

UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL

**MODELAGEM MULTIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE DE
CONTAMINANTES INORGÂNICOS EM SOLOS TROPICAIS
LATERÍTICOS**

JUAN FERNANDO DÍAZ SÁNCHEZ

PROF. ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, D.Sc.

DISSERTAÇÃO MESTRADO EM GEOTECNIA

PUBLICAÇÃO: GMD 201/2011

BRASÍLIA / DF: DEZEMBRO / 2011

**UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA
FACULDADE DE TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL**

**MODELAGEM MULTIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE DE
CONTAMINANTES INORGÂNICOS EM SOLOS TROPICAIS
LATERÍTICOS**

JUAN FERNANDO DÍAZ SÁNCHEZ

**DISSERTAÇÃO DE MESTRADO SUBMETIDA AO DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA CIVIL
DA UNIVERSIDADE DE BRASÍLIA COMO PARTE DOS REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A
OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE.**

APROVADA POR:

**PROF. ANDRÉ LUÍS BRASIL CAVALCANTE, D.Sc. (UnB)
(ORIENTADOR)**

**PROF. MÁRCIO MUNIZ DE FARIAS, Ph.D. (UnB)
(EXAMINADOR INTERNO)**

**PROF. MÁRCIO DE SOUZA SOARES DE ALMEIDA, Ph.D (UFRJ)
(EXAMINADOR EXTERNO)**

DATA: BRASÍLIA/DF, 5 DE DEZEMBRO 2011.

FICHA CATALOGRÁFICA

DÍAZ-SÁNCHEZ, JUAN FERNANDO

Modelagem Multidimensional de Transporte de Contaminantes Inorgânicos em Solos Tropicais Lateríticos. 2011

xii, 184 p., 297 mm (ENC/FT/UnB, Mestre, Geotecnia, 2011)

Dissertação de Mestrado - Universidade de Brasília. Faculdade de Tecnologia.

Departamento de Engenharia Civil

1. Solos lateríticos

2. Simulação

3. Advecção – Dispersão - Reação

4. Mecanismos Físicos

I. ENC/FT/UnB

II. Mestre

REFERÊNCIA BIBLIOGRÁFICA

DÍAZ SÁNCHEZ, J.F. (2011). Modelagem Multidimensional de Transporte de Contaminantes Inorgânicos em Solos Tropicais Lateríticos, Dissertação de Mestrado, Publicação GDM-201/11, Departamento de Engenharia Civil, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 184 p.

CESSÃO DE DIREITOS

NOME DO AUTOR: Juan Fernando Díaz Sánchez

TÍTULO DA DISSERTAÇÃO DE MESTRADO: Modelagem Multidimensional de Transporte de Contaminantes Inorgânicos em Solos Tropicais Lateríticos

GRAU / ANO: Mestre / 2011

É concedida à Universidade de Brasília a permissão para reproduzir cópias desta dissertação de mestrado e para emprestar ou vender tais cópias somente para propósitos acadêmicos e científicos. O autor reserva outros direitos de publicação e nenhuma parte desta dissertação de mestrado pode ser reproduzida sem a autorização por escrito do autor.

Juan Fernando Díaz Sánchez
Jfdiaz@hotmail.com

DEDICATÓRIA

Dedico este trabajo con todo mi amor y máspreciado cariño a:

Mis hermanos, Daniela y Sebastián, luz, motivación y esperanza para volver siempre a casa.

A mis abuelos, Consuelo, Isidro, y Genoveva.

*A la memoria de los que sé que me protegen a diario
Josefa, Inés, Arturo y Elkin.*

AGRADECIMENTOS

A Deus e Maria Auxiliadora por me ajudar a superar os momentos mais difíceis neste caminho.

A mi padre, Jorge Arturo, persona que se convirtió en un gran ejemplo de trabajo duro y constante. Me enseñó que superarme es cuestión de disciplina y querer hacer las cosas. Para él un infinito agradecimiento.

A mi madre, María Eugenia, mujer guerrera, que a pesar de todas las adversidades me mostro que luchando se puede salir adelante.

Ao Professor André Brasil pela disponibilidade sempre ante qualquer duvida e sobre todo pela sua amizade. Para ele uma infinita gratidão por todas as coisas que fez por mim.

A toda mi familia, en especial a Mariela, Beatriz, Luis Fernando, Fabiola, Tata, Pin, Nacho y a todos los demás, ellos son la más grande motivación para haber llegado hasta este punto

A todos mis amigos de infancia en especial a Javier, mi amigo y hermano con quien tengo la ligación más fuerte de mi pasado mi presente y espero que el futuro.

A Vero, pilar fundamental de mi vida en estos casi 10 años.

A Ivan, profesor, maestro y amigo por recibirme en su casa. Sus importantes consejos y aportes hicieron de mí una persona más madura en lo personal e profesional. No pude tener más suerte en este viaje que compartir con él todo este camino.

A mis amigos, Aleja, Cata, Claudia, Cormane, Esteban, Ruge, Viviana por abrirme las puertas de sus casas, estar siempre pendientes de mí, por sus valiosos consejos tanto personales como laborales. Su amistad es de las mejores cosas que me puedo llevar de este viaje.

A meus colegas e também amigos dos diferentes programas pela sua amizade e bacaneria. À Renata e a Silvia em especial por me ajudar na revisão desta dissertação.

Al combo de la 203 Hernán “Perrito”, Robin y Alex, porque me hicieron sentir como en familia y como en casa

Finalmente pero não com menos importância. Agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento Pessoal de Nível Superior (CAPES), pelo apoio econômico.

A Paolin “Poly”, por hacer de los últimos días, los días más agradables de todos, no te olvidare

“No solo no hubiera sido nada sin ustedes, sino con toda la gente que estuvo a mi alrededor desde el comienzo... algunos siguen hasta hoy...”

GRACIAS... TOTALES!

Gustavo Adrian Cerati.

RESUMO

Uma série de substâncias contaminantes constituídas principalmente por íons de metais pesados foram aplicados sobre corpos de prova moldados por solos lateríticos em condições *in-situ* e compactados. Os parâmetros ajustados de transporte foram determinados utilizando metodologias de minimização do erro entre a concentração relativa medida experimentalmente e a concentração relativa calculada através de uma solução analítica unidimensional para, finalmente, obter o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_L) e o coeficiente de retardo (R). Por meio de uma análise paramétrica e de sensibilidade utilizando a mesma solução analítica unidimensional foi possível estimar qualitativa e quantitativamente, respectivamente, qual dos parâmetros afeta de forma marcante o avanço da pluma contaminante para os materiais estudados. Alguns autores na última década enumeraram diferentes revisões feitas nas soluções analíticas tridimensionais de Domenico & Robbins e Domenico, indicando que existem opiniões que divergem com respeito ao rendimento destas duas soluções. Devido a este fato alguns autores centraram suas pesquisas em compreender a natureza das aproximações envolvidas na solução de analítica tridimensional de Domenico através de uma análise matemática rigorosa sobre a origem e desenvolvimento desta solução. Fundamentado nesta proposta, foi realizado um processo de simulação em um domínio fictício utilizando soluções analíticas e numéricas. Este processo de simulação envolveu duas e três dimensões do espaço utilizando os mesmos solos lateríticos e os parâmetros encontrados na análise unidimensional. A solução analítica proposta por Domenico foi comparada com a solução analítica proposta por Cleary & Ungs e a divergência entre as duas soluções foi calculada por meio da diferença média absoluta existente entre elas. Os resultados obtidos permitiram saber para que condições dos solos lateríticos estudados a solução analítica de Domenico apresentou as melhores aproximações. As simulações foram acompanhadas de análises paramétricas que, finalmente, permitiram observar, entender e desenvolver algumas pautas gerais para o uso adequado da solução de Domenico. As metodologias numéricas de MDF e MEF permitiram realizar uma verificação dos resultados e observações realizadas nas análises analíticas. Estas metodologias de aproximação numérica foram aplicadas no espaço unidimensional (MDF) e no espaço bidimensional (MEF). Este último permitiu conferir as observações constatadas durante a análise analítica multidimensional ratificando assim as incertezas que a solução analítica tridimensional de Domenico acarreta.

RESUMEN

Una serie de sustancias contaminantes constituidas principalmente por iones de metales pesados fueron colocados sobre testigos de suelo laterítico *in-situ* y compactados. Los parámetros ajustados de transporte se determinaron mediante metodologías de minimización del error entre la concentración relativa, medida experimentalmente y la concentración relativa, calculada a través de una solución analítica unidimensional para, finalmente, obtener el coeficiente de dispersividad longitudinal (α_x) y el coeficiente de retardo (R). Mediante un análisis paramétrico y de sensibilidad utilizando la misma solución analítica, fue posible estimar cualitativa y cuantitativamente, respectivamente, cuál de los parámetros contribuye más en el avance de la pluma de contaminación en los materiales estudiados. Algunos autores en la última década enumeraron diferentes revisiones realizadas en las soluciones analíticas tridimensionales de Domenico & Robbins y Domenico, indicando que hay opiniones encontradas respecto al rendimiento de estas dos soluciones. Debido a este hecho, algunos autores centraron sus investigaciones en comprender la naturaleza de las aproximaciones contenidas en la solución analítica tridimensional de Domenico a través de un análisis matemático riguroso sobre el origen e desarrollo de esta solución. Fundamentado en esta propuesta, fue realizado un proceso de simulación utilizando soluciones analíticas y numéricas considerando un dominio ficticio. Este proceso de simulación considero los espacios bi y tridimensionales y utilizando los suelos lateríticos y parámetros encontrados durante el análisis unidimensional. La solución analítica propuesta por Domenico fue comparada con la solución analítica propuesta por Cleary & Ungs, la divergencia entre las dos soluciones fue calculada por medio de la diferencia media absoluta existente entre ellas. Los resultados obtenidos permitieron conocer para qué condiciones de los suelos lateríticos estudiados, la solución analítica de Domenico presento mejores aproximaciones. Las simulaciones fueron acompañadas de análisis paramétricos que permitieron observar, entender e desarrollar algunas pautas generales para el uso adecuado de la solución de Domenico. Las metodologías numéricas de MDF y MEF permitieron verificar los resultados e observaciones realizadas durante los análisis analíticos. Estas metodologías de aproximación numérica fueron aplicadas en el espacio unidimensional (MDF) y en el espacio bidimensional (MEF). Este último permitió conferir las observaciones constatadas durante el análisis analítico multidimensional ratificando así las incertezas que la solución analítica tridimensional de Domenico acarrea.

ABSTRACT

A number of pollutants consist mainly of heavy metal ions were placed on witnesses in-situ lateritic soil and compacted. The adjusted parameters of transport were determined by methods of minimizing the error between the relative concentration, measured experimentally and the relative concentration, calculated through a one-dimensional analytical solution to finally obtain the longitudinal dispersivity coefficient (α_x) and the retardation coefficient (R). Using a parametric and sensitivity analysis, using the same analytical solution was possible to estimate qualitatively and quantitatively, respectively, which parameters contribute most to the advancement of the plume of contamination in the materials studied. Some authors in the last decade several revisions listed in the three-dimensional analytical solutions and Domenico Domenico & Robbins, indicating that there are conflicting opinions regarding the performance of these two solutions. Due to this fact, some authors focused their research on understanding the nature of the approximations contained in the three-dimensional analytical solution Domenico through a rigorous mathematical analysis of the origin and development of this solution. Based on this proposal, we carried out a simulation process using analytical and numerical solutions considering a fictitious domain. This simulation process and consider the bi-dimensional space and using lateritic soils and parameters found for dimensional analysis. The analytical solution proposed by Domenico was compared with the analytical solution proposed by Cleary & Ungs, the divergence between the two solutions was calculated using the mean absolute difference between them. The results allowed to know what lateritic soil conditions studied, the analytical solution presented Domenico best approximations. The simulations were accompanied by parametric analysis that allowed to observe, understand and develop some general guidelines for appropriate use of the Domenico solution. The MDF and numerical methods allowed us to verify the results MEF and observations made during laboratory analysis. These methodologies were applied numerical approximation in unidimensional space (MDF) and two-dimensional space (MEF). The latter allowed observations noted during the conferring of analytical analysis and multidimensional ratifying the uncertainties that Domenico dimensional analytical solution entails.

ÍNDICE

CAPÍTULO 1	1
1. INTRODUÇÃO	1
1.1. OBJETIVOS	4
1.2. ESTRUTURAÇÃO DA DISSERTAÇÃO	4
CAPÍTULO 2	6
2. TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM MEIOS POROSOS	6
2.1. ASPECTOS GERAIS	6
2.1. MECANISMOS FÍSICOS DE TRANSPORTE	8
2.1.1. Mecanismo de Advecção	8
2.1.2. Mecanismo de Dispersão Hidrodinâmica	10
2.2. RELAÇÃO ENTRE OS MECANISMOS FÍSICOS DE TRANSPORTE	17
2.3. MECANISMOS DE INTERAÇÃO SOLO-CONTAMINANTE	19
2.3.1. Sorção e Dessorção	20
2.3.2. Condições de Degradação	25
2.4. MODELO MATEMÁTICO DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES	26
2.4.1. Balanço de Massa	26
2.4.2. Hipóteses Fundamentais da Teoria de Transporte de Contaminantes	26
2.4.3. Modelo Matemático para Contaminantes Não Reativos	27
2.4.4. Modelo Matemático para Contaminantes Reativos	29
CAPÍTULO 3	31
3. METODOLOGIAS DE ANÁLISES E MATERIAIS UTILIZADOS	31
3.1. ASPECTOS GERAIS	31
3.2. METODOLOGIA DE ANÁLISE	32
3.2.1. Cadastro de Dados Experimentais	32
3.2.2. Modelo de Transporte de Contaminantes	34

3.2.3.	Calibração do Modelo de Transporte	35
3.2.4.	Análise Paramétrica e de Sensibilidade para Soluções Unidimensionais.....	37
3.2.5.	Processos de Simulação	40
3.3.	MATERIAIS UTILIZADOS	41
3.3.1.	Natureza do Solo Laterítico	41
3.3.1.1.	Caracterização dos Solos Lateríticos	41
3.3.1.2.	Caracterização Hidráulica dos Solos Lateríticos	44
3.3.1.1.	Concentrações das Soluções Contaminantes	45
3.3.2.	Procedimentos e Resultados dos Trabalhos Seleccionados	46
CAPÍTULO 4.....		53
4.	SOLUÇÃO ANALÍTICA UNIDIMENSIONAL DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES.....	53
4.1.	ASPECTOS GERAIS.....	53
4.1.	DEFINIÇÃO DE SOLUÇÕES ANALÍTICAS	54
4.2.	DEFINIÇÃO DE CONDIÇÕES AUXILIARES (INICIAL E DE CONTORNO) ...	55
4.3.	SOLUÇÕES ANALÍTICAS UNIDIMENSIONAIS	55
4.3.1.	Solução Analítica Unidimensional de Ogata & Banks (1961).....	55
4.3.2.	Solução Analítica Unidimensional de Bear (1979).....	57
4.4.	PROCESSO DE CALIBRAÇÃO DOS PARÂMETROS DE TRANSPORTE	58
4.4.1.	Método dos Mínimos Quadrados	58
4.4.2.	Análises e Comparação dos Parâmetros Ajustados de Transporte.....	65
4.5.	ANÁLISE PARAMÉTRICA E DE SENSIBILIDADE.....	70
4.5.1.	Análise Paramétrica da Solução Unidimensional de Ogata & Banks (1961)	73
4.5.2.	Análise de Sensibilidade na Solução Unidimensional de Ogata & Banks (1961)	79
CAPÍTULO 5.....		87

5. SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES	87
5.1. ASPECTOS GERAIS	87
5.2. CONSIDERAÇÕES DAS SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS	89
5.3. PARÂMETROS DE TRANSPORTE PARA AS SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS	92
5.3.1. Influência da Escala no Coeficiente de Dispersividade	92
5.3.2. Transformação dos Parâmetros de Laboratório nos Parâmetros de Campo	93
5.4. SOLUÇÕES ANALÍTICAS BIDIMENSIONAIS.	99
5.4.1. Solução Analítica Bidimensional de Domenico (1987).....	100
5.4.2. Solução Analítica Bidimensional de Cleary & Unga (1978)	101
5.4.1. Comparação dos Resultados entre as Soluções Analíticas Bidimensionais	102
5.5. SOLUÇÕES ANALÍTICAS TRIDIMENSIONAIS	105
5.5.1. Soluções Analíticas Tridimensionais de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987)	105
5.5.2. Solução Analítica Tridimensional de Cleary & Unga (1978)	108
5.5.3. Comparação dos Resultados entre as Soluções Analíticas Tridimensionais	109
5.6. ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DAS PLUMAS CONTAMINANTES NOS ESPAÇOS BI E TRIDIMENSIONAIS	111
5.7. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE	126
5.7.1. Análise de Sensibilidade Coeficientes de Dispersividade ($\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$).....	126
5.7.2. Análise de Sensibilidade Coeficiente de Retardo (R) e Velocidade Linear Média de Percolação (v_x)	128
CAPÍTULO 6	132
6. SOLUÇÕES NUMÉRICAS MULTIDIMENSIONAIS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES	132
6.2. ASPECTOS GERAIS.....	132
6.3. MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS (MDF).....	133

6.3.1.	Malha do MDF e Convenção de Discretização	134
6.3.2.	Formulações em Diferenças Finitas	135
6.3.3.	Solução Numérica Unidimensional do Modelo de Transporte pelo MDF.....	138
6.3.1.	Comparação da Solução Analítica com a Solução Numérica por MDF.....	140
6.4.	MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS (MEF)	148
6.4.1.	Método de Resolução de Galerkin	149
6.4.2.	Software FlexPDE V.5.0 ®	150
6.4.3.	Comparação das Soluções Analíticas Bidimensionais com a Solução Numérica por MEF.....	151
CAPÍTULO 7		158
7.	CONCLUSÕES	158
7.1.	CONCLUSÕES DA ANÁLISE UNIDIMENSIONAL ANALÍTICA	158
7.2.	CONCLUSÕES DA ANÁLISE MULTIDIMENSIONAL ANALÍTICA.....	160
7.3.	CONCLUSÕES DA ANÁLISE MULTIDIMENSIONAL NUMÉRICA	161
7.4.	SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS	161
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....		163
APÊNDICE A.....		169
A.	CODIGOS DE PROGRAMAÇÃO VISUAL BASIC® PARA MICROSOFT EXCEL 2007 ®	169
A.1	SOLUÇÃO ANALÍTICA UNIDIMENSIONAL DE OGATA & BANKS (1968) .	169
A.2	SOLUÇÃO ANALÍTICA UNIDIMENSIONAL DE BEAR (1979)	171
A.3	SOLUÇÃO ANALÍTICA TRIDIMENSIONAL DE DOMENICO (1987)	173
A.4	SOLUÇÃO ANALÍTICA TRIDIMENSIONAL DE CLEARY & UNGS (1978) ..	175
A.5	SOLUÇÃO NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL PELO METODO DAS DIFERENÇAS FNITAS DA EQUAÇÃO ADVECTIVA DISPERSIVA REATIVA.....	179
A.6	SOLUÇÃO NUMÉRICA BIDIMENSIONAL PELO METODO DOS ELEMENTOS FINITOS DA EQUAÇÃO ADVECTIVA DISPERSIVA REATIVA	183

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1. Exemplos de contaminação do subsolo: (a) Migração de um contaminante proveniente de um lixão. (b) Migração de um contaminante pela zona vadosa e acumulação na zona subjacente à linha freática. (c) Migração de contaminantes com densidades diferentes.	7
Figura 2.2. Propagação da pluma de contaminação devido ao mecanismo de advecção.	9
Figura 2.3. Propagação de uma pluma de contaminação devido ao mecanismo de dispersão.	10
Figura 2.4. Causas da dispersão mecânica na água e no solo. (a) Variação do fluxo através das partículas de solo. (b) a) Fluxo helicoidal, b) Variação do fluxo por redemoinhos. c) Variação do fluxo vertical e horizontal.	11
Figura 2.5. Gráfico D_x^h/D_0 versus número de Péclet, obtidos por Perkins & Johnson (1963) (Modificado de Fetter, 2008).	18
Figura 2.6. Isoterma linear (Rowe et al., 1995)	21
Figura 2.7. Isoterma de Freundlich: (a) Adsorção como função da concentração; (b) Representação gráfica para determinação dos parâmetros (Rowe et al., 1995).	22
Figura 2.8. Isoterma de Langmuir: (a) sorção em função da concentração; (b) método de normalização de eixos das ordenadas; (c) método de inversão dos parâmetros.	23
Figura 2.9. Balanço de massa do contaminante sobre um volume de controle	26
Figura 2.10. Volume elementar representativo de um meio poroso.	27
Figura 3.1. Fluxograma com metodologia de análise para o transporte de contaminantes em múltiplas dimensões	33
Figura 3.2. Curva de tempo(t) versus concentração relativa (c/c_0). Determinação dos critérios gráficos de tempo de estabilização (t_e) e inclinação do trecho de contaminação (m_e).	38
Figura 3.3. Distribuição do tamanho das partículas dos solos estudados.	43
Figura 3.4. Carta de plasticidade de Casagrande com os materiais utilizados em Carvalho (2001) e Nascentes (2003) (Modificado de Mitchell & Sitar, 1982).	43
Figura 3.5. Curvas de Chegada (CCH) dos íons de Cd^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} e Zn^{2+} nas amostras (A2 e A3) para a profundidade de 3.0 m (Modificado de Carvalho, 2001).	48
Figura 3.6. Curvas de Chegada (CCH) dos íons de Cd^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} e Zn^{2+} nas amostras (A4, A5 e A6) para a profundidade de 7.0 m (Modificado de Carvalho, 2001).	48

Figura 3.7. Curvas de Chegada (CCH) dos íons de Cd^{2+} , Mn^{2+} e Zn^{2+} nas amostras (CP1, CP2 e CP4) para o solo laterítico compactado (Modificado de Nascentes, 2003).....	51
Figura 4.1. Problema unidimensional de Ogata & Banks (1961).	56
Figura 4.2. Calibração pelo Método dos Mínimos Quadrados, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ à 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	59
Figura 4.2. (Cont.) Calibração pelo Método dos Mínimos Quadrados, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ à 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	59
Figura 4.4. Calibração pelo Método dos Mínimos Quadrados, (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} para o solo laterítico compactado.	61
Figura 4.5. Modelo unidimensional aplicado com os parâmetros otimizados aos dados experimentais, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m. ..	62
Figura 4.5 (Cont.). Modelo unidimensional aplicado com os parâmetros otimizados aos dados experimentais, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.	63
Figura 4.6. Modelo unidimensional aplicado com os parâmetros otimizados aos dados experimentais, (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} para o solo laterítico compactado.	64
Figura 4.6. (a) Variação da porosidade (n), (b) da massa específica seca (ρ_d), (c) do coeficiente de distribuição (K_d) e (d) do coeficiente de retardo (R) com a profundidade.....	68
Figura 4.7. Limites HCV e LCV. (a) solo laterítico in-situ à 3.0 m íons Pb^{2+} , (b) solo laterítico in-situ a 7.0 m íons Pb^{2+} , (c) solo laterítico compactado íons Cd^{2+}	72
Figura 4.8. Variação dos critérios gráficos de t_e e m_e com base na variação do coeficiente de dispersividade (α_x), do coeficiente de retardo (R) e da velocidade linear média (v_x). Caso do solo laterítico in-situ a 3 m.....	75
Figura 4.9. Variação dos critérios gráficos de t_e e m_e com base na variação do coeficiente de dispersividade (α_x), do coeficiente de retardo (R) e da velocidade linear média (v_x). Caso do solo laterítico in-situ a 7 m.....	76
Figura 4.10. Variação dos critérios gráficos de t_e e m_e com base na variação do coeficiente de dispersividade (α_x), do coeficiente de retardo (R) e da velocidade linear média (v_x). Caso do solo laterítico compactado.	77

Figura 4.11. Análise de sensibilidade dos parâmetros de transporte sobre a solução analítica unidimensional de Ogata & Banks (caso do solo laterítico in-situ).....	82
Figura 4.12. Análise de sensibilidade dos parâmetros de transporte sobre a solução analítica unidimensional de Ogata & Banks (caso do solo laterítico compactado).....	83
Figura 4.13. (a) Processo de calibração pelo método dos mínimos quadrados íon Cd^{2+} . (b) Comportamento da variância da concentração relativa com o tempo ($V[c/c_0(t)]$). Espaço de Volume de poros (V_p) versus concentração relativa (c/c_0).....	86
Figura 5.1. Geometria e sistema cartesiano de eixos para a solução analítica de Domenico (1987). Transporte tridimensional num domínio infinito devido a uma fonte de largura (Y) e altura (Z) (modificado de Guyonnet & Neville, 2004).....	90
Figura 5.2. Geometria e sistema cartesiano de eixos na solução analítica de Cleary & Ungs (1978). (a) Vista em planta do transporte da pluma contaminante. (b) Seção A-A, transporte tridimensional num domínio de largura (W) e altura (H) finita (modificado de Wexler, 1992).	91
Figura 5.3. Determinação dos coeficientes de dispersividade longitudinal no campo a partir dos coeficientes de dispersividade longitudinal de laboratório. (a) solo laterítico in-situ a 3.0 m, (b) solo laterítico in-situ a 7.0 m, (c) solo laterítico compactado.....	98
Figura 5.3. (Cont.) Determinação dos coeficientes de dispersividade longitudinal no campo a partir dos coeficientes de dispersividade longitudinal de laboratório. (a) solo laterítico in-situ a 3.0 m, (b) solo laterítico in-situ a 7.0 m, (c) solo laterítico compactado.....	99
Figura 5.4. Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) no espaço XY para os íons dos metais pesados no solo laterítico compactado.....	103
Figura 5.5. Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico in-situ a 3.0 m e solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	103
Figura 5.5. (Cont.) Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico in-situ a 3.0 m e solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	104
Figura 5.6. Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) no espaço XY para os íons dos metais pesados no solo laterítico compactado.....	110
Figura 5.7. Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico in-situ a 3.0 m e solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	110
Figura 5.7. (Cont.) Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico in-situ a 3.0 m e solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	111

Figura 5.8. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para os solo laterítico compactado. (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+}	114
Figura 5.9. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.	115
Figura 5.9. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.	116
Figura 5.10. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para o solo laterítico compactado. (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+}	117
Figura 5.11. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.	118
Figura 5.11. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.	119
Figura 5.12. Comparação nos espaços bi e tridimensionais da magnitude das diferenças médias absolutas entre as soluções analíticas de Domenico e Cleary & Unga (a) para os solos lateríticos compactados e (b) para os solos lateríticos in-situ.	121
Figura 5.13. Representação gráfica das magnitudes dos parâmetros de transporte para todos os solos lateríticos e íons analisados.	124
Figura 5.14. Alteração dos coeficientes de dispersividade longitudinal e transversais, (a) $\alpha_x/10$, (b) $\alpha_y/10$ e (c) $\alpha_z/10$ correspondem ao solo laterítico in-situ a 3 m para o íon Cu^{2+} (d) $\alpha_x/10$, (e) $\alpha_y/10$ e (f) $\alpha_z/10$ correspondem ao solo laterítico compactado para o íon Zn^{2+}	127

Figura 5.15. Alteração da velocidade linear media e do coeficiente de retardo, (a) $v_x/10$ e (b) $v_x \cdot 10$ correspondem ao solo laterítico in-situ a 3 m para o íon Cu^{2+} , (c) $v_x/10$ e (d) $v_x \cdot 10$ correspondem ao solo laterítico compactado para o íon Zn^{2+}	129
Figura 5.16. Magnitude das diferenças médias absolutas entre as soluções analíticas de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978) considerando a alteração dos parâmetros de transporte na análise de sensibilidade (a) para o solo laterítico compactado. (b) para o solo laterítico in-situ.....	130
Figura 6.1. Malha do MDF e convenção de discretização. (a) Esquema do bloco centrado (b) Esquema do ponto centrado.....	134
Figura 6.2. Interpretação geométrica das aproximações em diferenças finitas em atraso, centrado e avanço da equação diferencial.	136
Figura 6.3. Comparação das soluções analíticas de Ogata & Banks com a solução numérica obtida pelo MDF no solo laterítico in-situ.	142
Figura 6.3. (Cont.) Comparação das soluções analíticas de Ogata & Banks com a solução numérica obtida pelo MDF no solo laterítico in-situ.	142
Figura 6.4. Comparação das soluções analíticas de Ogata & Banks com a solução numérica obtida pelo MDF no solo laterítico compactado.	143
Figura 6.5. Gráfico D_x^h/D_0 versus número de Péclet experimental e numérico, obtidos por Perkins & Johnson (1963).....	146
Figura 6.6. Relação do coeficiente de dispersividade longitudinal e do número de Péclet. ..	147
Figura 6.7. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ obtidas pelas diferentes soluções analíticas e numéricas no espaço bidimensional utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	153
Figura 6.7. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ obtidas pelas diferentes soluções analíticas e numéricas no espaço bidimensional utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico in-situ a 7.0 m.....	154
Figura 6.8. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ obtidas pelas diferentes soluções analíticas e numéricas no espaço bidimensional para os solos lateríticos compactado (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+}	155

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 3.1. Caracterização dos solos estudados. Granulometria e limites de consistência.	42
Tabela 3.2. Caracterização dos solos estudados. Índices físicos.	42
Tabela 3.3. Parâmetros hidráulicos medidos por cada um dos autores.	44
Tabela 3.4. Concentrações dos íons de metais pesados utilizadas na solução contaminante de Carvalho (2001).....	45
Tabela 3.5. Concentrações dos íons de metais pesados utilizadas na solução contaminante de Nascentes (2003).....	46
Tabela 3.6. Parâmetros de transporte para o solo laterítico <i>in-situ</i> . Carvalho (2001).....	47
Tabela 3.7. Parâmetros de transporte para o solo laterítico compactado (Nascentes, 2003). 50	
Tabela 4.1. Comparação dos parâmetros de transporte: coeficiente de dispersividade (α_x) e coeficiente de retardo (R) para o solo laterítico <i>in-situ</i>	65
Tabela 4.2. Comparação dos parâmetros de transporte: coeficiente de dispersividade (α_x) e coeficiente de retardo (R) para o solo laterítico compactado.....	65
Tabela 4.3. Parâmetros de transporte de contaminantes que definem os limites <i>LCV</i> e <i>HCV</i> utilizados na análise paramétrica, para o caso do solo laterítico <i>in-situ</i> a 3 m.	74
Tabela 4.4. Parâmetros de transporte de contaminantes que definem os limites <i>LCV</i> e <i>HCV</i> na análise paramétrica, para o caso do solo laterítico <i>in-situ</i> a 7 m.	74
Tabela 4.5. Parâmetros de transporte de contaminantes que definem os limites <i>LCV</i> e <i>HCV</i> na análise paramétrica, para o caso do solo laterítico compactado.	74
Tabela 4.6. Parâmetros estatísticos dos principais parâmetros de transporte.	80
Tabela 4.7. Parâmetros estatísticos de porosidade (n) e massa específica seca (ρ_d) em estado <i>in-situ</i> e compactado de solos lateríticos	81
Tabela 5.1. Condições de entrada para o processo de simulação bi e tridimensional.	99
Tabela 5.2. Magnitude média da diferença média absoluta de todas as análises.	122
Tabela 6.1. Equações algébricas em diferenças finitas no espaço e no tempo	138
Tabela 6.2. Resumo da discretização no tempo e no espaço do domínio de estudo. Condições de estabilidade numérica e Número de Péclet.	144

LISTA DE ABREVIATURAS & SÍMBOLOS

ABREVIATURAS

(c/c_0)	concentração relativa
$(c/c_0)_{\max}$	concentração relativa máxima
$ v $	magnitude do vetor de velocidades médias
1D	espaço unidimensional
2D	espaço bidimensional
3D	espaço tridimensional
CCH	Curvas de Chegada
CTC	capacidade de troca catiônica
EPA	Environmental Protection Agency
FOSM	First-order, second moment
HVC	High Conceivable Values
<i>IP</i>	índice de plasticidade
<i>LL</i>	limite de liquidez
<i>LP</i>	limite de plasticidade
LVC	Low Conceivable Values
MCV	Medium Conceivable Values
MDF	Método das Diferenças Finitas
MEF	Método dos Elementos Finitos
pH	potencial hidrogeniônico
USCS	Classificação Unificada dos Solos

LETRAS ARÁBICAS

<i>b</i>	taxa cinética constante de saída e entrada de constituintes nos sítios de adsorção
<i>c</i>	concentração média da espécie contaminante
<i>c</i>	concentração de equilíbrio
<i>C</i>	número de Courant
<i>D*</i>	Coefficiente de difusão molecular
<i>D₀</i>	coeficiente de difusão medido em uma solução aquosa
<i>d₅₀</i>	diâmetro efetivo médio dos grãos
<i>D_h</i>	coeficiente de dispersão hidrodinâmica
<i>D_m</i>	coeficiente de dispersão mecânica
<i>D_{m,ij}</i>	tensor de segunda ordem de coeficientes de dispersão

	mecânica
$D_{m,x}$	coeficiente de dispersão mecânica longitudinal
$D_{m,z}$	coeficiente de dispersão mecânica transversal vertical
$D_{m,z}$	coeficiente de dispersão mecânica transversal vertical
e	índice de vazios
erf	função erro
erfc	função erro complementar
F_i	vetor de fluxo de massa advectiva que ocorre nas direções $i=x, y$ e z
F_i^*	vetor de fluxo de massas por difusão nas direções $i=x, y$ e z
$F_{m,i}$	vetor de fluxo de massas por dispersão mecânica nas direções $i=x, y$ e z
H	altura do aquífero
k	condutividade hidráulica
K	coeficiente de partição de Freundlich
K_d	coeficiente de distribuição
k_{ij}	tensor de segunda ordem de condutividades hidráulicas
l	distância em uma escala macroscópica
L	Largura da amostra, corpo de prova ou domínio de estudo
l_e	distancia real em uma escala microscópica
m_e	inclinação do trecho de contaminação
n	porosidade total
N	coeficiente exponencial ou de partição de Freundlich
N	número de Neumann
n_e	porosidade efetiva
P_e	número de Péclet
R	coeficiente de retardo
S	massa de soluto adsorvida pela massa de solo
S_m	quantidade máxima de contaminante adsorvida pelo solo
Sr	grau de Saturação
t	tempo
T	relação entre volume de efluente coletado e volume de poros
t_e	tempo de estabilização
V_{ef}	volume de efluente coletado
v_i	i -ésima componente do vetor de velocidades lineares médias $i=x, y$ e z

v_x	velocidade linear média de percolação na direção x
$ v $	magnitude do vetor de velocidades médias
V_p	volume de poros
W	largura do aquífer
w_{op}	umidade ótima
x	coordenada espacial
y	coordenada espacial
Y	largura da fonte contaminante
z	coordenada espacial
Z	altura da fonte contaminante

LETRAS GREGAS

$\sum r_i^m$	processo químico de adsorção mas decaimento radioativo
α	coeficiente de dispersividade
α_{ijkl}	tensor de quarta ordem de coeficientes de dispersividade
α_L	coeficiente de dispersividade longitudinal
α_{TH}	coeficiente de dispersividade transversal horizontal
α_{TV}	coeficiente de dispersividade transversal vertical
α_x	coeficiente de dispersividade longitudinal
α_y	coeficiente de dispersividade transversal horizontal
α_z	coeficiente de dispersividade transversal vertical
δ_{ij}	delta Kronecker
$\varepsilon(\Delta x)$	erro da aproximação numérica
λ	meia vida dos núclídeos radioativos
μ	média aritmética
$\nabla_j c$	vetor gradiente de concentração média das espécies contaminante $i=x, y$ e z
$\nabla_j h$	vetor gradiente de carga hidráulica $i=x, y$ e z
$\sigma[x_i]$	desvio padrão da variável x_i
τ	tortuosidade do meio poroso
$V[x_i]$	variância da variável x_i
Δt	tamanho do passo na discretização do tempo
Δx	tamanho do passo na discretização do espaço
ρ_d	massa específica seca do solo
$\rho_{d,max}$	massa específica seca do solo máxima
ρ_s	massa específica das partículas sólidas
$\overline{\delta V}$	magnitude da diferença média absoluta

ELEMENTOS QUIMICOS

Cd^{2+}

Cádmio

Cr^{3+}

Crômo

Cu^{2+}

Cobre

Mn^{2+}

Manganes

Pb^{2+}

Chumbo

Zn^{2+}

Zinco

CAPÍTULO 1

1. INTRODUÇÃO

Importantes fatores dos processos de industrialização observados desde a metade do século XX até hoje, dentre os quais se citam o avanço na medicina e o surgimento de novas tecnologias, tem criado condições para o crescimento extraordinário da população mundial. Como consequência, a sociedade precisa aumentar sua produção de bens e o uso das reservas do planeta levando à geração de resíduos de todo tipo que produzem finalmente o aumento da contaminação das águas, do ar e dos solos. A contaminação das águas subterrâneas devido à infiltração de contaminantes no solo é um dos problemas de saúde pública que mais afeta a população mundial, emergindo como uma das principais preocupações das nações na atualidade. A ação rápida e técnica na detecção e remediação pode contribuir para minimização dos impactos adversos que este fenômeno gera desde o ponto de vista ambiental até o econômico (Woldt, 1990).

Embora a água seja essencial para a vida, muitas vezes não é reconhecida como um recurso precioso. Durante o século passado, a super-exploração e contaminação proveniente das atividades industriais, agrícolas e comerciais se mostraram como grandes ameaças. Esta contaminação tem sido devida aos produtos químicos, orgânicos e/ou inorgânicos, resíduos industriais perigosos, chorumes de aterros sanitários, vazamentos de óleo, líquidos tóxicos de atividades agrícolas, tais como, fertilizantes, pesticidas e herbicidas e, finalmente, resíduos radioativos em depósitos localizados em formações geológicas profundas. Graves problemas de contaminação do solo e das águas subterrâneas ocorrem em países industrializados e cada vez mais, nos países em desenvolvimento (Bear & Cheng, 2010).

No caso do impacto ambiental da mineração, existe uma pesquisa significativa sobre os efeitos da contaminação causada pela drenagem de águas ácidas ricas em metais pesados, pela lixiviação das ombreiras e pela deposição de rejeitos em barragens. Estudos em ecossistemas têm indicado que áreas muito próximas a complexos urbanos, a zonas de mineração ou a sistemas rodoviários, contêm concentrações muito altas destes elementos. O efeito dos compostos inorgânicos agrava-se quando os mesmos são absorvidos pelas plantas e quando a

quantidade excede a máxima capacidade de retenção do solo, tornando-se facilmente lixiviáveis, com conseqüente contribuição nas águas subterrâneas (Stigliani, 1988). Em geral, a deposição destes rejeitos é feita na superfície do solo causando uma variação das condições hidrogeológicas locais.

O armazenamento dos resíduos sólidos urbanos em aterros sanitários construídos segundo critérios de engenharia e normas operacionais específicas, que permitem o confinamento seguro, de modo a evitar danos ou riscos à saúde pública, vem sendo uma das maneiras de minimizar o problema de contaminação do solo e das águas subterrâneas pela infiltração de lixiviado no subsolo. Mesmo assim, Boscov et al. (1999) ressaltam que não existe camada impermeabilizante totalmente impermeável. Mesmo que a concentração inicial do poluente sobre a superfície do terreno não seja considerável, sempre atingirá o lençol freático com concentração não nula.

Com a atual necessidade de medir, calcular e prever os problemas anteriormente enumerados, o estudo dos problemas de contaminação precisa da utilização ou estabelecimento de modelos matemáticos. Estes são uma forma de representar os fenômenos de fluxo e transporte de massas contaminantes através de equações matemáticas. A linguagem matemática prove um poderoso mecanismo para expressar uma grande quantidade de informação de forma simples e compacta. No campo da ciência do meio ambiente e da geotecnia ambiental, o uso de modelos matemáticos aplicados às águas subterrâneas está sendo mais frequente. Segundo Kumar (2004), os modelos estão se adequando a uma ampla variedade de condições hidrogeológicas e, mais recentemente, a aplicação está orientada a prever o transporte de contaminantes na avaliação do risco.

Segundo Schwarts (1990), os modelos de percolação de fluidos e de transporte de massas contaminantes sobre uma superfície ou um domínio qualquer, são afetados por vários processos os quais podem ser mostrados em três tipos de modelos diferentes. O primeiro refere-se à modelagem de *fluxo de água no subsolo*, sendo esse o modelo mais simples, já que na maioria dos casos, o modelo só precisa considerar unicamente dois processos: o primeiro em resposta ao potencial do gradiente hidráulico e o segundo devido ao balanço de massa como conseqüência ao ganho ou perda de massa de água por fontes que renovam ou poços de bombeamento que extraem. O segundo modelo faz referência ao *fluxo em fases múltiplas*. Este vai ocorrer quando outros fluidos se deslocam no interior do solo. Neste modelo incluem-se os gases nos espaços vazios do solo ou solventes orgânicos que

simplesmente não podem se dissolver na água. Finalmente, o *fluxo de contaminantes* diluídos na água, cujos principais mecanismos se estabelecem em dois grupos, o primeiro, referente aos mecanismos de transporte de massas e o segundo aos mecanismos de transferência de massa. A modelagem matemática, para simular este último modelo, permite avaliar o destino e persistência das substâncias diluídas na água, em um domínio definido pelo espaço e pelo tempo e prediz com exatidão, a física e química que ocorrem durante o fenômeno de transporte (Schwartz et al., 2003).

Berkowitz et al. (2008) explicam que a elaboração e a aplicação de ditos modelos ambientais de transporte de contaminantes foram desenvolvidos pelas seguintes razões:

1. Para prever o tempo de viagem das espécies contaminantes nos sistemas hídricos superficiais ou nas águas subterrâneas quando ocorrem as calamidades.
2. Para avaliar o passado, presente e futuro da exposição humana frente aos fenômenos de contaminação.
3. Predizer as condições futuras em diversos estágios de mudanças ambientais e estabelecer estratégias de gestão e avaliar a eficácia destes.
4. Reduzir os custos de extração de água do solo e controlar a qualidade desta mediante a utilização de modelos de predição mais baratos.
5. Melhorar a compreensão dos mecanismos que controlam a dispersão e conhecer o destino dos produtos químicos no meio ambiente mediante a quantificação de suas reações e movimentação.

Esta dissertação apresentará diferentes processos de simulação em múltiplas dimensões do fenômeno de transporte de massas contaminantes, especificamente compostos contaminantes inorgânicos (metais pesados), que se deslocam através dos meios porosos em condições saturadas de origem tropical, especificamente solos lateríticos. O ponto de partida estará na definição dos diferentes tipos de modelos matemáticos que descrevem e acoplam os processos de transporte e transferência de massas contaminantes em uma, duas e três dimensões do espaço e, as respectivas, soluções analíticas e numéricas disponíveis na literatura e como estas podem ser aplicadas. Debater-se-á sobre a fundamentação teórica desses modelos e soluções, apresentando suas principais vantagens e limitações, o uso e abuso destas formulações e a forma em que cada modelo e sua respectiva solução podem se selecionar, assim como também, os procedimentos de calibração de um modelo de transporte de contaminantes.

1.1. OBJETIVOS

Esta pesquisa tem como objetivo geral, simular o movimento de compostos contaminantes inorgânicos em múltiplas dimensões através do meio poroso, que para objeto desta pesquisa serão solos de ambientes tropicais, especificamente solos lateríticos. A modelagem será elaborada principalmente considerando soluções analíticas e numéricas. Para atender este objetivo geral serão desenvolvidos os seguintes objetivos específicos:

- Reunir e analisar resultados de ensaios laboratoriais relacionados ao transporte de contaminantes aplicados em solos tropicais, disponíveis em trabalhos e pesquisas, e comparar os resultados obtidos nesta dissertação com os resultados inicialmente apresentados pelos autores.
- Resolver o problema de transporte de contaminantes por meio da programação de uma ferramenta matemático-computacional que permita a comparação entre soluções analíticas e numéricas.
- Verificar a eficácia de diferentes métodos de solução, validando-os com as previsões esperadas sobre o comportamento físico-químico do processo.
- Analisar e avaliar o comportamento e transporte dos solutos caracterizados quando interagem com o meio poroso selecionado, comparando os resultados obtidos com os resultados laboratoriais inicialmente reunidos.

