

Uma Metodologia Numérico-Analítica Aplicada a Problemas Transparentes de Transporte de Contaminante

Celme Tôrres Costa, Marco Aurélio Holanda de Castro

Depto. de Eng. Hidráulica e Ambiental/CT/UFC

celmeanp@ufc.br, marco@ufc.br

Recebido: 28/07/04 - revisado: 13/06/06 - aceito: 11/07/07

RESUMO

Os processos através dos quais os contaminantes se movem através do solo podem ser expressos por modelos matemáticos. Eles se baseiam na integração da equação de transporte utilizando condições de contorno específicas para o sistema de interesse. Entretanto, sua aplicabilidade é limitada devido aos problemas de instabilidade e oscilação numérica que podem existir dependendo da relação entre o intervalo de tempo escolhido e o espaçamento entre os nós da malha. Este trabalho propõe uma metodologia numérico-analítica para problemas transientes de transporte de contaminantes unidimensional. O objetivo do trabalho é apresentar uma nova metodologia que possa reduzir a instabilidade numérica e as oscilações encontradas nos métodos numéricos tradicionais. Trata-se de um método misto, numérico em relação ao espaço e analítico em relação ao tempo. Nesse estudo foi utilizado um modelo teórico unidimensional na verificação da solução numérico-analítica para o problema de transporte de contaminante e para validação dos resultados foram aplicados o método dos elementos finitos e a solução analítica da equação de transporte ao modelo teórico. Os resultados obtidos validam a metodologia numérico-analítica, uma vez que as curvas obtidas com a metodologia numérico-analítica, método dos elementos finitos e solução analítica não apresentam diferenças consideráveis.

Palavras-Chave: Métodos numéricos; Instabilidade numérica; Contaminação.

INTRODUÇÃO

Equações diferenciais ordinárias e parciais aparecem em inúmeros problemas de engenharia. Em especial, na área de transporte de contaminantes. Como poucos casos reais têm solução analítica possível ou viável, os métodos numéricos aparecem como uma ferramenta eficiente na solução desse tipo de problema.

Sem dúvida, os métodos analíticos são a melhor forma de solucionar os problemas de engenharia, pois fornecem uma solução de forma fechada. Entretanto, poucos problemas reais nessa área podem ser resolvidos dessa forma, devido às dificuldades impostas pelo conjunto de equações (normalmente equações diferenciais parciais de 2.^a ordem e não lineares) que regem o fenômeno. Mesmo as soluções analíticas para alguns problemas, quando existem, normalmente contêm séries infinitas, funções especiais (erf, Γ), etc. As soluções analíticas servem de base para a compreensão do comportamento do sistema de equações, para o desenvolvimento de métodos e validação de códigos computacionais. A solução analítica das equações diferenciais

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

No entanto, para se ter confiança em um certo esquema numérico de solução, no sentido da garantia de que a solução obtida com o esquema numérico representa uma aproximação razoável da solução exata do problema matemático, é necessário que o esquema utilizado apresente propriedades de consistência, convergência e estabilidade. Essas propriedades são inerentes à solução e são funções dos erros envolvidos. A consistência está relacionada com a aproximação do sistema contínuo de equações por um sistema discreto. Convergência é a condição em relação à qual a solução do esquema aproximado tende para a solução exata da equação diferencial, à medida que se diminuem os incrementos espacial e temporal. E por fim, a estabilidade está relacionada com o esquema de integração no tempo. Quando um método numérico qualquer é instável, uma pequena perturbação, tal como um

erro de truncamento, tende a crescer na medida em que o processo computacional avança no tempo. Na maioria das vezes, essa amplificação é de ordem exponencial e o erro cresce acima de limites razoáveis após um pequeno número de passos do processo computacional.

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

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

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

Pelo exposto, a ferramenta numérica é adequada e confiável quando se está de posse de um método numérico que resolva corretamente as equações diferenciais, e de um modelo matemático, que represente com fidelidade o fenômeno físico.

TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

A contaminação das águas subterrâneas tem origem na infiltração do contaminante. A interação solo-água-contaminante é muito complexa, uma vez

que muitos processos físicos, químicos e biológicos podem ocorrer simultaneamente. São diversos os fenômenos que controlam o transporte de contaminantes no meio poroso, onde o contaminante é a massa de alguma substância, movendo-se com algum fluido, nos vazios do meio poroso, seja ele saturado ou não saturado. A compreensão desses mecanismos, análise e modelagem matemática e numérica do problema, associadas a programas de monitoramento, permitem a avaliação da contaminação das águas subterrâneas. O movimento do contaminante não depende apenas do fluxo do fluido no qual essas substâncias estão dissolvidas, mas sim de mecanismos que por sua vez dependem de processos físicos, químicos e biológicos, aos quais estas substâncias são submetidas durante um processo de contaminação. Os processos de transporte de contaminantes são ilustrados na Curva Característica do Transporte, também conhecida como *Breakthrough Curve*.

Sucintamente pode-se dizer que os processos que controlam o transporte de contaminantes são a advecção, a difusão e a dispersão. A advecção é o mecanismo de transporte ocasionado pelo fluxo de água, uma vez que com o deslocamento da água, os contaminantes presentes na mesma se movem na direção das linhas de fluxo com a velocidade que, em princípio, é igual à velocidade média linear da água e sem alterar sua concentração na solução. A Eq. (01) é a equação diferencial do transporte por advecção, considerando o caso unidimensional:

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

Onde, C é a concentração do contaminante [M/L³]; v_x é a velocidade linear média de percolação da água nos poros [L/T], sendo dada por:

$$v_x = \frac{K_x}{n} \frac{dh}{dl} \quad (2)$$

Sendo, K_x o coeficiente de permeabilidade ou condutividade hidráulica do solo [L/T]; n é a porosidade efetiva do solo (adimensional) e dh/dl é o gradiente hidráulico (adimensional).

Devido ao gradiente de concentração existente em um fluido, ocorre o transporte de contaminantes por difusão molecular ou simplesmente difusão, ou seja, o contaminante dissolvido em água desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, visando equalizar a concentração em toda a massa de fluido. Este fenômeno ocorre independente da velocidade do

fluido, mas é acentuado pela turbulência resultante dos mecanismos de mistura mecânica. A difusão do contaminante é proporcional ao gradiente de concentração, a qual pode ser expressa pela primeira lei de Fick:

$$F = - D_d \frac{dC}{dx} \quad (3)$$

F é o fluxo de massa de contaminante [M/LT]; D_d é o coeficiente de difusão [L^2/T] e dC/dx é o gradiente de concentração [$M/L^3/L$].

