pe = \frac{v \cdot \Delta z}{D} \quad (15)$$

$$Cr = \frac{q \cdot \Delta t}{\phi \cdot S.R. \cdot \Delta z} \quad (16)$$

Discussão teórica sobre o significado dos números de Peclet (Pe) e de Courant (Cr) pode ser encontrada em Marsilly (1986) e Perrochet e Berod (1993). Dos trabalhos de Noorishad *et al.* (1992) e Perrochet e Berod (1993), pode-se assumir as seguintes restrições para a estabilidade de métodos numéricos aplicados a problemas de transporte unidimensional:

$$Pe \leq 2 \quad \text{e} \quad Pe \cdot Cr \leq 2$$

A análise teórica do valor máximo para a discretização espacial (Δz) pode ser feita a partir da análise da restrição relativa ao número de Peclet (Pe), definido pela Equação 15.

A partir da relação entre a velocidade real do fluxo (v) e a velocidade de Darcy (q) e considerando-se o coeficiente de dispersão hidrodinâmico, dado pela Equação 10, mas sem o termo de correção e admitindo-se ainda um valor de coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa (D_m) relativamente pequeno, a Equação 15 pode ser escrita como:

$$Pe = \frac{S \cdot \Delta z}{\alpha_L} \quad (17)$$

Considerando-se a restrição em relação ao Número de Peclet (Pe) e grau de saturação (S) máximo igual 1, que representa uma condição mais restritiva em relação à Δz , tem-se a partir da Equação 17, com as devidas manipulações algébricas:

$$\Delta z \leq 2 \cdot \alpha_L \quad (\text{restrição relativa à discretização espacial } \Delta z).$$

Portanto, teoricamente, o valor de Δz deve ser no máximo o dobro do valor da dispersividade longitudinal do meio poroso (α_L).

A análise teórica do valor máximo para a discretização temporal (Δt) pode ser feita a partir da análise da restrição relativa ao produto entre os números de Peclet (Pe) e Courant (Cr), definidos pelas Equações 15 e 16, respectivamente, e que resulta em:

$$Pe \cdot Cr = \frac{q^2 \cdot \Delta t}{\phi^2 \cdot S \cdot R \cdot D} \quad (18)$$

Adotando-se as mesmas considerações utilizadas na análise de Δz , tem-se:

$$Pe \cdot Cr = \frac{q \cdot \Delta t}{\phi \cdot R \cdot \alpha_L} \quad (19)$$

Considerando-se agora a restrição em relação ao produto entre os números de Peclet (Pe) e de Courant (Cr) e adotando-se um de coeficiente de retardo (R) mínimo igual a 1, que representa uma condição mais restritiva em relação à Δt , tem-se a partir da Equação 19, com as devidas manipulações algébricas:

$$\Delta t \leq \frac{2 \cdot \phi \cdot \alpha_L}{q} \quad (\text{restrição relativa à discretização temporal } \Delta t).$$

A relação acima representa teoricamente o valor máximo para a discretização temporal (Δt) como função da porosidade do meio (ϕ), dispersividade longitudinal do meio (α_L) e da recarga (q). Considerando-se os diferentes valores de ϕ , α_L e q utilizados para a análise do modelo TRANSP1D, pode-se definir valores máximos para Δt para os diferentes cenários.

3.2 – Análise da sensibilidade em relação à discretização temporal (Δt)

A análise de sensibilidade do modelo TRANSP1D em relação à discretização temporal (Δt) consistiu em realizar testes para diferentes valores de Δt , procurando-se respeitar às restrições impostas aos valores de Δz e Δt , discutidas no item anterior. Adotou-se, para a representação da coluna de solo, um número de células igual a 20, o que implica em um valor de Δz igual a 10 cm para os Cenários 01 a 03 e igual a 5 cm para o Cenário 04.

Para cada cenário, o procedimento básico dos testes foi assumir inicialmente um valor de Δt relativamente pequeno e sucessivamente aumentar esse valor até ser observada alguma inconsistência nos resultados do modelo. O referido procedimento, além de permitir verificar a existência de alguma instabilidade numérica, permitiu também verificar a influência de Δt sobre a qualidade dos resultados.