1.2. ESTRUTURAÇÃO DA DISSERTAÇÃO

Esta dissertação foi estruturada em sete (7) capítulos, sendo que no Capítulo 1 são explicados os aspectos gerais sobre a crescente contaminação dos solos causada pelos diferentes processos antrópicos, enfatizando a contaminação devido aos processos de mineração e à instalação de aterros sanitários. Apresenta-se também os objetivos gerais e específicos necessários para o desenvolvimento do trabalho, assim com a estrutura da dissertação.

No Capítulo 2 são apresentados os conceitos fundamentais da teoria de transporte de contaminantes em meios porosos, assim como a fundamentação teórica de cada um dos mecanismos físicos e químicos que atuam durante o processo.

No Capítulo 3 são explicadas de forma específica, as etapas e as metodologias utilizadas para o desenvolvimento dos objetivos planejados no início desta pesquisa, assim como os materiais utilizados para as análises do fenômeno de transporte, compreendendo a natureza dos solos lateríticos e das substâncias contaminantes utilizadas.

No Capítulo 4 são determinados os parâmetros unidimensionais de transporte de contaminantes por meio de uma técnica de otimização, que aplicada sobre os dados experimentais dos solos lateríticos utilizados, geram os parâmetros de transporte ótimos. Uma vez obtidos estes parâmetros se realizaram comparações com os parâmetros obtidos pelos autores das respectivas pesquisas. O capítulo também apresenta uma análise paramétrica e de sensibilidade com o objetivo de identificar os parâmetros que mais afetam de forma qualitativa e quantitativa a resposta da função que descreve o processo de contaminação no espaço unidimensional.

No Capítulo 5 são apresentados os processos de simulação nos espaços bi e tridimensionais aplicando duas soluções analíticas correspondentes à solução analítica tridimensional de Domenico (1987) e a solução analítica de Cleary & Ungs (1978). Inicialmente foram explicadas as considerações e hipóteses para melhor compreensão das capacidades e limitantes existentes. As duas soluções analíticas escolhidas foram aplicadas a uma escala de campo para todos os solos lateríticos e os íons contaminantes estudados, obtendo-se dessa forma, a distribuição e avanço das plumas contaminantes no espaço para um determinado tempo. O capítulo finalizará com uma análise de sensibilidade para examinar o comportamento das duas soluções analíticas diante a alteração de seus parâmetros.

No Capítulo 6 é realizada uma comparação e verificação dos resultados obtidos nas análises do problema de transporte com as soluções analíticas multidimensionais utilizando aproximações numéricas. Foram utilizados para este fim, o Método das Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF). O primeiro método foi programado e utilizado para verificar as soluções analíticas unidimensionais obtidas no Capítulo 4 e o segundo método foi programado e utilizado para verificar as soluções analíticas bidimensionais obtidas no Capítulo 5.

No Capítulo 7 são apresentadas as conclusões do trabalho e as sugestões para pesquisas futuras com enfoque no transporte de contaminante, tanto, na parte numérica e de modelagem como na parte laboratorial e experimental.

Finalmente no Apêndice I são apresentados os códigos de programação realizados em Visual Basic ® aplicado a Microsoft Excel ® e FlexPDE ® para o desenvolvimento das soluções analíticas e numéricas em múltiplas dimensões.

CAPÍTULO 2

2. TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM MEIOS POROSOS

2.1. ASPECTOS GERAIS

Nas águas subterrâneas, observam-se dois fenômenos de transporte que devem ser diferenciados preliminarmente para se estabelecer o enfoque desta pesquisa. A água transporta as partículas produzidas pelos processos erosivos, assim como os íons diluídos procedentes de fontes naturais ou antrópicas. Tudo isto ocorre geralmente na superfície do terreno, mas, por vezes, estes fenômenos podem ocorrer em formações geológicas profundas, como o caso de reservatórios de material radioativo. A fração fina, constituída principalmente por argilominerais e por matéria orgânica, leva consigo uma grande quantidade de nutrientes e de contaminantes, incluindo metais pesados. O transporte de produtos químicos associados a sedimentos é denominado *transporte de sedimentos* e o transporte dos componentes químicos em forma diluída é denominado *transporte de contaminantes* (Berkowitz *et al.*, 2008).

Em princípio, a estrutura de um modelo de transporte de contaminante é a mesma de um modelo de fluxo. A principal diferença reside no fato de que, em um modelo de fluxo, a quantidade transportada é a massa da fase líquida e, em um modelo de transporte, a quantidade transportada é a massa de espécies químicas contaminantes presentes na fase líquida. No primeiro caso, a quantidade medida é a densidade do líquido, enquanto que no segundo caso a quantidade é a concentração de espécies químicas (Bear & Cheng, 2010).

Van der Perk (2007) define o termo *transporte* nos fenômenos de contaminação como a ação conjunta dos fenômenos de migração, de deslocamento e de armazenamento de substâncias químicas nas águas que percolam através do solo. Durante o transporte, ocorre uma *transformação*, que indica as mudanças na concentração destas espécies químicas como consequência das reações e dos processos de transferência de massa entre as diferentes interfaces que atuam no processo.

O fenômeno de contaminação, de forma mais específica, inicia-se quando soluções líquidas tóxicas dissolvidas na água são derramadas sobre a superfície ou no interior do solo deliberadamente ou por acidente. Uma vez derramado, o contaminante líquido percola o solo através da zona vadosa. Vários processos biológicos e químicos ocorrem ao longo do caminho, através da zona vadosa, até alcançar o aquífero subjacente. Quando alcança o aquífero, o contaminante é **transportado** pela água para os pontos de afloramento (rios, lagos, ou poços de bombeamento). Durante o processo ocorre uma **transformação** no contaminante que geralmente se reflete na mudança da concentração das espécies químicas dissolvidas devido a reações químicas e transferências de interfaces, como a dissolução da matriz sólida (Bear & Cheng, 2010). A Figura 2.1 ilustra as diferentes formas como os contaminantes se transportam no interior do solo.

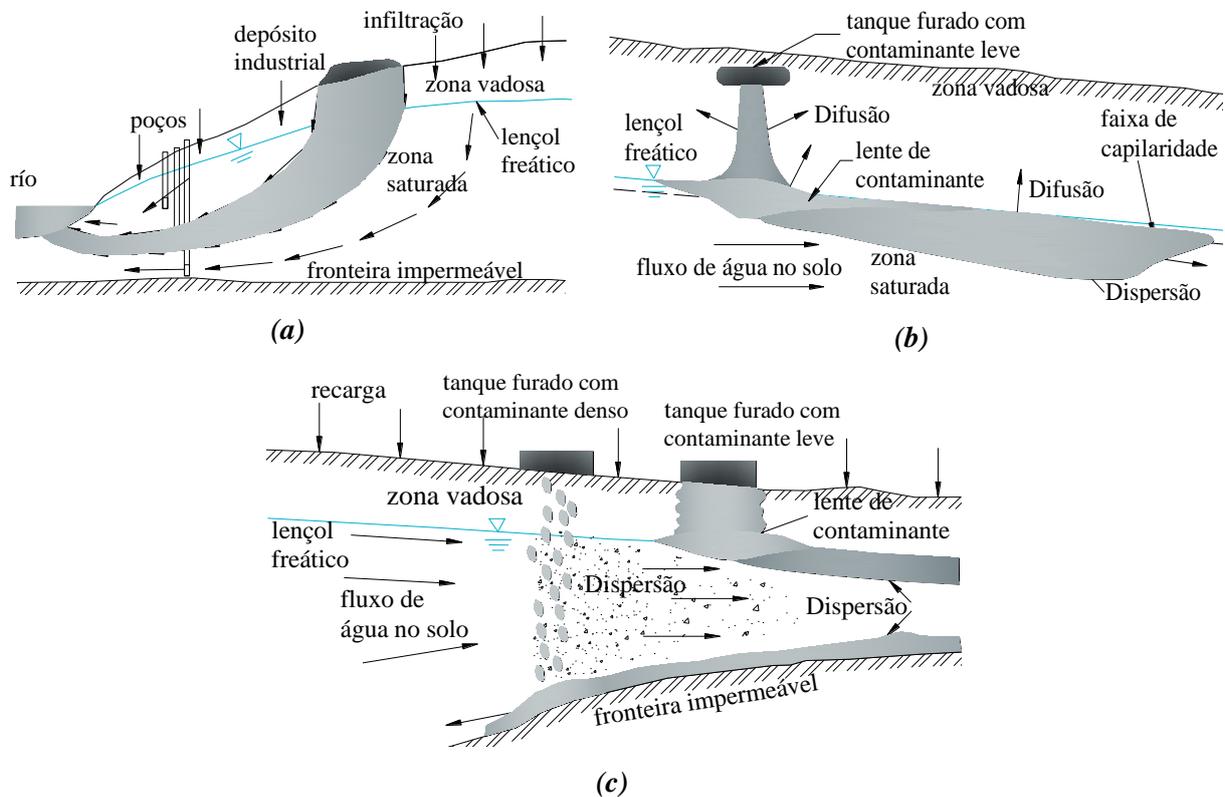


Figura 2.1. Exemplos de contaminação do subsolo: (a) Migração de um contaminante proveniente de um lixão. (b) Migração de um contaminante pela zona vadosa e acumulação na zona subjacente à linha freática. (c) Migração de contaminantes com densidades diferentes.

Van der Perk (2007) explica que o impacto ambiental de contaminantes é determinado não apenas pela reação do meio ambiente à presença dos componentes químicos, mas também pela movimentação dos mesmos. O transporte de sedimentos e de contaminantes dissolvidos ao longo da superfície ou através do caminho preferencial de fluxo subterrâneo, ligando cada

ponto dentro de uma bacia hidrográfica do rio até o ponto de captação, é regido pelas interações físico-químicas não-lineares entre a água, sedimentos, contaminantes e componentes biológicos que operam em diferentes escalas espaciais e temporais.

As interações no fluxo das águas subterrâneas e/ou de superfície incluem fenômenos de dispersão ao longo da trajetória de fluxo, adsorção e dessorção entre a fase dissolvida, o solo e os sedimentos em suspensão. Além disso, as interações variam em magnitude, devido à variação espacial e temporal das emissões de nutrientes e de poluentes na superfície do solo ou no leito do rio, à distribuição espaço-temporal das chuvas, à escala, à tortuosidade e à velocidade nos caminhos de fluxo.

O objetivo deste capítulo é apresentar de forma preliminar os diferentes modelos constitutivos e matemáticos que descrevem os fenômenos de transporte de contaminantes que se encontram diluídos na água subterrânea, assim como as interações físico-químicas que ocorrem entre o contaminante e o meio poroso durante o deslocamento.

2.2. MECANISMOS FÍSICOS DE TRANSPORTE

Os mecanismos físicos de transporte de contaminantes no meio poroso são todos os processos influenciados diretamente por um sistema de fluxo relacionado ao transporte de partículas e de substâncias não reativas. Estes mecanismos físicos, denominados também na literatura como processos hidrodinâmicos, ocorrem na natureza geralmente de forma simultânea, mas podem ser subdivididos em dois processos básicos: advecção e dispersão.

O transporte de solutos, em altas velocidades de fluxo da água subterrânea, é feito pela advecção. Além disso, durante a trajetória, ocorre um espalhamento da pluma de contaminação, provocado pela dispersão hidrodinâmica. A dispersão hidrodinâmica é a ação conjunta dos processos de dispersão mecânica do contaminante entre os poros do meio poroso e da difusão molecular. A seguir, apresenta-se uma descrição detalhada de cada um dos mecanismos de transporte já mencionados.

2.2.1. Mecanismo de Advecção

A advecção é o mecanismo primário responsável pela migração do contaminante no subsolo. A massa contaminante é transportada simplesmente porque a água subterrânea em que o poluente está dissolvido se movimenta por um sistema de fluxo (Schwarz, 1990). Em condições de fluxo laminar, a água escoia devido à força de gravidade ou devido a pressões

externas e é retida pelo atrito interno (viscosidade) e pelo atrito de contato entre água e sedimentos que se deslocam (Domenico & Schwarz, 1998). Um contaminante diluído em uma corrente de água é levado na mesma direção e com a mesma velocidade linear média (v_i) do fluido percolante sem que o pico de concentração seja alterado em qualquer tempo t (Figura 2.2). Neste caso a velocidade linear média é dada por:

$$v_i = -\frac{1}{n_e} k_{ij} \nabla_j h \quad (2.1)$$

onde, v_i representa a i -ésima componente do vetor de velocidades lineares médias ou também denominadas de velocidades advectivas [L/T], k_{ij} é o tensor de segunda ordem de condutividades hidráulicas [L/T] e $\nabla_j h$ corresponde ao vetor gradiente de carga hidráulica, nas direções x , y e z do sistema cartesiano adotado; n_e é definido como o volume de poros por onde ocorre condução do fluido dividido pelo volume total do material (sólido+poros). A quantificação de n_e é complexa, o que torna muito comum o uso da porosidade total n em substituição ao valor n_e . Para materiais granulares, assume-se com certa segurança que n_e seja igual a n (Fetter, 2008).

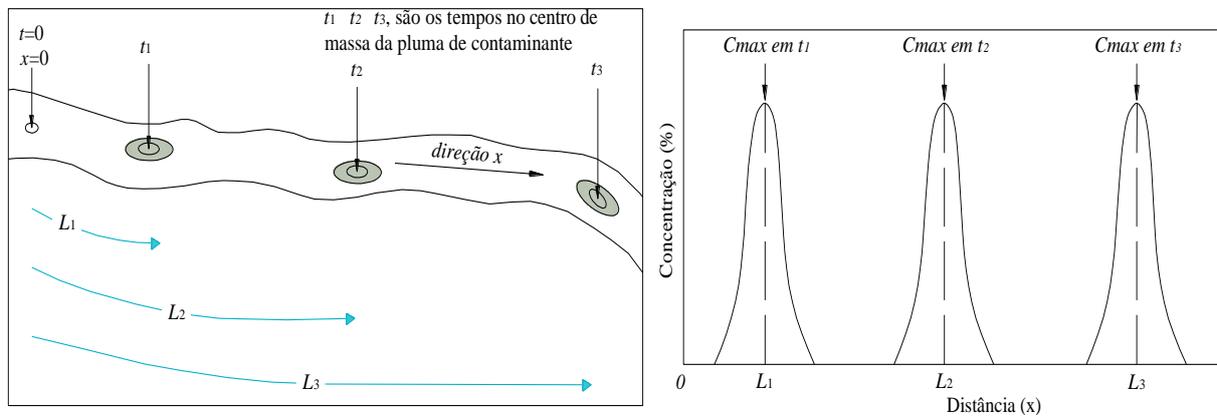


Figura 2.2. Propagação da pluma de contaminação devido ao mecanismo de advecção.

A componente de fluxo de massa F_i que compõe o vetor de fluxo de massa de uma espécie contaminante por advecção através de uma área transversal unitária em uma unidade de tempo nas direções x , y e z pode ser expresso por:

$$F_i = v_i n c \quad (2.2)$$

onde c é a concentração média da espécie contaminante [M/L³] e n é a porosidade total [adimensional] do solo.

Para Schwarz (1990), a estreita relação existente entre o mecanismo de transporte advectivo e o fluxo de água subterrânea significa que os fatores considerados para o fluxo de água, como a localização, a quantidade de massa que entra comparada à que sai do sistema de fluxo e a distribuição da condutividade hidráulica desempenham um papel importante na migração de contaminantes. De fato, o processo de advecção pode ser dominante, como observado no caso de problemas de transporte em grandes escalas. Neste caso, segundo Zheng & Wang (1999), este fenômeno é predominante em relação aos demais fenômenos de transporte. Como consequência, a velocidade linear média (v_i) pode ser obtida pelos modelos de fluxo da Lei de Darcy e pode ser utilizada, finalmente, para estimar os padrões de transporte de contaminantes com boa precisão.

2.2.2. Mecanismo de Dispersão Hidrodinâmica

A dispersão, de forma geral, constitui um processo transiente e de mistura irreversível. Este fenômeno indica fisicamente, a tendência ao espalhamento do contaminante pelos caminhos que ele percorre. As moléculas, à medida que são transportadas, tendem a se afastar da trajetória principal, algumas com velocidade maior que as outras, ocasionando assim a diluição da solução, como se observa na Figura 2.3.

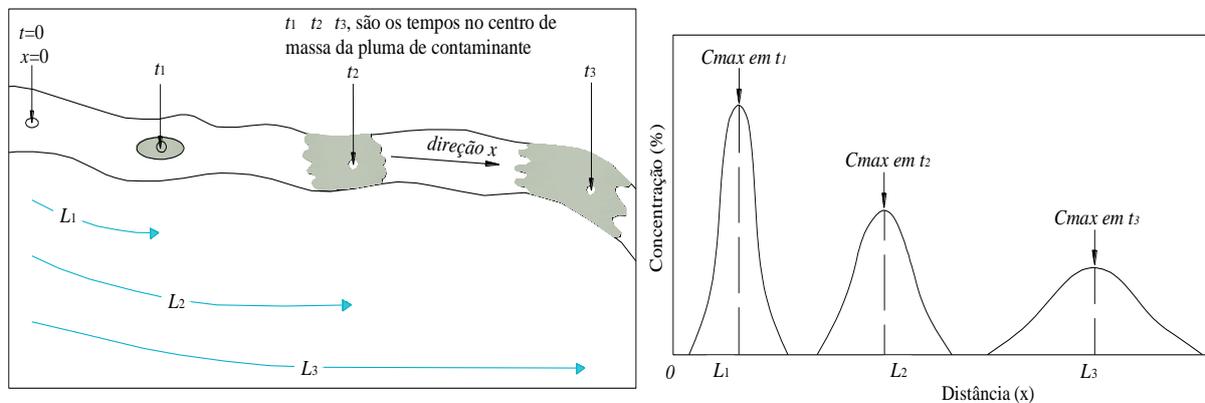


Figura 2.3. Propagação de uma pluma de contaminação devido ao mecanismo de dispersão.

As componentes resultantes da diluição são denominadas de dispersão mecânica (D^m), como consequência da heterogeneidade da velocidade no interior do sistema, e difusão molecular (D^*), devido a diferentes gradientes de concentração. A somatória destas componentes pode ser expressa pelo coeficiente de dispersão hidrodinâmica ou simplesmente coeficiente de dispersão (D^h) (Freeze & Cherry, 1979):

$$D^h = D^m + D^* \quad (2.3)$$

2.2.2.1. Dispersão Mecânica (D^m)

Este mecanismo acontece predominantemente na escala macroscópica e está associado à movimentação mecânica dos solutos. O mecanismo ocorre durante a advecção e consiste no processo de propagação do soluto causado pela heterogeneidade da velocidade no movimento do fluido e também pelos diversos caminhos percorridos pelo fluxo através do meio.

De uma forma mais aprofundada, Shackelford (1993) cita que o contaminante sofre um espalhamento causado por diferentes velocidades nos canais entre partículas e pelos caminhos tortuosos impostos à solução. As diferenças na velocidade nos canais são causadas pelo atrito imposto ao fluido nas proximidades das partículas, sendo que o efeito desse atrito diminui em função do aumento da distância entre as partículas, como se pode perceber pelo tamanho dos vetores mostrados na Figura 2.4(a).

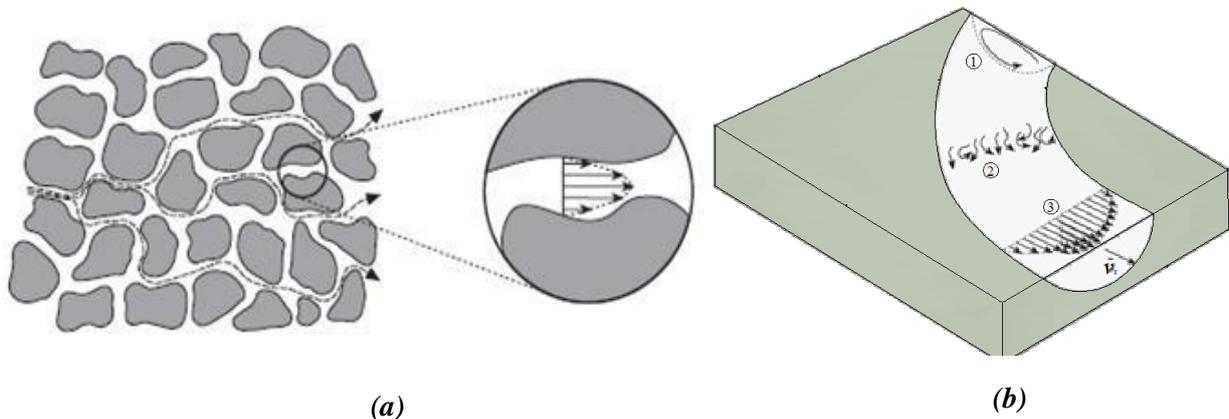


Figura 2.4. Causas da dispersão mecânica na água e no solo. (a) Variação do fluxo através das partículas de solo. (b) 1) Fluxo helicoidal, 2) Variação do fluxo por redemoinhos. 3)Variação do fluxo vertical e horizontal.

Embora o fluxo das águas subterrâneas seja laminar, na escala macroscópica, a velocidade do fluxo varia dentro dos poros do solo, como é ilustrado na Figura 2.4(a). A diferença de velocidade devido à mudança na área dos canais vazios do solo faz com que a solução se disperse. Na escala macroscópica (Figura 2.4(b)), a transferência de massa pela dispersão mecânica é muito maior em termos de ordem de grandeza, que a transferência de massa devido à difusão molecular, como consequência dos efeitos do fluxo turbulento (Berkowitz *et al.*, 2008).

2.2.2.2. Tensor de Dispersão Mecânica (D_{ij}^m) e Coeficiente de Dispersividade (α)

Scheidegger (1961) e Bear (1979 e 2010) mostram que, para um domínio isotrópico, o fluxo de massa por dispersão mecânica pode ser definido em vários termos que podem ser calculados, como a velocidade linear média e a concentração média. O fluxo de massa por dispersão mecânica é descrito pela Lei de Fick e definido em função do coeficiente de dispersão mecânico. Usando-se notação indicial (i.e, somatório implícito sobre índices repetidos), a Lei de Fick é dada pela seguinte expressão:

$$F_i^m = -nD_{ij}^m \nabla_j c \quad (2.4)$$

onde F_i^m denota a i -ésima componente do vetor de fluxo de massa por dispersão mecânica dos contaminantes que passam por unidade de área em uma unidade de tempo, $\nabla_j c$ é o vetor gradiente de concentração média das espécies contaminante, expresso nas três dimensões por $\partial c/\partial x$, $\partial c/\partial y$ e $\partial c/\partial z$ [M/L³/L] e D_{ij}^m é o tensor de dispersão mecânica que pode ser representado matematicamente por um tensor de segunda ordem, composto por nove componentes no espaço tridimensional. Este tensor transforma o vetor de gradientes de concentração no vetor de fluxo de massa dispersiva de contaminante. A Eq. (2.4) é válida para qualquer meio anisotrópico. O sinal negativo reflete que o sentido da transferência de massa é o oposto do gradiente de concentração. A transferência de massa continua até que o equilíbrio seja atingido, ou seja, até que o vetor de gradiente de concentração se torne nulo em todos os pontos. A Eq. (2.4) pode ser escrita de forma matricial como:

$$\begin{Bmatrix} F_x^m \\ F_y^m \\ F_z^m \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} D_{xx}^m & D_{xy}^m & D_{xz}^m \\ D_{yx}^m & D_{yy}^m & D_{yz}^m \\ D_{zx}^m & D_{zy}^m & D_{zz}^m \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial c}{\partial x} \\ \frac{\partial c}{\partial y} \\ \frac{\partial c}{\partial z} \end{Bmatrix} \quad (2.5)$$

Como se pode observar nas Eqs. (2.4) e (2.5), existe uma grande semelhança entre a Lei de Fick e a Lei de Darcy. Segundo Bear & Cheng (2010), a lei de Darcy é definida em função da geometria dos espaços vazios do solo e das propriedades do fluido percolante e a lei de Fick depende principalmente do campo de velocidades associado ao fluido percolante. Desta forma, o tensor que descreve o coeficiente de dispersão mecânica pode ser expresso utilizando a velocidade linear média do fluido que atravessa os espaços vazios de um meio poroso:

$$D_{ij}^m = \frac{1}{\|v\|} \alpha_{ijkl} v_k v_l \quad (2.6)$$

onde α_{ijkl} é um tensor de quarta ordem, cujos membros são parâmetros ou propriedades (Fel & Bear, 2010), denominadas coeficientes de dispersividade [L]. Este termo depende da escala do domínio de estudo e determina o nível em que a espécie contaminante espalha-se através do meio poroso saturado. v_k é a k-ésima componente do vetor de velocidades lineares médias ou advectivas [L/T] e $\|v\|$ representa a magnitude do vetor de velocidades médias [L/T], calculado por:

$$\|v\|^2 = v_k v_k \quad (2.6)$$

No caso de meios porosos anisotrópicos, são necessários seis coeficientes de dispersividade (α). Cada um deles corresponde a um coeficiente de dispersão mecânica (D^m), sendo todos independentes uns dos outros (Fel & Bear, 2010). Para casos isotrópicos, o tensor do coeficiente de dispersão mecânica é definido por dois coeficientes de dispersividade independentes entre si (α_L e α_T) (Scheidegger, 1961 e Bear & Cheng, 2010). Geralmente, não é possível obter em campo os seis coeficientes necessários em uma análise anisotrópica. Como uma alternativa prática na modelagem de transporte de contaminantes, Zheng & Wang (1999) propõem assumir que os dois coeficientes de dispersividade para o caso isotrópico sejam aplicáveis também aos meios anisotrópicos. Em contrapartida, Schwarts (1990) afirmou que, se são usados apenas dois coeficientes de dispersividade, longitudinal (α_L que representa a dispersividade na direção x) e transversal (α_T que representa a dispersividade na direção y ou z), na predição do transporte de uma pluma contaminante em um meio anisotrópico quando a direção do fluxo não é sempre paralela à direção principal da anisotropia, os fluxos dispersivos obtidos podem estar super ou subestimados, isto é, podem ser constatados erros na predição da concentração da pluma. Em termos dos coeficientes de dispersividade α_L e α_T , as componentes do tensor do coeficiente de dispersão mecânica, para um meio anisotrópico, podem ser expressas na forma:

$$D_{ij}^m = \alpha_T \|v\| \delta_{ij} + (\alpha_L - \alpha_T) \frac{v_i v_j}{\|v\|} \quad (2.6)$$

onde δ_{ij} é o delta de Kronecker definido como uma função descontínua cujos valores são zero e um e se define da seguinte forma:

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1, & \text{se } i = j \\ 0, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (2.7)$$

Burnett & Frind (1987) e Zheng & Wang (1999) utilizam dois coeficientes de dispersividade para o caso transversal: o primeiro na direção transversal horizontal (α_{TH} equivalente ao coeficiente de dispersividade na direção y) e o segundo na direção transversal vertical (α_{TV} equivalente ao coeficiente de dispersividade na direção z), ambos com dimensão de comprimento [L]. Desta forma, fazendo uso da Eq. (2.6), podem ser obtidas as formulações para cada uma das seis (6) componentes do tensor do coeficiente de dispersão mecânica, no caso anisotrópico. Nas direções x , y e z , tem-se:

$$D_{xx}^m = \alpha_x \frac{v_x^2}{\|v\|} + \alpha_y \frac{v_y^2}{\|v\|} + \alpha_z \frac{v_z^2}{\|v\|} \quad (2.10a)$$

$$D_{yy}^m = \alpha_x \frac{v_y^2}{\|v\|} + \alpha_y \frac{v_x^2}{\|v\|} + \alpha_z \frac{v_z^2}{\|v\|} \quad (2.10b)$$

$$D_{zz}^m = \alpha_x \frac{v_z^2}{\|v\|} + \alpha_y \frac{v_x^2}{\|v\|} + \alpha_z \frac{v_y^2}{\|v\|} \quad (2.10c)$$

Uma das características do tensor D_{ij}^m é que o mesmo é simétrico. Segundo De Groot & Mazur (1962), as componentes do tensor devem satisfazer:

$$D_{ij}^m = D_{ji}^m \quad (2.11)$$

Devido a esta condição, as expressões para as componentes cruzadas do tensor são obtidas:

$$D_{xy}^m = D_{yx}^m = (\alpha_x - \alpha_y) \frac{v_x v_y}{\|v\|} \quad (2.12a)$$

$$D_{xz}^m = D_{zx}^m = (\alpha_x - \alpha_z) \frac{v_x v_z}{\|v\|} \quad (2.12b)$$

$$D_{yz}^m = D_{zy}^m = (\alpha_z - \alpha_y) \frac{v_z v_y}{\|v\|} \quad (2.12c)$$

Finalmente, a partir das Eqs. (2.10) e (2.12), obtêm-se os termos D_{xx}^m , D_{yy}^m e D_{zz}^m correspondentes às componentes do tensor do coeficiente de dispersão mecânica nas direções

x , y , z , respectivamente $[L^2/T]$, e as componentes cruzadas, D_{xy}^m , D_{yx}^m , D_{xz}^m , D_{zx}^m , D_{yz}^m e D_{zy}^m $[L^2/T]$. E, v_x , v_y e v_z são as velocidades lineares médias ou advectivas nas direções x , y e z , respectivamente $[L/T]$.

Um caso especial pode caracterizar este tensor quando em um ponto do meio contínuo, existe um sistema de eixos x_1 , y_1 , z_1 , em relação ao qual as componentes cruzadas do tensor do coeficiente de dispersão mecânica são nulas e as demais componentes assumem valores máximos e mínimos, garantindo-se simplesmente fluxo nas direções principais do sistema. Neste caso, o fluxo de massa por dispersão mecânica, Eq.(2.4), sofre a influencia de apenas 3 componentes do tensor de dispersão mecânica localizadas na diagonal principal do sistema:

$$\begin{Bmatrix} F_x^m \\ F_y^m \\ F_z^m \end{Bmatrix} = - \begin{bmatrix} D_{xx}^m & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy}^m & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz}^m \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \frac{\partial c}{\partial x} \\ \frac{\partial c}{\partial y} \\ \frac{\partial c}{\partial z} \end{Bmatrix} \quad (2.13)$$

Outro caso especial deste tensor é obtido quando se tem fluxo unidirecional, ou seja, $v_x = v$ e $v_y = v_z = 0$. Desta forma, as Eq. (2.10) e Eq. (2.12) se reduzem a:

$$D_{xx}^m = \alpha_x \|v\| \quad (2.14a)$$

$$D_{yy}^m = \alpha_y \|v\| \quad (2.14b)$$

$$D_{zz}^m = \alpha_z \|v\| \quad (2.14c)$$

$$D_{xy}^m = D_{yx}^m = D_{yz}^m = D_{zy}^m = D_{zx}^m = D_{xz}^m = 0 \quad (2.15)$$

De forma matricial, as Eqs. (2.14a) a (2.14c) e Eq. (2.15) podem ser escritas como:

$$D_{ij}^m = \begin{bmatrix} D_{xx}^m & 0 & 0 \\ 0 & D_{yy}^m & 0 \\ 0 & 0 & D_{zz}^m \end{bmatrix} = \|v\| \begin{bmatrix} \alpha_x & 0 & 0 \\ 0 & \alpha_y & 0 \\ 0 & 0 & \alpha_z \end{bmatrix} \quad (2.16)$$

onde D_{xx}^m , D_{yy}^m e D_{zz}^m correspondem aos coeficientes de dispersão mecânica nas direções principais longitudinal (x), transversal horizontal (y) e transversal vertical (z), respectivamente.

2.2.2.3. Difusão Molecular (D^*)

A difusão molecular (D^*) é um processo em escala microscópica resultante da movimentação aleatória das moléculas do soluto no interior da fase líquida. A taxa de movimento é diretamente proporcional ao gradiente de concentração, fazendo com que a substância migre de um ponto de maior concentração a um ponto de menor concentração. Este processo independe da velocidade do fluido e, por isto, para velocidades nulas, o mecanismo de difusão molecular tende a ser o fenômeno dominante.

A teoria da difusão molecular tem por base a primeira Lei de Fick. Esta assegura que o fluxo de massa por difusão molecular, que atravessa uma seção transversal na unidade de tempo, é diretamente proporcional ao gradiente de concentração. Para um meio saturado, o fluxo de massa por difusão molecular pode ser expresso da seguinte forma (Fetter, 2008):

$$F_i^* = -n\tau D_0 \nabla_i c \quad (2.17)$$

ou

$$F_i^* = -nD^* \nabla_i c \quad (2.18)$$

onde F_i^* denota o i -ésimo componente do vetor de fluxo de massa por difusão molecular; D_0 é uma grandeza escalar com dimensão $[L^2/T]$, que representa o coeficiente de difusão molecular medido em uma solução aquosa de contaminante. No caso da Eq. (2.17), o termo τD_0 é substituído pelo coeficiente de difusão molecular efetivo denotado por D^* . Finalmente τ representa o fator de tortuosidade (Bear & Bachmat, 1990) expresso por:

$$\tau = \left(\frac{l}{l_e} \right)^2 \quad (2.19)$$

onde l denota a distância em uma escala macroscópica definida pela trajetória reta entre dois pontos de uma linha de fluxo e l_e é a distância real em uma escala microscópica, ou seja, a distância efetiva de transporte entre esses dois pontos. Quando $l_e > l$, então $\tau < 1.0$ e $D^* < D_0$. Assim, é possível concluir que o transporte de contaminantes devido à difusão molecular no meio poroso é menor que o transporte de contaminantes devido à difusão molecular livre em soluções aquosas. Os valores do fator de tortuosidade variam de $0.2 \leq \tau \leq 0.4$ para solos argilosos compactados, conforme definiu Shackelford (2000) em seus estudos.

Shackelford (1993) explica que o coeficiente de difusão molecular depende das propriedades químicas e termodinâmicas da substância e da temperatura da água. A magnitude da difusão molecular aumenta proporcionalmente com o aumento da temperatura e diminuição do tamanho das moléculas. Na temperatura ambiente, os coeficientes de difusão molecular da maioria dos produtos químicos estão na ordem de 10^{-10} m²/s, o que indica um processo de transporte muito lento.

2.3. RELAÇÃO ENTRE OS MECANISMOS FÍSICOS DE TRANSPORTE

Os mecanismos explicados anteriormente assumem diferentes níveis de relevância no transporte de contaminantes no solo. Por exemplo, a difusão molecular é um fenômeno lento e contínuo, que é desencadeado mesmo quando há apenas fluxo devido a gradientes de concentração, ou seja, mesmo que não haja fluxo hidráulico (advectivo). Assim, a velocidade advectiva determina a importância relativa de cada mecanismo de transporte que atua no sistema.

É possível avaliar a contribuição dos diferentes mecanismos de transporte. O número de Péclet (P_e) é um número adimensional que representa a efetividade do transporte por advecção em comparação ao transporte dispersivo ou difusivo (Fetter, 2008). O número de Péclet é dado por:

$$P_e = |v| \frac{l}{D^h} \quad (2.20)$$

onde D^h é o coeficiente de dispersão hidrodinâmico [L²/T] e l denota a distância em uma escala macroscópica definida pela trajetória entre dois pontos de uma linha de fluxo [L].

Segundo Bear & Cheng (2010) e Zheng & Wang (1999), a Eq. (2.20) pode ser mais bem utilizada sob o ponto de vista macroscópico, ou seja, para condições de campo. Outros autores, como Freeze & Cherry (1979) e Bear & Cheng (2010) utilizam outra expressão, que possibilita também determinar o número de Péclet para condições de laboratório:

$$P_e = |v| \frac{d_{50}}{D_0} \quad (2.21)$$

onde d_{50} denota o diâmetro efetivo médio dos grãos no caso de solos homogêneos [L] e D_0 é o coeficiente de difusão molecular medido em uma solução aquosa de contaminante.

Na Figura 2.5, apresenta-se o gráfico em que se relaciona a razão D_x^h/D_0 e o número de Péclet, com base em resultados experimentais de ensaios de coluna publicados por Perkins & Johnston (1963). Estes resultados permitem visualizar a importância relativa entre os mecanismos físicos de transporte.

Conforme a Figura 2.5, Fetter (2008) e Bear & Cheng (2010) explicam que, com velocidades de escoamento muito baixas, a razão D_x^h/D_0 tende a um valor constante de aproximadamente 0.7. Este é o valor experimentalmente determinado para o fator de tortuosidade em areias. Considerando que o termo τD_0 é equivalente ao coeficiente de difusão molecular efetivo denotado por D^* e admitindo-se a hipótese de velocidades de escoamento nulas ($D^h \approx D^*$), pode-se considerar que a razão D_x^h/D_0 é igual ao fator de tortuosidade (τ).

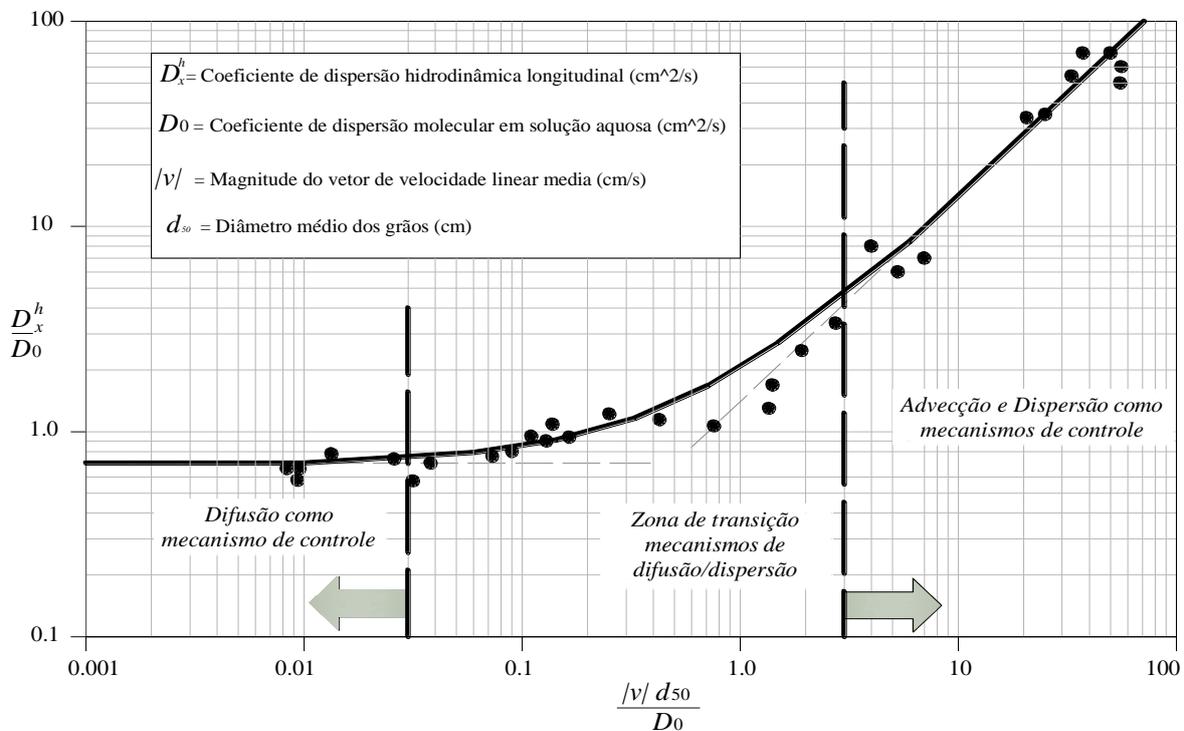


Figura 2.5. Gráfico D_x^h/D_0 versus número de Péclet, obtidos por Perkins & Johnson (1963) (Modificado de Fetter, 2008).

A Figura 2.5 pode ser dividida em zonas que definem a predominância de cada mecanismo. Na zona à esquerda, para valores baixos de Péclet entre $0 < P_e < 0.02$, a difusão molecular é o mecanismo predominante, visto que a velocidade média de fluxo é muito baixa (quase nula). Quando $0.2 < P_e < 3.0$, existe uma zona de transição onde os efeitos da difusão molecular e da dispersão mecânica são da mesma ordem de grandeza. Para valores de Péclet variando entre $3 < P_e < 10$, a dispersão mecânica é o processo dominante. Finalmente, para

valores de Péclet $P_e \gg 10$, os mecanismos de advecção e de dispersão mecânica predominam (Shackelford, 1994).

2.4. MECANISMOS DE INTERAÇÃO SOLO-CONTAMINANTE

Durante o transporte de contaminantes através do solo, ocorrem interações entre os solutos e os constituintes do solo, que resultam na atenuação ou no retardo do processo de contaminação. Estas interações incluem mecanismos físicos, químicos e biológicos. Os mecanismos de interação química dependem das características químicas dos contaminantes, como por exemplo, sua reatividade, se são orgânicos ou inorgânicos e de seus constituintes, além de depender das características do solo e do pH do sistema (Ritter *et al.*, 1995). A maior parte dos mecanismos implica em transferência de massa do soluto da fase líquida para a fase sólida e, em alguns casos, representam o contrário.

Os mecanismos de atenuação ou de retardo podem ser separados segundo Knox *et al.* (1993) em **bióticos** e **abióticos**. Os mecanismos **bióticos** são aqueles em que atuam os microorganismos existentes no solo. Estes microorganismos tomam os nutrientes dos elementos contaminantes transformando-os em compostos menos nocivos. Quase sempre a maior atividade microbiológica está associada à camada superficial dos solos, onde coexiste a matéria orgânica, originada da decomposição de plantas e de animais. Os mecanismos de atenuação **abióticos** afetam o transporte de contaminantes por meio de interações destes com a fase sólida do solo (exemplo: sorção, troca iônica) ou por meio da mudança na forma do contaminante, que, conseqüentemente, reagirá com a fase sólida (exemplo: hidrólise, reações de oxi-redução, dissolução/precipitação).

Devido à grande variedade de composição dos solos, dos resíduos e das condições físico-químicas de um local em específico, levando em vista que esses mecanismos de interação atuam normalmente de forma simultânea, a identificação exata do mecanismo atenuante é complexa. Relacionado a isto, Young *et al.* (1992) argumentam que a separação dos diferentes mecanismos envolvidos é difícil, não somente pelas limitações encontradas nas pesquisas experimentais, mas também pela carência de conhecimento com relação às interações solo-contaminantes.

Os mecanismos de interação entre solo e soluto que merecem maior atenção são os que resultam na acumulação de soluto no solo devido à transferência de massa do fluido percolante para a fase sólida, onde fica retido. A retenção de substâncias é referida

genericamente como sorção (Hasset & Banwart, 1989). Quando o contaminante está associado à fase sólida, não se sabe se este foi adsorvido à superfície do sólido, absorvido na estrutura do sólido, precipitado na superfície do sólido ou particionado na matéria orgânica (Sposito, 1989).

2.4.1. Sorção e Dessorção

A sorção ou atenuação é um termo genérico, utilizado para indicar o mecanismo pelo qual os solutos (íons, moléculas, e compostos) são distribuídos entre a fase líquida/gasosa e a superfície das partículas sólidas do solo. Segundo Young *et al.* (1992), o termo sorção é usado quando há dificuldade de discernimento entre os diferentes mecanismos de atenuação, representando então o mecanismo geral de transferência de matéria para as partículas sólidas.

Sorção é o fenômeno no qual parte da massa de uma espécie química presente num líquido (adsorbato) se acumula nos vazios ou sobre parte da matriz sólida do meio poroso (adsorvente). Comumente este fenômeno acontece na interface líquido-sólida do sistema, mas também pode ocorrer entre um sólido e a fase gasosa (Bear & Cheng, 2010).

Yong *et al.* (1992) e Berkowitz *et al.* (2008) explicam que o fenômeno de sorção é analisado como um mecanismo químico e físico. Basicamente, sorção física é um fenômeno reversível onde se observam interações intermoleculares entre o adsorbato e o adsorvente, atingindo rapidamente o equilíbrio. A sorção química é o mecanismo irreversível pelo qual ocorrem trocas de elétrons entre a parte sólida e a molécula adsorvida.