Para sistemas onde a concentração varia com o tempo, aplica-se a segunda lei de Fick, que é descrita pela Eq. (4) (Freeze & Cherry, 1979; Fetter, 1993).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} \quad (4)$$

O transporte por mistura mecânica ou dispersão é decorrente da dispersão em canais individuais, do desenvolvimento de velocidades médias diferentes em canais diferentes, devidas à variação das dimensões dos poros ao longo das linhas de fluxo e do desvio da trajetória das partículas em decorrência da tortuosidade, reentrâncias e interligações entre os canais (Bear, 1972). A dispersão que ocorre na direção do fluxo é chamada dispersão longitudinal e a que ocorre na direção perpendicular ao fluxo é chamada dispersão transversal.

O processo de difusão molecular não pode ser separado da dispersão mecânica no fluxo de água pelo solo. Esses dois processos são combinados para definir um parâmetro chamado coeficiente de dispersão hidrodinâmica, D, o qual é representado pelas Eq. (5) e (6):

$$D_L = \alpha_L V_x + D^* \quad (5)$$

$$D_T = \alpha_T V_x + D^* \quad (6)$$

Onde, D_L é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal [L^2/T]; D_T é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal [L^2/T]; α_L é o coeficiente de dispersividade longitudinal [L]; α_T o coeficiente de dispersividade transversal [L]; D^* é o coeficiente de difusão efetiva ($D^* = \omega D_d$, sendo ω é o coeficiente de tortuosidade do solo, adimensional).

Os processos químicos podem ocorrer dependendo do solo e da solução contaminada, em

cada situação. Geralmente essas reações causam um retardamento do fenômeno de transporte do contaminante. Numa interpretação clássica, o retardamento que ocorre durante a migração de poluentes é totalmente atribuído aos processos de sorção (adsorção-desorção). Naturalmente, a habilidade do solo em reter substâncias é limitada. Assim sendo, se a fonte de contaminação tiver alimentação contínua, a taxa de retenção tende a diminuir com o tempo, podendo chegar a se anular (Yong et al., 1992). A grandeza que quantifica este fenômeno é o fator de retardamento, R, que é a razão entre a velocidade do fluido percolante e a velocidade da frente de contaminação. Seu valor pode ser retirado diretamente da curva característica de transporte obtida a partir de ensaios de coluna realizados em laboratório.

Não é objetivo do trabalho o detalhamento dos processos de transferência de massa; no entanto, a presença do termo advectivo na equação de transporte faz com que ocorra instabilidade na sua solução. Esta instabilidade é devida à dispersão numérica, que causa o aparecimento de concentrações negativas ou a determinação de valores maiores que os observados. A dispersão numérica está relacionada com a propagação de erros devido a problemas de instabilidade do sistema de equações resultante da discretização espacial utilizada para representar o problema de transporte de massa. Para que as soluções do problema de transporte de contaminantes não apresentem instabilidade devido à dispersão numérica é necessário que sejam observadas duas restrições:

(i) Para a medida dos efeitos da discretização espacial se define o número de Péclet, que é a relação entre a magnitude da velocidade de fluxo, o comprimento e o valor do coeficiente de dispersão.

(ii) Para medida dos efeitos da discretização temporal se define o número de Courant, que é a relação entre a magnitude da velocidade de fluxo (v_x), o tamanho do intervalo de tempo (Δt) e o tamanho da discretização espacial na direção da velocidade (Δx).

Daus (1985) apresenta um estudo utilizando o método dos elementos finitos, sobre a solução da equação de transporte para a determinação dos valores limites para o número de Péclet e o número de Courant. Para que uma solução não apresente instabilidade, os resultados mostram que é necessário que os autovalores, do sistema gerado, sejam reais e distintos e para isso $Pe \leq 2$. Para o efeito da discretização temporal os resultados mostram que a solução não apresenta instabilidade para o caso de

$Cr \leq Pe/2$. Devido à restrição imposta pelo número de Péclet, a simulação de geometrias e padrões de fluxo complexos se torna por vezes inviável, dado o número de elementos necessários para que a solução seja estável e não apresente oscilações. Na tentativa de se obter soluções que não apresentem oscilações para o número de Péclet, o método de Petrov-Galerkin é utilizado. Trata-se de um método de resíduos ponderados, onde as funções de ponderação são diferentes das funções de interpolação. As funções de ponderação utilizadas no método de Petrov-Galerkin são resultados da tentativa de estabilizar a solução da equação de transporte ao se introduzir um termo adicional, que tem como objetivo melhorar as propriedades de estabilidade do sistema de equações gerado pelo método (Campos, 1999).

CONDIÇÕES INICIAL E DE CONTORNO

A solução de qualquer equação diferencial dependente do tempo (transiente) requer a especificação de condições na fronteira do sistema estudado (condições de contorno) e as condições no início do processo físico (condição inicial). A definição precisa das condições de contorno e inicial é a parte mais importante para o processo de modelagem do transporte de contaminantes e escoamento de águas subterrâneas.

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

$$C(x,0) = 0 \quad (7)$$

ou

$$C(x,0) = C_0(x) \quad (8)$$

Onde $C_0(x)$ é a concentração inicial de contaminante. A Eq. (7) é usada como condição inicial para sistemas ainda não contaminados, enquanto que a Eq. (8) representa os sistemas que possuem alguma contaminação.

As condições de contorno, por sua vez, são expressões matemáticas que especificam a variável dependente (velocidade ou concentração de contaminante) ou fluxo nos contornos do domínio e são usadas para incluir os efeitos do sistema hidro-

geológico externo da área modelada. Quatro tipos de condições de contorno geralmente são utilizadas para descrever o escoamento de água subterrânea e transporte de contaminantes. Essas condições de contorno se apresentam na seguinte forma:

- Tipo 1 (Dirichlet) – concentração prescrita, $C = C_0$
- Tipo 2 (Newman) – gradiente de concentração, $\partial C / \partial x = 0$
- Tipo 3 (Cauchy) – fluxo
- Tipo 4 – fronteira livre.

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

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

Uma alternativa para este problema é a utilização da condição de contorno do Tipo 4. Este tipo de condição de contorno não é determinada por condições externas, mas como parte da solução do problema. No caso do campo de velocidade não ser nulo não há necessidade de uma condição para garantir a unicidade da solução. O efeito da existência deste tipo de condição de contorno equivale a se ter o contorno da malha no infinito. A condição de contorno Tipo 3 representa uma fonte de concentração cuja taxa é constante.