Para a recarga de 0,2 cm/h, os valores de Δt utilizados foram 1h, 2h, 4h, 6h, 12h e 24h para um horizonte de 720h (30 dias). Já para uma recarga equivalente a 500 mm/ano, foram usados os valores de Δt iguais a 6h, 12h, 24h, 48h, 72h e 144h, para um horizonte de 180 dias. Finalmente, para o valor de recarga nula, foram utilizados valores de Δt correspondentes a 2 dias, 4 dias, 8 dias, 16 dias, 24 dias e 48 dias, para um horizonte de 1440 dias (aproximadamente 4 anos).

Em relação ao valor de recarga de 0,2 cm/h, verificou-se que inconsistências numéricas são verificadas para valores Δt maiores ou iguais a 24 h. Além disso, verificou-se que os resultados obtidos para valores de Δt iguais a 1h, 2h e 4h foram bastante próximos entre si. Já para o valor de recarga de 500 mm/ano, verificou-se que os perfis de concentração foram relativamente próximos entre si e não foram constatadas inconsistências numéricas para valores de Δt de até 144 h.

Finalmente, em relação ao valor de recarga nula, verificou-se que os perfis de concentração foram relativamente próximos entre si e não foram constatadas inconsistências numéricas para valores de Δt de até 1152 h (48 dias). É importante destacar que o mecanismo de advecção acaba não colaborando no processo de transporte ao longo da coluna de solo para o valor de recarga nula. Isto ajuda a explicar a proximidade entre os perfis de concentração para os diferentes valores de Δt

analisados e, inclusive, o pequeno desenvolvimento dos perfis de concentração na coluna de solo ao longo do tempo.

A condição de contorno no topo da coluna de solo é outra característica do modelo implantado que é importante ressaltar. A condição de concentração constante no topo da coluna explica a tendência dos perfis de concentração convergirem para um perfil uniforme em toda a extensão da coluna de solo ao longo do tempo. De certo modo, essa condição de contorno contribui para uma “aproximação” entre os perfis de concentração relativos a diferentes Δt na medida em que o tempo t cresce.

A título de exemplo, as Figuras 1 a 4 apresentam perfis de concentração para diferentes cenários e valores de recarga. Os perfis são relativos sempre à metade do horizonte de tempo usado nas simulações.

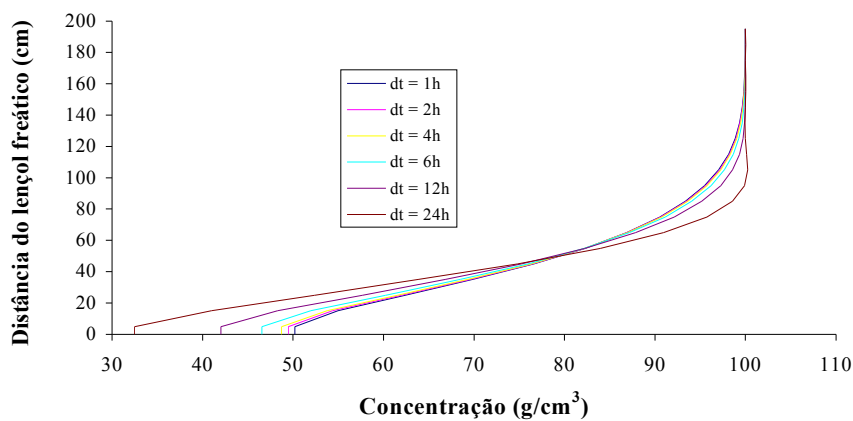


Figura 1 – Análise de Δt . Perfil de concentração (Cenário 01, recarga = 0,2 cm/h, $t = 15$ dias)