Depois de serem retidas no sólido, as espécies contaminantes podem ser liberadas na fase líquida, deslocando-se como líquidos diluídos na água ou finalmente transportados na fase gasosa do subsolo. A forma e a velocidade com que esta liberação ocorre dependem principalmente das propriedades dos contaminantes e da fase sólida. Este fenômeno é conhecido como dessorção.

A dessorção é causada principalmente pela mudança nas propriedades do líquido que envolve a fase de retenção dos sólidos. Devido a processos químicos de competição e de troca iônica entre os íons que compõem a superfície sólida do solo e aqueles que compõem a solução líquida contaminante, poderão acontecer transferência e substituição de íons em cada uma das fases. Especificamente, íons que se localizam na superfície sólida do solo, sejam por que são produto do próprio processo de decomposição ou pela percolação de um

contaminante antigo, podem ficar em liberdade posteriormente se houver a percolação de uma nova espécie contaminante.

2.4.1.1. Quantificação da Sorção

O mecanismo de sorção é estudado mediante a comparação da concentração de equilíbrio de um composto no adsorvente com a concentração de equilíbrio na solução a uma determinada temperatura. A quantificação da sorção é determinada experimentalmente pela medida da distribuição do contaminante em um meio poroso particular por meio de ensaios de equilíbrio em lote. Os resultados são plotados em um gráfico, originando expressões avaliadas em um sistema fixo de temperatura conhecido como *isoterma de sorção*.

- *Isoterma de Sorção Linear*

A isoterma linear é apropriada para casos em que o potencial de sorção aumenta com o aumento da concentração. A isoterma é dada por:

$$S = K_d c \quad (2.22)$$

Este modelo é a situação mais simples de representação de sorção. A isoterma é representada por S [M/M], que corresponde à massa de soluto sorvida pela massa de solo e é proporcional à concentração de equilíbrio da solução, denominada c [M/L³]. Neste caso, o ajuste de inclinação da reta corresponde ao coeficiente de distribuição K_d [L³/M].

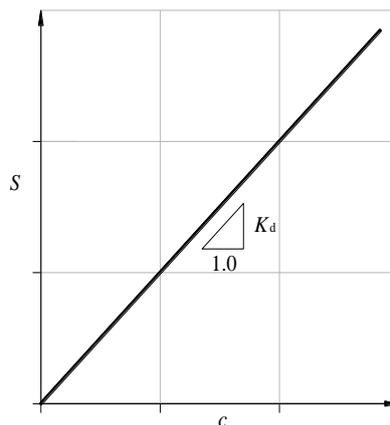


Figura 2.6. Isoterma linear (Rowe *et al.*, 1995)

De acordo com Rowe *et al.* (1995), a relação existente entre S e c é considerada uma aproximação razoável para baixas concentrações de contaminantes. Na prática, a isoterma de

sorção linear não representa de fato o comportamento das concentrações de soluto, pois estas são relativamente elevadas.

- **Isoterma Não Linear de Sorção de Freundlich**

No modelo de Freundlich a isoterma é dada por:

$$S = Kc^N \quad (2.23)$$

onde N é o coeficiente exponencial de Freundlich e K é o coeficiente de partição de Freundlich. Eles poderão ser obtidos por meio do gráfico S versus c . Em escalas logarítmicas, N é o coeficiente angular da reta obtida e $\log(K)$ é o intercepto no eixo das ordenadas (Figura 2.7(b)). Outra forma de obter os parâmetros é ajustar uma equação aos pontos da isoterma usando regressão não linear.

$$\log(S) = N \log(c) + \log(K) \quad (2.24)$$

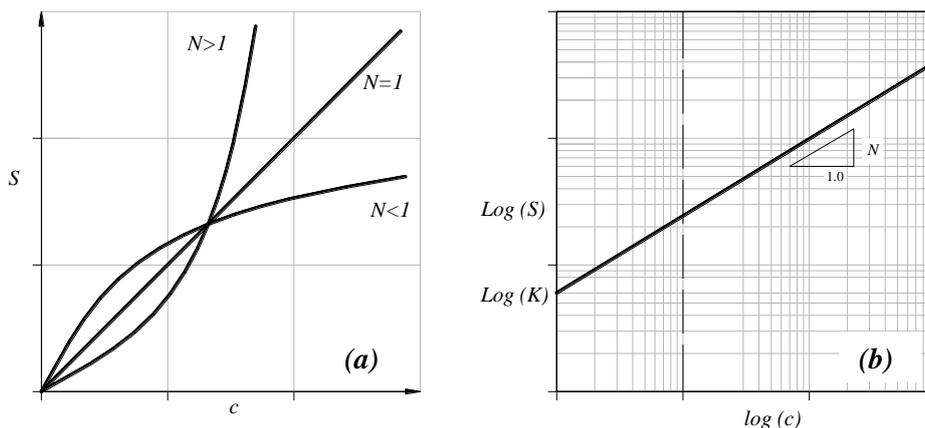


Figura 2.7. Isoterma de Freundlich: (a) Adsorção como função da concentração; (b) Representação gráfica para determinação dos parâmetros (Rowe *et al.*, 1995).

O expoente N especifica o tipo de sorção. Se $N = 1$, esta equação tende a expressão da isoterma linear. Se $N < 1$, significa que na medida em que S aumenta, torna-se mais difícil para as quantidades adicionais do adsorvato serem adsorvidas. Isto significa uma sorção desfavorável, gerando uma isoterma de forma côncava. Caso contrário, quando $N > 1$, a sorção é favorável e, neste caso, tem-se uma isoterma de sorção tipo convexa.

- **Isoterma Não Linear de Sorção de Langmuir**

A isoterma de Langmuir é dada por:

$$S = \frac{S_m bc}{1 + bc} \quad (2.25)$$

onde b denota a taxa cinética constante de saída e de entrada de constituintes nos locais de sorção [L^3/M] e S_m expressa a quantidade máxima sorvida pelo solo.

Dois procedimentos podem ser utilizados para a linearização dos dados e obtenção dos parâmetros do modelo de Langmuir (b e S_m). O primeiro tipo de linearização é feito por meio da normalização do eixo das ordenadas (c/S), como se ilustra na Figura 2.8(b). Dessa forma, a equação da reta obtida terá a seguinte forma:

$$\frac{c}{S} = \frac{1}{S_m b} + \frac{c}{S_m} \quad (2.26)$$

O intercepto da reta no eixo das ordenadas é dado por $1/(S_m b)$, e o coeficiente angular $1/S_m$.

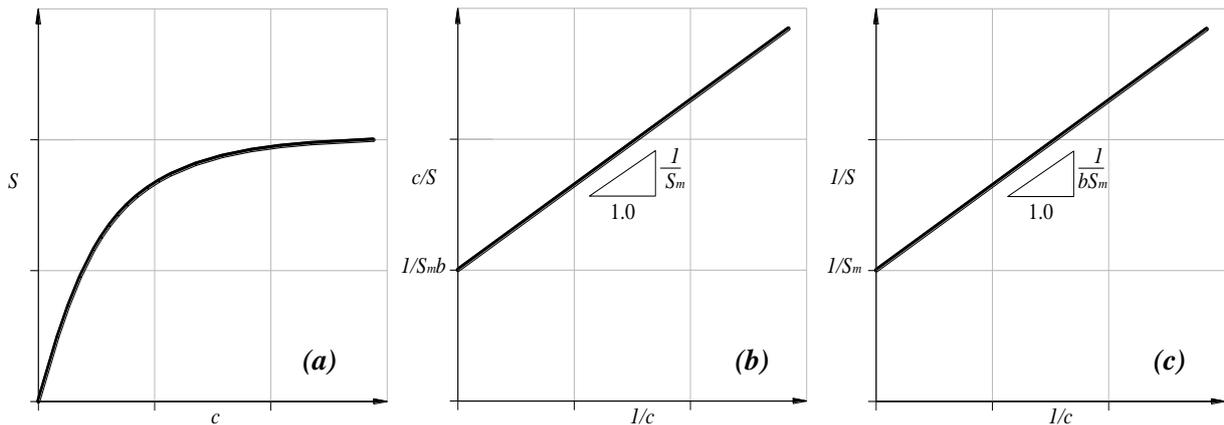


Figura 2.8. Isoterma de Langmuir: (a) sorção em função da concentração; (b) método de normalização de eixos das ordenadas; (c) método de inversão dos parâmetros.

O segundo método de linearização é feito por meio da inversão dos parâmetros S e c ($1/S$ versus $1/c$). A equação da reta resultante tem a forma:

$$\frac{1}{S} = \frac{1}{S_m b} \cdot \frac{1}{c} + \frac{1}{S_m} \quad (2.27)$$

Na Figura 2.8(c), o coeficiente angular é dado por $1/(S_m b)$ e o intercepto da reta no eixo das ordenadas por $1/S_m$.

2.4.1.2. Fator de Retardo (R)

O fator de retardo fornece informações sobre o quanto o solo retarda a chegada de uma frente de contaminação com uma determinada concentração, considerando o mecanismo de sorção linear reversível e um equilíbrio instantâneo. Freeze & Cherry (1979) definem o efeito de retardo a partir do coeficiente adimensional R .

Em termos gerais, pode-se dizer que R representa o retardo médio do centro de massa de um contaminante movendo-se a partir de uma fonte pontual enquanto ocorre a sorção (Freeze & Cherry, 1979). Em termos matemáticos, o fator de retardo pode ser calculado como o quociente entre a magnitude do vetor de velocidades lineares média de fluxo $\|v\|$ de água e a velocidade média do contaminante v_{eq} :

$$R = \frac{\|v\|}{v_{eq}} \quad (2.28)$$

Este fator adimensional representa uma medida da capacidade de atenuação de dado solo em relação a determinadas espécies químicas.

Segundo Bear & Cheng (2010), para formular o fenômeno de retardo no caso de um meio poroso saturado e utilizando uma isoterma linear de sorção (Eq.(2.22)), o fator de retardo toma a forma:

$$R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{n} \quad (2.29)$$

onde ρ_d é a massa específica seca do solo [M/L^3], K_d é o coeficiente de distribuição ou sorção [L^3/M] e n é a porosidade do solo [adimensional].

Van der Perk (2007) explica que, para solutos não reativos, o valor de R é igual à unidade e, portanto, o soluto é transportado com a mesma velocidade de percolação do solvente. Para solutos reativos, $R > 1.0$. Neste caso, os solutos são transportados a uma velocidade menor do que a do solvente, sendo esta a velocidade real do contaminante. Isto é fácil de deduzir, tendo em vista que como R depende de K_d , se não houver sorção, o valor de K_d será igual a zero e R será igual a unidade.

Shackelford (1993) cita que, para isotermas côncavas, o coeficiente de distribuição poderá ser avaliado pela formulação de secantes às isotermas não lineares. Neste caso, a inclinação em um ponto qualquer da isoterma decresce à medida que a concentração de equilíbrio

aumenta. Quando é utilizado então o método da secante passando pela origem, os valores são obtidos com o auxílio das Eqs. (2.23) e (2.25) para os modelos de Freundlich e Langmuir, respectivamente (Fetter, 2008):

$$R = 1 + \frac{\rho_d}{n} (KNc^{N-1}) \quad (2.30)$$

$$R = 1 + \frac{\rho_d}{n} \left(\frac{S_m b}{(1 + bc)^2} \right) \quad (2.31)$$

2.4.2. Condições de Degradação

Durante o transporte de contaminantes, pode ocorrer também a degradação das espécies contaminantes. O termo degradação é um termo geral, que envolve os termos de decaimento radioativo e biodegradação, os quais são explicados em detalhe a seguir.

2.4.2.1. Decaimento Radioativo

Este mecanismo é uma reação irreversível, que gera uma diminuição natural da concentração do contaminante na pluma ao longo do tempo, causando a atenuação. Entretanto, não necessariamente irá diminuir a velocidade de movimento da pluma de contaminação. Se um soluto radiativo entra no sistema solo/água, estará sujeito a um retardo na superfície do solo, entrando em decaimento radioativo, o que vai reduzindo a concentração dos contaminantes tanto na fase sólida como líquida.

Os contaminantes orgânicos e inorgânicos, em sua composição química geral, são compostos por núcleos que, na maioria dos casos, são instáveis e, portanto, radioativos. Estes núcleos emitem espontaneamente uma ou mais partículas, transformando-se em outro nuclídeo.

A equação básica usada para descrever o transporte de uma única espécie contaminante através do meio poroso foi determinada por Bear (1979), explicando que a taxa na qual ocorre um mecanismo de decaimento em uma amostra radioativa é proporcional ao número de nuclídeos radioativos presentes e pode ser representado por:

$$\Delta c = -\lambda c \Delta t \quad (2.32)$$

onde c é a concentração $[M/L^3]$ do material ainda sem decaimento, Δc é o incremento da concentração $[M/L^3]$, que decai em um intervalo de tempo Δt [T] e λ é a meia vida dos nuclídeos radioativos $[1/T]$ que, em geral, é uma constante.

A constante de decaimento λ é especificada para cada constituinte reativo (nuclídeo). No caso limite em que $\Delta t \rightarrow 0$, a Eq. (2.32) pode tomar a forma proposta por Bear (1972):

$$\frac{\partial c}{\partial t} = -\lambda c \quad (2.33)$$

2.4.2.2. Biodegradação

Também denominado de bio-transformação. De uma forma geral, é um mecanismo no qual uma espécie química do contaminante em dissolução ou sorvida na superfície das partículas sólidas é transformada em outros produtos devido às reações bioquímicas. Os novos produtos podem ser menos nocivos que o reagente original ou, em alguns casos, podem ser mais tóxicos.

2.5. MODELO MATEMÁTICO DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

Os contaminantes não reativos são aqueles que não experimentam nenhum tipo de reação com a fase sólida. Isto equivale a dizer que estes solutos não são atenuados e sofrem influência somente dos mecanismos físicos de transporte citados anteriormente. Em contrapartida, solutos reativos experimentam diversos tipos de reações com a fase sólida e, por isto, têm os movimentos atenuados pelo solo.

2.5.1. Balanço de Massa

O balanço de massa é a contabilidade das entradas, das saídas, das reações e das mudanças no armazenamento da massa sobre um volume elementar representativo, como se apresenta na Figura 2.9.

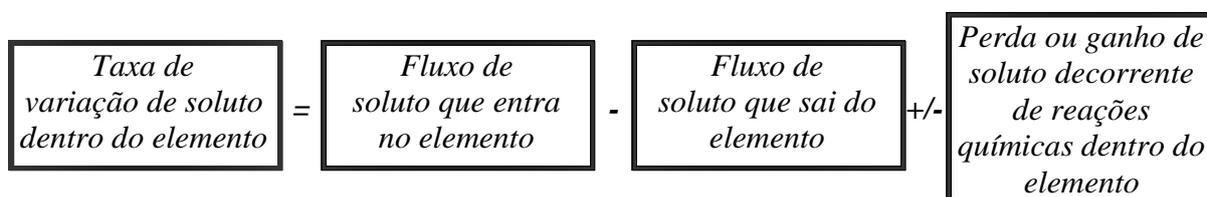


Figura 2.9. Balanço de massa do contaminante sobre um volume de controle

2.5.2. Hipóteses Fundamentais da Teoria de Transporte de Contaminantes

A equação expressa na Figura 2.9 é baseada na Lei da Conservação de Massa e nos princípios estabelecidos por Scheidegger (1961), Ogata (1970), Bear (1972) e Kinokow & Bredehoeft (1984). Estes autores apresentam uma série de hipóteses fundamentais para o

desenvolvimento das expressões matemáticas dos mecanismos acoplados de transporte de contaminantes:

1. A lei de Darcy é válida e o gradiente de carga hidráulica é o único mecanismo significativo para a geração de fluxo advectivo de água e contaminante.
2. A condutividade hidráulica e a porosidade do aquífero são constantes no tempo e a porosidade é uniforme no espaço (meio poroso homogêneo e isotrópico).
3. Não se consideram mudanças das condições do fluxo no tempo (fluxo estacionário).
4. O aquífero é homogêneo e isotrópico com respeito aos coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal.

A natureza de um problema em específico pode ser tal que todas as hipóteses anteriormente descritas sejam válidas. O grau no qual as condições de um problema em específico se distanciam destas hipóteses vai afetar a aplicabilidade e a confiabilidade de determinado modelo ao problema em particular. Se o desvio de uma hipótese em particular é significativo, as equações que controlam os mecanismos de transporte em específico terão de ser modificadas para contemplarem adequadamente os processos que ocorrem.

2.5.3. Modelo Matemático para Contaminantes Não Reativos

Seja um volume elementar representativo, como uma massa de meio poroso saturado com limites definidos consistindo em uma unidade funcional localizada em qualquer lugar no espaço, representado pela Figura 2.10.

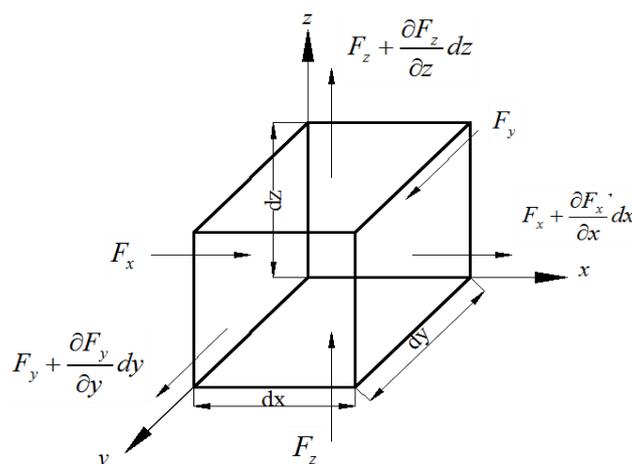


Figura 2.10. Volume elementar representativo de um meio poroso.

Da combinação dos fluxos de massa encontrados para cada um dos mecanismos citados anteriormente, surgem os princípios da modelagem geral para o transporte de contaminantes

não reativos. O fluxo total tridimensional de massa contaminante, no caso não reativo, nada mais é do que a soma dos fluxos por advecção e por dispersão hidrodinâmica (dispersão mecânica e difusão molecular), como mostram as seguintes equações:

$$F_i^{total} = F_i + F_i^m + F_i^* \quad (2.34)$$

$$F_i^{total} = v_i n c - n D_{ij}^m \nabla_j c - n D^* \nabla_i c \quad (2.35)$$

A primeira Lei de Fick, descrita no Item 2.2.2.3, não considera o fato de que o gradiente de concentração em um material diminui com o passar do tempo (estado transiente). Este fato é importante principalmente para os fenômenos de difusão, portanto se define a segunda Lei de Fick nos casos transientes, estabelecendo-se que a mudança das concentrações de um contaminante no tempo é igual à variação no fluxo da difusão local.

Utilizando o princípio da conservação da massa em um volume elementar representativo de um meio poroso e substituindo na mesma os diferentes fluxos expressos nas Eqs. (2.34) e (2.35), a taxa de intercâmbio de massa no interior do volume elementar representativo é igual à diferença entre a massa que entra e a que sai daquele volume elementar (Fetter 2008):

$$\text{div} F_i^{total} = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = -n \frac{\partial c}{\partial t} \quad (2.36)$$

Utilizando a Eq. (2.34) para encontrar os valores de fluxo de massa de contaminantes totais F_x , F_y , e F_z que atuam nas respectivas direções x , y e z , substituí-las na Eq. (2.36) e supondo que a porosidade n permanece constante no interior do volume elementar, tem-se, finalmente:

$$\frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_x^h \frac{\partial c}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y^h \frac{\partial c}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z^h \frac{\partial c}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (v_x c) - \frac{\partial}{\partial y} (v_y c) - \frac{\partial}{\partial z} (v_z c) \quad (2.37)$$

onde, t é o tempo [T]; x , y e z são as direções do sistema cartesiano adotado [L]; (x, y, z) é o ponto onde se quer analisar a concentração no tempo t [T]; D_x^h , D_y^h e D_z^h são os coeficientes de dispersão hidrodinâmica [L²/T] nas direções do fluxo x , y e z , respectivamente; $c(x, y, z, t)$ é a concentração do contaminante [M/L³]; $\partial c/\partial x$, $\partial c/\partial y$ e $\partial c/\partial z$ correspondem aos gradientes de concentração [M/L³/L] nas direções x , y e z e v_x , v_y e v_z são as velocidades lineares médias ou advectivas [L/T] nas direções x , y e z , respectivamente. Todas as velocidades são maiores que zero e constantes durante todo o processo de transporte.

Em um meio poroso homogêneo, os coeficientes de dispersão hidrodinâmica D_x^h , D_y^h e D_z^h não variam no espaço. Embora estes coeficientes sejam função da direção do fluxo, sempre em um meio poroso isotrópico e homogêneo tem-se que $D_x^h \neq D_y^h \neq D_z^h$. Para o caso advectivo, a equação de advecção em três dimensões espaciais assume que a concentração dos contaminantes é homogênea em todo o fluxo de água (Domenico & Schwarz, 1998).

Levando em conta as considerações apresentadas nas Eqs. (2.14a) até (2.14c) e (2.16), a equação de transporte advectivo-dispersivo (Eq. (2.37)), em três dimensões, de uma solução contaminante em um meio poroso homogêneo, considerando velocidade uniforme para fluxo que se desloca paralelamente ao eixo x (Fetter, 2008 e Zheng & Wang, 1999) é a seguinte:

$$\frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} \quad (2.38)$$

2.5.4. Modelo Matemático para Contaminantes Reativos

Qualquer interação química que ocorra durante o processo de migração de um contaminante num meio poroso deve ser incluída no modelo apresentado anteriormente. Considerando um contaminante reativo, com o qual ocorrem interações químicas com o meio, a Eq. (2.36) é alterada para:

$$\text{div}F_i^{total} = -n \frac{\partial c}{\partial t} \pm \sum r \quad (2.39)$$

O termo $\sum r$ indica possíveis interações químicas nas quais espécies contaminantes são removidas ou adicionadas à solução. De forma geral, este termo inclui qualquer tipo de mecanismos químicos específicos envolvidos no retardo. Definindo-se o termo $\sum r$ para o processo químico de adsorção junto ao decaimento radioativo, obtém-se (Freeze e Cherry, 1979):

$$\sum r = -\rho_d \frac{\partial S}{\partial t} - \lambda n c \quad (2.40)$$

onde $\partial S/\partial t$ seria a variação da concentração da massa de soluto adsorvida por massa de solo e substituindo a Eq. (2.40) na Eq. (2.39) e levando em conta a Eq.(2.35), tem-se, finalmente:

$$\frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \rho_d \frac{\partial S}{\partial t} - \lambda n c \quad (2.41)$$

Substituindo o caso mais simples de isoterma de adsorção linear (Eq.(2.22)) na Eq. (2.41) e reorganizando os termos, segue que:

$$\frac{\partial c}{\partial t} \left(1 + \frac{\rho_d}{n} K_d \right) = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda c \quad (2.42)$$

O procedimento anterior pode ser feito da mesma forma para cada uma das isotermas de adsorção não lineares de Freundlich e de Langmuir. No caso da isoterma linear, obtém-se o termo de retardo, R , e dividindo a Eq. (2.42) por este, obtém-se, finalmente, que:

$$\frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (2.43)$$

A Eq. (2.43) corresponde ao modelo matemático de transporte de contaminante que acopla os mecanismos físicos de dispersão hidrodinâmica no sentido longitudinal e transversal, por meio dos coeficientes de dispersão $D_x^{h'} = D_x^h / R$, $D_y^{h'} = D_y^h / R$ e $D_z^{h'} = D_z^h / R$ e que considera uma velocidade linear advectiva uniforme para um fluxo que se desloca paralelo ao eixo x igual a $v_x' = v_x / R$, sendo afetada pelos mecanismos de atenuação (retardo R) e pelas reações químicas do próprio contaminante, denotado por λ .

CAPÍTULO 3

3. METODOLOGIAS DE ANÁLISES E MATERIAIS UTILIZADOS

3.1. ASPECTOS GERAIS

É crescente a demanda atual no Brasil e no mundo por locais para a disposição dos resíduos sólidos urbanos e por zonas para a destinação final de rejeitos da mineração. Consequentemente, é crescente a busca de materiais que atendam às exigências técnicas para a construção de barreiras selantes ou *liners* como sistemas impermeabilizantes, com a finalidade de proteger o subsolo e o lençol freático contra a contaminação.

Grande parte das pesquisas realizadas no Brasil, na área do transporte de contaminantes, enfatizou o estudo dos solos lateríticos como materiais para a construção de sistemas de impermeabilização, concentrando-se na procura dos parâmetros hidrogeológicos (velocidades médias de percolação v_x , coeficiente de dispersividade α , coeficiente de retardo R) fundamentais na modelagem do processo de transporte. Estas pesquisas utilizaram metodologias e ensaios laboratoriais desenvolvidos no mundo e em alguns casos melhorados no Brasil para estes tipos de solos.

Nesta dissertação, foram reunidos e analisados resultados de ensaios laboratoriais disponíveis em diferentes trabalhos de pesquisa (dissertações e teses) brasileiros, relacionados à determinação de parâmetros hidrogeológicos e de transporte que caracterizam o fenômeno, principalmente aplicados em solos de ambiente tropicais, especificamente solos lateríticos. A escolha das pesquisas foi limitada às análises laboratoriais que considerassem a movimentação de metais pesados, comumente presentes no lixiviado dos aterros sanitários e nos rejeitos de mineração.

Neste capítulo, explicam-se de forma específica as etapas e as metodologias utilizadas, assim como os materiais utilizados para as análises dos fenômenos de transporte, compreendendo a natureza dos solos lateríticos e as substâncias contaminantes utilizadas. São

apresentados também os resultados e as análises obtidos nos trabalhos estudados para a elaboração desta dissertação.

3.2. METODOLOGIA DE ANÁLISE

A metodologia para a análise do problema de transporte de contaminantes em múltiplas dimensões através de um solo tropical laterítico foi estruturada em duas etapas.

Na primeira etapa, realizou-se uma revisão bibliográfica, considerando o cadastramento de trabalhos de pesquisa, realizados principalmente no Brasil, focados na obtenção de parâmetros do fenômeno de transporte de contaminantes por meio de resultados experimentais aplicados em solos tropicais lateríticos. Ainda nesta etapa inicial, realizou-se a conceitualização do modelo de transporte, considerando os processos que interferem no problema. A primeira etapa foi finalizada com o estudo e com o desenvolvimento de ferramentas computacionais por meio da utilização de diferentes linguagens de programação.

A segunda etapa contempla os processos de simulação, isto é, a aplicação das diferentes soluções existentes em uma, duas e três dimensões utilizando metodologias analíticas e numéricas, com utilização das ferramentas computacionais desenvolvidas na etapa inicial. Isto tem como finalidade a obtenção de uma resposta quanto à movimentação do contaminante em um meio poroso de ambiente tropical em função da concentração relativa (c/c_0) dos contaminantes analisados, vistos em escalas de tempo e de espaço.

Uma etapa intermediária do processo foi a verificação e a calibração dos modelos, que serviu de ponte entre a primeira e a segunda etapas das análises. A Figura 3.1 apresenta o fluxograma com a metodologia de análise para o desenvolvimento desta pesquisa. Em seguida, são explicados, de forma detalhada, cada um dos passos que compõem as etapas e as atividades descritas no fluxograma.

3.2.1. Cadastro de Dados Experimentais

De acordo com a primeira etapa do fluxograma da Figura 3.1, foram selecionados dois trabalhos de pesquisa desenvolvidos pelo *Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Universidade Federal de Viçosa*: Carvalho (2001), que estudou solos lateríticos no estado *in-situ* e Nascentes (2003), que utilizou um solo de natureza e de origem similares, porém em estado compactado. A escolha destas pesquisas foi fundamentada nos seguintes critérios:

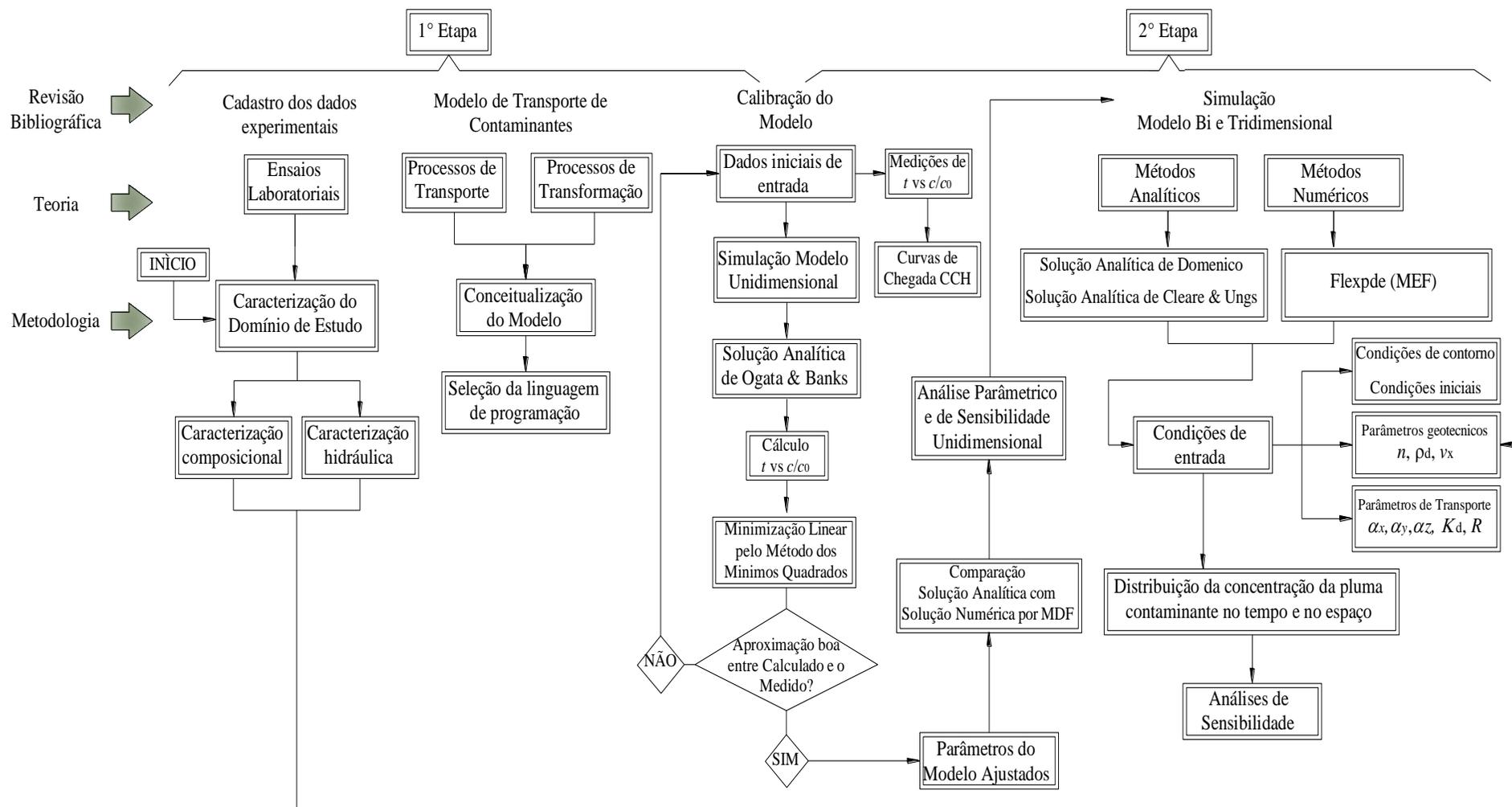


Figura 3.1. Fluxograma com metodologia de análise para o transporte de contaminantes em múltiplas dimensões

- **Tipo de solo:** Nos trabalhos selecionados, foram estudados dois solos lateríticos de uma mesma região. O solo de Nascentes (2003) corresponde a um solo argiloso extraído do aterro sanitário do município de Visconde do Rio Branco-MG. O solo de Carvalho (2001) corresponde a um solo argiloso extraído de um antigo depósito de lixo no Município de Viçosa, localizado na Zona da Mata de Minas Gerais. Os dois locais estão separados por uma distância entre 20 a 25 km aproximadamente.
- **Tipo de solução contaminante:** Os solos escolhidos foram analisados com soluções contaminantes compostas por metais pesados. Nas duas pesquisas, foram utilizados componentes típicos de lixiviados de aterros sanitários. De forma geral, no caso de Nascentes (2003 e 2006), foram utilizados simultaneamente íons de Zinco (Zn^{2+}), Cádmio (Cd^{2+}), Manganês (Mn^{2+}), Cobre (Cu^{2+}), Chumbo (Pb^{2+}) e Cromo (Cr^{3+}). Carvalho (2001) utilizou Zinco (Zn^{2+}), Cádmio (Cd^{2+}), Cobre (Cu^{2+}) e Chumbo (Pb^{2+}).
- **Tipo e quantidade de ensaios realizados:** Foram realizados, principalmente, ensaios de coluna. A partir destes ensaios foram obtidos os parâmetros dispersivos e sorcivos (coeficiente de dispersividade α e coeficiente de retardo R) do solo.
- **Qualidade dos dados experimentais:** As pesquisas geraram uma quantidade representativa de dados, respaldados por medições repetidas em amostras de solo que conservaram as mesmas condições durante a realização do ensaio.

As principais informações fornecidas por estas pesquisas foram a caracterização dos solos utilizados e os resultados dos ensaios de coluna, apresentadas em forma de curvas de chegada, comparando o volume de poros (V_p) definido como o volume de fluido necessário para ocupar o espaço de vazios em um solo e a concentração relativa (c/c_0).

3.2.2. Modelo de Transporte de Contaminantes

O propósito de um modelo que simula o transporte de contaminantes em águas subterrâneas é calcular a concentração de uma espécie química dissolvida em um aquífero em qualquer momento e lugar especificado. O embasamento teórico para a equação que descreve o transporte de solutos tem sido muito bem documentado na literatura (Bear & Cheng, 2010; Domenico & Schwartz, 1998) e foi apresentado detalhadamente no Capítulo 2 deste trabalho.

3.2.2.1. Conceitualização do Modelo de Transporte

Reilly *et al.* (1987) proporcionaram um marco conceitual para as análises e a modelagem de processos físicos e de interação de transporte de contaminantes em águas subterrâneas. As

mudanças na concentração do produto químico ocorrem em um sistema dinâmico devido principalmente a três processos distintos:

- Transporte de massa devido ao *mecanismo advectivo*, no qual a massa contaminante se desloca com a mesma velocidade e na mesma direção que as águas subterrâneas.
- Transporte de massa devido ao *mecanismo de dispersão hidrodinâmica*, no qual as variações de velocidade na micro e macro escala da estrutura do meio poroso fazem com que o contaminante se propague e se espalhe mais do que a frente advectiva.
- *Mecanismos de interação solo-contaminante*, em que certa quantidade de espécies químicas dissolvidas é inserida ou retirada da água subterrânea ou do meio poroso como resultado dos processos químicos e biológicos.

3.2.2.2. Seleção dos Softwares e Linguagem de Programação

A linguagem de programação escolhida foi o Visual Basic® com aplicação no Microsoft Excel®. Nesta linguagem, foram programadas todas as soluções analíticas e a programação da solução numérica unidimensional pelo método das diferenças finitas (MDF). Os códigos de programação permitiram encontrar uma matriz das concentrações relativas (c/c_0) para um determinado tempo em um determinado intervalo de espaço e finalmente obter uma resposta gráfica da pluma de avanço da massa contaminante estudada.

As soluções numéricas bi e tridimensionais foram avaliadas a partir de “scripts” codificados na linguagem do programa de elementos finitos FlexPDE ®. Este se trata de um "*scripted finite element model builder and numerical solver*", ou seja, o software FlexPDE ® produz a formulação do problema em termos de elementos finitos a partir da equação diferencial, gera a malha (auto-adaptativa), resolve o problema (para as condições de contorno especificadas) e apresenta os resultados graficamente (pós-processamento) (FlexPDE ®, 2005).

3.2.3. Calibração do Modelo de Transporte

Este processo consiste na alteração dos valores dos parâmetros de transporte do modelo, tentando reproduzir as condições encontradas nos ensaios experimentais, dentro de limites de aceitabilidade. É necessária uma adequada caracterização do domínio, principalmente no que se refere à determinação dos índices físicos do material (porosidade (n), peso específico seco do solo (ρ_d), o grau de saturação (S_r)) e a caracterização hidráulica do mesmo (condutividade hidráulica do solo (k) e velocidades médias de percolação (v)). A falta de uma caracterização

adequada do material pode resultar em um modelo que está calibrado para um conjunto de condições que não são representativas das condições reais do mesmo.

O processo de calibração foi necessário para reduzir o intervalo de variabilidade nos dados iniciais do modelo e obter, finalmente, o que na Figura 3.1 se define como parâmetros do modelo ajustado. Estes parâmetros são principalmente o coeficiente de distribuição (K_d), que proporciona o coeficiente de retardo (R) e o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x).

3.2.3.1. Minimização Linear por Mínimos Quadrados

Bear & Cheng (2010) recomendam utilizar um procedimento de solução inversa com o qual se obtém a solução ótima, reduzindo ao mínimo a soma dos quadrados dos erros entre as concentrações relativas medidas e as calculadas teoricamente. Esta solução inversa é conhecida como *Minimização Linear por Mínimos Quadrados* e a formulação é dada por:

$$E = \sum_{i=1}^n \left[(c/c_0)_m - (c/c_0)_c \right]^2 \quad (3.1)$$

onde E representa o erro acumulado, igual à soma dos quadrados das diferenças entre a concentração relativa calculada $(c/c_0)_c$ e a concentração relativa medida $(c/c_0)_m$ para n medições.

Para aplicar esta metodologia, é necessário um conjunto de pares ordenados, que neste caso serão compostos pela concentração relativa calculada $(c/c_0)_c$ e a concentração relativa medida a partir de medições nos ensaios de coluna $(c/c_0)_m$. Estes pontos podem ser plotados no plano x - y onde $(c/c_0)_c$ assume o valor das abscissas e $(c/c_0)_m$ o valor das ordenadas.

É necessário supor que este conjunto de pontos possa ser representado de forma aproximada por uma linha reta, com certo grau de dispersão causado pelos diversos erros do experimento. Finalmente, o objetivo será encontrar a linha reta que apresente o melhor ajuste aos dados experimentais. Neste caso, o critério para conseguir esse melhor ajuste é, que a soma (ponderada) dos quadrados da diferença entre os dados experimentais e os calculados seja minimizada em função dos parâmetros α e K_d . O uso do quadrado das diferenças como medida do erro evita a situação que valores positivos e negativos sejam cancelados entre si.

O processo de calibração foi executado a partir da solução analítica unidimensional proposta por Ogata & Banks (1961). Esta última equação será explicada detalhadamente no Capítulo 4 deste trabalho.

3.2.3.2. Comparação entre Soluções Analíticas e Numéricas

Uma vez obtidos os parâmetros ajustados mediante o processo de calibração, as soluções analíticas obtidas com Ogata & Banks (1961) para o caso unidimensional foram comparadas com as soluções numéricas programadas utilizando o método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF).

Os procedimentos de comparação serviram para suporte à verificação da eficácia dos diferentes métodos de solução, validando-os com as previsões esperadas sobre o comportamento físico-químico do processo. Estes resultados são apresentados no Capítulo 6. Os procedimentos de comparação também foram aplicados durante toda a pesquisa para verificar o funcionamento dos códigos de programação elaborados para as diferentes soluções analíticas multidimensionais.

3.2.4. Análise Paramétrica e de Sensibilidade para Soluções Unidimensionais

Mandle (2002) define uma análise paramétrica e de sensibilidade como um processo de alteração dos parâmetros do modelo de entrada em um intervalo razoável, igual ao intervalo de incerteza nos valores dos parâmetros do modelo, e a observação das mudanças relativas na resposta deste. O objetivo de uma análise deste tipo é mostrar a sensibilidade das simulações à incerteza nos valores dos dados de entrada.

Um dos principais objetivos é observar como cada parâmetro altera a solução e estabelecer o controle de cada parâmetro sobre o comportamento do fenômeno. Outro objetivo, em longo prazo, poderá ser a determinação e a direção de futuras atividades na medição e no cadastro dos dados. Esse tipo de informação que é relativamente sensível para o modelo exigirá maior caracterização e cuidado que dados para o qual o modelo é relativamente insensível.

A análise de sensibilidade no caso unidimensional foi feita mudando inicialmente os parâmetros na solução analítica de Ogata & Banks (1961), o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) e o coeficiente de distribuição (K_d). Da mesma forma, foram feitas alterações nas propriedades de entrada que afetam diretamente o modelo, tais como a velocidade linear média (v_x), a porosidade (n) e a massa específica seca (ρ_d).

3.2.4.1. Análise Paramétrica

Para observar as mudanças relativas no modelo, devido às variações nos parâmetros, foram definidos para esta pesquisa dois critérios, determinados no gráfico de tempo (t) versus concentração relativa c/c_0 :

- A **inclinação do trecho de contaminação** (m_e): fisicamente indica que o processo de contaminação é rápido na medida em que alguns dos parâmetros que afetam o fenômeno são alterados. Determina-se traçando uma linha tangente sobre o ponto onde a concentração relativa é 0.5 ($c/c_0=0.5$) (Figura 3.2).
- O **tempo de estabilização** (t_e): fisicamente indica o ponto onde se inicia o processo de estabilização do fenômeno contaminante. Este ponto se determina pela interseção entre as retas A-A e B-B (Figura 3.2), sendo que a primeira corresponde à reta do trecho de contaminação e a segunda é a reta que indica a máxima concentração relativa ($c/c_0=1.0$), quando o processo de contaminação se dá por estabilizado.

Em alguns trabalhos é explicado que o coeficiente de dispersão hidrodinâmica e o coeficiente de retardo podem ser determinados se a tangente à curva experimental, c/c_0 vs. T , no ponto $c/c_0=0.5$, é conhecida, onde o parâmetro T é um parâmetro adimensional que corresponde à relação entre o volume de efluente coletado (V_{ef}) e o volume de poros (V_p) da amostra e equivale ao número de volume de poros (Nascentes, 2003). A definição apresentada anteriormente não será aplicada neste trabalho, as razões serão discutidas no Capítulo 4 desta dissertação.

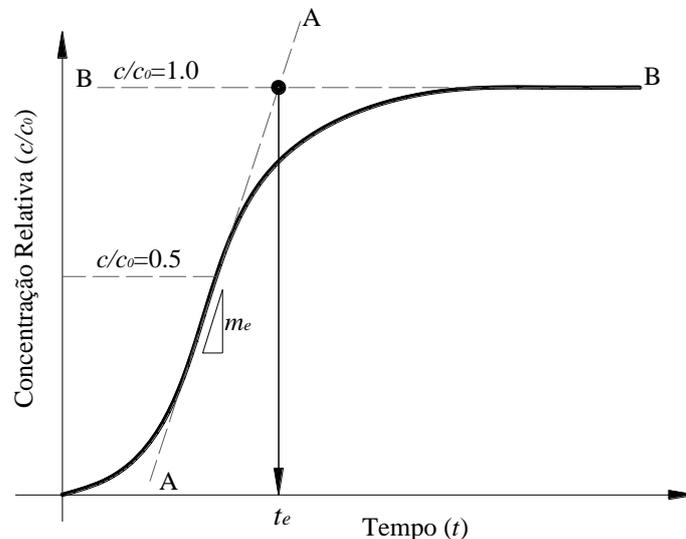


Figura 3.2. Curva de tempo(t) versus concentração relativa (c/c_0). Determinação dos critérios gráficos de tempo de estabilização (t_e) e inclinação do trecho de contaminação (m_e).

3.2.4.2. Análise de Sensibilidade

Com o objetivo de identificar quantitativamente a importância de cada parâmetro na solução analítica de transporte unidimensional de Ogata & Banks (1961), foi executado o método de primeira ordem e segundo momento (FOSM).