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

SOLUÇÃO ANALÍTICA

As soluções analíticas da equação de transporte de contaminantes têm sido derivadas para uma variedade de condições de contornos (van Genuchten e Alves, 1982, Ségol, 1993; Leij e Toride, 1995). Embora as soluções analíticas sejam obtidas para condições restritas, elas têm muitas aplicações, tais como a validação de programas computacionais, prognóstico do transporte de contaminantes a longo termo (tempo ou distância), a análise de sensibili-

dade do transporte de contaminantes e a determinação dos parâmetros hidrodispersivos em experimentos sob condições controladas em colunas de solo ou lisímetro.

Apesar de simples, as soluções analíticas necessitam de cuidadosa atenção no que se refere às condições de contorno que são empregadas na análise matemática do problema físico (Parker e van Genuchten, 1984; Toride et al., 1993). Embora a maioria das soluções analíticas pertença ao meio infinito e semi-infinito, soluções analíticas para um meio finito têm sido desenvolvidas e estão sendo utilizadas para quantificar o transporte de contaminantes. Estas soluções são normalmente utilizadas em soluções numéricas (Feike e Toride, 1998).

As condições de contorno para um sistema semi-infinito consideram que a concentração de contaminantes é macroscopicamente contínua em todo perfil de solo e que não ocorre dispersão externamente (Dankwerts, 1953). Desta forma, soluções para uma condição de contorno infinita podem ser aplicadas para uma região finita (Parker e van Genuchten, 1984). Parlange et al. (1992) mostraram que a concentração na saída de um sistema estará entre os valores prognosticados quando usamos um meio finito e uma condição de contorno infinita (Costa, 2000).

Embora a maioria dos problemas de transporte de contaminantes seja resolvida numericamente, as soluções analíticas ainda são utilizadas em muitas pesquisas porque descrevem com maior precisão as características físicas do problema. As soluções analíticas normalmente não possuem os problemas de dispersão numérica e erros de truncamento que freqüentemente ocorrem nas simulações numéricas.

Como base de comparação, utilizou-se a solução analítica da equação unidimensional de transporte sem decaimento ou retardamento e solo saturado (Bear, 1979). A solução é obtida para um meio semi-infinito submetido à condição de contorno Tipo 1, na posição $x = 0$.

$$C = \frac{C_0}{2} \left[\operatorname{erfc} \left\{ \frac{L - v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right\} + \exp \left\{ \frac{v_x L}{D_x} \right\} \operatorname{erfc} \left\{ \frac{L + v_x t}{2\sqrt{D_x t}} \right\} \right]$$

onde, C é a concentração do contaminante e C_0 a concentração inicial $[M/L^3]$; L é o comprimento do meio semi-infinito $[L]$; v_x é a velocidade média de fluxo $[L/T]$; D_x é o coeficiente de dispersão na direção x $[L^2/T]$; t é o tempo $[T]$ e erfc é a função de erro complementar.

METODOLOGIA

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

$$\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} = D \frac{\partial^2(\theta C)}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} - \rho K_d \frac{\partial C}{\partial t} - \lambda(\theta C - \rho K_d C) \quad (9)$$

Onde, C é a concentração do contaminante $[M/L^3]$; θ é o conteúdo de água volumétrico do meio poroso $[L^3/L^3]$; v a velocidade real da água $[L/T]$; D é o coeficiente de dispersão $[L^2/T]$; ρ é a densidade do meio poroso $[M/L^3]$ (aquífero); K_d é a constante da isoterma de Freundlich $[L^3/M]$; λ é o coeficiente de decaimento de primeira ordem do contaminante $[T^{-1}]$.

É importante salientar que para aplicação da Eq. (9) no modelo teórico foram assumidas as seguintes hipóteses: a lei de Darcy é válida; o meio poroso é homogêneo e isotrópico; a porosidade e a condutividade hidráulica são constantes no tempo; os mecanismos físicos de difusão molecular e dispersão mecânica podem ser tratados conjuntamente como mecanismos de espalhamento de Fick; fluxo permanente (carga hidráulica constante e consequentemente vazão constante); o contaminante se comporta como um traçador (densidade e viscosidade da solução constante ao longo do tempo).

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

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

$$\hat{C}^{(e)}(x, y, z) = \sum_{i=1}^n N_i^{(e)} C_i \quad (10)$$

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

Quando a solução aproximada é substituída na Eq. (9), a equação diferencial não é totalmente satisfeita. Nos Métodos dos Resíduos Ponderados, os parâmetros (ou valores nodais) são determinados igualando-se a zero a integral desse resíduo, ponderando por uma função $W_i^{(e)}$. A contribuição do elemento para o resíduo no nó i é:

$$Ri^{(e)} = - \int_e W_i^{(e)}(x) \left[\begin{array}{c} D_x \frac{\partial^2}{\partial x^2} (\theta \hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial x} (v_x \hat{C}^{(e)}) \\ - \frac{\partial}{\partial t} (\rho_b K_d \hat{C}^{(e)}) - \frac{\partial}{\partial t} (\theta \hat{C}^{(e)}) \\ - \lambda (\theta \hat{C}^{(e)} + \rho_b K_d \hat{C}^{(e)}) \end{array} \right] dx \quad (11)$$

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

$$Ri^{(e)} = - \int_{(e)} N_i^{(e)}(x) \left[\begin{array}{c} D_x^{(e)} \theta^{(e)} \frac{\partial^2 \hat{C}^{(e)}}{\partial x^2} - v_x^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial x} \\ - \rho_b K_d^{(e)} \frac{\partial \hat{C}^{(e)}}{\partial t} - \frac{\partial}{\partial t} (\theta^{(e)} \hat{C}^{(e)}) \\ - \lambda (\theta^{(e)} \hat{C}^{(e)} + \rho_b^{(e)} K_d^{(e)} \hat{C}^{(e)}) \end{array} \right] dx \quad (12)$$

Onde, $\theta^{(e)}$ é o conteúdo volumétrico da água no meio poroso dentro do elemento e λ é propriedade do contaminante, não do meio poroso, sendo constante para todos os elementos. O conteúdo volumétrico da água e a velocidade aparente da água subterrânea podem ou não mudar com o tempo, por isso, duas formulações separadas da Eq. (12) são possíveis: para fluxo de água no estado permanente e transiente.