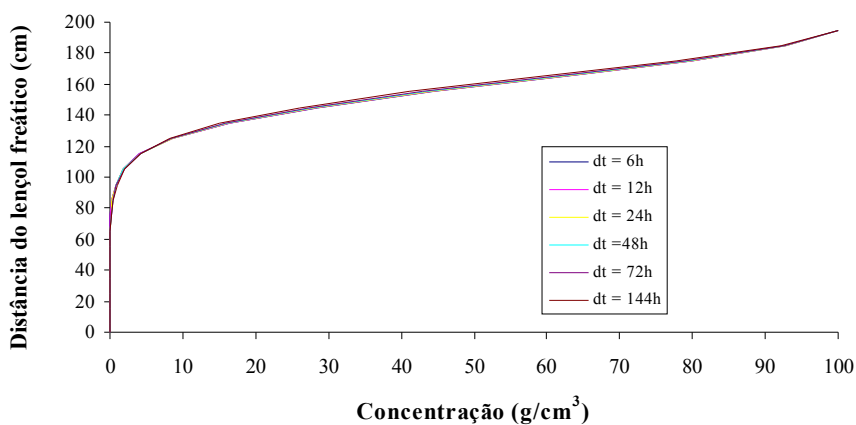


Figura 2 – Análise de Δt . Perfil de concentração (Cenário 02, recarga = 500 mm/ano, $t = 90$ dias)

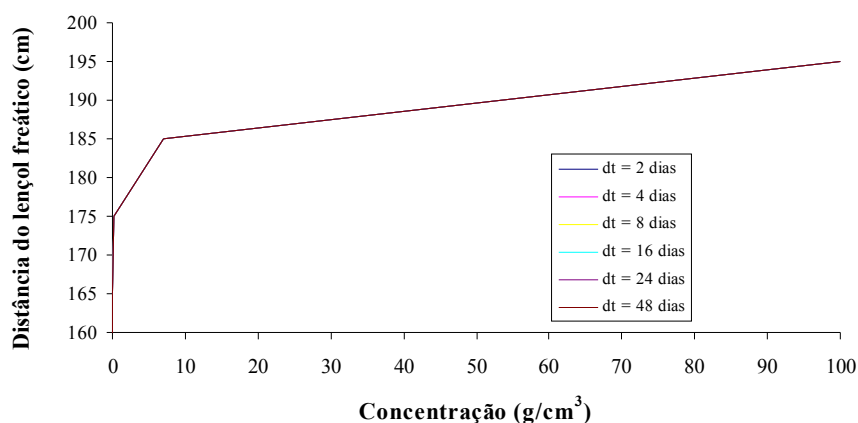


Figura 3 – Análise de Δt . Perfil de concentração (Cenário 03, recarga = 0 cm/h, $t = 720$ dias)

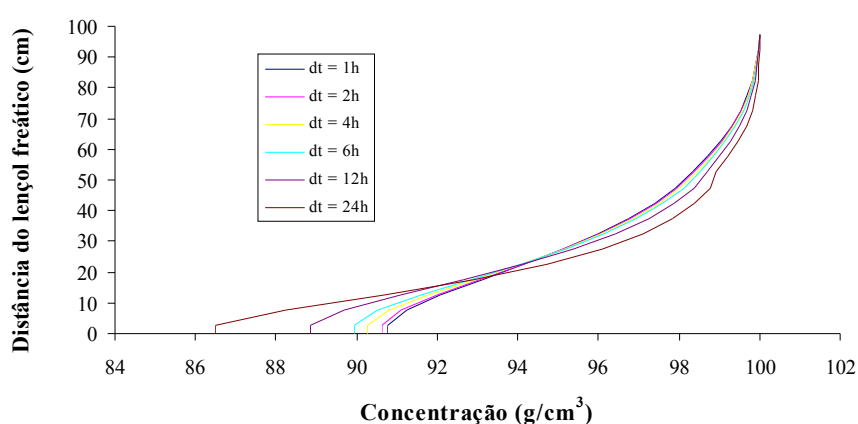


Figura 4 – Análise de Δt . Perfil de concentração (Cenário 04, recarga = 0,2 cm/h, $t = 15$ dias)

3.3 – Análise da sensibilidade em relação à discretização espacial (Δz)

A análise de sensibilidade do modelo TRANSP1D em relação à discretização espacial (Δz) consistiu em realizar testes para diferentes valores de Δz , procurando-se respeitar às restrições impostas aos valores de Δz e Δt , discutidas no item 3.1.