Basicamente, com o método FOSM se determina a variância de uma função, neste caso, a variância da concentração do contaminante que é função do tempo. O cálculo consiste na obtenção das parcelas de variância da concentração causadas por cada um dos parâmetros envolvidos na solução analítica do problema de transporte unidimensional. A avaliação destas parcelas estabelece a importância relativa de cada um dos parâmetros. Matematicamente, a variância pode ser expressa pela seguinte equação:

$$V[C_r] = \sum_i \left(\frac{\partial C_r}{\partial X_i} \right)^2 V[X_i] \quad (3.2)$$

onde C_r neste caso denota a concentração relativa (c/c_0), aqui representando a variável dependente, e X_i representa o conjunto de variáveis independentes ($\alpha_x, K_d, n, \rho_d, v_x$), $V[C_r]$ é a variância da concentração relativa, cuja variação estará caracterizada por ser função do tempo, ou seja, a variação da função de concentração relativa num determinado tempo quando ocorre uma variação em cada uma das variáveis independentes ∂X_i , que afetam o processo de transporte na solução analítica e, finalmente, $V[X_i]$ é a variância de cada uma das variáveis independentes.

Na Eq.(3.2), a resposta final da concentração é em função do tempo, por tanto, a análise da variância da função concentração relativa $V[C_r]$ será dada em função do tempo também. Foram escolhidos oito tempos aleatórios da curva de concentração relativa, e foram observadas as mudanças deste valor na medida em que foram feitas as variações nos parâmetros.

A variação realizada nos parâmetros de transporte deverá estar compreendida entre um valor do desvio padrão do parâmetro à esquerda ou a direita da média. A forma da variação dos parâmetros deverá ser realizada fazendo com que todas as variáveis sofram variações em um dos sentidos em relação à média, caso contrário, poderão existir efeitos de compensação.

Como a função de Ogata & Banks (1961) é altamente não linear, foram escolhidas pequenas variações nos parâmetros de forma que as alterações na geometria da curva fossem mínimas. A quantidade escolhida foi de +1% do valor de cada parâmetro. Ou seja, todos os parâmetros foram acrescidos de 1% à direita do valor médio e analisados de forma independente.

A análise de sensibilidade, pelo método de FOSM, foi feita para dois materiais. O primeiro, o solo laterítico *in-situ* à 3.0 m e, o outro material, o solo laterítico compactado. As curvas de chegada escolhidas serão as mesmas que as analisadas na análise paramétrica, isto é, chumbo (Pb^{2+}) para o solo *in-situ* e cádmio (Cd^{2+}) para o solo compactado.

3.2.5. Processos de Simulação

Uma vez que os parâmetros do modelo foram ajustados pelo processo de calibração, foi iniciada a parte de simulação bi e tridimensional do fenômeno de transporte, aplicando diferentes soluções analíticas e numéricas. Nestas simulações, são necessários os parâmetros de transporte, tais como o coeficiente de dispersividade transversal horizontal (α_y) e o coeficiente de dispersividade transversal vertical (α_z) que atuam nas direções y e z , respectivamente. Gelhar (1992) estabelece que valores de α_y e α_z se apresentam tipicamente entre uma e duas ordens de magnitude respectivamente, menores que o coeficiente de dispersividade longitudinal α_x . Desta forma, estes coeficientes foram fixados como:

$$\alpha_y = 0.1\alpha_x \quad (3.3)$$

$$\alpha_z = 0.01\alpha_x \quad (3.4)$$

As soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas serão as propostas por Domenico (1987) e Cleary & Unga (1978), ambas desenvolvidas para condições de contorno que consideram um aquífero e uma fonte de largura e altura finitas.

O estudo e a comparação destas duas soluções analíticas tem por base o fato descrito por West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) de que a solução de Domenico (1987) seria válida apenas quando o valor da dispersividade longitudinal é muito baixo (perto de valores nulos). Com valores de dispersividade longitudinal diferente de zero, a solução de Domenico (1987) produz uma quantidade finita de erros, situação que não se observa na solução analítica proposta por Cleary & Unga (1978).

Assim será possível analisar o comportamento das duas soluções nos espaços bi e tridimensionais, quando são inseridos nelas os parâmetros de transporte obtidos a partir de dados experimentais em solos de ambientes tropicais, especificamente solos lateríticos, sendo esses calibrados a partir de modelos unidimensionais.

Como resultado, será obtida a pluma de contaminação no tempo e no espaço. Estes resultados poderão ser comparados com as soluções numéricas de forma a se verificar a eficácia dos diferentes métodos de solução.

Da mesma forma que foi feito no Item 3.2.4, serão realizadas análises paramétricas considerando alterações nos parâmetros dispersivos, no parâmetro sorcivo e na velocidade linear média de fluxo. Com isto, será possível verificar para que valores de cada um dos parâmetros se observam divergências entre a solução de Domenico (1987) e a solução de Cleary & Ungs (1978). Além disso, será possível ratificar qual é o parâmetro que mais modifica o comportamento do processo de transporte.

3.3. MATERIAIS UTILIZADOS

3.3.1. Natureza do Solo Laterítico

As argilas lateríticas são materiais disponíveis e com propriedades geotécnicas bem conhecidas no meio geotécnico nacional quando relativas à construção de barragens e aterros. O projeto de impermeabilização de locais de disposição de resíduos pode ser concebido visando a atender a imposições de normas vigentes ou a critérios de desempenho. Um desses critérios fundamentais é a limitação temporal e espacial de concentrações de contaminantes, sendo preciso acumular conhecimentos sobre parâmetros geomecânicos e químicos dos solos lateríticos (Bosco *et al.*, 1999).

Nas duas pesquisas escolhidas, foram realizados ensaios de caracterização. Foram determinados a partir dos ensaios de caracterização do solo a distribuição do tamanho de suas partículas, os limites de consistência (limite de liquidez e limite de plasticidade), a massa específica em condições naturais e secas, o teor de água por meio da saturação dos corpos de prova e, finalmente, as propriedades de porosidade (n) e o índice de vazios (e). Para os dois trabalhos, foram determinadas também as características hidráulicas dos materiais.

3.3.1.1. Caracterização dos Solos Lateríticos

Carvalho (2001) utilizou dois blocos de amostras inalteradas de solo (*in-situ*). Um bloco foi retirado a 3.0 m e outro a 7.0 m de profundidade, medidos a partir da superfície do terreno até o centro de gravidade da amostra, denominados “Argila 3.0 m” e “Argila 7.0m”.

Nascentes (2003) utilizou um latossolo vermelho amarelo. Diferentemente de Carvalho (2001), o solo coletado foi compactado até atingir um peso específico de 15.63 kN/m^3 , correspondente a 95% do grau de compactação do Proctor Normal.

Desta forma, nesta pesquisa, será adotado como solo *in-situ* a aquele que faz referência ao material utilizado por Carvalho (2001) e como solo compactado aquele que faz referência ao material utilizado por Nascentes (2003). Os resultados dos ensaios laboratoriais de caracterização dos solos estudados são apresentados nas Tabelas 3.1 e 3.2 e na Figura 3.3 apresenta-se a representação gráfica da distribuição dos tamanhos das partículas dos solos.

Nas Tabelas 3.1 e 3.2, observa-se que os solos utilizados nas duas pesquisas apresentam teor de partículas de tamanho argila variando entre 40 e 55%, com média em torno de 45%; no caso do teor de silte, não se observam variações significativas (10 a 15%) e, finalmente, o teor de partículas de areia varia entre 36 a 48%.

Estes resultados indicam que os três materiais apresentam distribuição de partículas com comportamento bimodal, já que as maiores frequências das partículas se concentram nos teores mais finos e mais grossos. O material retido entre os tamanhos de 0.01 mm e 0.1 mm é insignificante em relação ao material retido nos extremos da curva granulométrica.

Tabela 3.1. Caracterização dos solos estudados. Granulometria e limites de consistência.

TRABALHO	CONDIÇÃO	PROF. (m)	USCS	GRANULOMETRIA			LIMITES DE CONSISTÊNCIA		
				ARGILA (%)	SILTE (%)	AREIA (%)	LL	LP	IP
CARVALHO 2001	Solo <i>In-situ</i>	3.0	CH	54	10	36	65.80	31.50	34.30
		7.0	CH	44	15	32	64.00	29.94	34.06
NASCENTES 2003	Solo Compactado	-	MH-CH	42	10	48	52.00	30.00	22.00

Tabela 3.2. Caracterização dos solos estudados. Índices físicos.

TRABALHO	CONDIÇÃO	PROF. (m)	ρ_s (Kg/m ³)	ρ_d (Kg/m ³)	n	ρ_{dmax} (Kg/m ³)	w_{op} (%)	e	S_r (%)
CARVALHO 2001	Solo <i>In-situ</i>	3.0	2710	1153	0.58	-	-	1.40	50.0
		7.0	2700	1570	0.42	-	-	0.72	75.5
NASCENTES 2003	Solo Compactado	-	2700	1560	0.43	1640*	22.3	0.73	83.2
					0.39*			0.69*	

* Propriedades após do processo de compactação

Os limites de consistência dos três solos apresentaram variações pequenas: os limites de liquidez (LL) dos três solos oscilam entre 52 e 65%, os limites de plasticidade (LP) apresentaram variações menores entre 30 a 32% e, finalmente, os índices de plasticidade oscilam entre 22 e 34%. Os limites de liquidez e de plasticidade localizam estes solos próximos à linha “A” da carta de plasticidade de Casagrande, como se observa na Figura 3.4. Segundo a classificação unificada dos solos (USCS), estes materiais podem ser classificados como argilas de alta compressibilidade (CH) ou siltes de alta plasticidade (MH).

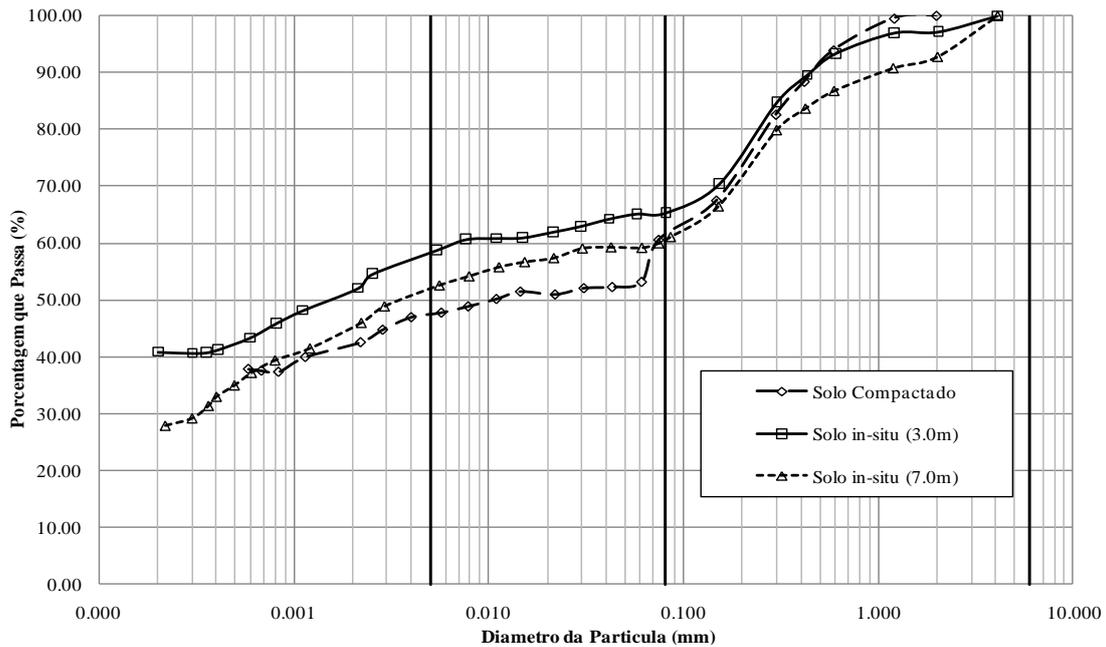


Figura 3.3. Distribuição do tamanho das partículas dos solos estudados.

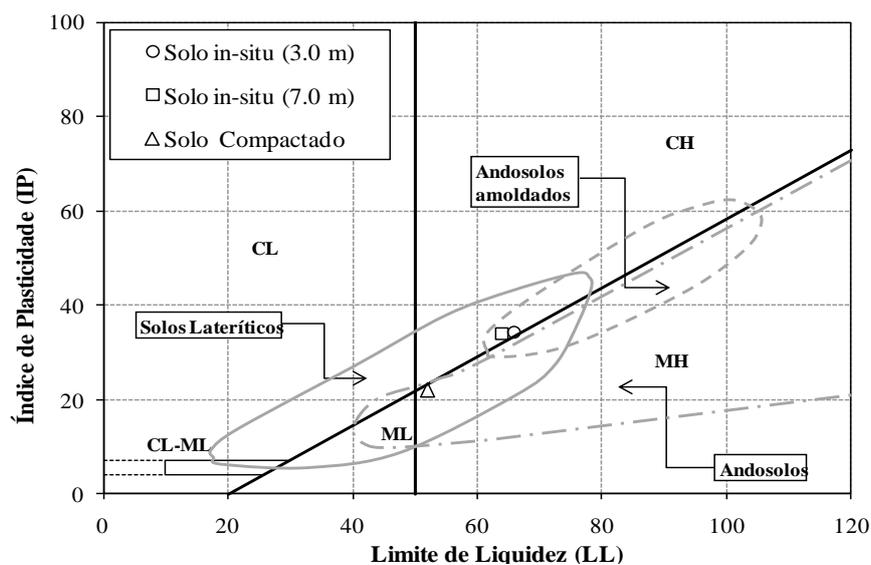


Figura 3.4. Carta de plasticidade de Casagrande com os materiais utilizados em Carvalho (2001) e Nascentes (2003) (Modificado de Mitchell & Sitar, 1982).

O solo laterítico, de forma geral, é um solo residual, caracterizado por ter um alto grau de intemperismo e por ser rico em minerais de argila e em sesquióxidos. Este solo compõe a camada superficial denominada de horizonte laterítico. São comumente denominados solos tropicais aqueles que ocorrem entre os trópicos, isto é, entre os paralelos 30° N e 30° S de latitude, e apresentam propriedades de engenharia particulares diferentes daquelas características dos solos de regiões temperadas (Camapum de Carvalho *et al.*, 2006).

Gidigasú (1974) e Mitchell & Sitar (1982) dão um indício a partir dos ensaios de classificação e de caracterização para classificarem um solo tropical como laterítico. Gidigasú (1974) explica que os solos lateríticos apresentam limites de consistência cujos valores se encontram localizados próximos à linha “A” da carta de plasticidade de Casagrande variando entre as faixas de alta e baixa plasticidade. Mitchell & Sitar (1981) indicam que o limite de liquidez (LL) dos solos lateríticos se encontra próximo a 60% e os índices de plasticidade são menores ou próximos de 30%, classificando-se como materiais de baixa a média plasticidade. Finalmente, os solos selecionados para esta pesquisa, podem ser classificados como solos tropicais lateríticos.

3.3.1.2. Caracterização Hidráulica dos Solos Lateríticos

Dentro da caracterização hidráulica, foi determinado o parâmetro de condutividade hidráulica (k) dos materiais utilizados, considerando a passagem de água deionizada tanto nas amostras de solo laterítico *in-situ* como no estado compactado.

Para cada ensaio, foram obtidas também as velocidades médias de percolação (v) com água deionizada, fundamentais para a análise de transporte. Os resultados dos ensaios são apresentados na Tabela 3.3, com os valores médios utilizados nesta pesquisa.

Tabela 3.3. Parâmetros hidráulicos medidos por cada um dos autores.

TRABALHO	CONDIÇÃO	PROF. (m)	k (m/d)	v (m/d)
CARVALHO 2001	Solo	3.0	8.05E-01	4.4929
	<i>In-situ</i>	7.0	2.32E-01	0.4147
NASCENTES 2003	Solo Compactado	-	2.34E-04	0.2066

3.3.1. Natureza dos Contaminantes Inorgânicos

Os contaminantes inorgânicos são gerados pela lixiviação de substâncias resultantes de processos e atividades industriais e de mineração. Este tipo de contaminantes é constituído principalmente por metais pesados. Sperling (2005) enumera como metais pesados os seguintes elementos: Ag, As, Cd, Co, Cr, Cu, Hg, Ni, Pb, Sb, Se e Zn. Estes elementos são encontrados naturalmente nos solos em concentrações variáveis, porém, são inferiores àquelas consideradas tóxicas para diferentes organismos vivos. Dentre eles As^{2+} , Cd^{2+} , Cr^{3+} , Cu^{2+} e Zn^{2+} são essenciais aos organismos em certas quantidades.

Segundo Qasim & Chiang (1994), das diferentes espécies de metais pesados encontrados em vertedores de lixiviação, os íons de Cu^{2+} , Zn^{2+} , Cd^{2+} e Pb^{2+} são classificados como os contaminantes prioritários pela *Environmental Protection Agency* (EPA) e são os metais mais comumente detectados no deflúvio das águas de chuvas.

3.3.1.1. Concentrações das Soluções Contaminantes

As duas pesquisas adotadas como referência neste trabalho, foram centradas na análise dos parâmetros de transporte de íons de metais pesados enumerados por Qasim & Chiang (1994). Cada uma das pesquisas adotou um contaminante sintético seguindo a metodologia descrita a seguir.

Carvalho (2001) adotou uma solução contaminante contendo íons de cádmio (Cd^{2+}), zinco (Zn^{2+}), cobre (Cu^{2+}) e chumbo (Pb^{2+}). O “coquetel” foi preparado utilizando nitratos destes elementos químicos, dissolvidos em água deionizada. As concentrações dos íons contaminantes que compõem a solução de Carvalho (2001) são apresentadas na Tabela 3.4.

Tabela 3.4. Concentrações dos íons de metais pesados utilizadas na solução contaminante de Carvalho (2001).

ÍON CONTAMINANTE	SÍMBOLO	CONCENTRAÇÃO (mg/l)
Cádmio	Cd^{2+}	20
Chumbo	Pb^{2+}	300
Cobre	Cu^{2+}	200
Zinco	Zn^{2+}	700

Nascentes (2003) realizou os estudos utilizando uma solução sintética composta por seis metais pesados. Estes foram encontrados em amostras de percolado coletadas no atual lixão do Município de Visconde de Rio Branco. A solução foi preparada a partir de nitratos de Zn^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} , Cr^{3+} e Mn^{2+} . As concentrações dos íons contaminantes que compõem a solução de Nascentes (2003) são apresentadas na Tabela 3.5.

Tabela 3.5. Concentrações dos íons de metais pesados utilizadas na solução contaminante de Nascentes (2003)

ÍON CONTAMINANTE	SÍMBOLO	CONCENTRAÇÃO (mg/l)
Crômio	Cr^{3+}	0.7
Cádmio	Cd^{2+}	1.6
Chumbo	Pb^{2+}	1.6
Cobre	Cu^{2+}	5
Manganês	Mn^{2+}	36
Zinco	Zn^{2+}	62

3.3.2. Procedimentos e Resultados dos Trabalhos Selecionados

Cada uma das pesquisas consultadas, das quais foram utilizados os resultados dos ensaios experimentais, especialmente os ensaios de transporte de contaminantes para a obtenção dos parâmetros do fenômeno, estes adotaram metodologias específicas de acordo com os objetivos para os quais os trabalhos foram projetados. Em seguida, são apresentadas essas metodologias de forma sucinta, explicando as condições, o número de amostras utilizadas e os resultados e as análises dos dados experimentais obtidos.

3.3.2.1. Procedimento, Resultados e Análises nos Solos Lateríticos *in-situ* (Carvalho, 2001)

Com o objetivo de determinar os fatores de retardo e os coeficientes de dispersão-difusão dos metais Zn^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} e Pb^{2+} , Carvalho (2001) utilizou corpos de provas indeformados de dois solos denominados pelo autor como “Argila 3.0 m” e “Argila 7.0 m”. A metodologia utilizada para o desenvolvimento destes ensaios foi apresentada por Matos (1995).

Inicialmente, foram moldados seis corpos de prova (A1 até A6), sendo três corpos de prova com o material de solo da cota de 3.0 m (A1, A2 e A3) e três corpos de prova com o material

de solo da cota de 7.0 m (A4, A5, A6). Os corpos de prova tinham 0.1 m de altura e 0.52 m de diâmetro.

A solução contaminante aplicada nas colunas consistiu em um “coquetel” composto pelos metais apresentados na Tabela 3.4. Os efluentes, resultantes da percolação do contaminante através do solo, foram coletados em frascos esterilizados. Após a coleta de 25 mL de solução efluente, as soluções foram levadas para análise para determinação das concentrações de Cd^{2+} , Zn^{2+} , Cu^{2+} e Pb^{2+} . Os valores das concentrações médias dos frascos foram relacionados ao do volume total de efluente drenado até então.

De posse dos dados de concentração relativa (c/c_0), correspondente ao volume de poros de cada amostra, foram traçadas as curvas de chegada (denominadas para efeito deste trabalho como CCH) de cada metal em cada amostra de solo ensaiada. Nas curvas de chegada do Zn^{+2} , Cd^{+2} , Cu^{+2} e Pb^{+2} , foram obtidos os valores do fator de retardo (R), como sendo o volume de poros para $c/c_0=0,5$ e o coeficiente de dispersão-difusão (D^h), como sendo a inclinação da curva no ponto $c/c_0=0,5$ (Matos, 1995).

As curvas de chegada para cada material e cada íon são apresentadas na Figura 3.5 para as amostras de solo à 3.0 m e na Figura 3.6 para as amostras à 7.0 m de profundidade. A Tabela 3.1 resume os valores obtidos de acordo com os procedimentos anteriores. Estas curvas que representam a concentração relativa contra o tempo foram obtidas a partir das curvas obtidas em laboratório entre a concentração relativa e T , que é um parâmetro adimensional que representa à relação entre o volume de efluente coletado (V_{efl}) e o volume de poros (V_p) da amostra ($T= V_{efl}/. V_p$) O incremento de um espaço para outro foi calculado a partir da seguinte expressão:

$$t = \frac{TL}{v_x} = \frac{V_{efl}}{V_p} \quad (3.5)$$

onde L corresponde à altura da amostra de solo estudada [L].

Tabela 3.6. Parâmetros de transporte para o solo laterítico *in-situ*. Carvalho (2001).

MATERIAL	Zinco (Zn^{2+})		Cádmio (Cd^{2+})		Cobre (Cu^{2+})		Chumbo (Pb^{2+})	
	α_x (m)	R	α_x (m)	R	α_x (m)	R	α_x (m)	R
Argila 3.0m	0.0259	1.85	0.0703	2.00	0.00938	3.75	0.0431	5.00
Argila 7.0m	-0.018	1.92	-1.14E-10	1.92	0.00758	3.13	-0.0341	4.53

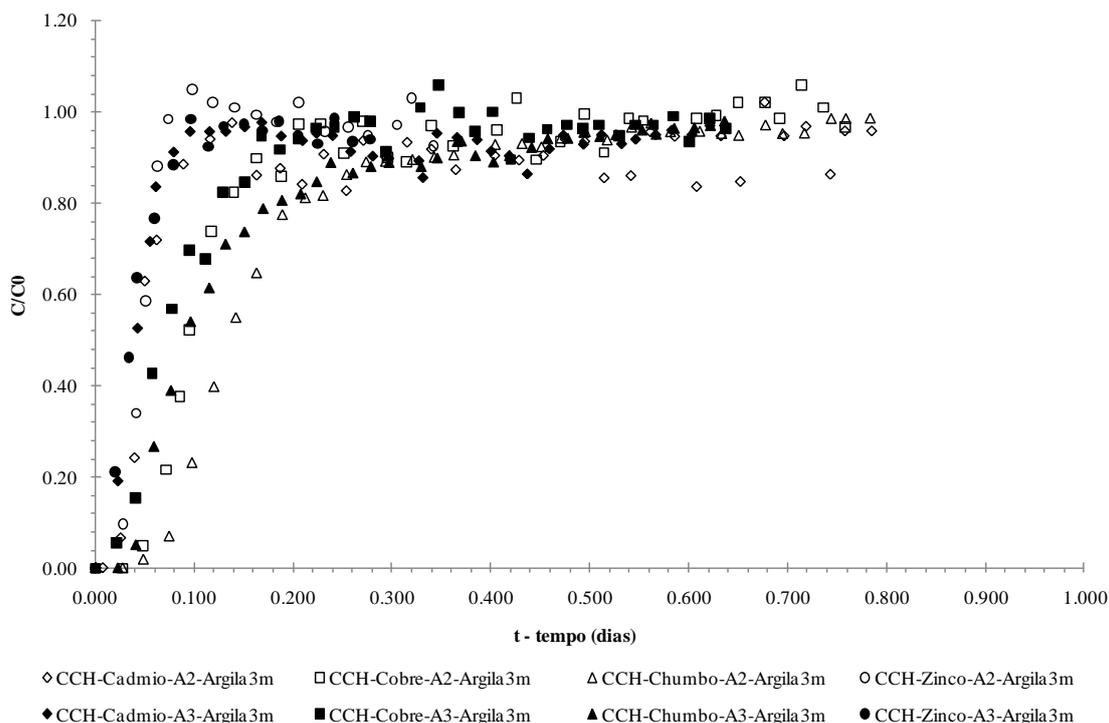


Figura 3.5. Curvas de Chegada (CCH) dos íons de Cd^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} e Zn^{2+} nas amostras (A2 e A3) para a profundidade de 3.0 m (Modificado de Carvalho, 2001).

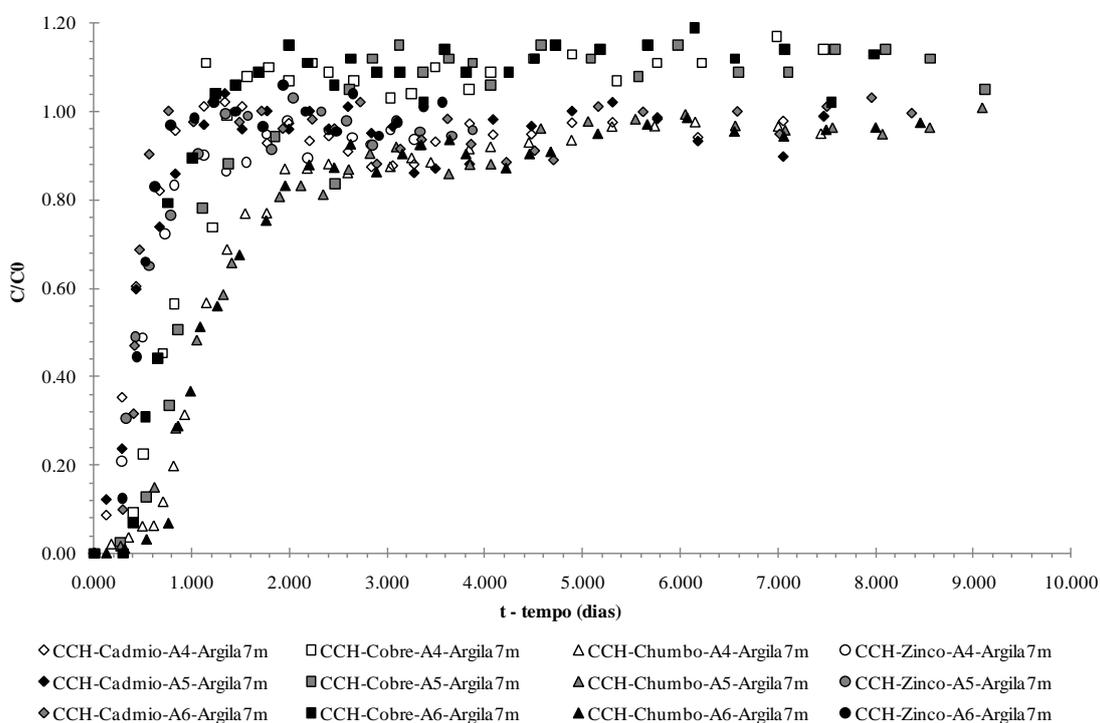


Figura 3.6. Curvas de Chegada (CCH) dos íons de Cd^{2+} , Cu^{2+} , Pb^{2+} e Zn^{2+} nas amostras (A4, A5 e A6) para a profundidade de 7.0 m (Modificado de Carvalho, 2001).

Carvalho (2001) constata as seguintes conclusões de acordo com os resultados obtidos nas curvas de chegada:

“Pode-se verificar, analisando-se a Tabela 3.6 e as Figuras 3.5 e 3.6, que a mobilidade do íon Zn^{2+} é relativamente baixa, em razão da obtenção de um fator de retardo próximo a 2.0, o que é um indicativo da pequena interação solo-soluto. O comportamento do Cd^{+2} foi muito semelhante ao observado para o Zn^{2+} , com fatores de retardo próximo a 2.0.

O comportamento da curva de chegada do Cu^{2+} evidencia uma menor mobilidade desse metal que as observadas para o Zn^{2+} e Cd^{2+} . Isso se deve a uma maior interação deste metal percolado com os solos estudados.

As curvas de chegada do Pb^{2+} apresentaram a menor dispersão entre os pontos obtidos experimentalmente. Estas curvas evidenciaram que o Pb^{2+} é o íon com a menor mobilidade dentre os metais estudados, originando um fator de retardo próximo a 5.0.”

E finalmente Carvalho (2001) concluiu que:

“O Zn^{2+} e Cd^{2+} foram os metais pesados transportados mais rapidamente na encosta abaixo do local de deposição do lixo, enquanto o Cu^{2+} e o Pb^{2+} foram os metais pesados transportados mais lentamente.

3.3.2.2. Procedimento, Resultados e Análises no Solo Laterítico Compactado (Nascentes, 2003)

Nascentes (2003) determinou os parâmetros de transporte de uma argila laterítica em condições compactadas através de ensaios de coluna. O autor ensaiou um solo laterítico que seria utilizado na formação de uma camada de impermeabilização na base do aterro sanitário do município de Visconde do Rio Branco-MG.

Para o solo laterítico compactado, foram moldados quatro corpos de prova com 0.05 m de diâmetro e 0.1 m de altura e numerados de CP1 a CP4. Foram moldados visando a alcançar o teor de umidade e peso específico seco correspondente a 95%, no ramo seco, dos valores ótimos obtidos na curva de compactação do ensaio Proctor Normal.

A metodologia seguida no ensaio de coluna inicia com a saturação dos corpos de prova com água destilada antes de iniciar o processo de percolação com solução contaminante até ser atingida uma vazão de saída constante. Após a estabilização da vazão, substituiu-se a água pela solução contaminante a qual consistiu de um “coquetel” composto pelos metais

apresentados na Tabela 3.5. Foram traçadas curvas de chegada para todos os íons de metais pesados utilizados. Os metais Cu^{2+} e Pb^{2+} foram detectados nos efluentes em pequena quantidade, enquanto o Cr^{3+} não foi detectado, não sendo possível traçar as curvas de chegada destes metais. Na Figura 3.7, são apresentadas as curvas de chegada obtidas para os solos lateríticos compactados.

Para a obtenção dos parâmetros de transporte, Nascentes (2003) utilizou uma metodologia de calibração e de otimização por meio de um processo iterativo o qual fornecia os valores do coeficiente de retardo (R) e do número de Péclet (P_e), do qual se obtém o coeficiente de dispersão hidrodinâmica (D^h). Esta metodologia consiste inicialmente na escolha arbitrária dos parâmetros procurados, realizando-se uma primeira aproximação aos dados experimentais. Em seguida, realiza-se o cálculo do erro através da diferença entre o determinado experimentalmente e o calculado teoricamente. Em seguida, iniciava-se o processo de busca de “melhores” parâmetros por um procedimento de otimização de ordem zero no qual só o valor da função é requerido. Nascentes (2003) fixou assim um dos parâmetros e calculou o erro mínimo causado pela variação do segundo parâmetro. Obtido este segundo parâmetro, fixou o seu valor e buscou o erro mínimo causado pela variação do primeiro parâmetro. Calculado o primeiro parâmetro, fixou este novo valor e buscou, novamente, o novo erro mínimo causado pela variação do segundo parâmetro. Com este novo valor fixo para o segundo parâmetro, voltou à busca do “melhor” primeiro parâmetro e assim por diante, até que a diferença entre os erros anterior e atual ficassem dentro da tolerância pré-estabelecida.

Tabela 3.7. Parâmetros de transporte para o solo laterítico compactado (Nascentes, 2003).

MATERIAL	Zinco (Zn^{2+})		Cádmio (Cd^{2+})		Manganes (Mn^{2+})	
	α_x (m)	R	α_x (m)	R	α_x (m)	R
CP1	0.00483	26.5	0.00114	36.00	0.0068	19.5
CP2	0.00311	27.5	0.00116	38.50	0.00437	18
CP4	0.00273	26	0.00089	37.50	0.00539	18.5
MÉDIA	0.00356	26.67	0.00106	37.33	0.00552	18.67

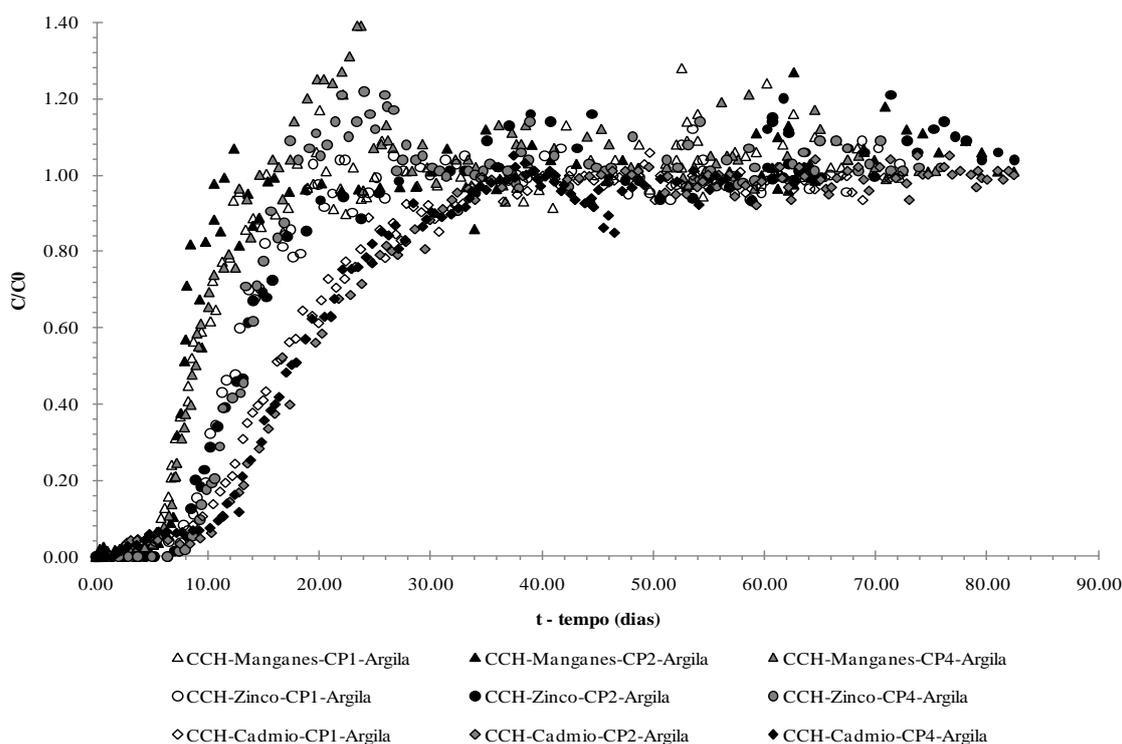


Figura 3.7. Curvas de Chegada (CCH) dos íons de Cd^{2+} , Mn^{2+} e Zn^{2+} nas amostras (CP1, CP2 e CP4) para o solo laterítico compactado (Modificado de Nascentes, 2003).

Para o cálculo do coeficiente de dispersividade apresentado na Tabela 3.7, considerou-se a velocidade média de percolação, cujo valor, em torno de 0.2066 m/d, foi praticamente o mesmo nos três corpos de prova. Nascentes (2003) chegou às seguintes conclusões com os resultados obtidos nas curvas de chegada:

A seqüência de mobilidade foi a seguinte: $\text{Mn}^{2+} < \text{Zn}^{2+} < \text{Cd}^{2+} < \text{Cu}^{2+} < \text{Pb}^{2+} < \text{Cr}^{3+}$. O Pb^{2+} sofreu maior retardo nos corpos de prova do que o Cu^{2+} . Com base nas curvas de chegada, verificou-se uma maior mobilidade do Mn^{2+} em relação ao Zn^{2+} e ao Cd^{2+} . O deslocamento destas curvas para a direita indica existência de interação solo-soluto.

Foi observada uma inclinação maior das curvas de Mn^{2+} e Zn^{2+} em relação às curvas de Cd^{2+} , indicando maiores valores de coeficiente de dispersão hidrodinâmica para o Cd^{2+} para as mesmas velocidades de percolação. O aumento do coeficiente de dispersão hidrodinâmica faz decrescer a inclinação da curva de chegada, proporcionando um lento aumento da concentração do soluto no efluente.

A concentração é um dos fatores que têm grande influência no fator de retardo. Quanto maior a concentração, mais rapidamente o solo esgota sua capacidade de retenção dos solutos aplicados, diminuindo o seu retardo.

Analisando as curvas de chegada dos metais Mn^{+2} e Zn^{+2} , observou-se que houve desorção destes metais ($c/c_o > 1$), não tendo sido verificada, ao longo do ensaio, qualquer variação nas concentrações iniciais da solução afluente. O fenômeno pode ser decorrente da competição entre os metais presentes na solução contaminante por sítios de troca, provocando um deslocamento dos cátions de menor energia de adsorção (Mn^{+2} e Zn^{+2}) para a solução do solo.

CAPÍTULO 5

5. SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

5.1. ASPECTOS GERAIS

As soluções analíticas são uma poderosa ferramenta para o estudo do processo de transporte de contaminantes em meios porosos e aquíferos subterrâneos. Domenico & Robbins (1985), Domenico (1987), Wexler (1992) e Domenico & Schwartz (1998) focaram seus estudos em decidir qual das soluções analíticas existentes na literatura poderia ser aplicada nos diversos problemas de campo. Para a escolha de soluções analíticas figuram entre os desafios na modelagem do transporte de contaminantes, determinar: os mecanismos que representam o fenômeno, as dimensões e concentração da fonte contaminante, a velocidade de infiltração, a estimativa do tempo que o contaminante leva para atingir o lençol freático e a determinação das componentes de dispersividade necessárias nos problemas tridimensionais.

Existem diversas soluções analíticas em múltiplas dimensões capazes de resolver a equação de transporte apresentada na Eq.(2.43). Cleary & Unga (1978) obtiveram uma série de soluções analíticas exatas que representavam uma fonte contaminante em um domínio tridimensional de comprimento x (semi-infinito) e dimensões y e z finitas. Os valores de contorno do problema especificavam restrições de fluxo nos limites horizontais e verticais do domínio e a solução era composta por duas séries infinitas. Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987) resolveram a Eq.(2.43) utilizando uma aproximação em três dimensões que descreve o avanço de uma pluma contaminante, considerando efeitos de advecção-dispersão-retardo com decaimento de primeira ordem de uma fonte contaminante finita. A solução de Domenico (1987) foi fundamentada em um enfoque previamente publicado por Domenico & Robbins (1985) para modelar uma pluma contaminante desconsiderando o decaimento. A grande vantagem do modelo de Domenico (1987) é que este fornece uma solução que não precisa de procedimentos de integração numérica. Devido a esta vantagem computacional a solução de Domenico (1987) tem sido vastamente utilizada para resolver diferentes problemas

de transporte com o auxílio de vários códigos e ferramentas computacionais. Wexler (1992) obteve também uma solução analítica para os mesmos valores e condições de contorno do problema de Cleary & Ungs (1978), mas considerando um domínio infinito nas direções y e z . A solução de Wexler (1992) foi uma extensão de uma solução proposta anteriormente por Sagar (1982), incluindo principalmente o fenômeno de retardo. Este apresentou uma solução analítica exata ao problema de transporte considerado anteriormente por Domenico (1987). As soluções de Sagar (1982) e Wexler (1992) estão constituídas por uma integral que deve ser avaliada de forma numérica. Outros autores como Leij et al. (1991) e Batu (1996) conseguiram obter uma solução analítica exata para o problema multidimensional de transporte. No entanto, foram utilizadas condições de contorno, especialmente da fonte contaminante, mais complexas quando comparadas com as explicadas anteriormente. Entre estas complicações esta a consideração de múltiplas fontes com concentrações variáveis.

West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) enumeram diferentes revisões feitas nas soluções analíticas de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987). Essa revisão indicou que existem diferentes opiniões em relação à aplicabilidade da solução de Domenico. Dado que a solução analítica de Domenico foi fundamentada em um enfoque heurístico, alguns pesquisadores têm expressado seu ceticismo com respeito à sua validade (West & Kueper, 2004). Por este motivo, West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) centraram suas observações em compreender a natureza das aproximações envolvidas na solução de Domenico. Srinivasan *et al.* (2007) realizaram uma análise matemática rigorosa sobre a origem e desenvolvimento desta solução. Os resultados permitiram entender os comportamentos observados durante o processo de simulação dos três solos lateríticos estudados e ajudaram a desenvolver algumas pautas gerais para o uso adequado da solução de Domenico (1987).

Tendo em vista os problemas matemáticos observados por West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) na solução analítica multidimensional de Domenico (1987), neste capítulo deseja-se observar o comportamento dessa solução para os três tipos de solos lateríticos analisados comparando-a com a solução analítica proposta por Cleary & Ungs (1978).

Neste Capítulo apresenta-se a segunda etapa desta dissertação correspondente ao processo de simulação nos espaços bi e tridimensional aplicando as soluções analíticas de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978). Em primeiro lugar, serão explicadas as considerações e hipóteses de cada solução para melhor compreensão das capacidades e das limitações

existentes. Posteriormente, serão encontrados os parâmetros de transporte necessários para a execução do processo de simulação multidimensional. Estes parâmetros de transporte serão determinados partindo-se dos parâmetros no espaço unidimensional em escala laboratorial determinados no Capítulo 4. Com o auxílio da teoria das semelhanças e da análise dimensional, estes parâmetros serão levados a uma escala de campo fictícia determinada para a execução das simulações. Na escala de campo serão aplicadas as duas soluções analíticas escolhidas para todos os materiais estudados no Capítulo 3 e 4. O resultado esperado será a distribuição e avanço das plumas contaminantes nos espaços multidimensionais para um determinado tempo. Este capítulo finalizará com uma análise de sensibilidade utilizando procedimentos similares aos adotados por Srinivasan *et al.* (2007) para examinar o comportamento das duas soluções analíticas para os solos lateríticos em condições *in-situ* e compactadas. Espera-se com este processo de simulação verificar a eficácia de diferentes métodos de solução, validando-os com as previsões esperadas sobre o comportamento físico-químico do processo. Espera-se também, analisar e avaliar o comportamento do transporte dos solutos caracterizados quando interagem com o meio poroso selecionado.

5.2. CONSIDERAÇÕES DAS SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS

As soluções analíticas multidimensionais consideradas permitem simular o processo de avanço no tempo e no espaço de uma pluma contaminante que se espalha em um meio poroso saturado em um espaço bi e tridimensional. A escolha dessas duas soluções foi fundamentada no fato de que elas não utilizam nenhum processo de integração numérica, resultando assim sempre em uma solução fechada do problema de transporte. Isto é uma grande vantagem em relação às outras soluções analíticas multidimensionais existentes.

De uma forma geral, todas as soluções analíticas adotam uma série de considerações simplificadoras das propriedades e condições de contorno do domínio de estudo. Algumas destas considerações não são realistas, e outras, são idealizadas para que a equação diferencial parcial do problema possua solução exata. As soluções multidimensionais apresentadas neste capítulo supõem um meio poroso homogêneo, saturado, de comprimento semi-infinito e largura que pode ser infinita ou semi-infinita. No caso de ser infinita, considera-se que as fronteiras impermeáveis nas bordas estarão suficientemente afastadas para se ter um efeito insignificante sobre a distribuição do contaminante na área de interesse.

No limite inicial do domínio considerado, existirá uma superfície que representará a fonte contaminante com dimensões específicas e uma substância contaminante com concentração inicial (c_0) homogênea, conhecida e constante. Essa substância é injetada no sistema a uma velocidade constante e com uma taxa de injeção pequena, evitando que o campo de velocidades do sistema seja alterado. Durante todo o processo de contaminação, o contaminante mantém as propriedades de densidade e viscosidade constantes. Cada solução analítica considerará condições geométricas de fonte e domínio particulares, as quais serão explicadas mais na frente e que são ilustradas nas Figuras 5.1 e 5.2.