No fluxo de água subterrânea no estado permanente (meio saturado ou não-saturado), o conteúdo de água e a velocidade aparente são constantes para todos os passos de tempo. Embora sejam constantes dentro do elemento, eles podem variar de um elemento para outro. Para o fluxo transiente, podemos escrever a Eq. (12) na forma matricial, combinando as expressões para cada nó do elemento.

$$\begin{Bmatrix} R_1^{(e)} \\ \vdots \\ R_n^{(e)} \end{Bmatrix} = [D^{(e)}] \begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ C_n \end{Bmatrix} + [A^{(e)}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial C_n}{\partial t} \end{Bmatrix} \quad (13)$$

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

$$\begin{aligned} [D^{(e)}]_{nxn} &= \int_{(e)} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} \\ \vdots \\ \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{Bmatrix} [D_x^{(e)} \theta^{(e)}] \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{Bmatrix}_{1xn} dx \\ &+ \int_{(e)} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{Bmatrix}_{nx1} v_x^{(e)} \begin{Bmatrix} \frac{\partial N_1^{(e)}}{\partial x} & \dots & \frac{\partial N_n^{(e)}}{\partial x} \end{Bmatrix}_{1xn} dx \\ &+ \int_{(e)} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{Bmatrix}_{nx1} \begin{Bmatrix} \lambda (\theta^{(e)} + \rho_b^{(e)} K_d^{(e)}) \end{Bmatrix}_{1x1} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{Bmatrix}_{1xn} dx \end{aligned} \quad (14)$$

Se a formulação consistente é usada para a derivada do tempo em uma solução aproximada $\frac{\partial \hat{C}}{\partial t}$. A matriz de sorção do elemento é definida como:

$$\begin{aligned} [A^{(e)}] &= \int_{(e)} \begin{Bmatrix} N_1^{(e)} \\ \vdots \\ N_n^{(e)} \end{Bmatrix} \begin{Bmatrix} \rho_b^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)} \end{Bmatrix}_{1x1} \\ &\begin{Bmatrix} N_1^{(e)} & \dots & N_n^{(e)} \end{Bmatrix}_{1xn} dx \end{aligned} \quad (15)$$

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

$$[A^{(e)}] = (\rho_b^{(e)} K_d^{(e)} + \theta^{(e)}) \frac{V^{(e)}}{n} \begin{bmatrix} 1 & & & 0 \\ & \ddots & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{bmatrix} \quad (16)$$

nxn

A matriz de dispersão global [D] e a matriz de sorção global [A] podem ser obtidas combinando as matrizes de cada um dos elementos numa malha.

$$[D]_{\substack{\text{global} \\ \text{psp}}} = \sum_{e=1}^m [D^{(e)}]_{\text{nxn}} \quad (17)$$

$$[A]_{\substack{\text{global} \\ \text{psp}}} = \sum_{e=1}^m [A^{(e)}]_{\text{nxn}} \quad (18)$$

Sendo, m o número de elementos e p é o número de nós da malha.

A formulação residual (de peso) para a equação de transporte de contaminante é dada por:

$$[D]_{\text{global}} \begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_p \end{Bmatrix} + [A]_{\text{global}} \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \vdots \\ \frac{\partial C_p}{\partial t} \end{Bmatrix} = \{F\}_{\text{global}} \quad (19)$$

Se definirmos os dois vetores {C} e {Ĉ}

$$\{C\} = \begin{Bmatrix} C_1 \\ \vdots \\ \vdots \\ C_p \end{Bmatrix} \quad \{\dot{C}\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial C_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \vdots \\ \frac{\partial C_p}{\partial t} \end{Bmatrix} \quad (20)$$

A Eq. (19) pode ser escrita como:

$$[A]_{\text{global}} \{\dot{C}\} + [D]_{\text{global}} \{C\} = \{F\}_{\text{global}} \quad (21)$$

A Eq. (21) é um sistema de equações diferenciais ordinárias, com solução para valores de C e $\frac{\partial C}{\partial t}$ a cada nó na malha de elementos finitos, a cada tempo.

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

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \frac{\partial(vC)}{\partial x} \quad (22)$$

D é o coeficiente de dispersão e v é a velocidade da água no meio poroso.

MODELO TEÓRICO

O modelo teórico unidimensional utilizado neste trabalho para a verificação da solução numérico-analítica para o problema de transporte de contaminante é constituído por um sistema sujeito a uma contaminação inicial e constante de 10 mg/l. A velocidade da água na direção do fluxo de água é de 0,03 m/d, o coeficiente de dispersão adotado é de 1,0 m²/d e a porosidade (n) é de 0,3 para todos os elementos. O meio poroso é considerado homogêneo, isotrópico e saturado ($\theta = n$). O sistema inicialmente encontra-se livre de contaminação. Para solução do problema, aplicou-se primeiramente uma metodologia numérica para tratamento da variável espacial x. Foi usado neste caso, o Método dos Elementos Finitos. O domínio foi dividido em 5 elementos unidimensionais lineares e iguais de 10 m e 6 nós conforme a Figura 01. A contaminação é aplicada diretamente no nó 1. A concentração no nó 6 tende a zero e as concentrações nos demais nós são desconhecidas.

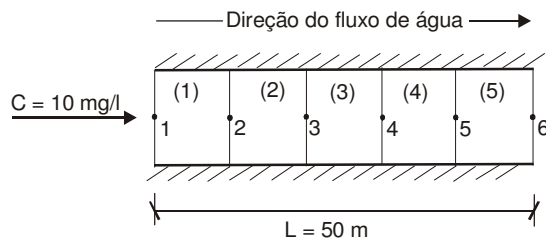


Figura 1 - Exemplo unidimensional de transporte de contaminantes.

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

$$\{C(t)\}_{t=0} = \begin{Bmatrix} 10 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (23)$$

O vetor $\{C(t)\}$ traz os valores da concentração nos nós da malha, sendo dado por:

$$\{C(t)\} = \begin{Bmatrix} 10 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \\ C_6 = 0 \end{Bmatrix} \quad (24)$$

A concentração no nó 1 é a concentração inicial aplicada ao sistema, sendo portanto uma concentração conhecida. Visando eliminar a adoção da discretização do tempo, a partir deste ponto é detalhada a metodologia analítica para o tratamento da variável tempo.