Os diferentes testes foram realizados considerando-se o número de células igual a 10, 20, 50, 100 e 200. Estes valores correspondem a valores de Δz iguais a 20 cm, 10 cm, 4 cm, 2 cm e 1 cm, respectivamente, para os Cenários 01 a 03 e a valores de Δz iguais a 10 cm, 5 cm, 2 cm, 1 cm e 0,5 cm, respectivamente para o Cenário 04. Foram ainda fixados os valores de Δt iguais a 4h, 24h e 8 dias para as condições de recarga de 0,2 cm/h, 500 mm/ano e 0,0 cm/h, respectivamente. Além disso, os horizontes de tempo adotados para a análise foram de, respectivamente, 30 dias, 180 dias e 1440 dias para os valores de recarga mencionados.

De modo geral, verificou-se que os perfis de concentração mostraram um comportamento uniforme para os diferentes valores de Δz , não apresentando inconsistências numéricas. Este

comportamento dos perfis de concentração pode ser explicado pela adoção de valores de Δz e Δt que respeitavam as restrições discutidas no item 3.1.

Em relação aos valores numéricos obtidos para os perfis de concentração, verificou-se que, independentemente do valor de recarga, valores de Δz de 1 cm, 2 cm e 4 cm para os Cenários 1 a 3 e de 0,5 cm, 1 cm e 2 cm para o Cenário 04 produziram perfis de concentração relativamente próximos entre si. Os referidos valores de Δz representam para os quatro cenários analisados um número de células igual a 200, 100 e 50, respectivamente.

É importante destacar que a análise da discretização espacial (Δz) teve, como objetivo principal, estabelecer um número “razoável” de células para a representação da coluna de solo, considerando cada valor de recarga e cada cenário analisado.

A título de exemplo, as Figuras 5 a 8 apresentam perfis de concentração para diferentes cenários e valores de recarga. Os perfis são relativos sempre à metade do horizonte de tempo usado nas simulações.

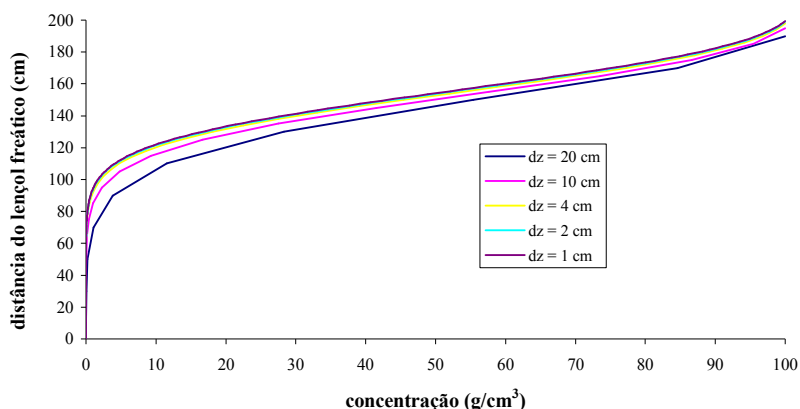


Figura 5 – Análise de Δz . Perfil de concentração (Cenário 01, recarga = 500 mm/ano, t = 90 dias)