O contaminante é sujeito ao mecanismo físico de advecção só na direção x . Ou seja, a direção de fluxo de água e contaminante existirá unicamente e de forma constante na direção longitudinal com uma velocidade (v_x). Entretanto, o contaminante estará sujeito ao mecanismo de dispersão nas três direções, longitudinal (x) e transversal (y e z), representadas pelos coeficientes de dispersividade α_x , α_y e α_z , respectivamente. Esses coeficientes são considerados constantes. Nas duas soluções, os autores assumem que o contaminante sofre um mecanismo de decaimento de primeira ordem. Mas, neste trabalho, o valor considerado para o decaimento será nulo ($\lambda = 0$). Ambas as soluções poderão ser manipuladas para diferentes geometrias em que ocorra o processo de contaminação no meio poroso envolvido, necessitando apenas da modificação na posição da fonte contaminante.

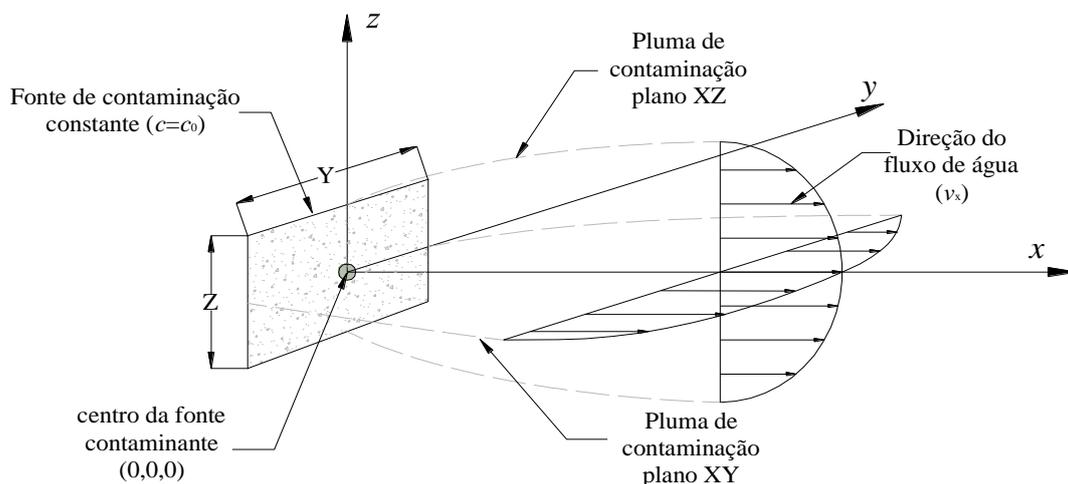


Figura 5.1. Geometria e sistema cartesiano de eixos para a solução analítica de Domenico (1987). Transporte tridimensional num domínio infinito devido a uma fonte de largura (Y) e altura (Z) (modificado de Guyonnet & Neville, 2004).

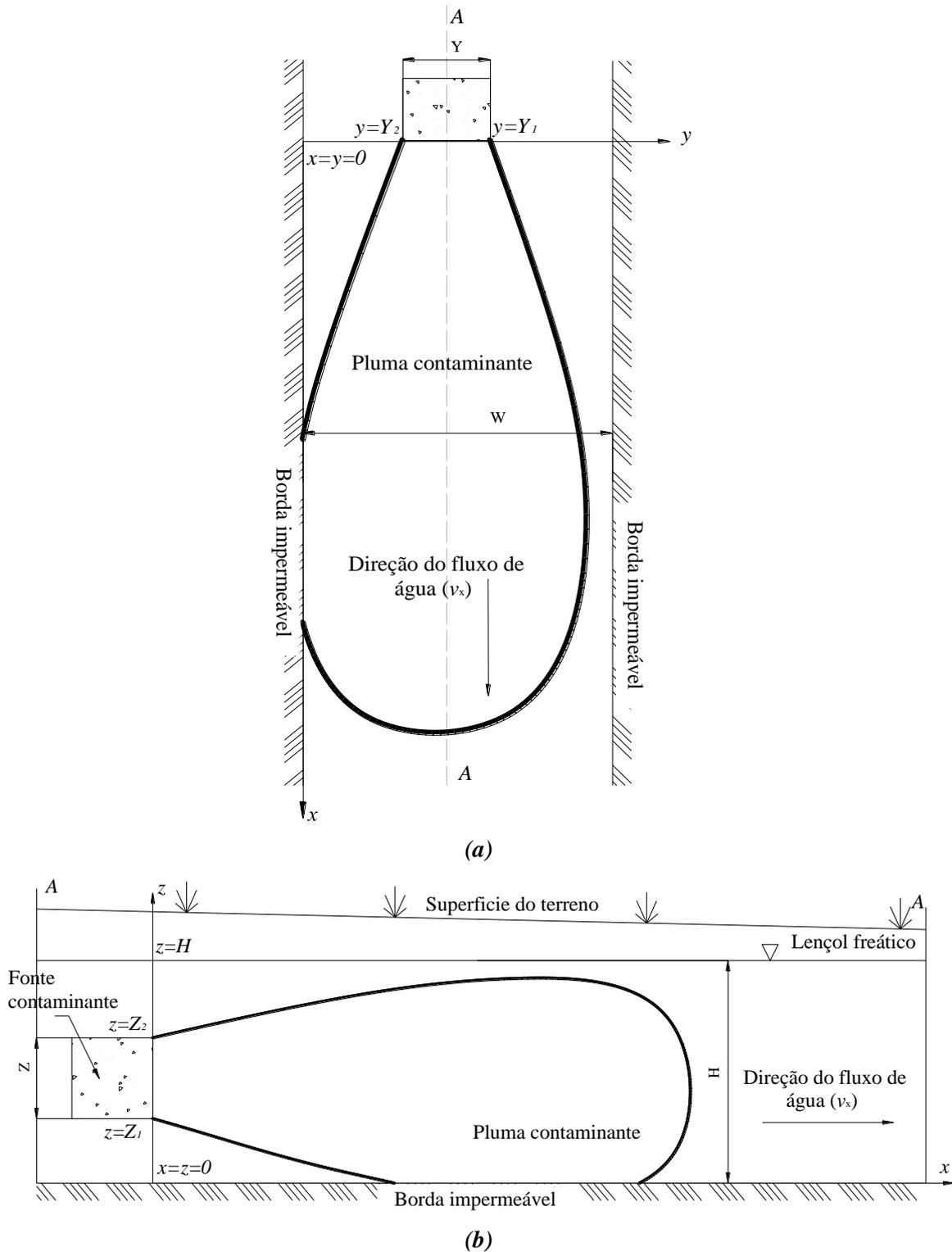


Figura 5.2. Geometria e sistema cartesiano de eixos na solução analítica de Cleary & Ungs (1978). (a) Vista em planta do transporte da pluma contaminante. (b) Seção A-A, transporte tridimensional num domínio de largura (W) e altura (H) finita (modificado de Wexler, 1992).

5.3. PARÂMETROS DE TRANSPORTE PARA AS SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS

No caso de compostos inorgânicos (metais pesados), caso em análise nesta dissertação, são consideradas até dez variáveis de entrada que deverão ser determinadas para modelar o problema. Isso inclui as dimensões de uma fonte contaminante definida por um espaço finito (x, y, z), a concentração da fonte (c_0), a velocidade linear média de fluxo no solo (v_x), o tempo de transporte do contaminante desde o primeiro momento que faz contato com o lençol freático (t), os mecanismos sorcivos (K_d e/ou R) e, finalmente, as três componentes de dispersividade para o problema geral que é o problema de transporte tridimensional (α_x, α_y e α_z). Quando se trata de compostos orgânicos, surgem variáveis adicionais como o decaimento radioativo (λ) e/ou a biodegradação que finalmente levam à diminuição da concentração cujas equações serão expressas, mas não aplicadas, nesta dissertação.

Nos capítulos anteriores foi possível medir, calcular e analisar os parâmetros de transporte, utilizando métodos de calibração e otimização sobre dados experimentais obtidos no laboratório em ensaios unidimensionais (ensaio de coluna), de uma série de soluções contaminantes constituídas principalmente por íons de metais pesados. Esses parâmetros foram obtidos para corpos de prova de solos lateríticos moldados em condições *in-situ* e compactados. Os parâmetros ajustados foram finalmente o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x), coeficiente de retardo (R) e a velocidade linear média de percolação (v_x).

É possível utilizar alguma das expressões analíticas que serão apresentadas neste capítulo para realizar um processo de calibração e otimização, determinando de forma direta e independente cada uma das variáveis anteriormente enunciadas como foi realizado para o caso unidimensional. Para realizar isto, é indispensável contar com uma série de dados experimentais avaliados nas três dimensões do espaço. Os parâmetros de transporte para realização da simulação serão os determinados no Capítulo 4.

5.3.1. Influência da Escala no Coeficiente de Dispersividade

Madle (2002) define o coeficiente de dispersividade como uma propriedade dependente da escala do domínio estudado. O coeficiente de dispersividade determina o grau em que um contaminante diluído se espalhará em um domínio. Especificamente, o efeito da “escala” refere-se às medidas, cálculos e calibrações existentes na literatura (Domenico & Robbins, 1984, Domenico, 1987, Wexler, 1992 e Domenico & Schwartz, 1998). Esses autores sugerem

que as magnitudes dos coeficientes de dispersividade dependem do tamanho do domínio em que são obtidas as observações. Segundo Domenico & Robbins (1984), esse efeito pode ser dividido em duas partes relacionadas: ao aumento da magnitude dos coeficientes de dispersão em função da distância medida no campo e das muitas ordens de magnitude da diferença entre as medidas realizadas em campo, as obtidas em laboratório e os valores utilizados nos procedimentos de calibração.

Segundo Domenico & Robbins (1984) são dois os argumentos que explicam os efeitos da escala sobre os valores do coeficiente de dispersividade: a *heterogeneidade* e os *requisitos da modelagem*.

Heterogeneidade: Refere-se ao número, tamanho e disposição das variabilidades encontradas no meio poroso. Na escala macroscópica, um maior número de heterogeneidades pode ser encontrado e, neste caso, pode-se esperar uma maior dispersividade. Em um ensaio laboratorial, o mecanismo da dispersão mecânica, do ponto de vista microscópico, é devido às diferenças nas velocidades nos canais entre partículas e pelos caminhos tortuosos impostos à solução contaminante (*microdispersão*). Na escala de campo, tem-se camadas e zonas onde a condutividade hidráulica pode apresentar variações. Se a dispersão mecânica pode ser causada por pequenas diferenças de velocidade do fluxo no interior do solo poroso, é provável que também apresentará variações significativas quando a solução contaminante passar através de regiões com valores de condutividade hidráulica diferentes (*macrodispersão*).

Requisitos da Modelagem: A magnitude do coeficiente de dispersividade depende do caráter do modelo adotado e do processo de calibração escolhido assim como da qualidade da calibração. Um caso muito comum é quando procedimentos de campo e técnicas de calibração do modelo não consideram plenamente o efeito tridimensional da dispersão. Como resultado, incide-se em uma superestimação dos valores dispersivos quando a dimensionalidade do modelo calibrado não coincide com a do sistema natural.

5.3.2. Transformação dos Parâmetros de Laboratório nos Parâmetros de Campo

Neste tópico, serão determinados os parâmetros dispersivos necessários para executar os processos de simulação nos espaços multidimensionais. Um dos objetivos na estimativa destes parâmetros é continuar utilizando os parâmetros de transporte encontrados a partir dos ensaios unidimensionais em escala de laboratório e que foram otimizados a través do método dos mínimos quadrados (MMQ). Para conseguir passar da escala laboratorial para a escala de

campo se utilizou a teoria de análise dimensional, aplicando-se o teorema de “Π”-Buckingham e a teoria das semelhanças (Martínez, 2008).

5.3.2.1. Análise Dimensional no Modelo de Transporte

A análise dimensional é um método utilizado para verificar a aplicabilidade de equações em experimentos sistemáticos. A partir desse tipo de análise, se obtém uma série de expressões adimensionais. Essas permitirão utilizar os resultados experimentais obtidos em condições limitadas em situações com diferentes dimensões geométricas, cinemáticas e dinâmicas, inclusive em casos nos quais as propriedades do fluido e do fluxo são diferentes das observadas durante a etapa experimental.

5.3.2.2. Teorema “Π” de Buckingham Aplicado à Equação de Advecção-Dispersão

Com o Teorema “Π”-Buckingham é possível simplificar um fenômeno, ao reduzir o número de variáveis associadas com o mesmo. Pela análise dimensional, são obtidas expressões ou monômios adimensionais que descrevem o fenômeno físico com a mesma precisão que o fenômeno inicial, contudo, com menos variáveis. Matematicamente, o teorema estabelece que, em um problema físico com n variáveis e m dimensões distintas, as variáveis podem ser agrupadas em $(n - m)$ expressões adimensionais independentes, dadas por:

$$F(V_1, V_2, V_3, V_4, \dots, V_n) = 0 \Rightarrow G(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_{n-m}) = 0 \quad (5.1)$$

onde F e G são funções, V_1, V_2, \dots, V_n são n variáveis dimensionais e $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{n-m}$ são as $n - m$ expressões ou monômios adimensionais.

Os monômios $G(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_{n-m})$ são obtidos a partir do produtório das variáveis de referência V_i elevadas a expoentes (ε_{ik}) que conduzem o monômio ao estado adimensional:

$$\pi_k = \prod_{i=1}^n V_i^{\varepsilon_{ik}} \quad k = 1, 2, 3, \dots, n - m \quad (5.2)$$

Os expoentes ε_{ik} na Eq. (5.2) são determinados pela condição de que cada expressão seja adimensional. Isto é feito substituindo as dimensões $M, L,$ e T (massa M , distância L , e tempo T) das variáveis V_i pelos expoentes ε_{ik} e, finalmente, igualando-se o produtório a zero.

Neste caso, se quer encontrar o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) quando se tem uma mudança nas condições de escala do modelo. A análise dimensional é possível partindo-se da função analítica que descreve o problema advectivo–dispersivo–reativo:

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{x - v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x}{\alpha_x} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \right\} \quad (5.3)$$

Desta forma, a função pode ser definida por seis variáveis:

$$F(c/c_0, x, t, \alpha_x, v_x, R) = 0 \quad (5.4)$$

A análise dimensional para as variáveis dessa função é descrita por:

$$R = [\text{adimensional}], c/c_0 = [\text{adimensional}], x = [L], t = [T], \alpha_x = [L], v_x = [L.T^{-1}] \quad (5.5)$$

Para aplicar o Teorema “Π”-Buckingham, pode-se expressar a Eq. (5.5) como uma matriz de m -linhas definida pelas dimensões envolvidas e n -colunas correspondentes às variáveis do problema:

$$\begin{matrix} [x] & [t] & [\alpha_x] & [v_x] & [c/c_0] & [R] \\ \begin{bmatrix} M \\ L \\ T \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} & & & & \end{matrix} \quad (5.6)$$

O número de monômios é obtido pela diferença entre o número de variáveis e o número de dimensões ($m - n$). Neste caso, ($m - n$) será igual a dois (2), já que se têm de fato quatro variáveis ($m = 4$), uma vez que c/c_0 e R já são adimensionais, e duas dimensões ($n = 2$), uma vez que nenhuma variável considera dimensão de massa (M). Para determinar os monômios, se faz o produto entre a matriz da Eq.(5.6) pelo vetor de expoentes das magnitudes envolvidos (ε_{ik}) e iguala-se o resultado a um vetor nulo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_t \\ \varepsilon_{\alpha_x} \\ \varepsilon_{v_x} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (5.7)$$

Desta forma, os expoentes podem ser encontrados resolvendo o sistema (Eq. (5.7)):

$$\varepsilon_x + \varepsilon_{\alpha_x} + \varepsilon_{v_x} = 0, \quad \varepsilon_t - \varepsilon_{v_x} = 0 \quad (5.8)$$

Na Eq. (5.8), observa-se quatro incógnitas arbitrárias, o que permite encontrar infinitos conjuntos de soluções linearmente independentes que satisfazem o problema. A escolha da

solução foi feita de forma a conduzir a uma resposta que envolvesse parâmetros físicos conhecidos, como o número de Neumann e o número de Courant. Desta forma, foram obtidos dois conjuntos de soluções linearmente independentes, dados por: $\varepsilon_x=-2$, $\varepsilon_t=1$, $\varepsilon_{\alpha x}=1$ e $\varepsilon_{v_x}=1$ ou $\varepsilon_x=-1$, $\varepsilon_t=1$, $\varepsilon_{\alpha x}=0$ e $\varepsilon_{v_x}=1$. Aplicando-se a Eq. (5.2) e as soluções obtidas anteriormente é possível encontrar dois monômios adimensionais correspondentes ao problema dispersivo-advectivo:

$$\pi_1 = \frac{\alpha_x v_x}{\left(\frac{x^2}{t}\right)}, \quad \pi_2 = \frac{v_x}{\left(\frac{x}{t}\right)} \quad (5.9)$$

Estes dois monômios encontrados referem-se às duas constantes adimensionais denominadas de número de Neumann (N) no caso do π_1 e número de Courant (C) no caso do π_2 . Fisicamente, o número de Courant indica a relação entre, a velocidade física (v_x) e a velocidade numérica do transporte (x/t). O número de Neumann representa a relação entre a dispersão mecânica real ($\alpha_x v_x$) e a dispersão numérica (x^2/t). Estes números controlam a estabilidade nas soluções numéricas do problema de transporte. Para que uma solução seja estável é preciso que estes dois números cumpram algumas restrições mas, por enquanto, estes valores serão utilizados neste capítulo para transformar o parâmetro dispersividade de uma escala laboratorial a uma escala de campo.

É possível deduzir outra expressão linearmente dependente, expressa como a relação entre o número de Courant e o número de Neumann, esta relação é o número de Peclet:

$$P_e = \frac{\pi_2}{\pi_1} = \frac{C}{N} = \frac{x}{\alpha_x} \quad (5.10)$$

5.3.2.3. Teoria da Semelhança e Princípio de Similitude

Martínez (2008) explica que nos ensaios experimentais de fluxo, às vezes não é possível realizá-los na escala real, sendo necessário utilizar um protótipo. Isto ocorre devido ao tamanho ou pela dificuldade de reproduzir as condições reais do fluxo. Assim, realizam-se ensaios com modelos em escala reduzida e que são geometricamente semelhantes. Com o objetivo de simular o fenômeno de campo apresentado nesta dissertação e dispondo-se de alguns ensaios laboratoriais dos solos daqueles locais em escala reduzida, pretende-se modelar e avaliar o efeito que esta mudança de escala produz, analisando desta forma o comportamento do fenômeno de transporte no campo a partir de informações laboratoriais.

Utilizando a teoria de semelhança e os parâmetros adimensionais encontrados com o Teorema “Π”-Buckingham, supõe-se a validade das seguintes expressões:

$$N_{(Lab)} = N_{(campo)} \quad C_{(Lab)} = C_{(campo)} \quad P_{e(Lab)} = P_{e(campo)} \quad (5.11)$$

Substituindo as Eq. (5.9) e (5.10) na Eq. (5.11) tem-se, finalmente, que:

$$\frac{\alpha_{x,(Lab)} v_{x,(Lab)}}{\frac{x_{(Lab)}^2}{t_{(Lab)}}} = \frac{\alpha_{x,(campo)} v_{x,(campo)}}{\frac{x_{(campo)}^2}{t_{(campo)}}} \quad (5.11a)$$

$$\frac{v_{x,(Lab)}}{\frac{x_{(Lab)}}{t_{(Lab)}}} = \frac{v_{x,(campo)}}{\frac{x_{(campo)}}{t_{(campo)}}} \quad (5.11b)$$

$$\frac{x_{(Lab)}}{\alpha_{x,(Lab)}} = \frac{x_{(campo)}}{\alpha_{x,(campo)}} \quad (5.11c)$$

Com as Eqs. (5.11a) a (5.11c) é possível determinar a dispersividade longitudinal para qualquer escala do domínio que se pretende estudar utilizando os coeficientes de dispersividade medidos no laboratório. Na Figura 5.4 apresentam-se os gráficos de coeficientes de dispersividade para as diferentes escalas do domínio estudado, representadas pela distância x que corresponde à distância do ponto de estudo à fonte contaminante.

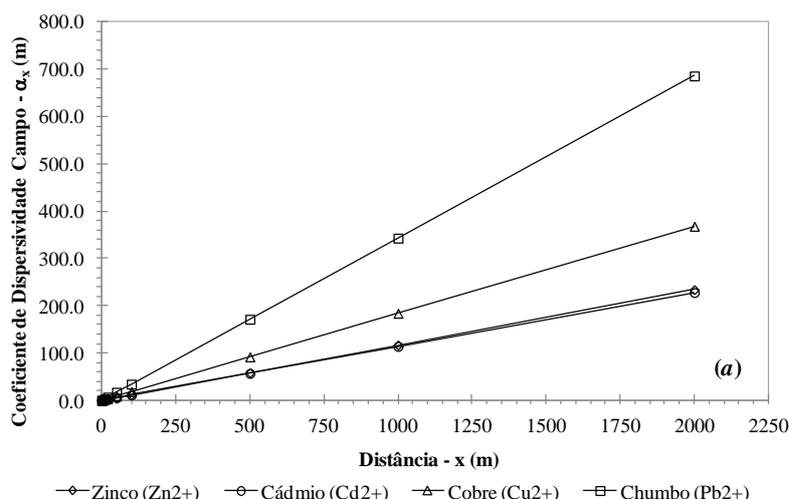


Figura 5.3. Determinação dos coeficientes de dispersividade longitudinal no campo a partir dos coeficientes de dispersividade longitudinal de laboratório. (a) solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, (b) solo laterítico *in-situ* a 7.0 m, (c) solo laterítico compactado.

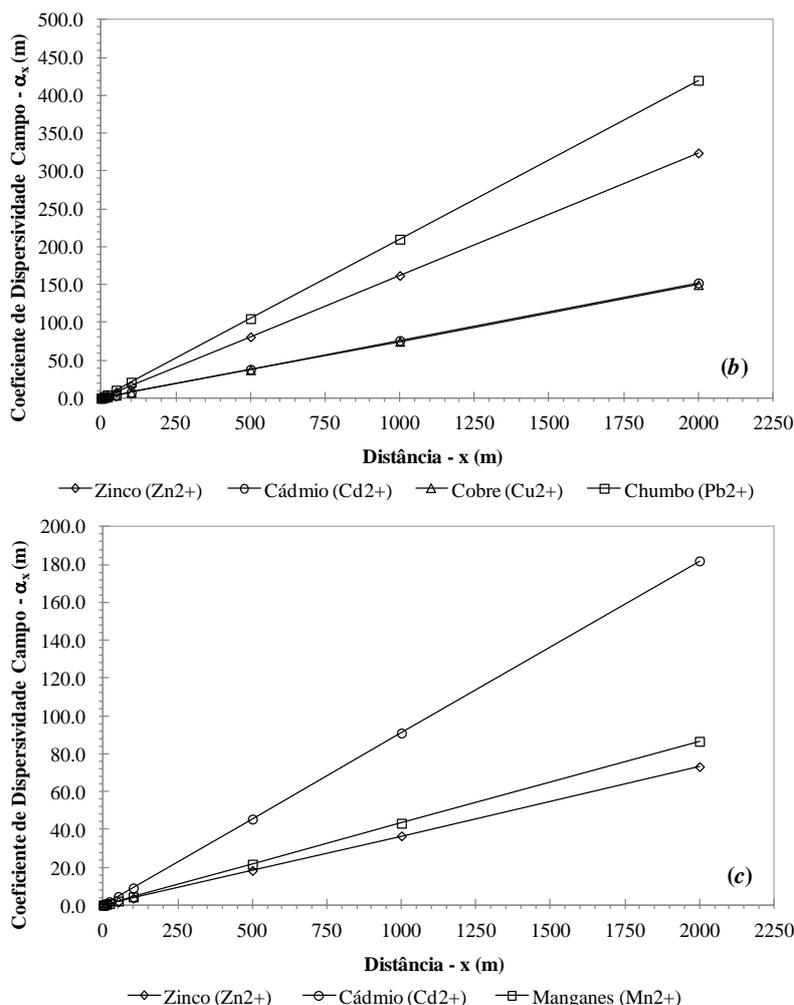


Figura 5.4. (Cont.) Determinação dos coeficientes de dispersividade longitudinal no campo a partir dos coeficientes de dispersividade longitudinal de laboratório. (a) solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, (b) solo laterítico *in-situ* a 7.0 m, (c) solo laterítico compactado.

A linearidade existente entre o aumento da escala e o coeficiente de dispersividade decorre do fato de se reproduzir o meio analisado na etapa de laboratório em escalas maiores. Como consequência, todas as propriedades do material avaliadas na etapa experimental se conservam. Entre estas propriedades tem-se a distribuição dos poros, os tamanhos das partículas, assim como, propriedades de permeabilidade que fazem com que o campo de velocidades seja o mesmo.

Uma vez obtidos os coeficientes de dispersividade longitudinal, Gelhar *et al.* (1992) estabelece que os valores de α_y e α_z variam tipicamente em uma e duas ordens de magnitude, respectivamente, menores que o coeficiente de dispersividade longitudinal α_x . Lembrando o proposto por Gelhar *et al.*(1992) os coeficientes podem ser calculados como:

$$\alpha_y = 0.1\alpha_x \quad (5.12)$$

$$\alpha_z = 0.01\alpha_x \quad (5.13)$$

Finalmente, na Tabela 5.1 se apresentam as condições inicial e de contorno do problema correspondentes à escala real de campo e as dimensões da fonte contaminante, estas condições fazem referencia ao problema ilustrado na Figura 5.2. Também são apresentados os parâmetros de transporte (α_x , α_y , α_z e R) e os parâmetros geotécnicos (n , ρ_d , v_x)

Tabela 5.1. Condições de entrada para o processo de simulação bi e tridimensional.

CONDIÇÕES DE ENTRADA		Solo Laterítico <i>in-situ</i> 3m				Solo Laterítico <i>in-situ</i> 7m				Solo Laterítico Compactado		
CONDIÇÕES INICIAL E DE CONTORNO		Zinco (Zn ²⁺)	Cádmio (Cd ²⁺)	Cobre (Cu ²⁺)	Chumbo (Pb ²⁺)	Zinco (Zn ²⁺)	Cádmio (Cd ²⁺)	Cobre (Cu ²⁺)	Chumbo (Pb ²⁺)	Zinco (Zn ²⁺)	Cádmio (Cd ²⁺)	Manganes (Mn ²⁺)
Tempo de Análise	t (d)		500			5000				43800		
Comprimento do Domínio	W (m)		960			960				960		
Largura do Domínio	H (m)		960			960				960		
Comprimento da Fonte	Y (m)		240			240				240		
Largura da Fonte	Z (m)		100			100				100		
Distância Analisada	x (m)		1250			1250				1250		
PARÂMETROS GEOTÉCNICAS												
Porosidade	n		0.58			0.42				0.43		
Massa Específica Seca	ρ_d (Kg/m ³)		1153			1578				1640		
Velocidade Linear Média	v_x (m/d)		4.4929			0.4147				0.2066		
PARÂMETROS DE TRANSPORTE												
Dispersividade Longitudinal	α_x (m)	146.25	142.5	230.0	428.75	202.5	95.13	93.4	262.5	45.75	113.75	54.13
Dispersividade Transv. Horizontal	α_y (m)	14.625	14.25	23.00	42.875	20.25	9.513	9.34	26.25	4.575	11.375	5.413
Dispersividade Transv. Vertical	α_z (m)	1.4625	1.425	2.300	4.2875	2.025	0.9513	0.934	2.625	0.458	1.1375	0.541
Coeficiente de Retardo	R	2.056	2.224	4.447	6.773	2.1939	1.849	3.315	5.9107	26.65	39.368	18.47

5.4. SOLUÇÕES ANALÍTICAS BIDIMENSIONAIS.

Estas soluções simulam o transporte de contaminantes originário de fontes que interagem com o domínio em estudo. Este deve ser suficientemente amplo para garantir a existência de gradientes de concentração na direção horizontal e gradientes de concentração na direção perpendicular ao eixo de avanço da pluma de contaminação. Isto permite que a pluma contaminante se espalhe na direção longitudinal (α_x) e transversal horizontal (α_y), respectivamente. O mesmo domínio deve ser suficientemente fino para garantir que os gradientes de concentração na direção z , perpendicular ao eixo da pluma de contaminação seja

desprezível, ou seja, o espalhamento da pluma contaminante na direção transversal vertical seja nulo, $\alpha_z = 0$. (Figura 5.2(b)). A equação que governa o fenômeno é dada por:

$$\frac{\partial c(x, y, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - v'_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (5.14)$$

5.4.1. Solução Analítica Bidimensional de Domenico (1987)

A solução analítica proposta por Domenico (1987) foi fundamentada na solução proposta por Domenico & Palciauskas (1982) e Domenico & Robbins (1985). A solução de Domenico (1987) é uma solução aproximada para a Eq. (5.14). As condições inicial e de contorno, ilustradas na Figura 5.1, são:

$$c(x, y, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 \leq x \leq \infty, -\infty \leq y \leq \infty \quad (5.15a)$$

$$c(0, y, t) = c_0, \quad -Y/2 \leq y \leq Y/2, \quad \forall \quad t > 0 \quad (5.15b)$$

$$c(0, y, t) = 0, \quad y < -Y/2 \quad \text{ou} \quad y > Y/2 \quad (5.15c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} = 0 \quad (5.15d)$$

Para as condições inicial e de contorno do domínio (Eq. (5.15a) até Eq. (5.15d)), Domenico (1987) apresentou uma solução analítica composta por dois termos:

$$c(x, y, t) = \frac{c_0}{4} f_x(x, t) f_y(y, t) \quad (5.16)$$

$$f_x(x, t) = \exp \left\{ \left(\frac{x}{2\alpha_x} \right) \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}} \right) \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x / v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right) + \exp \left\{ \left(\frac{x}{2\alpha_x} \right) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}} \right) \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x / v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right) \quad (5.16a)$$

$$f_y(y, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{y + Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] \quad (5.16b)$$

onde $c(x, y, t)$ é a concentração do contaminante no espaço bidimensional $[\text{M}/\text{L}^3]$; (x, y) é o ponto da análise $[\text{L}]$ da concentração no tempo t $[\text{T}]$; o v'_x é a velocidade linear média do

contaminante dividida inicialmente pelo fator de retardo ($v'_x = v_x/R$); α_x , α_y são os coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal horizontal respectivamente [L], λ é o decaimento radioativo e Y representa a largura da fonte contaminante [L].

Na Eq. (5.16), o termo $f_x(x, t)$ denota a solução analítica unidimensional proposta por Bear (1979) em sua forma completa, inclusive considerando o fenômeno sorcivo, adotando o fator de retardo. O termo $f_y(y, t)$ considera o efeito da dispersão transversal devido à fonte de tamanho finito no espaço bidimensional com dimensão Y .

5.4.2. Solução Analítica Bidimensional de Cleary & Ungs (1978)

Cleary & Ungs (1978) determinaram uma solução analítica bidimensional para a solução da equação Eq. (5.14). As condições inicial e de contorno, ilustradas na Figura 5.2, foram:

$$c(x, y, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 < x < \infty, 0 \leq y \leq W \quad (5.17a)$$

$$c(0, y, t) = c_0, \quad Y_1 \leq y \leq Y_2 \quad (5.17b)$$

$$c(0, y, t) = 0, \quad y < Y_1 \quad \text{ou} \quad y > Y_2 \quad (5.17c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow W} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} = 0 \quad (5.17d)$$

Dadas as condições inicial e de contorno do domínio em estudo, Cleary & Ungs (1978) apresentaram uma solução analítica exata definida por uma série infinita:

$$c(x, y, t) = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} L_n P_n \cos(\eta y) \cdot \left\{ \exp \left[\frac{x(v'_x - \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x - \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x}} \right] + \exp \left[\frac{x(v'_x + \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x + \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x}} \right] \right\} \quad (5.18)$$

onde,

$$L_n = \begin{cases} 1/2, & n = 0 \\ 1, & n > 0 \end{cases} \quad (5.18a)$$

$$P_n = \begin{cases} \frac{Y_2 - Y_1}{W}, & n = 0 \\ \frac{[\sin(\eta Y_2) - \sin(\eta Y_1)]}{n\pi}, & n > 0 \end{cases} \quad (5.18b)$$

$$\eta = n\pi / W, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.18c)$$

$$\beta = \sqrt{v_x^2 + 4\alpha_x v'_x (\eta^2 \alpha_y v'_x + \lambda)}$$

onde Y_1 e Y_2 correspondem às coordenadas dos pontos inferior e superior da fonte contaminante que definem a dimensão de largura [L], respectivamente, e W é a largura correspondente ao espaço entre as fronteiras impermeáveis [L] (Figura 5.2 (a))

Os termos da série da Eq. (5.18) tendem a oscilar. De fato, para pequenos valores de x , é necessária uma grande quantidade de termos para que se observe pouca oscilação no resultado da concentração. Para o caso de grandes valores de x , a série converge rapidamente. Neste caso, para que a oscilação do valor da concentração relativa não ultrapasse a ordem de 1×10^{-4} são necessários pelos menos 60 termos.

5.4.1. Comparação dos Resultados entre as Soluções Analíticas Bidimensionais

Com as condições de entrada estabelecidas na Tabela 5.1 e utilizando as soluções analíticas no espaço bidimensional, foram realizadas as simulações considerando duas componentes de dispersividade (α_x e α_y). Foram feitas simulações para os solos lateríticos *in-situ* e compactado. Nas Figuras 5.4 e 5.5. Nelas as plumas contaminantes são representadas pelos contornos que correspondem aos valores de concentração relativa (c/c_0) em um espaço XY . Para facilitar a comparação dos resultados, os gráficos foram plotados em uma mesma escala. C&U indica a solução de Cleary & Unga (1978).

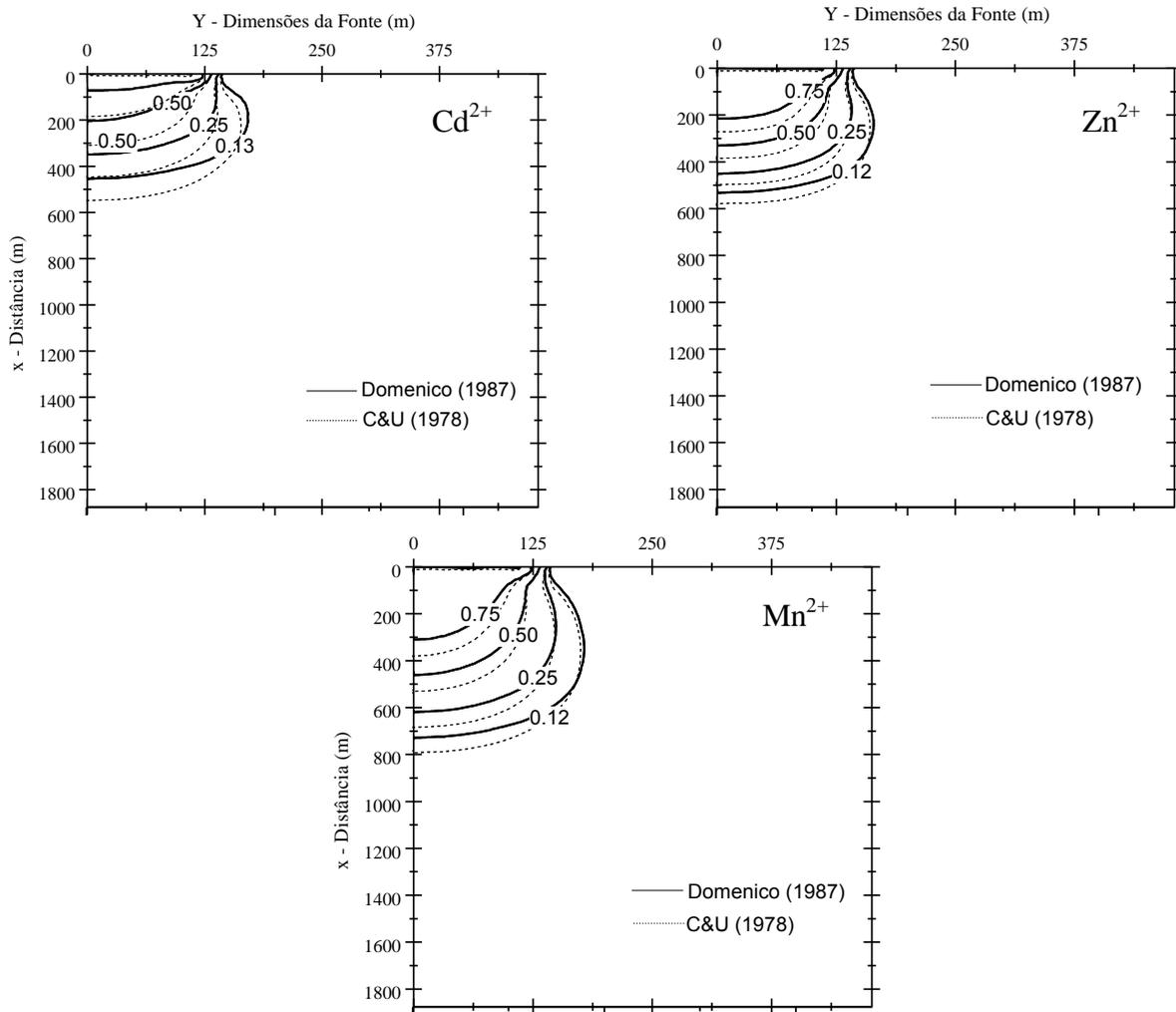


Figura 5.5. Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) no espaço XY para os íons dos metais pesados no solo laterítico compactado.

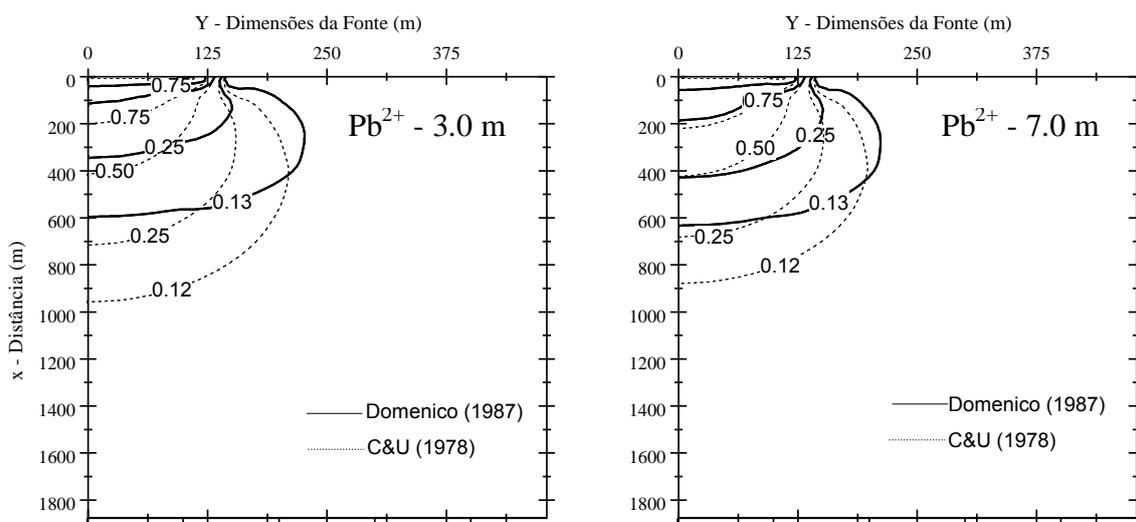


Figura 5.6. Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

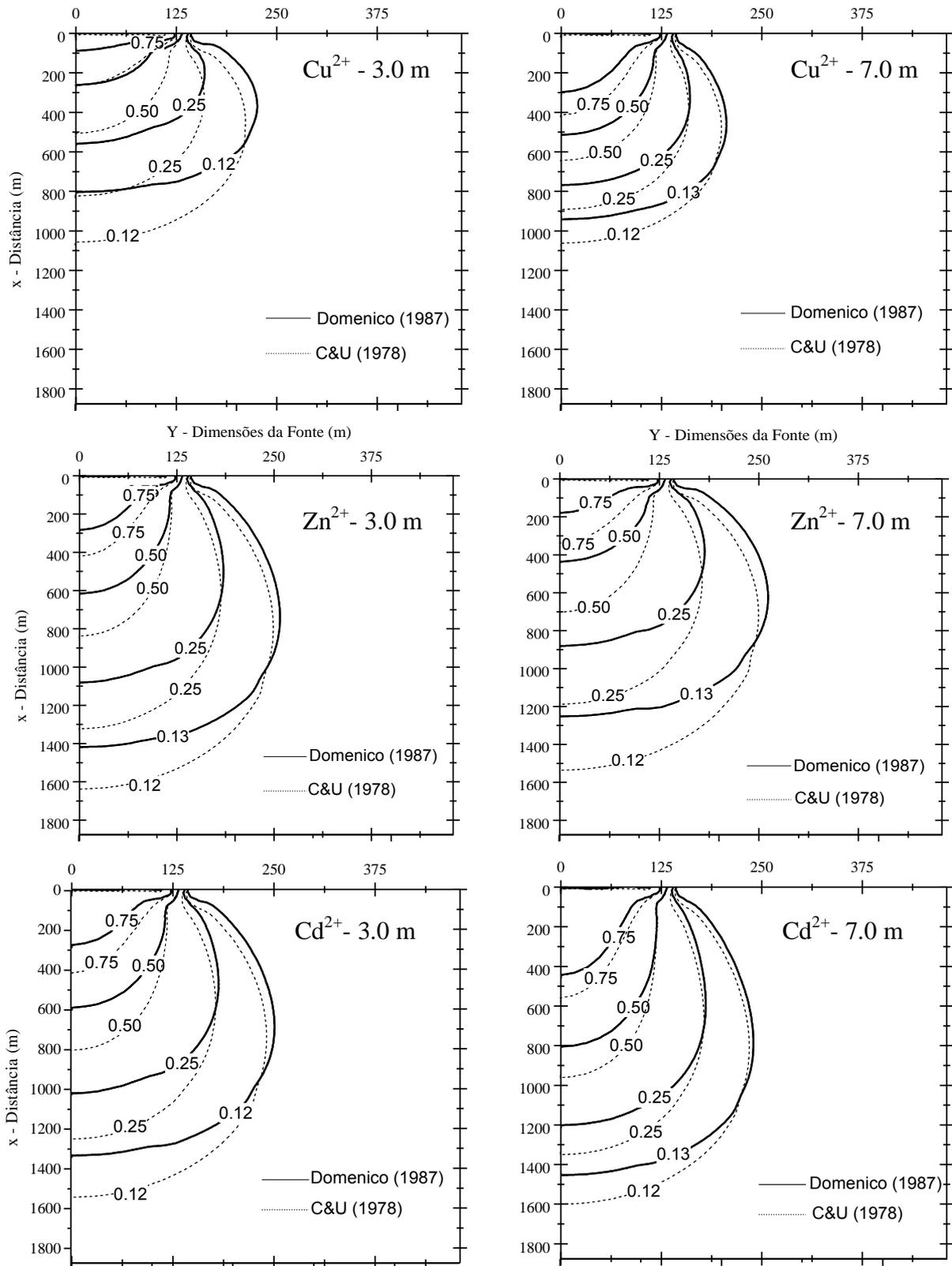


Figura 5.7. (Cont.) Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

5.5. SOLUÇÕES ANALÍTICAS TRIDIMENSIONAIS

As soluções tridimensionais são particularmente úteis para simular o transporte de plumas de contaminação em situações nas quais as fontes contaminantes possuem dimensões conhecidas. Estas soluções são aplicadas em meios suficientemente amplos, em todas suas dimensões, para que ocorra a propagação de gradientes longitudinais e transversais da massa contaminante. Com essas considerações, a equação que governa o fenômeno de transporte é dada por:

$$\frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v'_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (5.19)$$

5.5.1. Soluções Analíticas Tridimensionais de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987)

A solução analítica proposta por Domenico (1987) foi fundamentada na solução proposta por Domenico & Robbins (1985). Esta é uma solução aproximada para a Eq. (5.19). Srinivasan *et al* (2007) apresentaram de forma detalhada as condições inicial e de contorno para esta equação (Figura 5.1):

$$c(x, y, z, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 \leq x \leq \infty, -\infty \leq y \leq \infty, -\infty \leq z \leq \infty \quad (5.20a)$$

$$c(0, y, z, t) = c_0, \quad -Y/2 \leq y \leq Y/2, -Z/2 \leq z \leq Z/2, \quad \forall \quad t > 0 \quad (5.20b)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial y} = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \quad (5.20c)$$

Dadas as condições inicial e de contorno do domínio em estudo, Domenico (1987) apresentou uma solução analítica composta por três termos independentes:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0}{8} f_x(x, t) f_y(y, t) f_z(z, t) \quad (5.21)$$

onde,

$$f_x(x, t) = \operatorname{erfc} \left[\frac{x - v'_x t}{2\sqrt{D_x^m t}} \right] + \exp \left[\frac{v'_x x}{D_x^m} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + v'_x t}{2\sqrt{D_x^m t}} \right] \quad (5.21a)$$

$$f_y(y, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{y+Y/2}{2\sqrt{D_y^{h'}t}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y-Y/2}{2\sqrt{D_y^{h'}t}} \right] \quad (5.21b)$$

$$f_z(z, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{z+Z/2}{2\sqrt{D_z^{h'}t}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z-Z/2}{2\sqrt{D_z^{h'}t}} \right] \quad (5.21c)$$

Domenico & Robbins (1985) substituem nas Eqs. (5.21b) e (5.21c), que representam os termos dispersivos transversais $f_y(y, t)$ e $f_z(z, t)$, o tempo t por x/v'_x . Além disso, sabendo que $D_x^{m'} = \alpha_x v'_x$, $D_y^{m'} = \alpha_y v'_x$ e $D_z^{m'} = \alpha_z v'_x$, tem-se, finalmente, que:

$$f_x(x, t) = \operatorname{erfc} \left[\frac{x-v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x}{\alpha_x} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x+v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \quad (5.22a)$$

$$f_y(y, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{y+Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y-Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] \quad (5.22b)$$

$$f_z(z, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{z+Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z-Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right] \quad (5.22c)$$

onde α_x , α_y , α_z são os coeficientes de dispersividade longitudinal, transversal horizontal e transversal vertical respectivamente [L], Y representa a largura da fonte contaminante [L]; Z representa a altura ou espessura da fonte contaminante [L]. Neste caso, os termos $f_y(y, t)$ e $f_z(z, t)$ consideram o efeito da dispersão transversal devido à fonte de tamanho finito no espaço tridimensional com dimensões Y e Z , independentemente do tempo e da solução unidimensional que só considera a dispersão longitudinal.