Para o caso unidimensional as matrizes de dispersão [D] e sorção [S] dos elementos são dadas por:

$$[D]_{2 \times 2}^{(e)} = \frac{D_x^{(e)}}{L^{(e)}} \begin{bmatrix} 1 & -1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} + \frac{v_x^{(e)}}{2\theta^{(e)}} \begin{bmatrix} -1 & 1 \\ -1 & 1 \end{bmatrix} \quad (25)$$

$$[S]^{(e)} = \left(\frac{\rho_b^{(e)} K_d^{(e)}}{n^{(e)}} + 1 \right) \frac{L^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \frac{L^{(e)}}{2} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (26)$$

Aplicando os valores do modelo teórico nas equações (25) e (26) temos as matrizes de dispersão e sorção, as quais são iguais para todos os elementos do sistema :

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

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

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

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

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

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

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

$$[S^*] \frac{d\{C(t)\}}{dt} + [D^*]\{C(t)\} = \{f^*(t)\} \quad (27)$$

[S*] é matriz de sorção global; [D*] é matriz de dispersão global; {C(t)} é o vetor que contém o valor da concentração do contaminante nos nós da malha e {f*(t)} é conhecido como o vetor de carga nodal, o qual contém as condições de contorno referentes à derivada da variável dependente (contaminante) nos nós da malha, as quais podem também ser fun-

ção do tempo. As matrizes [S*] e [D*] são matrizes n x n (para o nosso exemplo n=4). Levando em consideração a conectividade dos nós, temos:

$$\begin{bmatrix} 10 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 10 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 10 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 10 \end{bmatrix} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} 0.20 & -0.05 & 0 & 0 \\ -0.15 & 0.20 & -0.05 & 0 \\ 0 & -0.15 & 0.50 & -0.05 \\ 0 & 0 & -0.15 & 0.20 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} C_2 \\ C_3 \\ C_4 \\ C_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -1.5 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

A Eq. (27) pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\frac{d\{C(t)\}}{dt} = -[S]^{-1}[D]\{C(t)\} + [S]^{-1}\{f(t)\} \tag{28}$$

onde:

$$\frac{d\{C(t)\}}{dt} = [A]\{C(t)\} + \{F(t)\} \tag{29}$$

$$[A] = -[S]^{-1}[D] \quad e \quad \{F(t)\} = [S]^{-1}\{f(t)\} \tag{30}$$

A solução de (27) é dada por:

$$\{C(t)\} = e^{[A]t} \{C\}_{t=0} + e^{[A]t} \int_0^t e^{-[A]s} \{F(s)\} ds \tag{31}$$

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

$$e^{[A]t} = a_0[I] + a_1[A] + a_2[A]^2 + \dots + a_{n-1}[A]^{n-1} \tag{32}$$

Como, no nosso caso, n=4; a equação acima fica:

$$e^{[A]t} = a_0[I] + a_1[A] + a_2[A]^2 + a_3[A]^3 \tag{33}$$

Onde os coeficientes a_0 , a_1 , a_2 e a_3 podem ser determinados usando-se o fato de que os autovalores de [A] também satisfazem a Eq. (33) (Castro, 1997), desta maneira nós podemos formar o seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} e^{\lambda_1 t} &= a_0 + a_1 \lambda_1 + a_2 \lambda_1^2 + a_3 \lambda_1^3 \\ e^{\lambda_2 t} &= a_0 + a_1 \lambda_2 + a_2 \lambda_2^2 + a_3 \lambda_2^3 \\ e^{\lambda_3 t} &= a_0 + a_1 \lambda_3 + a_2 \lambda_3^2 + a_3 \lambda_3^3 \\ e^{\lambda_4 t} &= a_0 + a_1 \lambda_4 + a_2 \lambda_4^2 + a_3 \lambda_4^3 \end{aligned} \tag{34}$$

λ_1 , λ_2 , λ_3 e λ_4 são os autovalores da matriz [A], sendo a mesma dada pelo produto da matriz inversa de sorção pela matriz de dispersão (Eq. 30).

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

Seus autovalores são:

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

Substituindo os autovalores em (34) e resolvendo o sistema para os valores de a_0 , a_1 , a_2 e a_3 , temos:

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

Fazendo uso da Eq. (33) determina-se explicitamente a matriz de transferência. O vetor {F(t)} é calculado a partir da Eq. (30) sendo dado por:

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

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

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

O cálculo $\int_0^t e^{-[A]s} \{F(s)\} ds$ é obtido substituindo na matriz de transferência os valores de t por (-s), com s variando de 0 a t.

Neste ponto, a solução {C(t)}, transiente e permanente, está completamente determinada através do uso da Eq. (31).

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

RESULTADOS

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

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

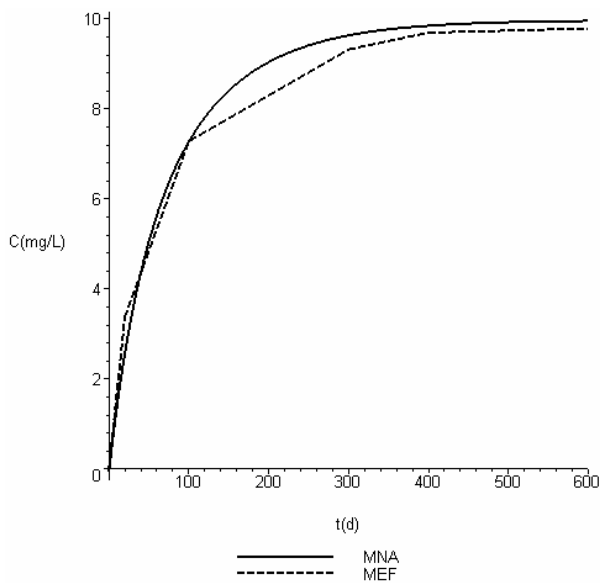


Figura 2 – Variação da concentração no tempo para o nó 2 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos

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

1. A redução de Δt implicaria em mais iterações, podendo gerar acumulação de erros computacionais e;
2. Sem conhecer a solução analítica (exata), não há possibilidade de se saber o erro que se está cometendo ao se adotar um determinado Δt .