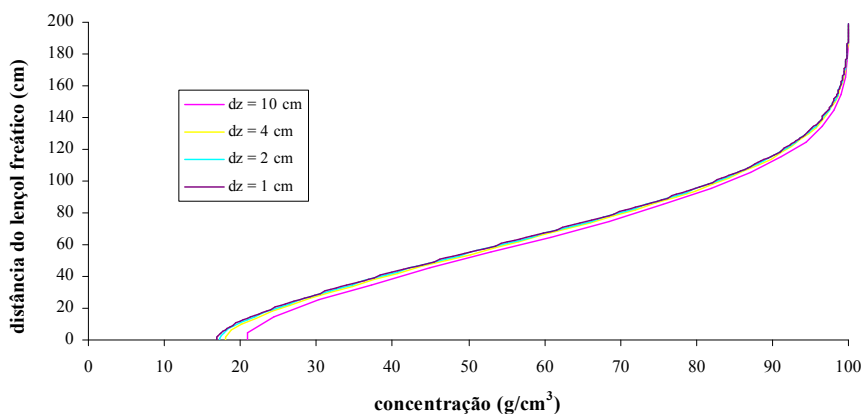


Figura 6 – Análise de Δz . Perfil de concentração (Cenário 02, recarga = 0,2 cm/h, t = 15 dias)

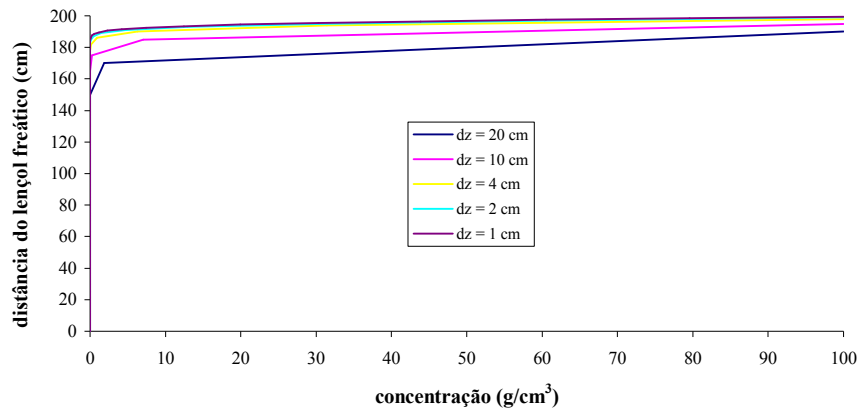


Figura 7 – Análise de Δz . Perfil de concentração (Cenário 03, recarga = 0 cm/h, t = 720 dias)

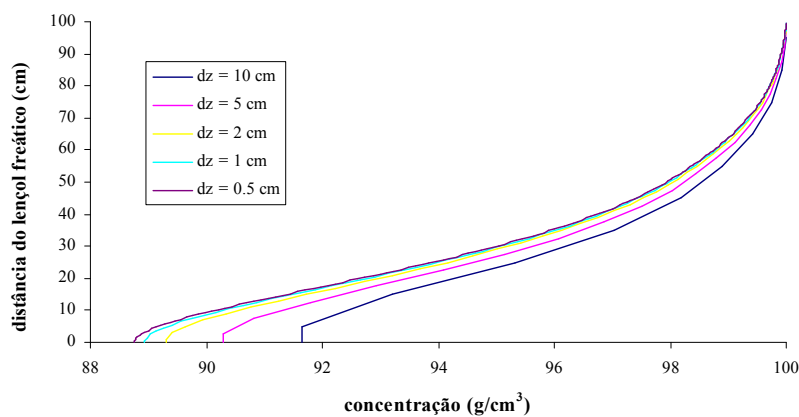


Figura 8 – Análise de Δz . Perfil de concentração (Cenário 04, recarga = 0,2 cm/h, t = 15 dias)

3.4 – Comparação entre a solução analítica e a solução numérica

Este item apresenta uma comparação entre a solução analítica e a solução numérica, fornecida pelo modelo TRANSP1D, para um problema particular de transporte unidimensional em meio poroso não saturado.

A Equação 7, que serviu de base para o esquema numérico do modelo TRANSP1D, foi estabelecida sob a hipótese de fluxo volumétrico (q) constante no tempo e espaço. A hipótese de q constante no tempo implica em grau de saturação (S), coeficiente de retardo (R) e coeficiente de dispersão (D) também constantes no tempo. Já a hipótese de q constante no espaço não implica necessariamente em S , R e D também constantes no espaço.