Domenico (1987) incorpora o efeito do fenômeno de decaimento de primeira ordem, substituindo o termo $f_x(x, t)$ que denota a solução analítica de Ogata & Banks (1961) pela solução analítica proposta por Bear (1979) apresentada no Capítulo 4. Neste caso, a forma completa da expressão foi apresentada por Martin-Hayden & Robbins (1997) e é dada por:

$$c(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} f_x^*(x, t) f_y(y, t) f_z(z, t) \quad (5.23)$$

onde,

$$f_x^*(x,t) = \exp\left\{\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right)\left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}}\right)\right\} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x - v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}}\right) + \exp\left\{\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right)\left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}}\right)\right\} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x + v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}}\right) \quad (5.23a)$$

$$f_y(y,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{y+Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{y-Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] \quad (5.23b)$$

$$f_z(z,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{z+Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{z-Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] \quad (5.23c)$$

Desta forma, a solução definitiva de Domenico (1985) foi apresentada em um sistema tridimensional, tendo sido compartimentada em um conjunto de soluções uni e bidimensionais. Para fundamentar essa idéia, Domenico & Robbins (1985) utilizaram o *princípio de superposição*.

Para conhecer a concentração máxima da pluma contaminante basta determinar a concentração ao longo do eixo de simetria. Isto é possível de ser realizado, fazendo $y = z = 0$ nas Eqs. (5.23b) e (5.23c), ou seja:

$$c_{\max}(x,0,0,t) = \frac{c_0}{8} f_x^*(x,t) f_y^*(0,t) f_z^*(0,t) \quad (5.24)$$

onde,

$$f_y^*(0,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{Y}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{Y}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] \quad (5.24a)$$

$$f_z^*(0,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{Z}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{Z}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] \quad (5.24b)$$

Na Eq. (5.23), se o termo de decaimento de primeira ordem (λ) for nulo, o fator de retardo (R) for igual à unidade e as dimensões da fonte (Y e Z) forem suficientemente grandes a ponto de fazer com que o argumento da função erro seja infinito ($\operatorname{erf}(+\infty) = 1$), a solução será reduzida ao caso unidimensional proposto por Ogata & Banks (1961).

5.5.2. Solução Analítica Tridimensional de Cleary & Ungs (1978)

Cleary & Ungs (1978) apresentam uma solução exata para a Eq. (5.19). As condições inicial e de contorno que foram estabelecidas a partir da Figura 5.2 são:

$$c(x, y, z, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 < x < \infty, 0 < y < W \text{ e } 0 < z < H, \quad (5.25a)$$

$$c(x, y, z, t) = c_0, \quad x = 0 \text{ e } Y_1 \leq y \leq Y_2 \text{ e } Z_1 \leq z \leq Z_2, \quad (5.25b)$$

$$c(x, y, z, t) = 0, \quad x = 0 \text{ e } y < Y_1 \text{ ou } y > Y_2 \text{ e } z < Z_1 \text{ ou } z > Z_2; \quad (5.25c)$$

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial x} = 0 \quad \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial y} = 0 \quad \lim_{y \rightarrow W} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial y} = 0 \\ \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \quad \lim_{z \rightarrow H} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (5.25d)$$

Nestas condições, a solução analítica é composta por uma série infinita dupla dada por:

$$\begin{aligned} c(x, y, z, t) = c_0 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_{mn} O_m P_n \cos(\zeta z) \cos(\eta y) \\ \cdot \left\{ \exp \left[\frac{x(v'_x - \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x - \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x(v'_x + \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x + \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$L_{mn} = \begin{cases} 1/2 & m = 0 \text{ e } n = 0 \\ 1 & m = 0 \text{ e } n > 0 \\ 1 & m > 0 \text{ e } n = 0 \\ 2 & m > 0 \text{ e } n > 0 \end{cases} \quad (5.26a)$$

$$O_m = \begin{cases} \frac{Z_2 - Z_1}{H}, & m = 0 \\ \frac{[\sin(\zeta Z_2) - \sin(\zeta Z_1)]}{m\pi}, & m > 0 \end{cases} \quad (5.26b)$$

$$P_n = \begin{cases} \frac{Y_2 - Y_1}{W}, & n = 0 \\ \frac{[\sin(\eta Y_2) - \sin(\eta Y_1)]}{n\pi}, & n > 0 \end{cases} \quad (5.26c)$$

$$\begin{aligned}\zeta &= m\pi / H, & m &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ \eta &= n\pi / W, & n &= 0, 1, 2, 3, \dots\end{aligned}\tag{5.26d}$$

$$\beta = \sqrt{v_x^2 + 4\alpha_x v_x' (\eta^2 \alpha_y v_x' + \zeta^2 \alpha_z v_x' + \lambda)}$$

onde Y_1 e Y_2 correspondem as coordenadas dos pontos inferior e superior da fonte contaminante que definem a dimensão de largura [L], respectivamente; Z_1 e Z_2 correspondem às coordenadas dos pontos inferior e superior da fonte contaminante que definem a dimensão de altura [L], respectivamente; W é a largura correspondente ao espaço entre as fronteiras impermeáveis [L] (Figura 5.2(a)) e H é a espessura do domínio (Figura 5.2(b)).

Os termos das séries da Eq. (5.26) tendem a oscilar. De fato, para pequenos valores de x , é necessária uma grande quantidade de termos para que se observe pouca oscilação no resultado da concentração. Para o caso de grandes valores de x , a série converge rapidamente. Neste caso, para que a oscilação do valor da concentração relativa não ultrapasse a ordem de 1×10^{-4} são necessários entre 80 a 100 termos.

5.5.3. Comparação dos Resultados entre as Soluções Analíticas Tridimensionais

Utilizando-se agora as soluções analíticas no espaço tridimensional, foram realizadas as simulações considerando as três componentes de dispersividade (α_x , α_y e α_z) para todos os íons de metais pesados nos solos lateríticos *in-situ* e compactados. Os resultados destas análises tridimensionais são apresentados nas Figuras 5.6 e 5.7. Nelas as plumas contaminantes são representadas pelos contornos que correspondem aos valores de concentração relativa (c/c_0) em um espaço XY . A ordem de apresentação dos resultados foi feito conservando os mesmos padrões de escala utilizados na análise bidimensional.

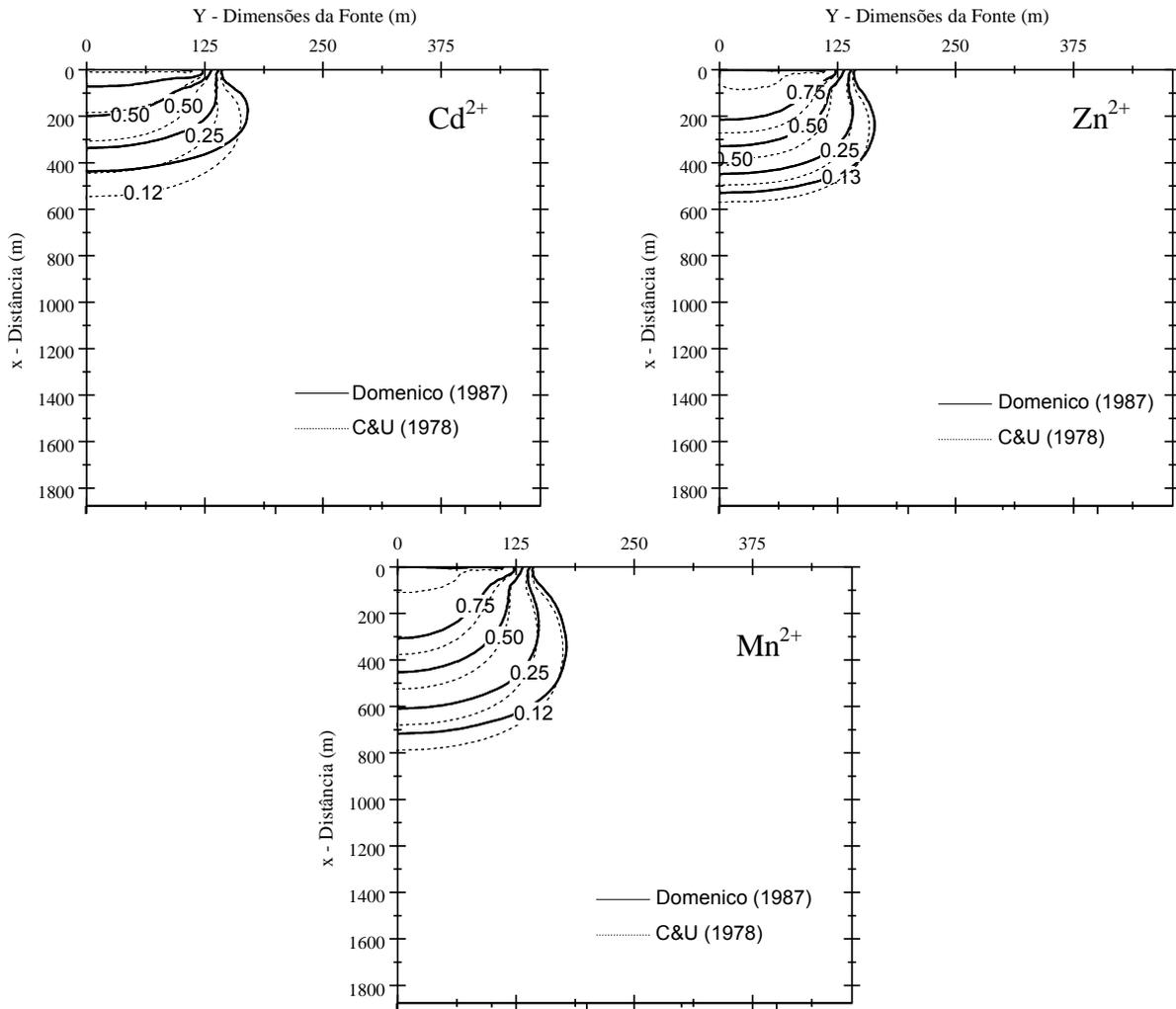


Figura 5.8. Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) no espaço XY para os íons dos metais pesados no solo laterítico compactado.

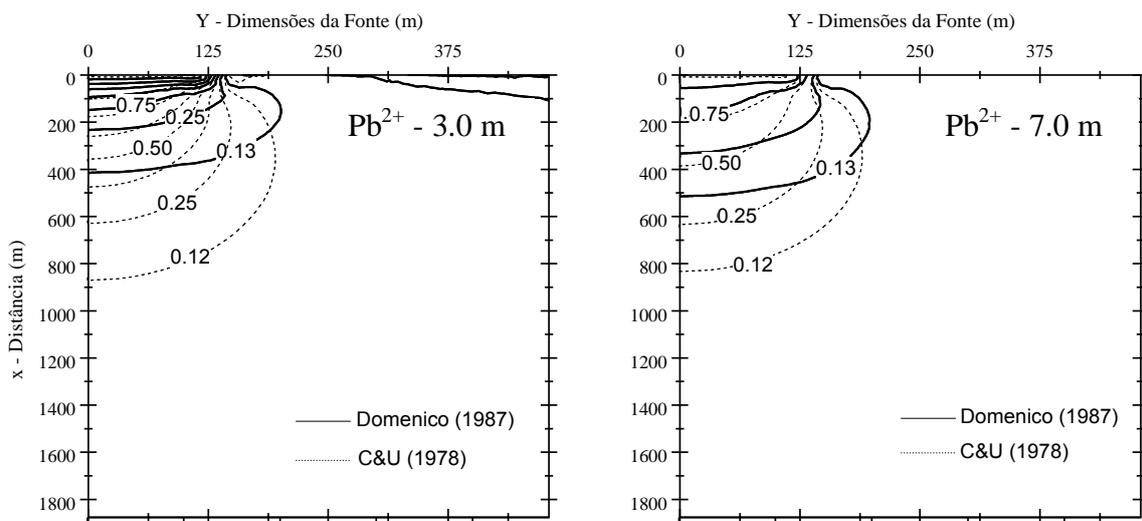


Figura 5.9. Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

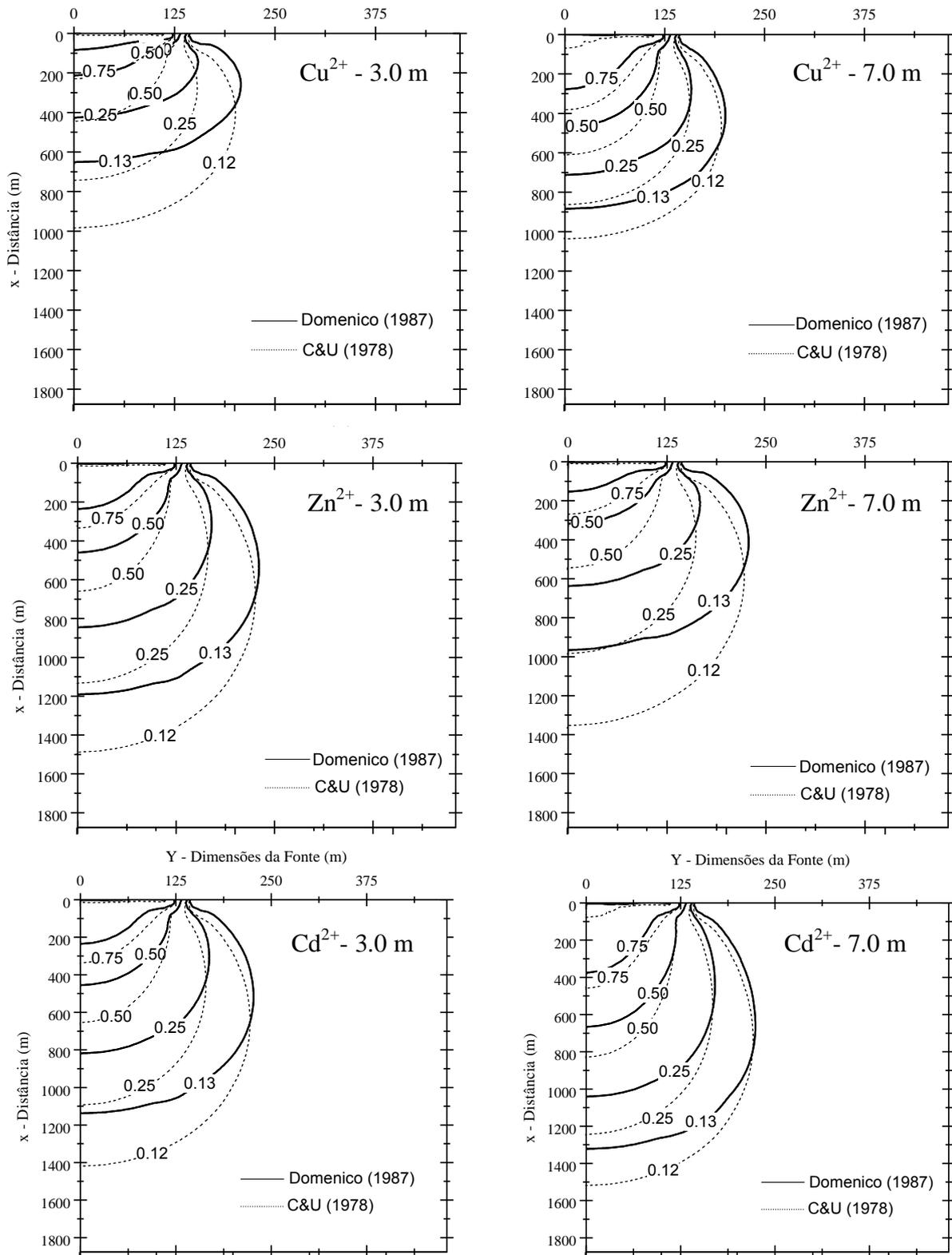


Figura 5.10. (Cont.) Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

5.6. ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DAS PLUMAS CONTAMINANTES NOS ESPAÇOS BI E TRIDIMENSIONAIS

Preliminarmente, vão ser comparados os resultados obtidos entre as simulações bi e tridimensionais, utilizando como balizador as concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$, correspondentes aos valores de concentração ao longo do eixo longitudinal da pluma quando $x = 0$. Nas Figuras 5.8 e 5.9 apresenta-se uma comparação, entre as concentrações relativas máximas determinadas nos modelos analíticos bi e tridimensionais de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978), para os três solos lateríticos estudados e os correspondentes íons contaminantes. Também são apresentadas, nas Figuras 5.10 e 5.11, as seções transversais das plumas de contaminação. Foram obtidas duas seções transversais para cada uma das plumas, em dois pontos localizados em distâncias diferentes medidas a partir da fonte contaminante.

Nas Figuras 5.9 e 5.11 observa-se que nos solos lateríticos *in-situ* as plumas do espaço tridimensional localizam-se retardadas em relação às plumas do espaço bidimensional. Isto é explicado pelo fato de que, por considerações de contorno, na formulação analítica bidimensional, deixa-se de considerar uma componente dispersiva correspondente ao coeficiente de dispersividade transversal vertical (α_z). A função desta componente dispersiva é gerar uma nova trajetória de espalhamento da massa contaminante. Consequentemente, as plumas contaminantes em duas dimensões apresentaram um maior avanço do que as tridimensionais. Neste caso, o fenômeno começará um processo de estabilização acelerado como consequência da componente adicional de dispersividade.

O mesmo fenômeno não acontece no solo laterítico compactado. Neste material, não se observa uma mudança tão pronunciada como nas análises bidimensionais devido à presença ou à ausência da componente dispersiva transversal vertical. Isso pode ser observado na Figura 5.11 para o solo laterítico compactado, onde as concentrações máximas relativas, determinadas nos espaços bi e tridimensional, encontram-se superpostas uma sobre a outra.

Este fenômeno deve ter sido influenciado pelo processo de compactação que afetou diretamente o incremento do coeficiente de retardo nestes materiais. O retardo é um parâmetro que, diferentemente do coeficiente de dispersão e de dispersividade, não considera a tridimensionalidade do sistema. Logo, sua grandeza permanece igual em todas as direções do espaço, atuando diretamente no tensor de coeficientes de dispersão mecânica. Assim, o retardo é simplesmente um valor escalar ($1/R$) que multiplica todas as componentes do tensor. Ou seja, no fenômeno de transporte considerando os mecanismos de adsorção, representados

pelo coeficiente de retardo, a componente de dispersão mecânica (D^m) é reduzida pela magnitude deste coeficiente. Neste caso, a dispersão mecânica no sentido transversal vertical (D_z^h) é muito baixa, e quando dividida por um valor de retardo (R) muito grande, seu efeito torna-se praticamente desprezível. Finalmente, pode-se dizer que nos solos compactados, o efeito da dispersividade transversal é desprezível. Isto é interessante, devido ao fato de que o problema de contaminação, para este tipo de material em condições compactadas, poderia, em princípio, ser simulado em condições bidimensionais.

Para os solos lateríticos compactados (Figuras 5.4 e 5.6) observa-se que para um tempo de análise próximo aos 120 anos (43800 dias) o avanço dos íons contaminantes só consegue chegar até aproximadamente a metade da distância de análise ($x = 600$ m). Em princípio, este efeito é devido à condição do próprio material e ao significativo efeito que a compactação estabelece no fenômeno sorcivo. As plumas apresentadas nas Figuras 5.4 e 5.6 foram plotadas na ordem de menor para maior deslocamento dos íons contaminantes. O Cd^{2+} apresentou os maiores coeficientes de dispersividade, que em teoria representam a capacidade de um soluto de se espalhar num meio poroso. O Cd^{2+} também apresentou menores deslocamentos, quando comparado com o Mn^{2+} . Além disso, o Cd^{2+} conservou o maior fator de retardo comparado com os outros íons. Esse comportamento também foi observado experimentalmente por Nascentes (2003) como foi apresentado no Capítulo 3 no Item 3.3.3.2.

Nos solos lateríticos *in-situ*, apresentados nas Figuras 5.5 e 5.7 (esquerda) para o solo a 3 m e (direita) para o solo a 7 m, o comportamento observado nas plumas foi diferente em relação ao solo laterítico compactado. Conservando o padrão de apresentação das análises anteriores, as Figuras 5.5 e 5.7 foram plotadas na ordem de menor para maior deslocamento dos íons contaminantes. Para os dois solos *in-situ*, o íon contaminante que se deslocou menos foi o Pb^{2+} e o íon que se deslocou mais foi o íon Cd^{2+} . Esse comportamento também foi observado experimentalmente por Carvalho (2001). Os tempos da análise para os dois materiais foram diferentes: para o solo laterítico *in-situ* a 3 m, o tempo foi de $t = 500$ dias e para o solo laterítico *in-situ* a 7 m, o tempo foi de $t = 5000$ dias, o que corresponde a dez vezes o tempo do primeiro solo. Embora os tempos de análise sejam diferentes, nas Figuras 5.5 e 5.7 observa-se que as distâncias atingidas pelas plumas de cada íon nos dois materiais são similares. Esse comportamento também foi observado nos resultados unidimensionais, onde o tempo para atingir o processo de estabilização na concentração, foi uma ordem de magnitude maior no solo com maior profundidade.

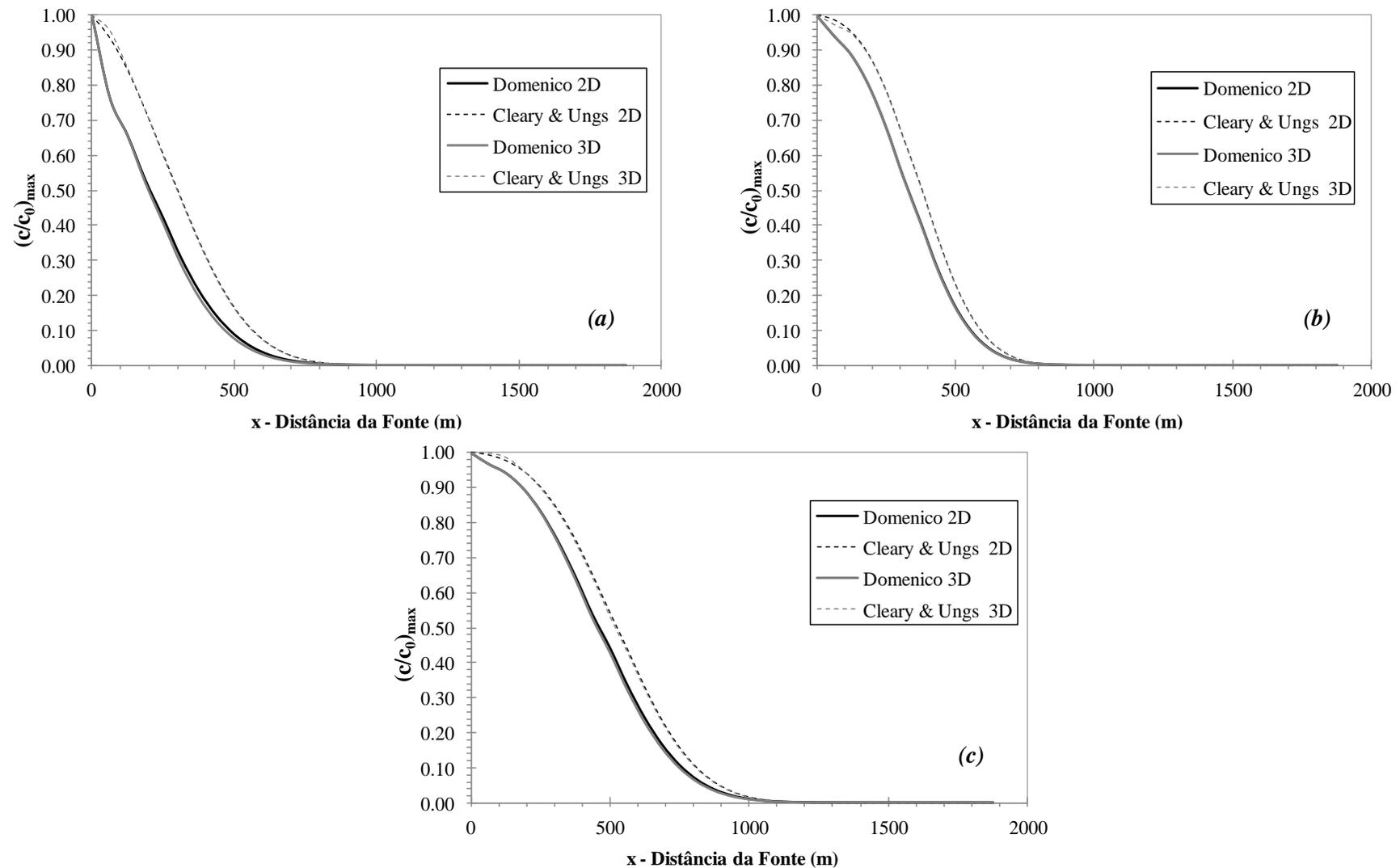


Figura 5.11. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para os solo laterítico compactado. (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} .

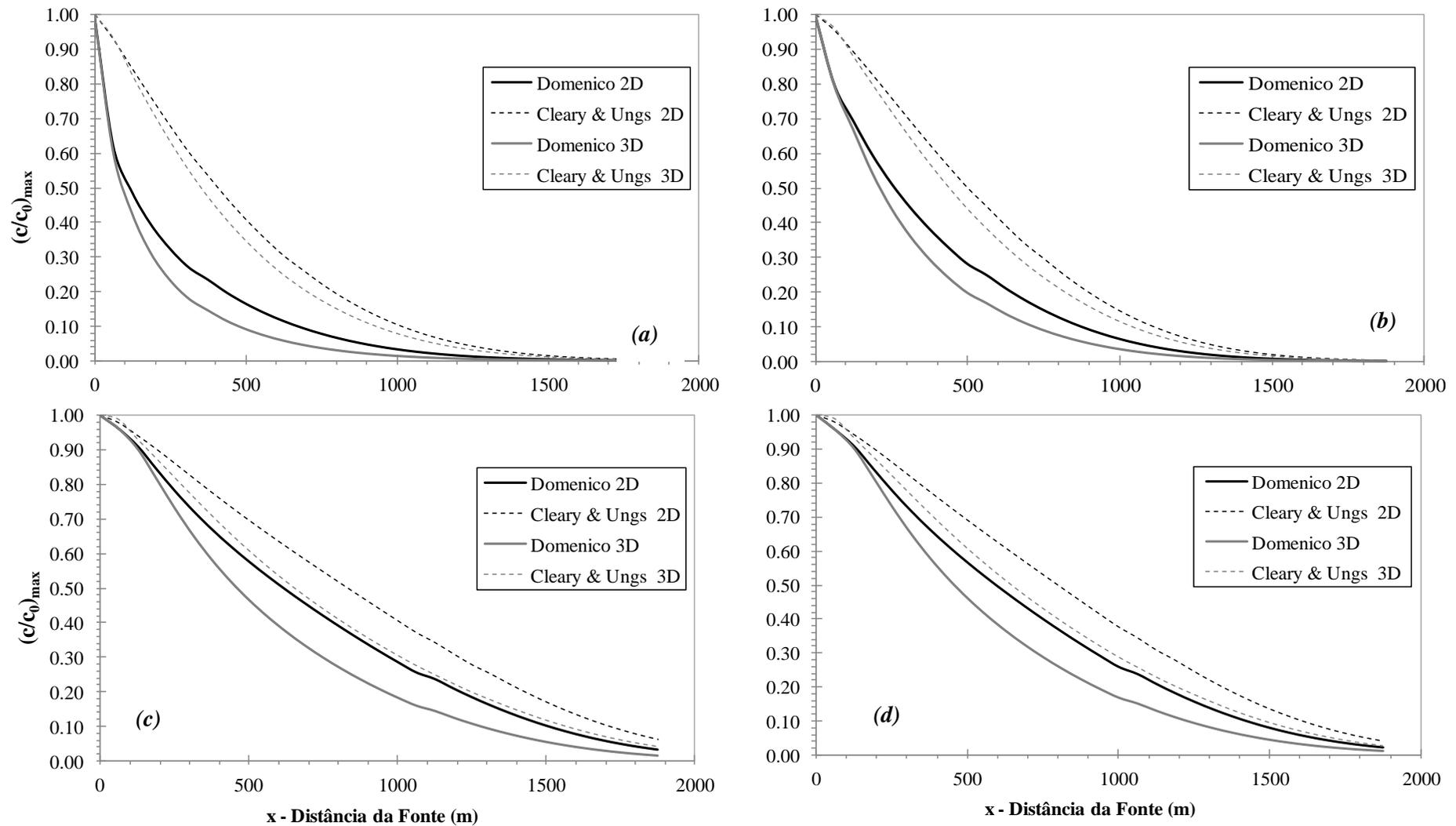


Figura 5.12. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

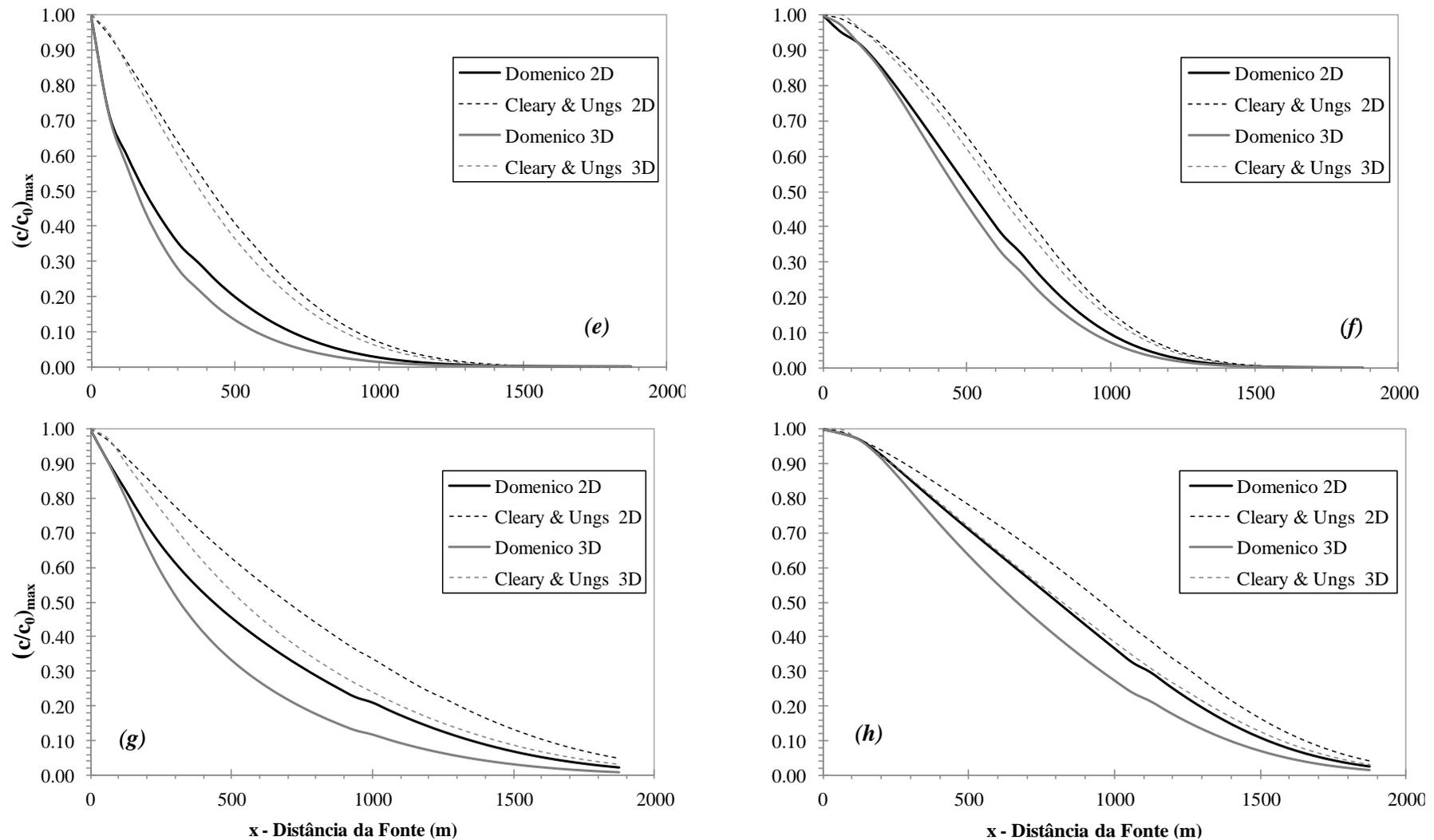


Figura 5.13. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

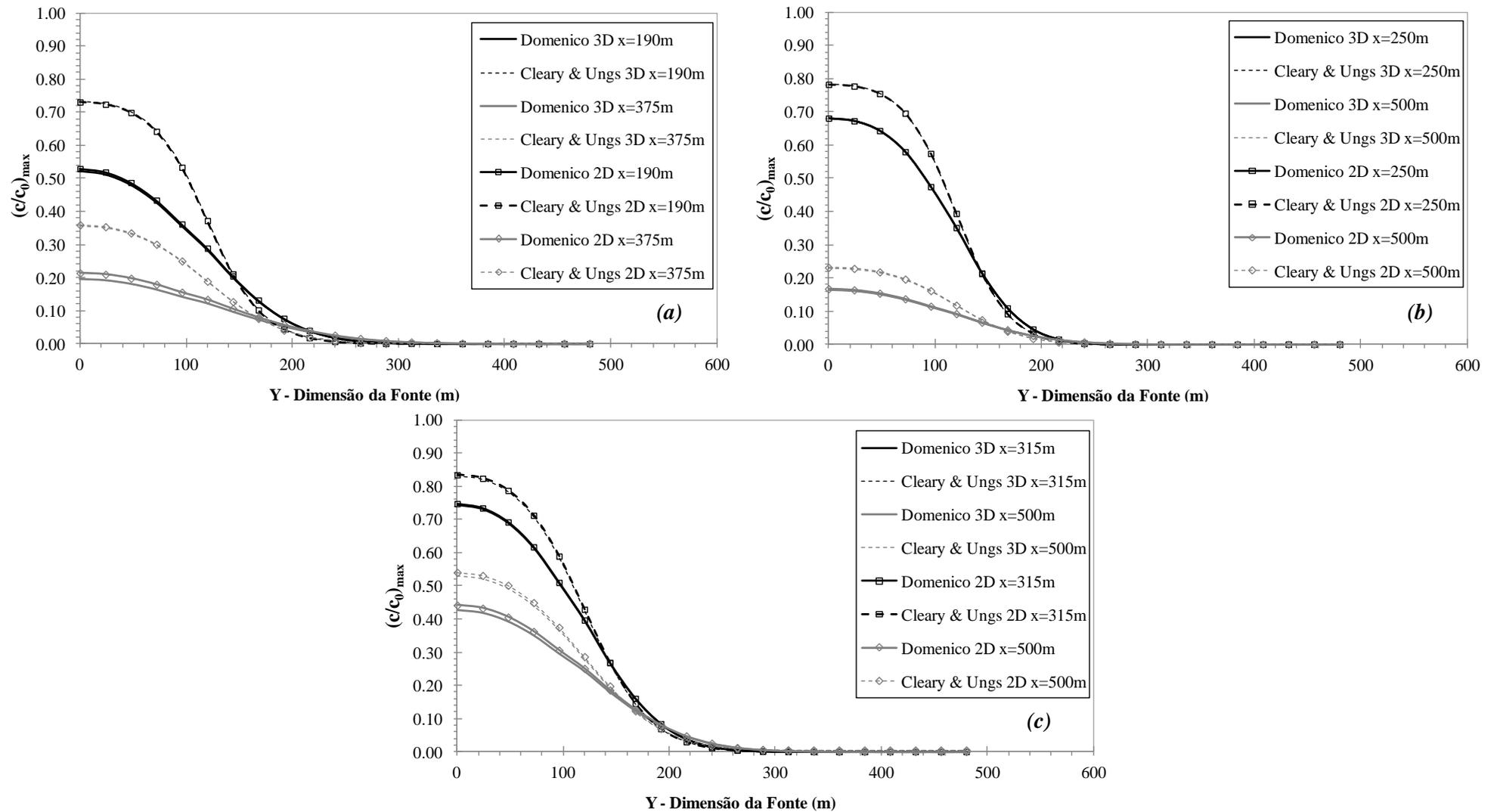


Figura 5.14. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para o solo laterítico compactado. (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} .

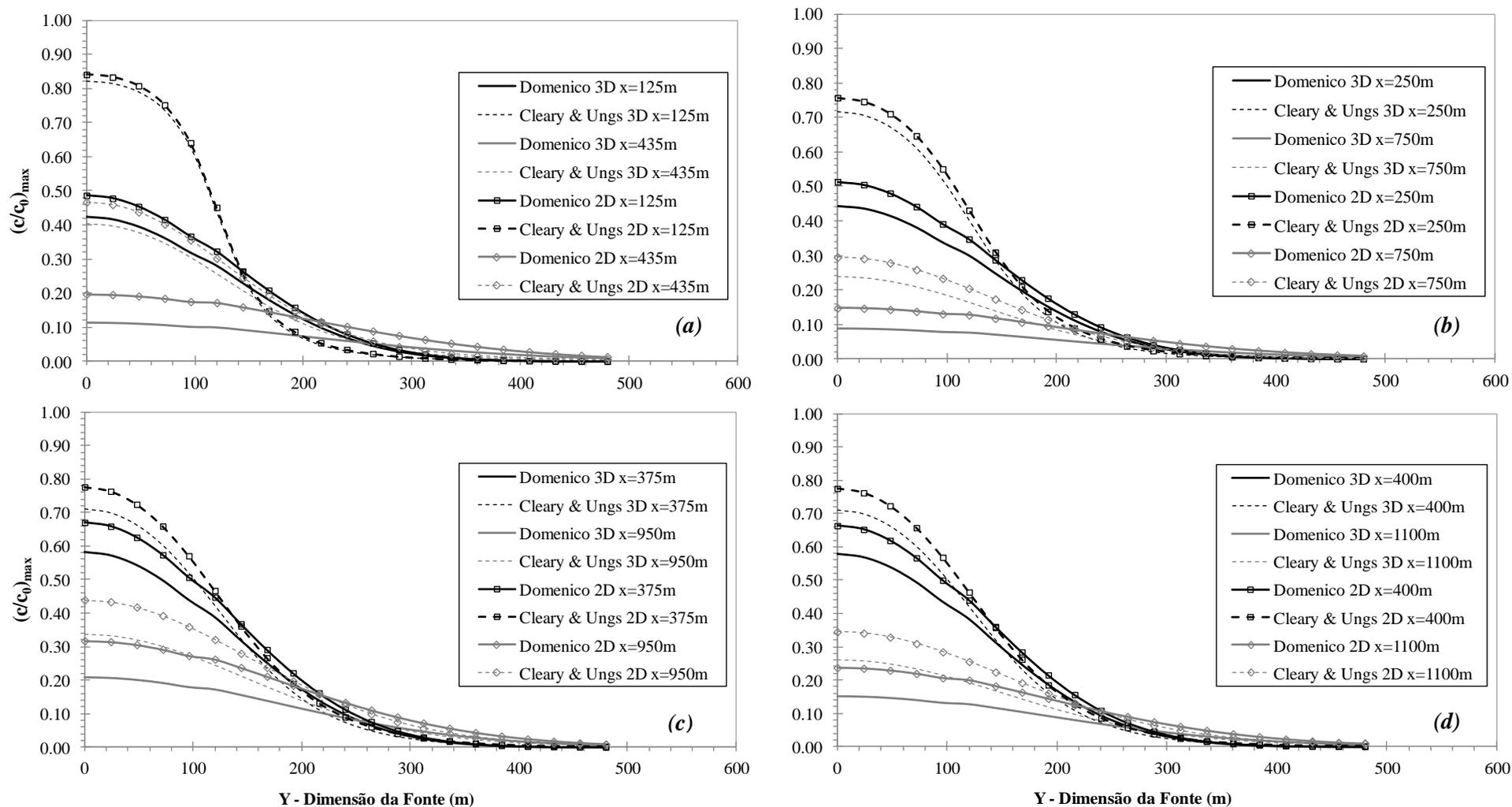


Figura 5.15. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

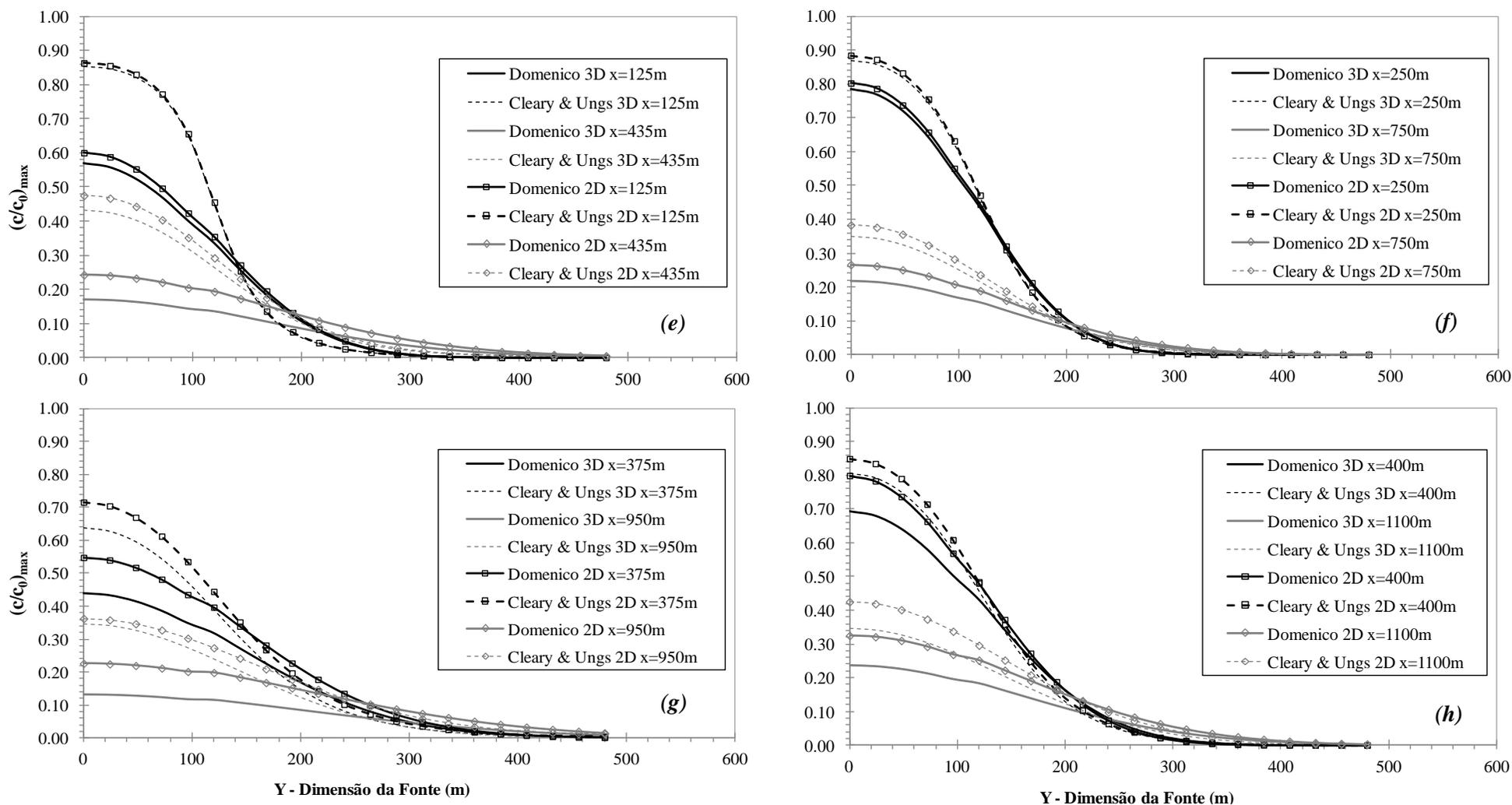


Figura 5.16. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

Nos resultados apresentados se faz sempre uma comparação entre as plumas contaminantes obtidas pelas soluções de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978). Apresentam-se em todos os casos fortes discrepâncias associadas com o valor da concentração relativa em determinados pontos do domínio e ao avanço das plumas contaminantes.