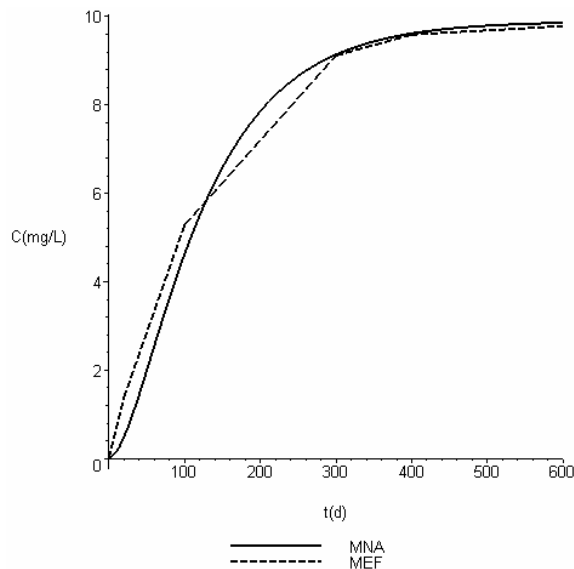


Figura 3 – Variação da concentração no tempo para o nó 3 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.

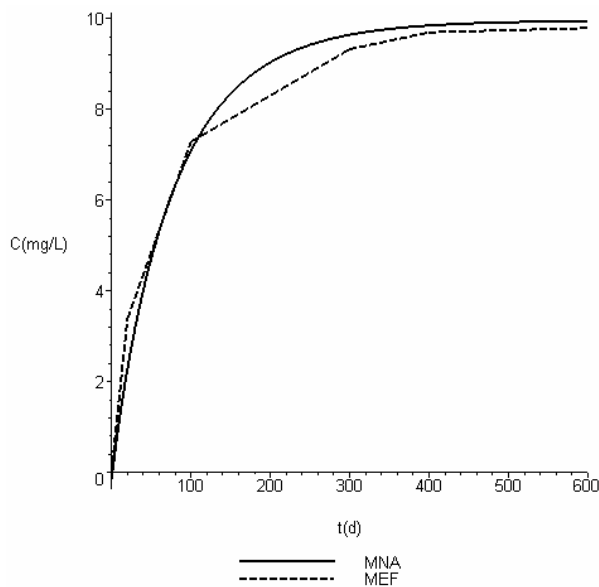


Figura 4 – Variação da concentração no tempo para o nó 4 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos.

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

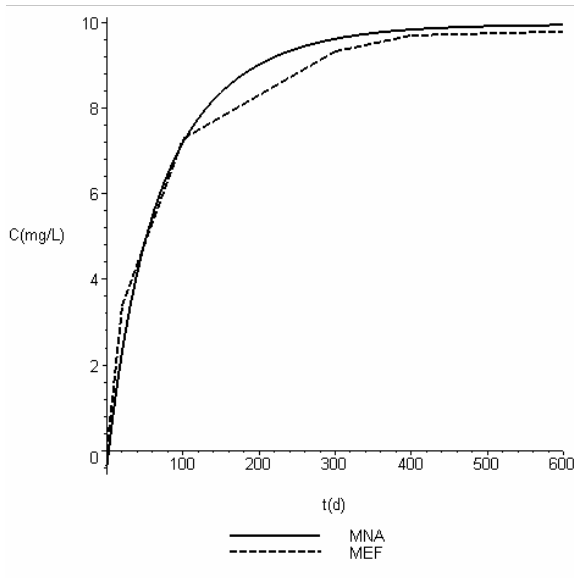


Figura 5 – Variação da concentração no tempo para o nó 5 utilizando o Método Numérico-Analítico (MNA) e o Método dos Elementos Finitos

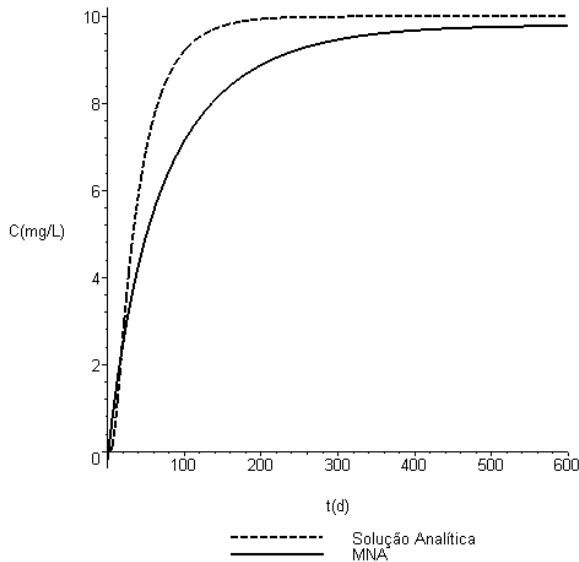


Figura 6 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 2.

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

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

As Figuras 10 e 11 mostram a evolução da concentração em relação à distância para os tempos de 20, 100 e 300 dias, utilizando o Método dos Elementos Finitos (MEF), a metodologia Numérico-Analítica (MNA) e as curvas obtidas a partir da solução analítica.

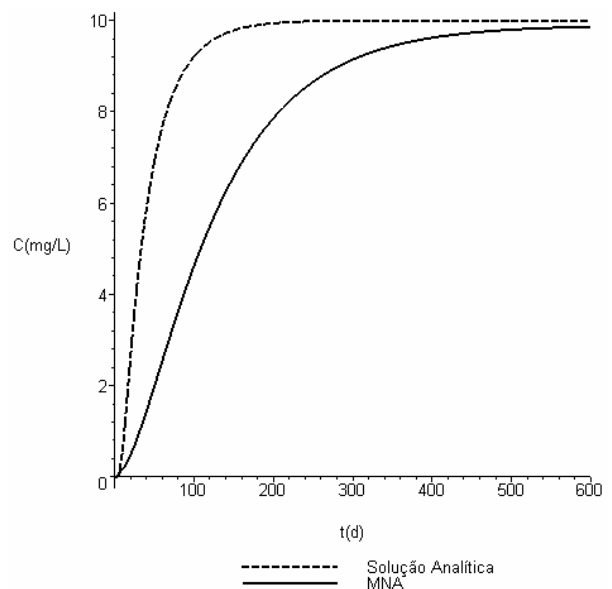


Figura 7 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 3.