Em geral, para a obtenção de soluções analíticas para o problema de transporte unidimensional em meio não saturado sob regime de fluxo permanente, adota-se a hipótese de S , R e D também constantes no espaço. Deste modo, a Equação 7 pode ser escrita como:

$$R \frac{\partial c}{\partial t} = D \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - \frac{q}{\phi S} \frac{\partial c}{\partial z} \quad (20)$$

Definindo-se a velocidade média (V) no nível do poro como sendo $V = q/\phi S$ e adicionalmente $D^* = D/R$ e $V^* = V/R$, tem-se a partir da Equação 20:

$$\frac{\partial c}{\partial t} = D^* \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - V^* \frac{\partial c}{\partial z} \quad (21)$$

Na literatura são encontradas soluções analíticas para a Equação 21, considerando-se diferentes condições iniciais e de contorno. Podem ser citados os trabalhos de Van Genuchten (1981), Javandel *et al.* (1984), Bear e Verruijt (1987), Fetter (1999) e Charbeneau (2000). A Equação 21 é similar à forma unidimensional da equação clássica de dispersão-advectação para substâncias não reativas dissolvidas em um meio não saturado, isotrópico e homogêneo sob fluxo permanente e uniforme, como apresentada, por exemplo, em Javandel *et al.* (1984).

Para a condição de concentração constante no topo da coluna, ou seja, $C(0,t) = C_0$ e para a condição inicial de concentração nula ao longo de uma coluna de solo de comprimento semi-infinito, a solução $C(z,t)$ da Equação 21 pode ser escrita, a partir de Charbeneau (2000), como:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left[\operatorname{erfc} \left(\frac{z - V^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right) + \exp \left(\frac{z V^*}{D^*} \right) \operatorname{erfc} \left(\frac{z + V^* t}{2\sqrt{D^* t}} \right) \right] \quad (23)$$

onde: z = distância do topo da coluna de solo;

$\operatorname{erfc}(\cdot)$ = função erro complementar, obtida aproximadamente a partir de Press *et al.* (1992).

Para a comparação das soluções numérica e analítica, adotou-se o Cenário 01, apresentado na Tabela 2, para a representação da coluna de solo. Além disso, adotou-se uma recarga equivalente a 500 mm/ano, valor possível de ser observado em campo e que foi utilizado previamente na análise de sensibilidade à discretização temporal (Δt) e à discretização espacial (Δz).

Já em relação aos parâmetros relativos especificamente ao problema de transporte, foram adotados os mesmos valores apresentados na Tabela 3. Adicionalmente, adotou-se um valor de saturação constante ao longo da coluna e igual a 0,57, que representa um valor de saturação médio obtido a partir de solução fornecida pelo modelo TRANSP1D.

Ainda em relação à comparação das soluções numérica e analítica, foram avaliados os resultados para diferentes valores de Δz , Δt e α_L . Para Δz , foram adotados os valores de 20 cm, 10 cm, 5 cm e 1 cm. Já para Δt , foram adotados os valores de 6 h, 12 h e 24 h. Finalmente para α_L , foram adotados os valores de 5 cm, 10 cm e 20 cm. A título de exemplo, as Figuras 9 a 11 apresentam alguns dos resultados obtidos na comparação das soluções numérica e analítica.

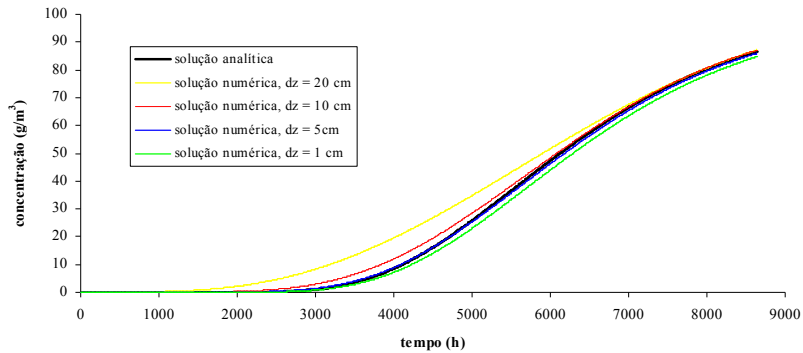


Figura 9 – Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 12$ h e $\alpha_L = 5$ cm)