De uma forma geral, observa-se que nos solos lateríticos compactados as duas soluções apresentam uma melhor proximidade quando comparadas com as plumas dos solos lateríticos *in-situ*. Particularmente, as plumas para os solos lateríticos *in-situ* a 3 m apresentaram as maiores divergências entre as duas soluções quando comparadas com o solo laterítico *in-situ* a 7 m. Também observa-se, nas Figuras 5.10 e 5.11, que a maior divergência entre as duas soluções analíticas se apresenta sobre o eixo longitudinal da pluma contaminante, quando $x = 0$. Para medir a magnitude dessa divergência determinou-se a diferença média absoluta existente entre os valores de concentração relativa máxima das duas soluções:

$$\overline{\delta V} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\delta V_i| \quad (5.27)$$

onde $\overline{\delta V}$ é a magnitude da diferença média absoluta dos N pontos da curva que compõe a concentração máxima relativa, δV_i corresponde à diferença no i -ésimo ponto entre a concentração máxima relativa obtida pela solução analítica de Domenico e a concentração máxima relativa obtida pela solução analítica de Cleary & Ungs (1978). Os resultados são apresentados na Figura 5.17 mediante diagramas de barras que comparam as magnitudes das diferenças médias absolutas entre os diferentes íons contaminantes utilizados, assim como, também, as magnitudes das mesmas diferenças para as análises bi e tridimensionais.

Na Figura 5.17 identifica-se uma leve diferença entre as soluções analíticas bi e tridimensionais para todos os solos e íons utilizados. Esta diferença variou, de forma geral, apenas entre 0.003 e 0.008 podendo ser causada pela presença da componente dispersiva transversal vertical (α_z). Destaca-se que se tem uma maior diferença entre os materiais que apresentaram maiores valores de coeficiente de dispersividade longitudinal, como o Cd^{2+} no solo laterítico compactado e o Pb^{2+} e o Cu^{2+} no solo laterítico *in-situ*. Como foi enunciado anteriormente, o coeficiente de dispersividade transversal vertical foi considerado duas ordens de magnitude menor que a componente dispersiva longitudinal (α_x), logo, quanto maior a componente dispersiva longitudinal, maior poderia ser a influência da componente dispersiva transversal vertical no fenômeno de transporte.

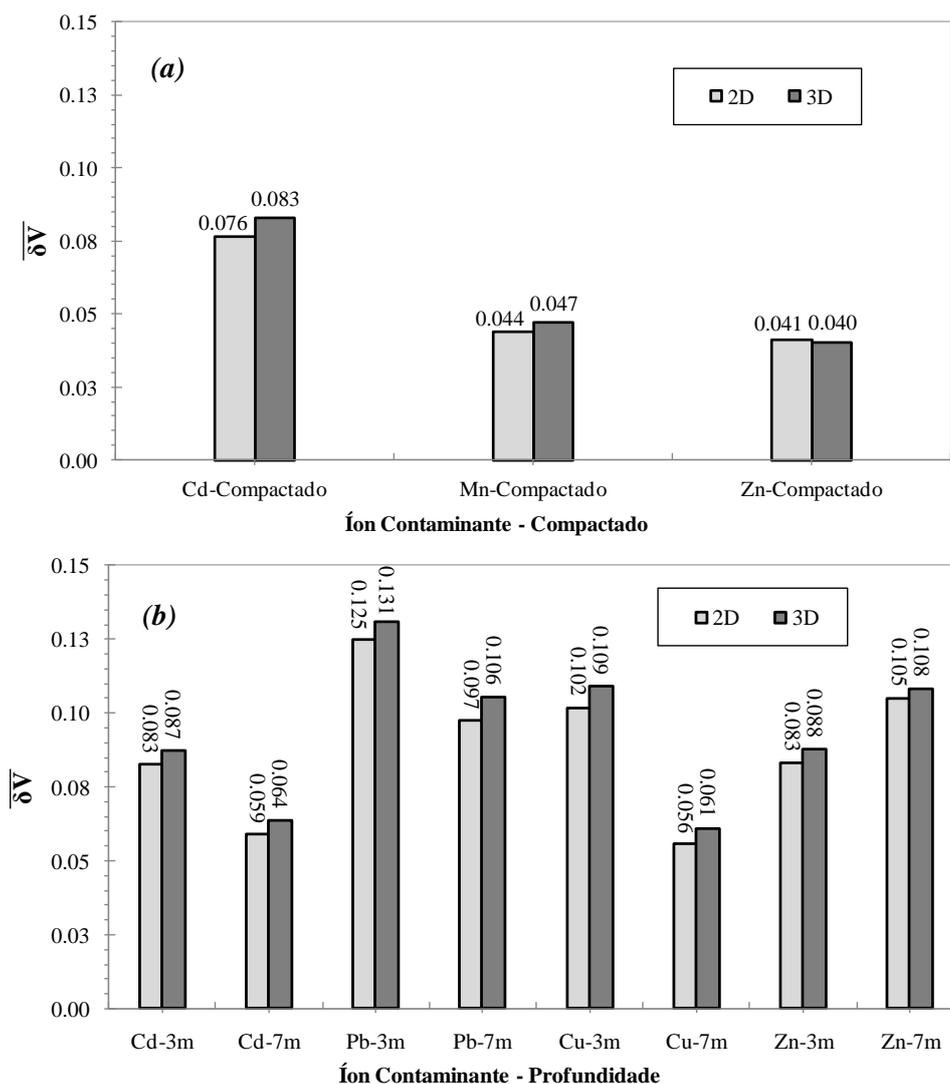


Figura 5.17. Comparação nos espaços bi e tridimensionais da magnitude das diferenças médias absolutas entre as soluções analíticas de Domenico e Cleary & Unga (a) para os solos lateríticos compactados e (b) para os solos lateríticos *in-situ*.

Como se observa na Figura 5.17, nos solos lateríticos compactados a maior magnitude de diferenças médias absolutas se apresenta principalmente nos íons Cd^{2+} com valores iguais a 0.083 para o caso tridimensional e 0.076 para o caso bidimensional. Nos íons Zn^{2+} e Mn^{2+} , as aproximações foram melhores e as magnitudes de diferenças médias absolutas foram da ordem de 0.040 e 0.047 no caso tridimensional e de 0.041 e 0.044 para o bidimensional. Estes últimos representam quase a metade da diferença média absoluta apresentada no íon Cd^{2+} .

No caso dos solos lateríticos *in-situ* (Figura 5.17(b)), a magnitude da diferença média absoluta para algumas plumas superou o valor de 0.1. De forma particular, observa-se que os solos que apresentaram uma diferença menor foram os solos lateríticos *in-situ* a 7 m. No caso

particular dos íons Pb^{2+} e Zn^{2+} , a diferença é muito mais pronunciada comparada com os íons Cu^{2+} e Cd^{2+} onde se tem uma melhor aproximação entre as duas soluções. Nestes materiais, a mínima e máxima magnitude de diferença média absoluta oscilou entre 0.056 a 0.105 na análise bidimensional e de 0.061 e 0.108 na análise tridimensional. Estes valores corresponderam aos íons contaminantes Cu^{2+} e Zn^{2+} , respectivamente.

Finalmente, nos solos lateríticos *in-situ* a 3 m de profundidade se observou a maior diferença entre as plumas contaminantes. Observa-se na Figura 5.17(b) que os íons Pb^{2+} e Cu^{2+} apresentaram as máximas diferenças médias absolutas com magnitudes que estiveram entre 0.131 e 0.106 para o caso tridimensional e entre 0.125 e 0.102 para o caso bidimensional. As mínimas diferenças médias absolutas foram obtidas para as plumas dos íons Cd^{2+} e Zn^{2+} com magnitudes de 0.088 e 0.083 para ambos os íons em ambos os espaços.

Uma magnitude média da diferença média absoluta de todas as análises é apresentada na Tabela 5.2. Observa-se que a média das magnitudes das diferenças médias absolutas dos solos lateríticos compactados corresponde a 50% do valor obtido para a média das magnitudes das diferenças médias absolutas dos solos lateríticos *in-situ* a 3 m.

Tabela 5.2. Magnitude média da diferença média absoluta de todas as análises.

SOLO LATERÍTICO	$\overline{\delta V}$
condições <i>in-situ</i> 3m	0.113
condições <i>in-situ</i> 7m	0.082
condições compactadas	0.054

Existe um fenômeno comum observado em todas as soluções analíticas. Este fenômeno está associado a dois comportamentos relacionados à forma de propagação da pluma contaminante deduzida pela solução analítica de Domenico (1987) comparada com a solução de Cleary & Ungs (1978). Os comportamentos podem ser observados nas Figuras 5.5 a 5.7. O primeiro ocorre no sentido longitudinal da pluma, visto a partir do eixo longitudinal quando $x = 0$, onde se localiza a maior diferença média absoluta entre as duas soluções analíticas (Figuras 5.8 a 5.11). Para Domenico (1987), observa-se um menor avanço da pluma contaminante comparado com a solução de Cleary & Ungs (1978). Isto indica que para uma mesma distância Domenico (1987) proporciona um menor valor de concentração. O segundo comportamento ocorre no sentido transversal da pluma, onde os valores de concentração

encontrados por Domenico(1987) são agora maiores que os valores de concentração determinados pela solução de Cleary & Unga(1978).

West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) realizaram uma análise matemática rigorosa da solução analítica de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987), encontrando vários problemas importantes nas soluções propostas. Um deles é relacionado ao fenômeno de propagação da pluma contaminante. Os autores explicam que existe uma interpretação errônea na conceituação da formulação do problema de Domenico (1987) referente ao *tempo de análise* ($t = x/v$) no processo de contaminação (Eqs. (5.21b) e (5.21c)). Esta interpretação está vinculada à massa dispersiva na direção transversal, que neste caso não dependerá do *tempo de simulação* (t) (tempo para o qual o usuário realmente esperará encontrar a concentração) (Srinivasan *et al.*, 2007). Por esta razão matemática, atribui-se a Domenico (1987) uma super estimação do tempo de análise de todas as partículas ao longo do eixo longitudinal, permitindo, assim, que no sentido transversal seja requerido um maior tempo para que o mecanismo de dispersão ocorra. Como consequência, existirá uma diminuição da concentração na parte longitudinal da pluma e, portanto, a solução analítica de Domenico sempre levará a uma subestimação do avanço e da concentração total na direção longitudinal.

Para entender isto de forma detalhada, considerou-se o caso do solo laterítico em condições *in-situ* a 7 m para o íon Cu^{2+} onde se tem uma velocidade linear média de $v = 0.4147$ m/ano, um coeficiente de retardo de $R = 3.315$ (Tabela 5.1). Além disso, a distribuição da pluma de concentração foi prevista para um tempo de simulação de 5000 dias em um ponto a 1250 m da fonte. A solução de Domenico estima o *tempo de análise* no ponto de interesse, fazendo $t = x/(v/R) = 10000$ dias. Na realidade este tempo é maior do que o *tempo de simulação* requerido inicialmente ($t = 5000$ dias). Esta é uma hipótese pouco realista já que a pluma de contaminante de 5000 dias não pode considerar a dispersão de uma pluma de 10000 dias.

Com todas as considerações realizadas, foi possível estabelecer um ponto em comum nos comportamentos de divergência entre as duas soluções. Elaborou-se assim a Figura 5.18 que apresenta uma representação gráfica, mediante um diagrama de barras, das magnitudes dos parâmetros de transporte apresentados na Tabela 5.1. Nesta figura, nos eixos das ordenadas são plotados o coeficiente de retardo (eixo esquerdo) e os coeficientes de dispersividade (eixo direito).

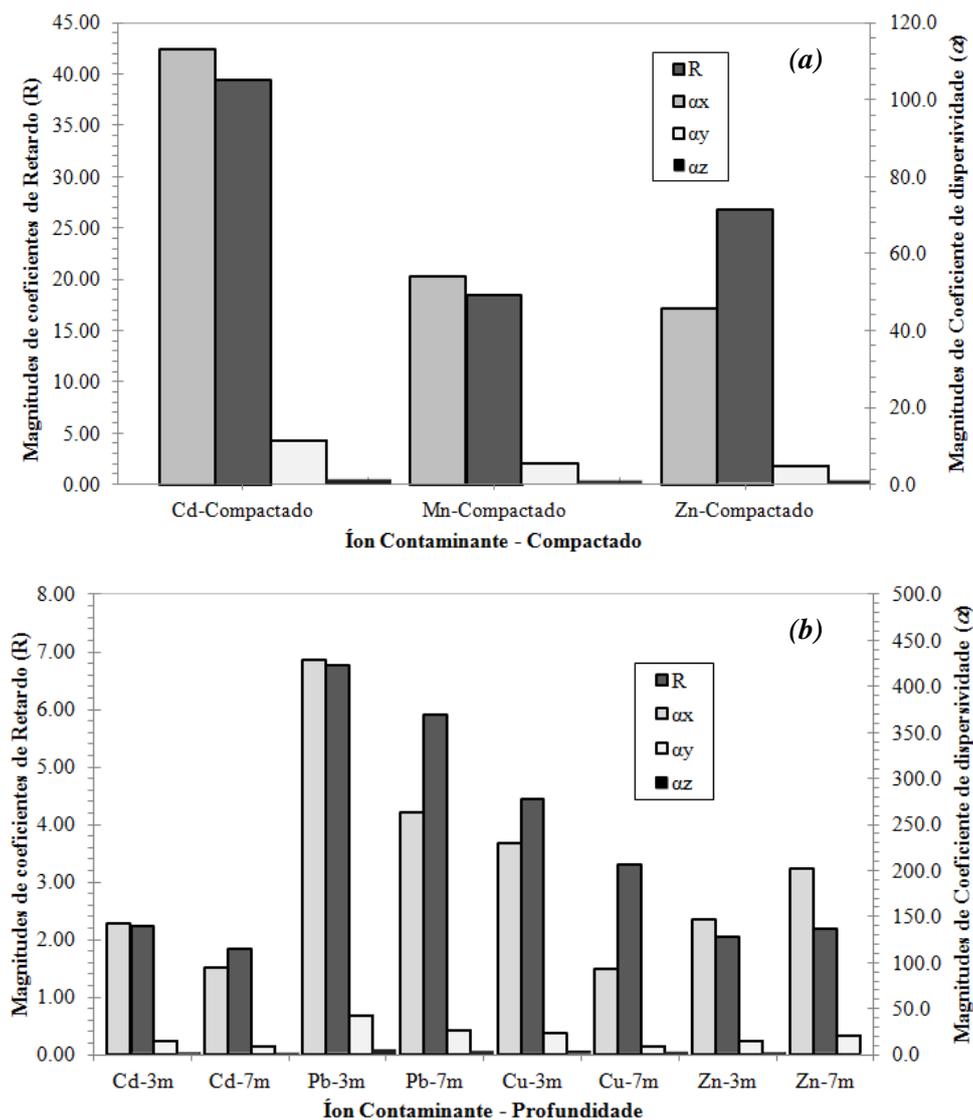


Figura 5.18. Representação gráfica das magnitudes dos parâmetros de transporte para todos os solos lateríticos e íons analisados.

Como se pode observar nas Figuras 5.12 e 5.13, os íons que apresentaram as menores magnitudes de diferença média absoluta entre as duas soluções coincidem com os íons que possuem as menores magnitudes do coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x). No caso dos solos lateríticos *in-situ* extraídos a 3 m, que correspondem aos solos com maiores diferenças, o parâmetro dispersivo variou entre $150 \text{ m} < \alpha_x < 430 \text{ m}$, aproximadamente. Estes valores correspondem aos coeficientes de dispersividade mínimo e máximo referentes aos íons Zn^{2+} e Pb^{2+} , respectivamente.

Observa-se que, na Figura 5.17(b), o Zn^{2+} foi um dos íons que apresentou o menor valor de diferença média absoluta e o íon Pb^{2+} apresentou a máxima diferença entre as duas soluções.

No entanto, para os solos lateríticos compactados, o coeficiente de dispersividade apresentou uma variação entre $45 \text{ m} < \alpha_x < 115 \text{ m}$, sendo o valor de $\alpha_x = 115 \text{ m}$ correspondente ao íon Cd^{2+} que apresentou a maior magnitude de diferença média absoluta entre as duas soluções. Segundo West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007), a diferença na forma de propagação da pluma de Domenico (1987) em relação à de Cleary & Ungs (1978) é consequência da interpretação errada do *tempo de análise* ($t = x/v$) que pode ser atenuada quando o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) tende a ser nulo. De uma forma mais específica Srinivasan *et al.* (2007) explica que o processo de derivação feito por Domenico (1987), onde o tempo nos termos de dispersão transversal é substituído por x/v , só é válido quando o coeficiente de dispersividade longitudinal tende a zero ($\alpha_x \rightarrow 0$). Para todos os valores do coeficiente de dispersividade longitudinal, com exceção do valor nulo, a solução terá um erro finito.

Srinivasan *et al.* (2007) explicam que para todas as partículas que estejam localizadas atrás da frente advectiva ($x = vt$), o tempo de análise utilizado na solução de Domenico $t = x/v$ será menor do que o tempo de simulação. No entanto, para partículas que estejam na frente advectiva, o tempo da análise $t = x/v$ será maior do que o tempo de simulação. Esta consideração indica que atrás da frente advectiva, a solução de Domenico (1987) comparada com a solução de Cleary & Ungs (1978) poderia apresentar as melhores aproximações, desde que fosse mantida a restrição de um valor de coeficiente de dispersividade longitudinal muito baixo. Finalmente, a distribuição espacial deste erro será muito sensível ao valor de α_x e à posição da frente advectiva (vt).

Dentre outros erros importantes, do ponto de vista matemático, considerados por Domenico (1987), e que afetam de uma forma mais global a distribuição da pluma nesta solução, pode-se citar o método de solução, chamado por Domenico & Robbins (1985) de *superposição* e apresentado nas Eqs. (5.16) e (5.21), que consiste em escolher as soluções bi e tridimensionais como sendo um produto de cada uma das soluções unidimensionais em cada uma das direções. West *et al.* (2007) afirma que este procedimento não é matematicamente rigoroso e introduz erros de aproximação em relação às técnicas exatas. Tendo em vista, que as Eqs. (5.16) e (5.21) não são soluções para a equação de transporte de massa originalmente proposta e, por isto, não se pode falar em uma verdadeira conservação da massa.

5.7. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Com o propósito de verificar alguns comportamentos analisados no Item 5.6, foi feita uma análise de sensibilidade alterando todos os parâmetros de transporte. Esta análise foi fundamentada na metodologia adotada por Srinivasan *et al.* (2007) que consistiu em alterar os parâmetros enunciados em uma ordem de magnitude acima e abaixo da magnitude dos parâmetros da análise inicial, apresentados na Tabela 5.1. Esta escolha de alteração foi focada em observar de uma forma exagerada os comportamentos analisados. Neste caso, trabalhar com alterações pequenas poderá acarretar em uma pequena variação na resposta das plumas. Finalmente, esta metodologia garante que os fenômenos que foram discutidos no Item 5.6 serão observados nos materiais selecionados.

Para efeitos desta análise foram selecionados dois solos lateríticos e cada um com um íon contaminante em específico. A escolha foi fundamentada nas Figuras 5.12 e 5.13. Escolheu-se como primeiro material, o solo laterítico *in-situ* a 3 m com o íon Cu^{2+} , que apresentou uma das maiores diferenças médias absolutas e o maior coeficiente de dispersividade longitudinal. O segundo material foi o solo laterítico compactado com o íon Zn^{2+} , que teve a menor diferença média absoluta e o menor coeficiente de dispersividade.

5.7.1. Análise de Sensibilidade Coeficientes de Dispersividade ($\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$)

Os coeficientes de dispersividade foram alterados considerando uma ordem de magnitude abaixo dos parâmetros de dispersividade utilizados na análise inicial. Não foi considerado o outro extremo, já que o comportamento do fenômeno foi observado nas Figuras 5.4 a 5.7, quando os coeficientes de dispersividade eram altos. Os resultados desta análise foram apresentados na Figura 5.19.

Observa-se, comparando a Figura 5.10 com a Figura 5.19 para o caso do solo laterítico *in-situ* (íon Cu^{2+}), que a diferença existente entre as duas soluções analíticas apresentou uma importante diminuição quando o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) é menor. No entanto, para o solo laterítico compactado (íon Zn^{2+}), esta diferença foi praticamente nula (Figura 5.8) e, as duas soluções são praticamente coincidentes. A melhoria entre as duas soluções foi mais evidente no sentido longitudinal, especialmente sobre o eixo longitudinal da pluma contaminante.

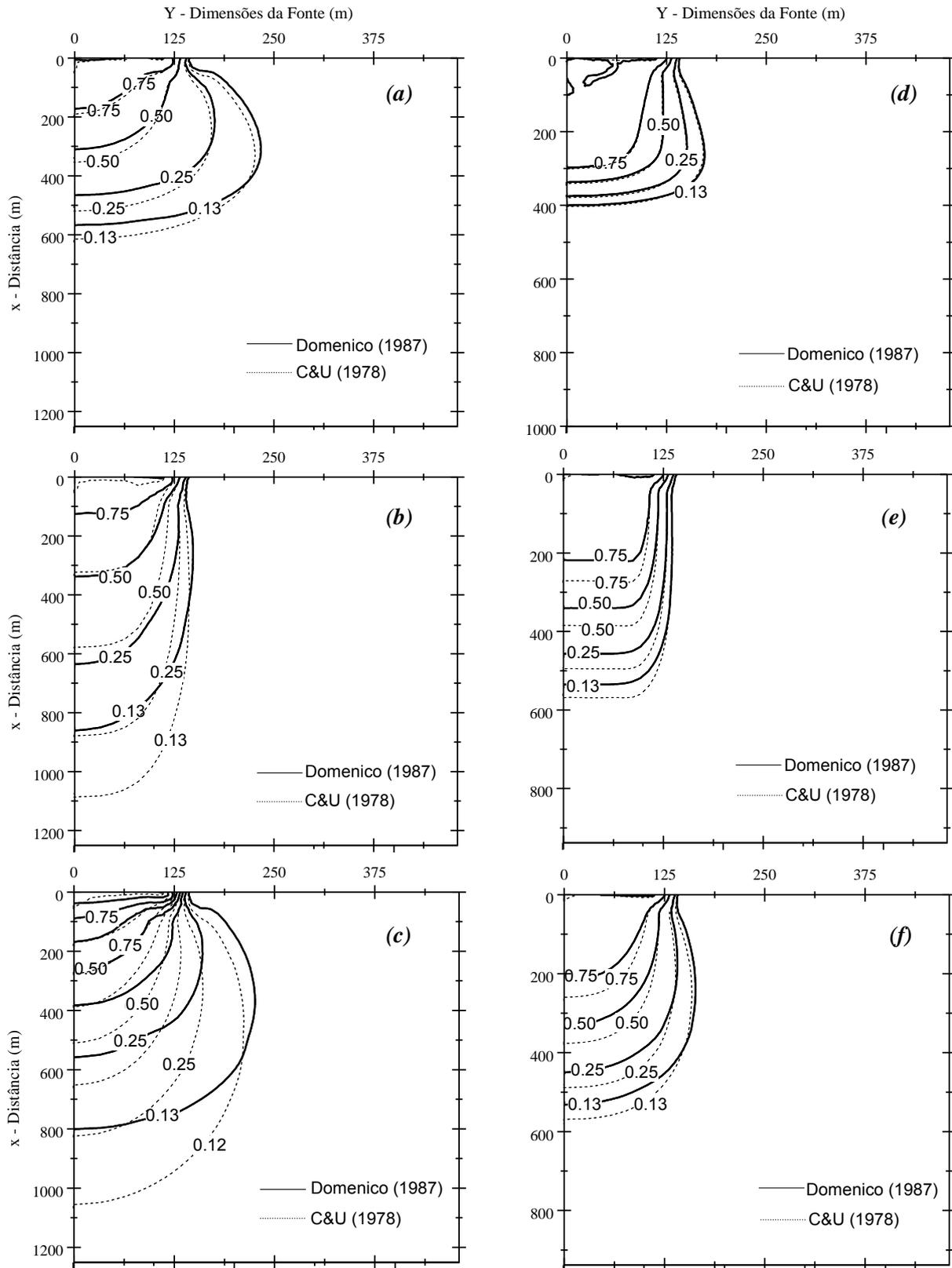


Figura 5.19. Alteração dos coeficientes de dispersividade longitudinal e transversais, (a) $\alpha_x/10$, (b) $\alpha_y/10$ e (c) $\alpha_z/10$ correspondem ao solo laterítico *in-situ* a 3 m para o íon Cu^{2+} (d) $\alpha_x/10$, (e) $\alpha_y/10$ e (f) $\alpha_z/10$ correspondem ao solo laterítico compactado para o íon Zn^{2+} .

No caso do coeficiente de dispersividade transversal horizontal (α_y), comparando-se as três Figuras 5.6, 5.7 e 5.14, observa-se que as plumas apresentaram uma distância de avanço similar à obtida na análise inicial, entretanto, não se evidencia uma diminuição na diferença entre as duas soluções analíticas com a diminuição do parâmetro de dispersividade. O mesmo caso acontece com o coeficiente de dispersividade transversal vertical (α_z). Para os dois solos a diminuição do coeficiente de dispersividade transversal vertical não gerou nenhum tipo de mudança importante nas plumas de contaminação e, como consequência, nenhuma diminuição na diferença entre as duas soluções.

5.7.1. Análise de Sensibilidade Coeficiente de Retardo (R) e Velocidade Linear Média de Percolação (v_x)

Neste caso, o coeficiente de retardo e a velocidade linear média foram alterados uma ordem de magnitude acima e abaixo do valor considerado na análise inicial. O fato de aumentar e diminuir a velocidade linear média uma ordem de magnitude, por exemplo, consiste em alterar de forma inversa o coeficiente de retardo ($v'_x=v_x/R$), ou seja, multiplicar a v_x por um fator 10 corresponde a dividir o retardo R pelo mesmo fator, e vice-versa. Isto explica o fato de que na Figura 5.20 tem-se apenas as plumas contaminantes para o caso da alteração da velocidade linear média.

Comparando a Figura 5.20 com a Figura 5.8 para o caso do solo laterítico compactado e com a Figura 5.10 para o solo laterítico *in-situ*, observa-se que o principal efeito na alteração da velocidade linear média e no fator de retardo produz como consequência uma alteração no avanço da pluma contaminante. Este efeito é muito mais notório no sentido longitudinal das plumas, sentido no qual só atua a velocidade linear média. No entanto, o efeito de redução entre as duas soluções analíticas, foi observado unicamente quando se aumentou a velocidade linear média e diminuiu o coeficiente de retardo. É neste ponto onde a localização da frente advectiva apresenta uma influência importante na aproximação entre as duas soluções. Quando se aumenta a velocidade linear média ou se diminui o coeficiente de retardo, ocorre um aumento da frente advectiva ($x = vt$).

Para os dois solos lateríticos apresentados, as frentes advectivas representadas por $v_x \cdot 10$ ou $R/10$ estão localizadas a uma distância $x = 5100$ m para o solo laterítico *in-situ* e a uma distância $x = 3400$ m para o solo laterítico compactado. Portanto, grande parte da massa da pluma contaminante se localizada atrás da frente advectiva. Conseguir que a solução de

Domenico (1987) apresente uma melhor resposta no caso do solo laterítico *in-situ* é quase impossível já que, para este material, a frente advectiva se localiza a uma distância menor do que o ponto no qual o fenômeno já se encontra totalmente estabilizado.

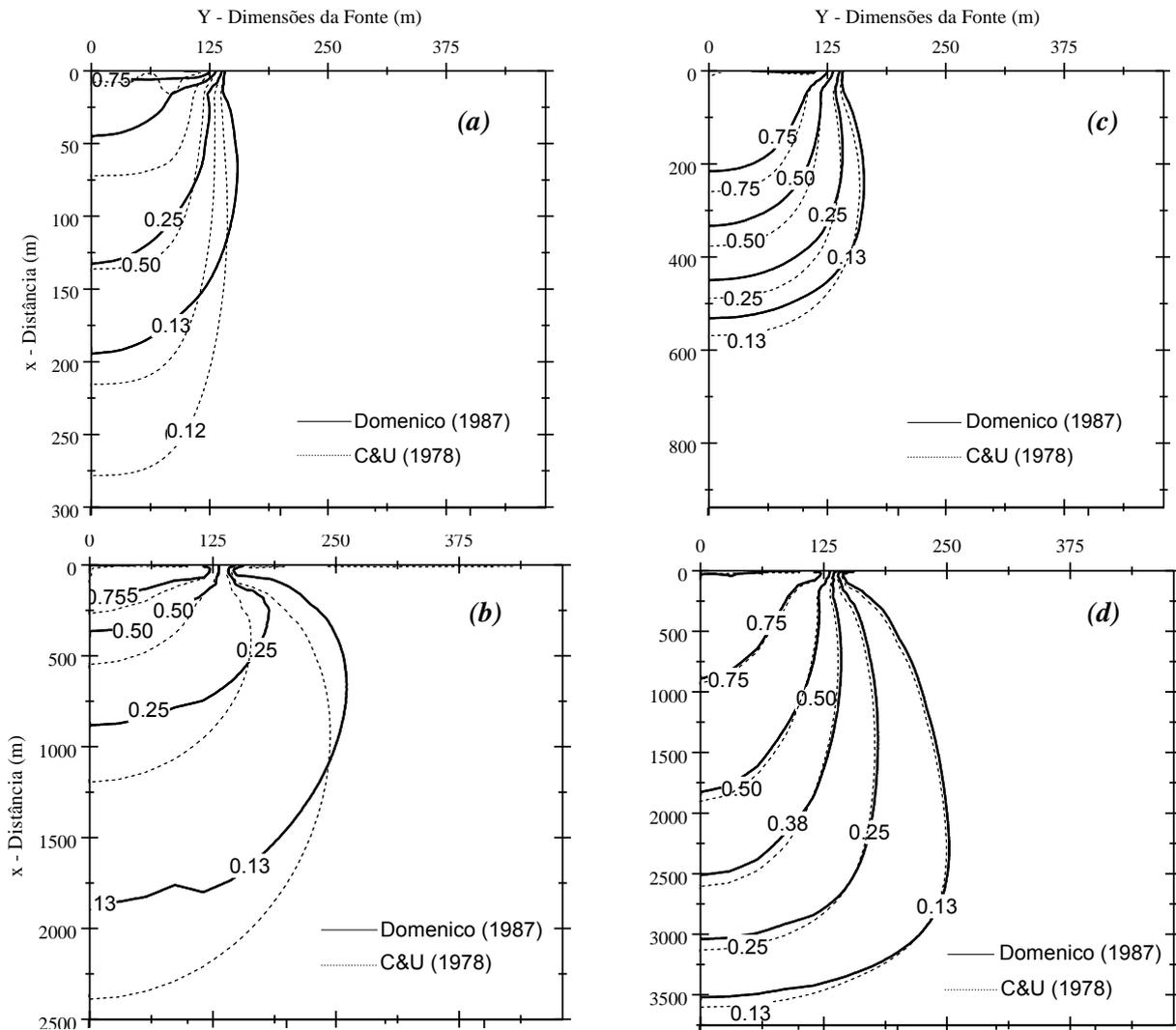


Figura 5.20. Alteração da velocidade linear média e do coeficiente de retardo, (a) $v_x/10$ e (b) $v_x \cdot 10$ correspondem ao solo laterítico *in-situ* a 3 m para o íon Cu^{2+} , (c) $v_x/10$ e (d) $v_x \cdot 10$ correspondem ao solo laterítico compactado para o íon Zn^{2+} .

A Figura 5.21 apresenta uma representação da análise de sensibilidade para o cálculo da diferença média absoluta entre as duas soluções considerando as alterações aos parâmetros de transporte. Observa-se, comparando estes resultados com os apresentados na Figura 5.17, que se teve uma redução importante na magnitude da diferença média absoluta quando o coeficiente de dispersividade longitudinal é reduzido em uma ordem de magnitude do valor inicial. No caso do solo laterítico compactado (íon Zn^{2+}) (Figura 5.21(a)), a diferença passou

de 0.040 para 0.0015 e, no caso do solo laterítico *in-situ* (íon Cu^{2+}) (Figura 5.21(b)), a diferença passou de 0.109 a 0.0290. Assim também, o incremento da velocidade linear média ou a redução do coeficiente de retardo aumentou a precisão da solução de Domenico (1987). Com isto, conseguiu-se diminuir de forma importante a magnitude da diferença média absoluta, passando no caso do solo laterítico compactado de 0.040 para 0.0121 aproximadamente e, no caso do solo laterítico *in-situ*, de 0.109 para 0.044.

Alguns parâmetros, como os de dispersividade transversal, não acarretaram em uma modificação importante em relação à variação da magnitude da diferença média absoluta.

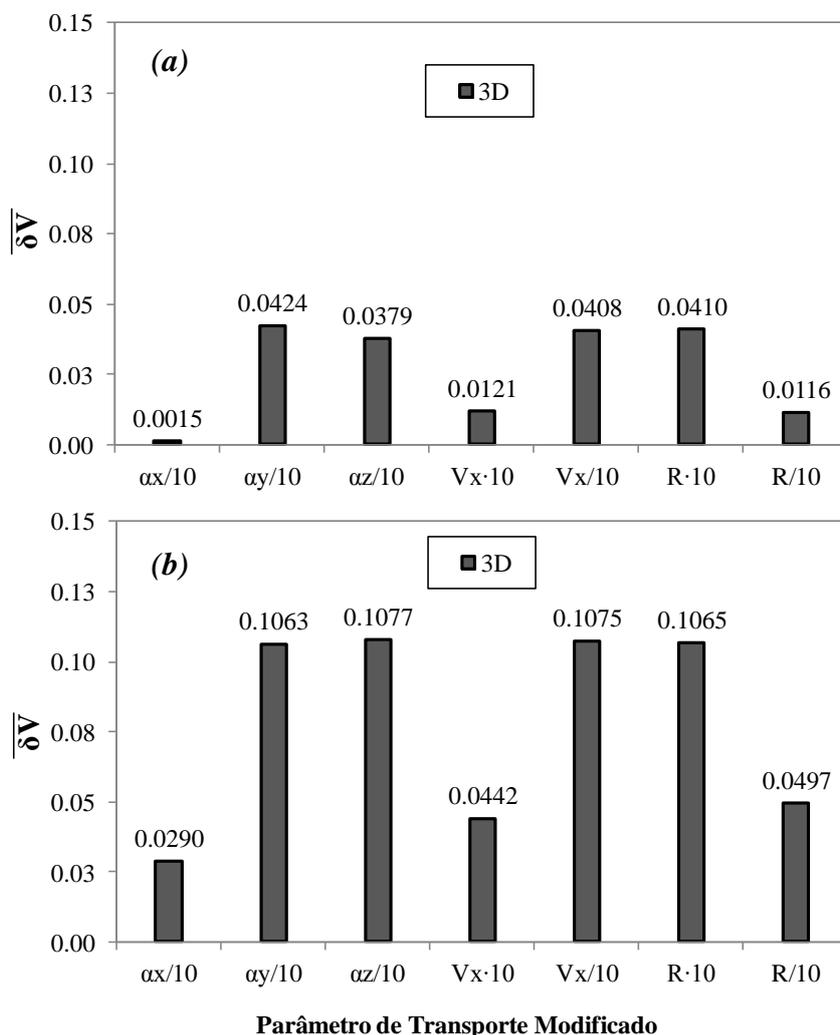


Figura 5.21. Magnitude das diferenças médias absolutas entre as soluções analíticas de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978) considerando a alteração dos parâmetros de transporte na análise de sensibilidade (a) para o solo laterítico compactado. (b) para o solo laterítico *in-situ*.

Com as análises realizadas, se compartilha e ratifica a idéia manifestada por Srinivasan *et al.* (2007) que explicaram que “a velocidade linear média e o coeficiente de retardo tem pouco efeito sobre a precisão da solução de Domenico (1987). No entanto, estes dois parâmetros contribuem de forma importante na determinação da localização da frente advectiva afetando assim a exatidão da solução. Em termos semelhantes, o tempo de simulação teria um efeito similar à velocidade linear média de percolação”. Então se conclui que o erro da solução de Domenico (1987) será baixo na resolução de problemas de transporte que tenham baixos valores de dispersividade longitudinal, altas velocidades de advecção e grandes tempos de simulação.

CAPÍTULO 4

4. SOLUÇÃO ANALÍTICA UNIDIMENSIONAL DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

4.1. ASPECTOS GERAIS

O fenômeno de transporte de contaminantes no subsolo vem sendo um dos mais importantes temas de pesquisa na engenharia nas últimas décadas (Bear, 1972; Domenico, 1984-1987; Gelhar et al., 1992; Bear & Cheng, 2010). Fetter (2008) explica que as equações diferenciais parciais que descrevem o fluxo de águas subterrâneas e o transporte de plumas contaminantes no meio poroso descritas no Capítulo 2 desta dissertação, podem ser resolvidas matematicamente usando soluções analíticas ou soluções numéricas.

De uma forma geral, para obter a solução analítica que gere uma solução exata para a equação diferencial parcial, requer-se que as propriedades e condições de contorno do domínio de estudo, neste caso o meio poroso, sejam pouco realistas e talvez idealizadas (Bear & Verruijt, 1987). Para a maioria dos problemas no campo, os benefícios matemáticos de se obter uma solução analítica exata são provavelmente superados pelos erros introduzidos devido às simplificações dadas ao contorno complexo do domínio.

Por outro lado, mesmo que muitos problemas de transporte devam ser resolvidos utilizando modelos numéricos, as soluções analíticas continuam sendo perseguidas por muitos pesquisadores, já que podem proporcionar uma melhor compreensão física do problema. Também têm o papel fundamental de validar os esquemas numéricos mais gerais quando aplicados às condições simplificadas para as quais existem soluções analíticas.

O objetivo deste capítulo é determinar os parâmetros de transporte de contaminantes utilizando uma técnica de otimização, que aplicada aos dados experimentais obtidos a partir dos ensaios de coluna em solos lateríticos *in-situ* e compactados, gerem os parâmetros ótimos. Ou seja, os parâmetros de transporte que quando são avaliados em uma solução analítica unidimensional consigam simular o melhor possível o obtido durante a fase experimental. Uma vez obtidos estes parâmetros, estes serão comparados com os parâmetros obtidos pelos

autores das respectivas pesquisas. Aliás, serão feitas análises paramétricas e de sensibilidade com o objetivo de identificar os parâmetros que mais afetam de forma qualitativa e quantitativamente, respectivamente, a pluma de contaminação. Em todos os casos será adotado como hipótese que os parâmetros como a densidade e a viscosidade da solução não mudam e que a matriz sólida é homogênea, isotrópica e indeformável (Bear & Cheng, 2010).

As soluções analíticas utilizadas serão aquelas que resolvem o problema de transporte de contaminantes por advecção-dispersão e sorção, através de um meio poroso saturado considerando inicialmente uma dimensão do espaço.

4.2. DEFINIÇÃO DE SOLUÇÕES ANALÍTICAS

As soluções analíticas de uma forma geral são soluções exatas para um problema específico, proporcionando uma resposta fechada ao modelo matemático geral. Estas soluções consideram uma série de suposições hidráulicas e do contorno do domínio objeto de estudo que finalmente ajudam na simplificação do modelo matemático e facilitam na obtenção da solução. Soluções analíticas podem ser obtidas a partir dos princípios físicos básicos e não geram o problema da dispersão numérica e outros erros de truncamento que, geralmente, são produzidos em alguns tipos de simulações numéricas (Zheng & Bennett, 1995).

Dentro das hipóteses hidráulicas, assume-se fluxo estacionário e uniforme das águas subterrâneas em apenas uma das dimensões além de gradiente hidráulico constante. Já dentro das hipóteses do contorno, estabelecem-se geometrias simplificadas onde, os limites superiores e inferiores do domínio são bem definidos. Além disso, a homogeneidade, a isotropia e a uniformidade das propriedades de reação química dos componentes que atuam no fenômeno são assumidas.

Devido às simplificações próprias das soluções analíticas, não é possível considerar todas as condições de campo, as quais são alteradas com o tempo e o espaço. Ou seja, as variações na taxa de fluxo das águas subterrâneas assim como a direção, as variações nas propriedades químicas dos componentes envolvidos no fenômeno, as mudanças nas condições de pressão hidráulica ou nas condições hidrogeológicas complexas (Mandle, 2002).

O uso de soluções analíticas permite uma melhor compreensão do mecanismo de transporte de contaminantes. Com o uso delas é possível prever o deslocamento das plumas contaminantes, aferir os parâmetros de campo relacionado com o transporte de solutos e verificar os resultados de modelos numéricos (Wexler, 1992).

4.3. DEFINIÇÃO DE CONDIÇÕES AUXILIARES (INICIAL E DE CONTORNO)

Para obter a solução de uma equação diferencial parcial que corresponde a um processo físico determinado, é preciso estabelecer uma informação adicional sobre o estado físico do processo. Esta informação é fornecida pelas condições auxiliares que são divididas em *condições inicial e condições de contorno*. Para os problemas no estado estacionário, só é preciso estabelecer *condições de contorno*. Para os problemas transientes, aquelas onde algumas variáveis do modelo apresentam mudanças com o tempo, *condições inicial e de contorno* deverão ser especificadas.

Matematicamente, as *condições de contorno* equivalem à geometria da fronteira e os valores da variável dependente ou da derivada normal da mesma na fronteira. Em termos físicos, para problemas que envolvem modelos de água subterrânea e, especificamente, modelos de transporte de contaminantes, as *condições de contorno* são de três tipos:

1. Condições de contorno de valor especificado e valor constante de concentração.
2. Condições de contorno de fluxo especificado devido a gradientes de concentração.
3. Condições de contorno onde não se tem fluxo.