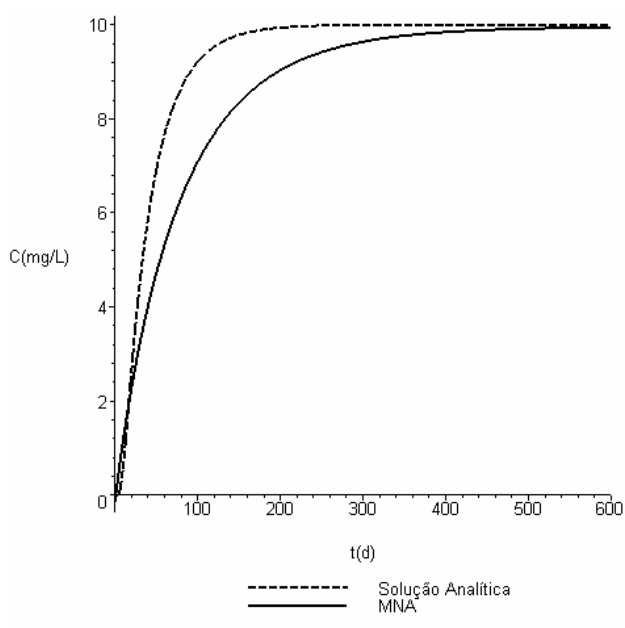


Figura 8 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 4.

A curva de decréscimo da concentração é muito mais acentuada nos 20 primeiros dias e torna-se mais suave após 300 dias, intervalo de tempo no qual o sistema começa a entrar no estado permanente, como mostram as Figuras 10, 11 e 12.

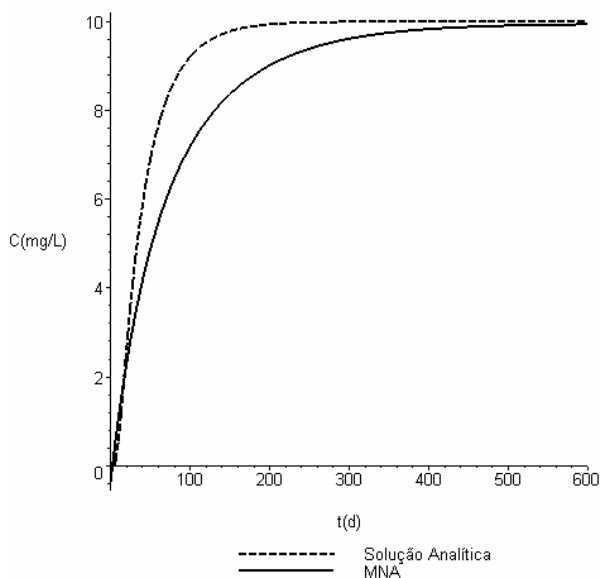


Figura 9 – Comparação do Método Numérico-Analítico (MNA) com a Solução Analítica para o Nó 5.

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

A Figura 10 mostra que as curvas obtidas com a MNA corrigem os problemas de oscilação numérica presente no MEF. A oscilação no MEF é devido à obtenção dos valores de concentração em pontos discretos do domínio o que não ocorre quando se usa o MNA onde os valores são obtidos através de uma equação exponencial. Nas Figuras 10 e 11 fica explícito que os valores de concentrações obtidos com o MNA são bem mais próximos da solução analítica do que os obtidos com o MEF.

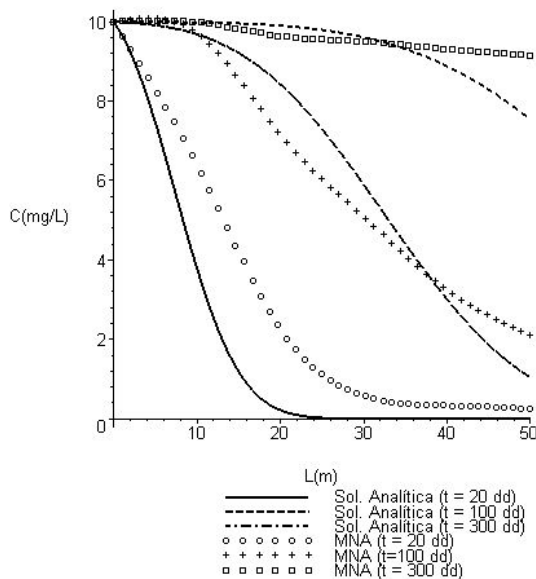


Figura 10– Variação da concentração em relação à distância para os tempo de 20, 100 e 300 dias utilizando a Solução Analítica e MNA.

Para a medida dos efeitos da discretização espacial se define o número de Péclet, e para medida dos efeitos da discretização temporal se define o

número de Courant. Desta forma, podemos dizer que o MNA não apresenta propriedades de instabilidade devido à dispersão numérica, tendo os valores do número de Péclet e de Courant igual a 1,5 e 0,03, respectivamente. Isto garante que a solução numérico-analítica representa uma aproximação razoável da solução exata do problema.

Tabela 1 – Erro relativo entre os valores de concentração C(mg/L) calculados com Metodologia Numérico-Analítica e o Método dos Elementos Finitos.

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

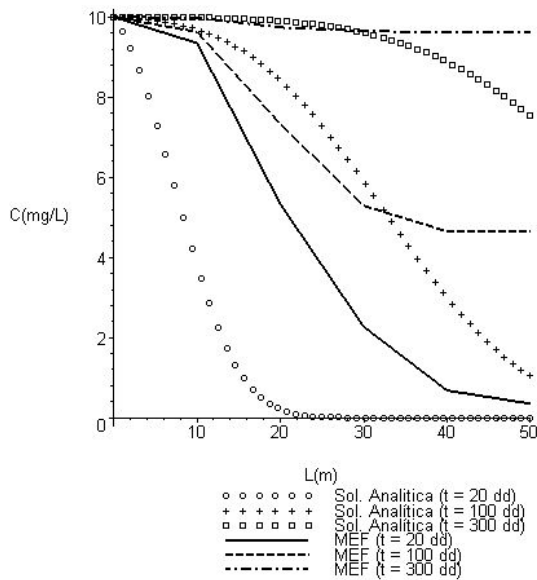


Figura 11– Variação da concentração em relação à distância para os tempo de 20, 100 e 300 dias utilizando a Solução Analítica e MEF.

Para testar os resultados apresentados foram determinados os valores das concentrações para os nós 2, 3, 4 e 5 para a Metodologia Numérico-Analítica (MNA) e o Método dos Elementos Finitos (MEF) considerando um tempo de 10 dias, e calculado o erro relativo para os valores da variável de concentração entre a duas metodologias. A Tabela 1 apresenta os valores teóricos de concentração

[M/L³] nos nós do domínio do problema obtidos com o MNA e com o MEF. Apesar dos valores de concentração nos nós 3, 4 e 5 se encontrarem na mesma faixa de variação os erros relativos são altos. No entanto, este fato não compromete a validade da metodologia apresentada, uma vez que a mesma tem sua validade demonstrada através da solução analítica.