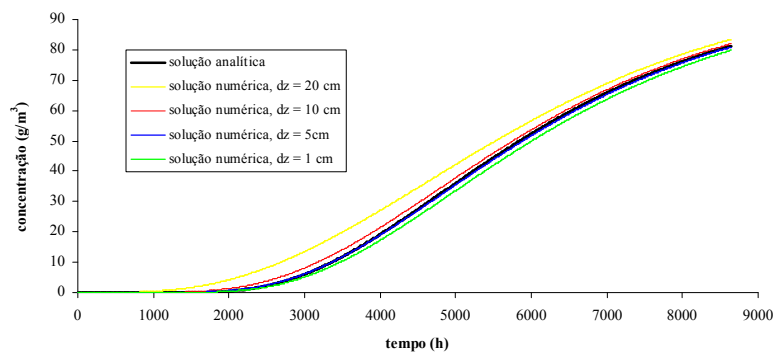


Figura 10 – Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 12$ h e $\alpha_L = 10$ cm)

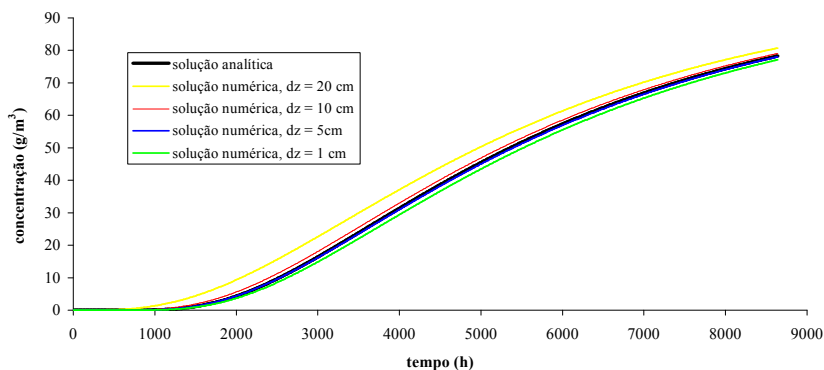


Figura 11 – Variação da concentração na metade da coluna ($\Delta t = 12$ h e $\alpha_L = 20$ cm)

Os resultados mostraram que, em termos qualitativos, o comportamento da variação da concentração em relação ao tempo no meio da coluna de solo foi relativamente o mesmo,

independente dos valores de Δt , Δz e α_L . De modo geral, os melhores resultados foram obtidos quando utilizado um valor de discretização espacial (Δz) igual a 5 cm.

4 – CONCLUSÕES

Como mencionado anteriormente, o presente artigo tem por objetivo discutir conceitos básicos relacionados ao problema de transporte em meio poroso não saturado e apresentar o desenvolvimento e a avaliação do modelo computacional TRANSP1D que trata do problema de transporte unidimensional de contaminantes em meio poroso não saturado sob regime permanente.

O modelo TRANSP1D foi avaliado segundo a sua sensibilidade à discretização temporal (Δt) e à discretização espacial (Δz) e em comparação à solução analítica de um problema particular de transporte unidimensional em meio poroso não saturado. Foram feitos testes considerando-se três diferentes valores de recarga e quatro cenários distintos.

A análise de sensibilidade em relação à Δt mostrou que, quando utilizado um valor de Δz igual a 10 cm (Cenários 01 a 03) e 5 cm (Cenário 04), os valores máximos de Δt devem ser iguais a 24 h, 144 h e 1152 h para os valores de recarga de 0,2 cm/h, 500 mm/ano e 0,0 cm/h, respectivamente. Acima dos referidos valores de Δt foram observadas inconsistências numéricas.

A análise de sensibilidade em relação à Δz sugeriu um valor máximo de 20 cm. É importante destacar que esta análise teve como objetivo principal estabelecer um número “razoável” de células para a representação da coluna de solo, considerando cada valor de recarga e cada cenário analisado. Finalmente, a comparação entre as soluções numérica e analítica mostrou uma boa aproximação entre os resultados, considerando-se os valores de Δt , Δz e α_L usados nos testes.

Finalizando, é importante destacar que as conclusões do trabalho foram obtidas a partir dos testes realizados e levando-se em consideração o conjunto de dados e parâmetros utilizados nas simulações com o modelo TRANSP1D.

BIBLIOGRAFIA

- BEAR, J.; VERRUIJT, A. *Modeling groundwater flow and pollution*. Dordrecht: D. Reidel Publishing Company, 1987. 414 p.
- BEESE, F.; WIERENGA, P. J. “*Solute transport through soil with adsorption and root water uptake computed with a transient and a constant-flux model*”. *Soil Science*, v. 129, p. 245-253, 1980
- CHARBENEAU, R. J. *Groundwater hydraulics and pollutant transport*. Upper Saddle River: Prentice Hall, 2000. 593 p.

- COTA, S. D. S. *Modelagem da contaminação de aquíferos livres por NAPLs residuais na zona não saturada*. Porto Alegre : UFRGS : IPH, 2000. 167 p. Tese de doutoramento submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.
- FETTER, C. W. *Contaminant hydrogeology*. 2. ed. Upper Saddle River: Prentice Hall, 1999. 500 p.
- GOMES, J.; CAICEDO, N. O. L. “*Modelo fluxo 1D: desenvolvimento de um modelo unidimensional de fluxo permanente em meio poroso não saturado*”. Artigo submetido ao Comitê Científico do XVII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, 2007. 18 p.
- HUYAKORN, P. S.; PINDER, G. F. *Computational methods in subsurface flow*. San Diego : Academic, 1983.
- JAVANDEL, I.; DOUGHTY, C.; TSANG, C. F. *Groundwater transport : handbook of mathematical models*. Washington : America Geophysical Union, 1984. 228 p. (Water Resources Monograph Series; 10)
- MARSHALL, J. D.; SHIMADA, B. W.; JAFFE, P. R. “*Effect of temporal variability in infiltration on contaminant transport in the unsaturated zone*”. *Journal of Contaminant Hydrology*, v. 46, pp. 151-161, 2000.
- MARSILY, G. de *Quantitative hydrogeology: groundwater hydrology for engineers*. San Diego: Academic Press Corporation, 1986. 440 p.
- NIELSEN, D. R.; VAN GENUCHTEN, M. T.; BIGGAR, J. W. “*Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone*”. *Water Resources Research*. v. 22, n. 9, p. 89S-108S, 1986.
- NOORISHAD, J.; TSANG, C. F.; PERROCHET, P.; MUSY, A. “*A perspective on the numerical solution of the convection dominated transport problem: a price to pay for the easy way out*”. *Journal of Hydrology*, v. 28, n. 2, pp. 551-561, 1992.
- PERROCHET, P.; BÉROD, D. “*Stability of the standard crank-nicholson-galerkin scheme applied to the diffusion-convection equation: some new insights*”. *Water Resources Research*, v. 29, n. 9, pp. 3291-3297, 1993.
- PRESS, W. H et al. *Numerical recipes in Fortran 77 : the art of scientific computing*. 2. ed. Cambridge : Cambridge University Press, 1992. volume 1. 933 p.
- SPITZ, K.; MORENO, J. *A practical guide to groundwater and solute transport modeling*. New York: John Wiley & Sons, 1996. 461 p.
- VAN GENUCHTEN, M. T. “*Analytical solutions for chemical transport with simultaneous adsorption, zero-order production and first-order decay*”. *Journal of Hydrology*, 1981. vol. 49. p 213-233, 1981.
- WIERENGA, P. J. “*Solute distribution profiles computed with steady-state and transient water movement models*”. *Soil Science Society American Journal*, v. 41, p. 1050-1055, 1977.