Como as soluções analíticas são obtidas para um meio semi-infinito, e o nosso modelo teórico trata de um meio finito, se extrapolarmos os valores de x para além do domínio, os valores da concentração tendem a zero. Este fato explica a variação no comportamento entre curvas obtidas com os MNA, MEF e a solução analítica (Figuras 10 e 11). Ao contrario do que acontece quando extrapolamos as curvas em relação ao tempo, nesse caso iremos obter os valores da concentração inicial e atingimos assim o estado permanente (Figuras 6, 7, 8 e 9).

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

CONCLUSÕES

O Método Numérico-Analítico (MNA) é uma nova metodologia proposta para determinação da curva de transporte de contaminante unidimensional. Os resultados obtidos com a MNA e comparados ao Método dos Elementos Finitos e a Solução Analítica da equação de transporte de contaminantes validam a metodologia apresentada.

Neste trabalho, propõe-se criar uma ferramenta para análise de contaminação da água subterrânea que fosse capaz de traduzir problemas de transporte de contaminantes unidimensionais, com precisão e eficiência. Tais objetivos foram atingidos com a utilização de uma metodologia analítica no tratamento da variável tempo.

A metodologia Numérico-Analítica associa a versatilidade dos métodos numéricos tradicionais de acomodar condições de contorno com geometrias de domínios complexos, meios heterogêneos e anisotrópicos com a garantia de convergência e estabilidade das soluções normalmente encontradas nos métodos analíticos.

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

REFERENCIAS

- BEAR, J. (1972). Dynamics of Fluids in Porous Media, American Elsevier, New York.
- BEAR, J. (1979). Analysis of flow against dispersion in porous media-Comments. J. Hydrol. 40: 381-385.
- CAMPOS, J. L. E. (1999). Análise numérica do transporte de contaminantes em meios porosos com reações químicas. Tese de Doutorado. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. PUC-RJ.
- CASTRO, M. A. H. (1997). Uma Metodologia Numérico-Analítica para Solução de Problemas Transientes em Recursos Hídricos, XII Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos, Vitória, ES, Vol. 2, p. 313-318.
- CASTRO, M. A. H. (1998). Solução de Problemas Transientes em Recursos Hídricos através da Matriz de Transferência. II Simpósio de Recursos Hídricos Del Cone Sur, Santa Fé, Argentina, v. IV, p. 309-318.
- CASTRO, M. A. H. (1998). Um Método Numérico-Analítico para Solução de Problemas Transientes. XI Congresso Brasileiro de Mecânica dos Solos e Engenharia Geotécnica. Brasília, Anais do XI COBRAMSEG, v. I, p. 1-8.
- CHARBENEAU, R.J. (2000). Groundwater Hydraulics and Pollutant Transport. Prentice-Hall, Inc. New Jersey.
- COSTA, C.T. (2000). Caracterização hidrodispersiva de um solo aluvial no semi-árido do Nordeste do Brasil. Dissertação de Mestrado. UFPE.
- DANKWERTS, P. V. (1953). Continuous Flow Systems. Chem. Eng. Sci. 2: 1-13.
- DAUS, A.D., FRIND, E.O., SUDICKY, E.A. (1985). Comparative error analysis in finite element formulation of advection-dispersion equation. Advance in Water Resources. 8: 86-95.
- FEIKE, J.L.; TORIDE, N. (1998). Analytical solutions for solute transport in finite soil columns with arbitrary initial distributions. Soil Sci. Soc. Am. J. 62: 855-864.
- FETTER, C.W. (1993). Contaminant Hydrogeology. Macmillan Publishing Company, 866 Third Avenue, New York, N.Y. 10022.
- FREEZE, R. A., E CHEERY, J. A. (1979) Groundwater, Prentice-Hall, Englewood Cliffs, N. J.
- ISTOK, J. D. (1989). Groundwater Modeling by the Finite Element Method, American Geophysical Union, Washington, DC, USA.
- LEIJ, F.J.; TORIDE, N. (1995). Discrete time and length-averaged solutions of the advection-dispersion equation. Water Resour. Res. 31: 1713-1724.
- PARKER, J. C.; VAN GENUCHTEN, M. TH. (1984). Flux-average and volume-average concentration in continuum approaches to solute transport. Water Resource Research. 20: 866-872.
- PARLANGE, J.Y. ; STARR, J. L.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; BARRY, D.A.; PARKER, J.C.. (1992). Exit Condition for Miscible Displacement Experiments. Soil Sci. 153: 165-171.
- ROTH, K. (1996). Lecture notes in soil physics. Institute of Soil Science, University of Hohenheim. Version 3.2.
- SÉGOL, G. (1993). Classic groundwater simulations: Proving and improving numerical models. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ.
- SUDICK, E.A. (1989). The Laplace transforms Galerkin Technique: A time-continuous Finite Element Theory and Application to mass transport in Groundwater. Water Resour. Res., 25 (8), 1833-1846.
- TORIDE, N.; LEIJ, F.J.; VAN GENUCHTEN, M. Th. (1993). A comprehensive set of analytical solutions for solute transport with first-order decay and zero-order production. Water Resour. Res. 29: 2167-2182.
- VAN GENUCHTEN, M. TH.; ALVES, W.J. (1982). Analytical solutions of the one dimensional convective-dispersive solute transport equation. USDA, Agricultural Research Service, Tech. Bull. 1661.
- YONG, R.N. et al. (1992). Principles of contaminant transport in soils. Development in geotechnical Engineering, Netherlands: Elsevier Science Publishers, 73, 327p.

A Numerical-Analytic Methodology Applied to Transient Problems of Contaminant Transport

ABSTRACT

The processes which move contaminants through the soil may be expressed by mathematical models. They are based on the integration of the transport equation using specific contour conditions for the system of interest. However, their applicability is limited due to instability and numerical oscillation problems, which may occur depending on the relationship between the time interval chosen and the space between the mesh nodes. This study proposes a numerical-analytic methodology for one-dimensional transient contaminant transport problems. The purpose of the study is to present a new methodology that can reduce numerical instability and the oscillations found in the traditional numerical method. This is a mixed method, numerical in relation to space and analytic in relation to time. The study used a one-dimensional theoretical model to verify the nu-

merical-analytic solution to the problem of contaminant transport and the finite elements method and the analytic solution of the transport equation to the theoretical model were applied to validate the results. They validate the numerical-analytic methodology, since the curves obtained using the numerical-analytic methodology, finite element method and analytic solution are not very different.

Key-words: Numerical method; numerical instability; contamination.