As *condições iniciais* são simplesmente os valores da variável dependente, que para o caso em estudo é a concentração da substância contaminante. Esta condição é especificada em todo o domínio contemplado dentro das *condições de contorno*. Normalmente, em um problema de fluxo transiente, as *condições iniciais* podem ser determinadas como auxílio de uma simulação inicial do sistema em estado de fluxo estacionário. Estas condições são validas apenas para o momento em que inicia a simulação, já que, deve-se considerar que a concentração da pluma contaminante muda durante o processo de simulação (Franke *et al.*, 1987).

4.4. SOLUÇÕES ANALÍTICAS UNIDIMENSIONAIS

4.4.1. Solução Analítica Unidimensional de Ogata & Banks (1961)

Esta solução oferece uma resposta ao comportamento do modelo matemático acoplado de transporte de contaminantes unidimensional considerando os mecanismos físicos de advecção e dispersão. Pode ser aplicada tanto a contaminantes reativos como não reativos como se observa na equação a seguir:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v_x' \frac{\partial c}{\partial x} \quad (4.1)$$

Para o caso de uma fonte contaminante cuja concentração inicial (c_0) se mantém constante na entrada da coluna de uma amostra de solo saturada, as condições inicial e de contorno da solução de Ogata e Banks (1961) são (Figura 4.1):

$$\begin{aligned} \text{condição inicial:} \quad & c(x,0) = 0, \quad \text{para } x \geq 0 \\ \text{condição de contorno:} \quad & c(0,t) = c_0, \quad \text{para } t \geq 0 \\ & c(\infty,t) = 0, \quad \text{para } t \geq 0 \end{aligned} \quad (4.2)$$

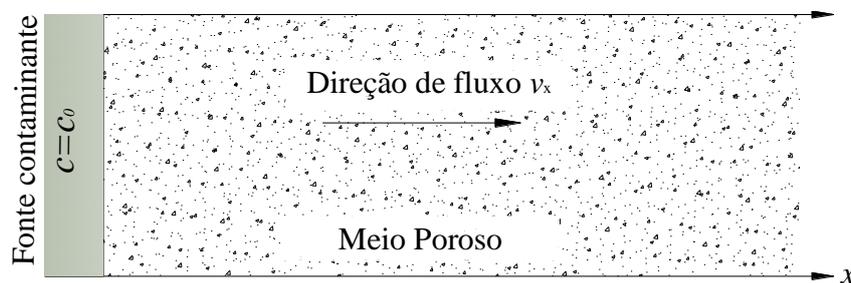


Figura 4.1. Problema unidimensional de Ogata & Banks (1961).

A condição inicial especifica que no instante inicial ($t = 0$), em qualquer ponto do domínio a concentração será nula. A primeira condição de contorno estabelece que a concentração na entrada da fonte contaminante em qualquer instante de tempo será igual à concentração inicial c_0 , simulando a condição de uma fonte contínua. Finalmente, a segunda condição de contorno, estabelece que quando a pluma contaminante se desloca uma distância suficientemente grande em um determinado tempo sua concentração será nula, caracterizando o efeito do mecanismo de dispersão.

Ogata & Banks (1961) obtiveram a solução da Eq (4.1) para as condições anteriormente descritas, dada por:

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{x - v_x' t}{2\sqrt{D_x^{h'} t}} \right] + \exp \left[\frac{v_x' x}{D_x^{h'}} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + v_x' t}{2\sqrt{D_x^{h'} t}} \right] \right\} \quad (4.3)$$

onde x é o ponto de observação da pluma contaminante [L], $v_x' = v_x/R$ é a velocidade linear média do contaminante [L/T] (Domenico & Schwartz, 1998) e o termo $D_x^{h'} = D_x^h/R$ é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal do contaminante afetados pelo

mecanismo de sorção representado pelo coeficiente de retardo R [adimensional]. A função $\text{erfc}(\theta)$ é denominada função erro complementar e é definida como:

$$\text{erfc}(\theta) = 1 - \text{erf}(\theta) \quad (4.4)$$

onde,

$$\text{erf}(\theta) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^\theta e^{-\varepsilon^2} \cdot d\varepsilon \quad (4.5)$$

Se no termo da dispersão hidrodinâmica ($D_x^{h'}$), não for considerado a difusão molecular (D^m), a parcela $D_x^{h'}$ pode ser reescrita em termos do coeficiente de dispersividade e da velocidade linear $\alpha_x v'_x$, onde α_x é o próprio coeficiente de dispersividade longitudinal [L] e t é o tempo de análise do processo de contaminação. Finalmente, a Eq.(4.3) poderá ser expressa da seguinte forma simplificada:

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left\{ \text{erfc} \left[\frac{x - v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x}{\alpha_x} \right] \text{erfc} \left[\frac{x + v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \right\} \quad (4.6)$$

Se R for igual a 1.0, obtém-se a solução de Ogata & Banks (1961) para o caso não-reativo.

4.4.2. Solução Analítica Unidimensional de Bear (1979)

Bear (1979) considerou o transporte de massa contaminante envolvendo mecanismos de decaimento reativo e obteve uma solução analítica para o problema que matematicamente pode ser representado por:

$$\frac{\partial c(x,t)}{\partial t} = D_x^{h'} \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v'_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (4.7)$$

onde, λ é a meia vida dos nuclídeos radioativos [1/T].

Considerando as mesmas condições iniciais e de contorno do problema de Ogata & Banks (1961) e o efeito do mecanismo sorcivo, representado pelo coeficiente de retardo, só que desta vez afetando também o parâmetro que representa o decaimento ($\lambda' = \lambda/R$), é possível obter a seguinte solução:

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left[\begin{aligned} & \left[\exp\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right) \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}}\right) \right] \operatorname{erfc}\left(\frac{x - v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}}\right) \\ & + \left[\exp\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}}\right) \right] \operatorname{erfc}\left(\frac{x + v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}}\right) \end{aligned} \right] \quad (4.8)$$

Esta solução em sua forma estendida é apresentada por Martin-Hayden & Robbins (1997) e sua demonstração pode ser encontrada em Srinivasan *et al.* (2007). A Eq. (4.8) pode não ser suficiente para descrever um problema de campo em toda sua tridimensionalidade, mas proporciona uma visão interessante para os fenômenos observados (Srinivasan *et al.*, 2007).

Na Eq. (4.8) se o termo λ for nulo e o retardo for igual à unidade, se obtêm novamente a solução unidimensional de Ogata & Banks para o caso não reativo apresentada na Eq. (4.3).

4.5. PROCESSO DE CALIBRAÇÃO DOS PARÂMETROS DE TRANSPORTE

Como foi explicado Item 3.2.3, realizou-se o processo de calibração usando a solução analítica unidimensional de Ogata & Banks (1961), considerando o fenômeno do retardo (Eq. (4.6)) e os dados experimentais obtidos para os solos lateríticos *in-situ* (Carvalho, 2001) e compactados (Nascentes, 2003).

4.5.1. Método dos Mínimos Quadrados

Para obter os parâmetros de transporte que se ajustaram da melhor forma aos dados experimentais se utilizou o método dos *Mínimos Quadrados*.

A Figura 4.2 apresenta os resultados do processo de calibração e otimização para os íons contaminantes utilizados nos solos lateríticos *in-situ*. Os pontos representados correspondem à comparação dos resultados de concentração relativa (c/c_0) medidos experimentalmente com os calculados pela solução analítica de Ogata & Banks (1961). Na mesma figura são apresentados os parâmetros definitivos que correspondem aos parâmetros do modelo ajustado. Da mesma forma, foi realizado o processo de calibração e otimização para os dados experimentais obtidos sobre os solos lateríticos compactados, e os resultados encontram-se apresentados na Figura 4.3.

Com os parâmetros obtidos no processo de calibração, as curvas de chegada (CCH) foram traçadas para os casos estudados utilizando-se a solução unidimensional de Ogata & Banks e encontram-se apresentadas nas Figuras 4.4 e 4.5, juntamente com os dados experimentais.

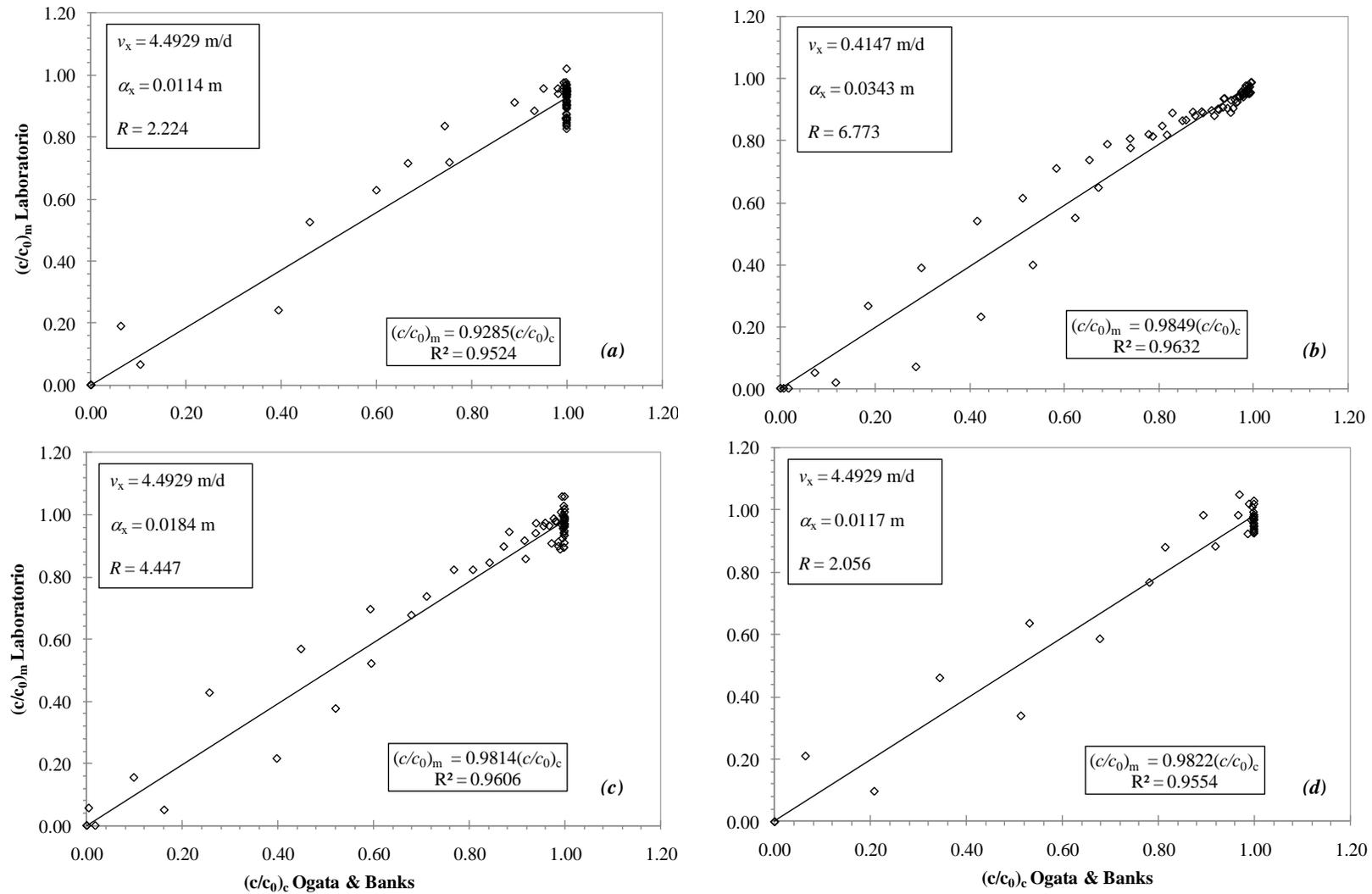


Figura 4.2. Calibração pelo Método dos Mínimos Quadrados, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* à 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

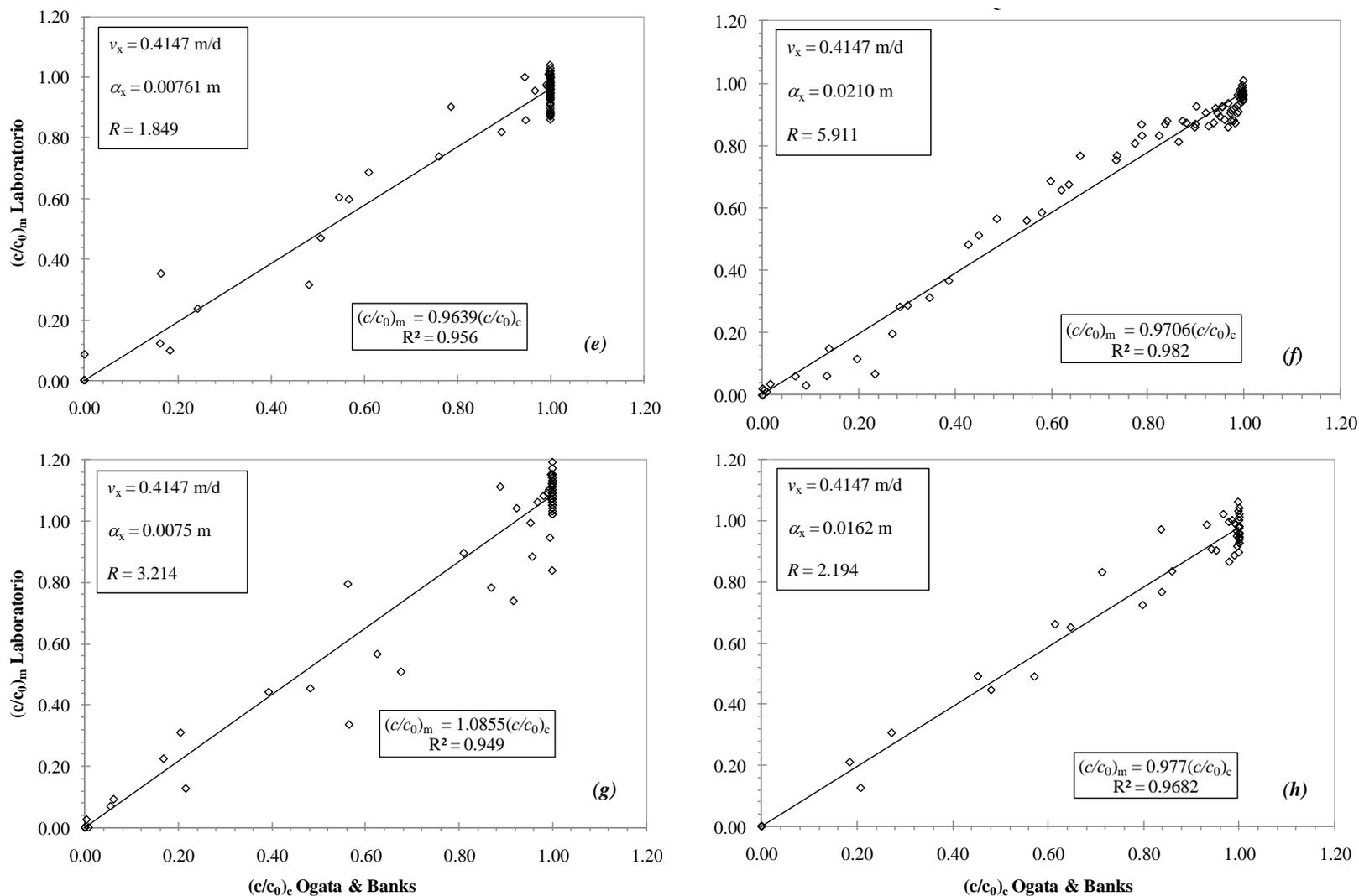


Figura 4.2. (Cont.). Calibração pelo Método dos Mínimos Quadrados, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* à 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

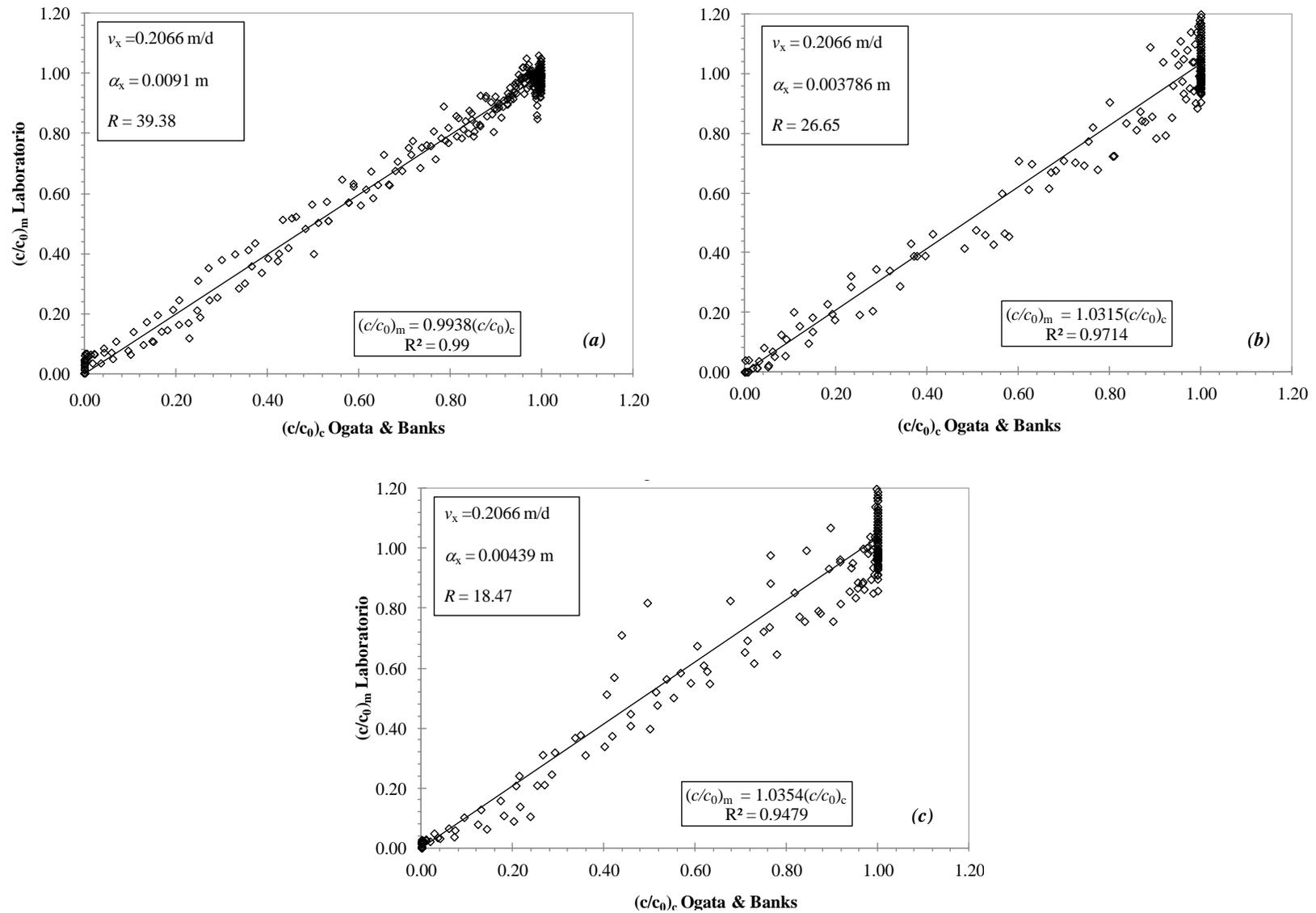


Figura 4.3. Calibração pelo Método dos Mínimos Quadrados, (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} para o solo laterítico compactado.

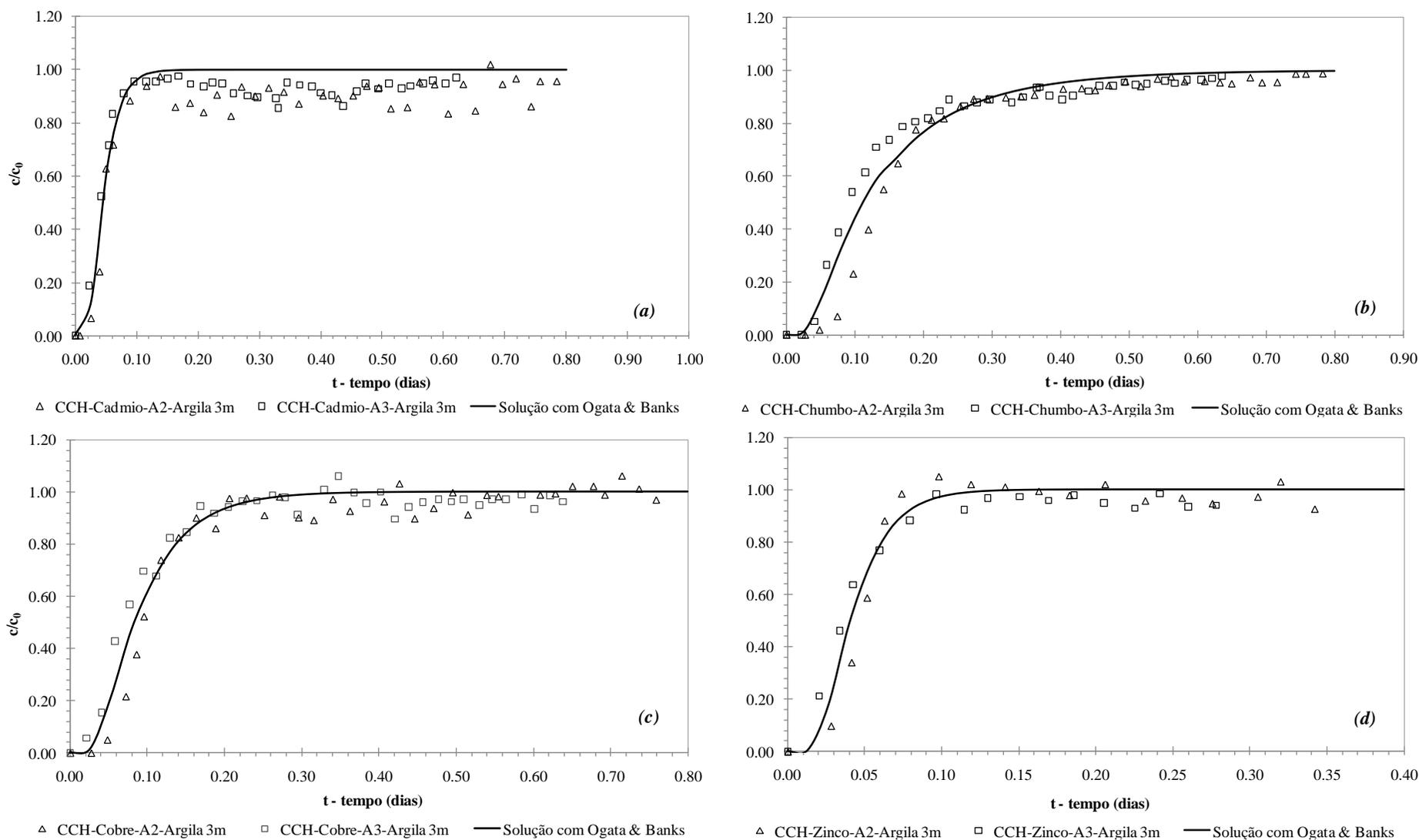


Figura 4.4. Modelo unidimensional aplicado com os parâmetros otimizados aos dados experimentais, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

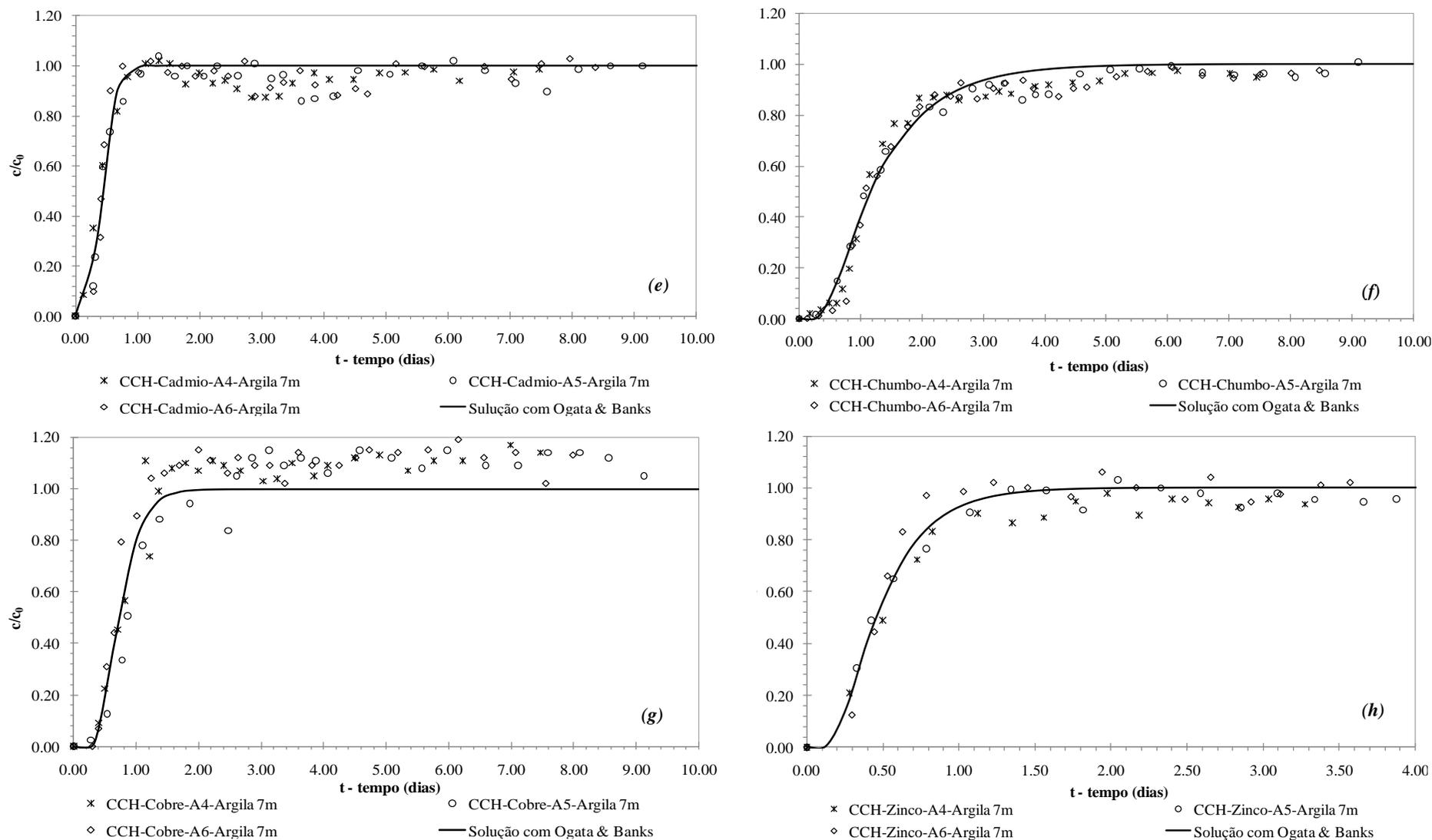


Figura 4.5 (Cont.). Modelo unidimensional aplicado com os parâmetros otimizados aos dados experimentais, (a) íon Cd^{2+} (b) íon Pb^{2+} (c) íon Cu^{2+} (d) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Cd^{2+} (f) íon Pb^{2+} (g) íon Cu^{2+} (h) íon Zn^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

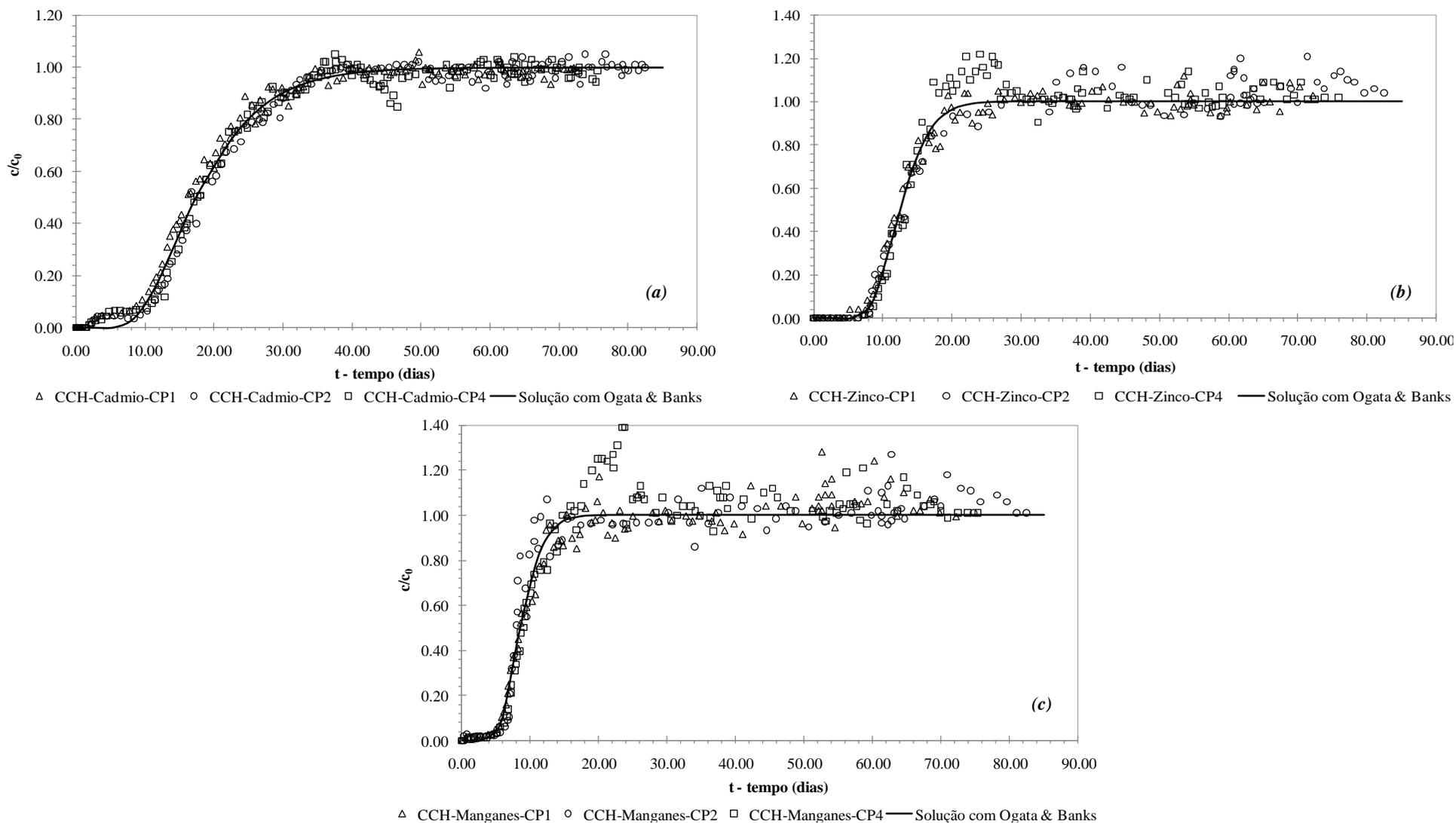


Figura 4.6. Modelo unidimensional aplicado com os parâmetros otimizados aos dados experimentais, (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} para o solo laterítico compactado.

4.5.2. Análises e Comparação dos Parâmetros Ajustados de Transporte

Os parâmetros ajustados de transporte obtidos com o método dos mínimos quadrados foram comparados com os resultados obtidos pelas pesquisas de Carvalho (2001) e Nascentes (2003), que utilizaram diferentes metodologias na determinação dos parâmetros de transporte (Tabela 4.1 e 4.2). As metodologias destes autores foram apresentadas no Item 3.3.3.1 para o caso do solo laterítico *in-situ* e, no Item 3.3.3.2, para o solo laterítico compactado. Neste último, devido ao fato de que as medições e ajustes foram realizados sobre três corpos de prova, conservando as mesmas características (umidade ótima, massa específica seca máxima, grau de compactação), se optou por calcular para cada parâmetro o valor da média aritmética.

Para encontrar os coeficientes de dispersividade nas duas pesquisas estudadas era necessário o conhecimento prévio da dispersão hidrodinâmica, da velocidade linear média e do coeficiente de difusão molecular (próximo a zero) e a aplicação da formulação da Eq. (2.14a) para determinar o coeficiente de dispersividade no caso longitudinal.

Os parâmetros encontrados pelo processo de otimização com o método dos mínimos quadrados para efeitos desta dissertação, consideram o comportamento não linear do modelo.

Tabela 4.1. Comparação dos parâmetros de transporte: coeficiente de dispersividade (α_x) e coeficiente de retardo (R) para o solo laterítico *in-situ*.

MATERIAL	Zinco (Zn^{2+})				Cádmio (Cd^{2+})				Cobre (Cu^{2+})				Chumbo (Pb^{2+})			
	Carvalho (2001)		MMQ		Carvalho (2001)		MMQ		Carvalho (2001)		MMQ		Carvalho (2001)		MMQ	
	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R
Solo Laterítico <i>in-situ</i> 3.0m	0.0259	1.85	0.012	2.06	0.0703	2.00	0.011	2.22	0.0094	3.75	0.018	4.45	0.0431	5.00	0.034	6.77
Solo Laterítico <i>in-situ</i> 7.0m	-0.018	1.92	0.016	2.19	-1E-10	1.92	0.008	1.85	0.0076	3.13	0.008	3.21	-0.0341	4.53	0.021	5.91

Tabela 4.2. Comparação dos parâmetros de transporte: coeficiente de dispersividade (α_x) e coeficiente de retardo (R) para o solo laterítico compactado.

MATERIAL	Zinco (Zn^{2+})				Cádmio (Cd^{2+})				Manganes (Mn^{2+})			
	Nascentes (2003)		MMQ		Nascentes (2003)		MMQ		Nascentes (2003)		MMQ	
	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R	a_x (m)	R
Solo Laterítico Compactado	0.00356	26.67	0.0038	26.65	0.00106	37.33	0.0091	39.38	0.00552	18.67	0.0044	18.47

MMQ: Método dos Mínimos Quadrados.

Observa-se nestes resultados comparativos, uma importante diferença entre os valores obtidos pelo método de otimização mediante o método dos mínimos quadrados (MMQ) e as metodologias dos trabalhos já mencionados. A diferença é mais notória nos solos lateríticos *in-situ*, destacando-se mais no parâmetro dispersivo que no parâmetro adsorcivo. Para os solos lateríticos compactados, os resultados obtidos pelo MMQ e os reportados por Nascentes (2003) apresentam melhor aproximação.

De forma adicional ao encontrado por Carvalho (2001) e Nascentes (2003) e apresentado no Capítulo 3 foram feitas as seguintes observações e análises apresentadas nos Itens 4.5.2.1 e 4.5.2.2.

4.5.2.1. Análises de Resultados do Fenômeno Dispersivo

Com respeito aos coeficientes de dispersividade para o caso dos solos lateríticos *in-situ*, em quase todos os íons, à exceção do íon Cu^{2+} , foram observados valores maiores do que os obtidos mediante o processo de calibração pelo MMQ (Tabela 4.1). Esta diferença oscila de uma forma geral entre 50% a 500% para os parâmetros do solo laterítico *in-situ* a 3.0 m.

No caso do solo laterítico *in-situ* a 7.0 m, a metodologia aplicada por Carvalho (2001) não apresentou resultados coerentes, dando como resultado valores negativos para quase todos os íons à exceção do Cu^{2+} que apresentou, neste caso, um valor mais aproximado ao calculado no MMQ.

Finalmente, os valores para o coeficiente de dispersividade, determinados para o solo laterítico compactado variam menos do que os determinados pelo processo de otimização pelo MMQ, com variações menores do que 90%. Os parâmetros obtidos pelo processo de otimização do MMQ quase sempre estimaram valores maiores do que os estimados pelos autores referenciados.

4.5.2.2. Análises de Resultados do Mecanismo de Sorção

Nos resultados do coeficiente de retardo observa-se de forma geral que os valores obtidos nas duas pesquisas de referência são próximos aos valores determinados pelo processo de otimização pelo MMQ. Observa-se que os valores obtidos por este processo são quase sempre maiores que os determinados pelos trabalhos iniciais.

Os fatores de retardo para o Zn^{2+} , Cd^{2+} , Cu^{2+} e Pb^{2+} obtidos nos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m e 7.0 m de profundidade são comparados na Figura 4.7. Os íons Cd^{2+} assumem os

valores mais baixos seguidos muito de perto pelos íons Zn^{2+} . Os íons Cu^{2+} e Pb^{2+} assumiram os maiores valores, especialmente o Pb^{2+} . Matos *et al.* (2001) reportam um comportamento similar ao estudar três solos lateríticos de um perfil de solo composto por três horizontes a profundidades diferentes. O significado deste comportamento segundo Matos *et al.* (2001) é interpretado pelo fato de que o Zn^{2+} e o Cd^{2+} possuem uma maior mobilidade associada à menor adsorção e os íons Cu^{2+} e Pb^{2+} apresentam o comportamento oposto.

Nos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m e 7.0 m de profundidade as diferenças no coeficiente de retardo são menores quando comparadas com as diferenças encontradas nos coeficientes de dispersividades. Para o solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, a oscilação da diferença do fator de retardo entre o calculado por Carvalho (2001) e o calculado pelo MMQ foi entre 10% e 25% e para o solo laterítico *in-situ* a 7.0 m a diferença oscilou entre 3% e 15%.

Existe também uma diferença destacável quando se comparam os valores do coeficiente de retardo ao longo da profundidade. Observa-se que para quase todos os íons, o coeficiente de retardo estabelece uma tendência a diminuir com a profundidade. Matos *et al.* (2001) encontraram um comportamento similar, explicando que os solos localizados mais superficiais apresentam uma maior tendência para adsorver estes metais comparado com solos a maior profundidade. Segundo McLellan *et al.* (1988), Lin & Chen (1998), Matos (1995) e Nascentes (2003) existe uma relação direta e proporcional entre o teor de matéria orgânica do solo e sua capacidade de adsorção dos metais. Esta relação é diretamente influenciada pela alta capacidade de troca catiônica (CTC) da matéria orgânica. Knox *et al.* (1993) afirmam que em superfície existem processos bióticos onde atuam os microorganismos existentes no solo, e quase sempre a maior atividade microbiológica está associada à camada superficial dos solos, onde coexiste a matéria orgânica, originada da decomposição de plantas e animais. O teor de matéria orgânica, em princípio, para um solo residual é mais abundante nos horizontes superficiais segundo Mitchell & Soga (2005) e diminuem com a profundidade.

A matéria orgânica, apesar de representar, geralmente, menos de 5% dos componentes sólidos nos solos, tem grande importância na retenção de metais pesados. O componente orgânico contribui também para um aumento da CTC do solo, pois ânions orgânicos se ligam aos minerais e óxidos da fração argila. Estas ligações determinam um abaixamento do ponto de carga zero (PCZ), ou seja, a criação de maior densidade de cargas negativas no solo, o que proporciona maior adsorção de cátions. Finalmente, segundo Stevenson (1985), cátions como Zn^{2+} , Cu^{2+} , Cd^{2+} e Pb^{2+} , dentre outros metais, formam compostos de coordenação com

ligantes orgânicos, o que os tornam passíveis de complexação. A complexação corresponde à reação de equilíbrio entre um íon metálico e um agente complexante e caracteriza-se pela formação de mais de uma ligação entre o metal e grupos funcionais do complexante.

Embora Carvalho (2001) não tenha uma determinação do conteúdo de matéria orgânica nos materiais trabalhados, existe uma alta probabilidade que a variação e comportamento em profundidade do coeficiente de retardo esteja sendo afetada pelo teor de matéria orgânica dos solos. A matéria orgânica presente no solo, mesmo quando em pequena quantidade, é capaz de contribuir com uma grande parcela da retenção de cátions. Sparks (1996) apresenta valores de CTC e superfície específica da ordem de 150 a 300 cmol/kg e 800 a 900 m²/g, respectivamente, e afirma, ainda, que mesmo em solos arenosos, que apresentam, comumente, teor de matéria orgânica inferior a 1%, a matéria orgânica exerce influência significativa nas reações químicas que ocorrem no solo (Costa, 2002).

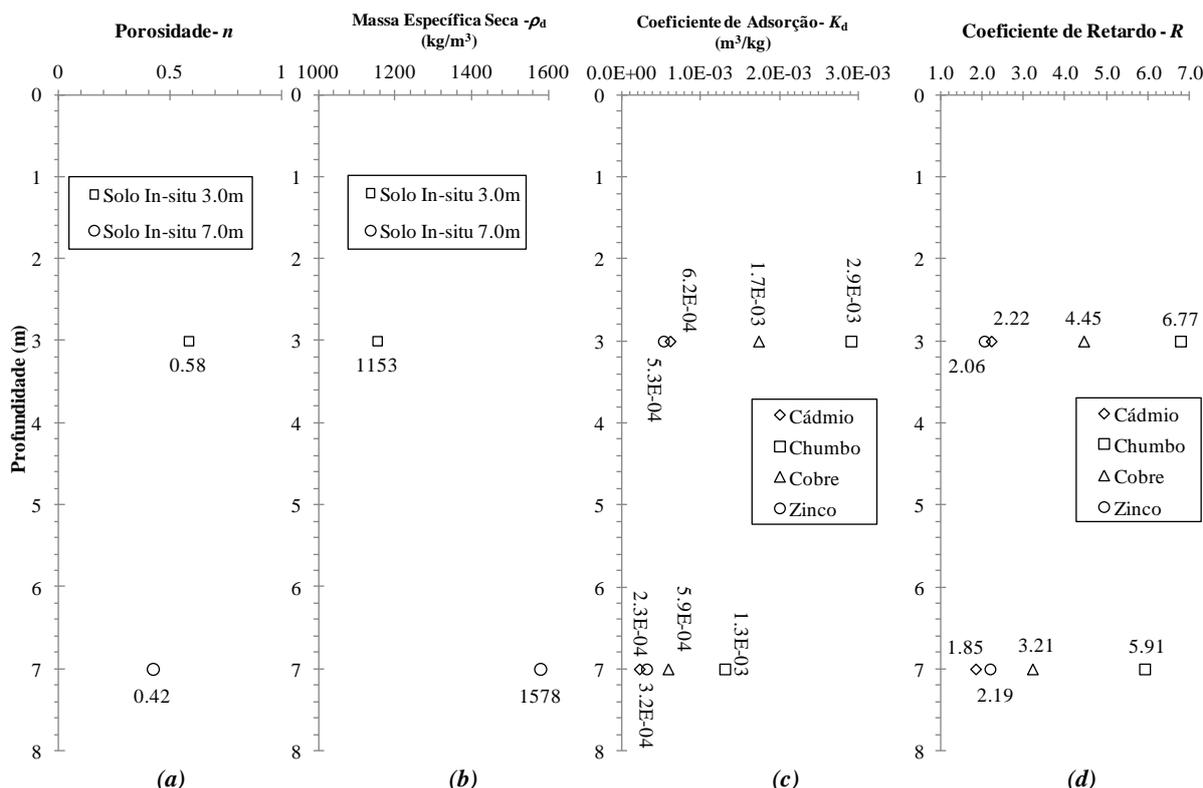


Figura 4.7. (a) Variação da porosidade (n), (b) da massa específica seca (ρ_d), (c) do coeficiente de distribuição (K_d) e (d) do coeficiente de retardo (R) com a profundidade.

Outra perspectiva a ser analisada a partir da Figura 4.7 para o caso dos solos lateríticos *in-situ*, é que em geral, no processo de transporte reativo, o parâmetro que mais controla o fenômeno de retardo é o coeficiente de distribuição K_d (coeficiente que mede a quantidade de

contaminante adsorvido). Este parâmetro é controlado pelo teor de matéria orgânica disponível no solo, mesmo quando comparado com outros parâmetros físicos que governam o fenômeno (porosidade e massa específica seca). A diminuição que sofre o coeficiente de distribuição é mais relevante do que o aumento da massa específica seca e do que a redução da porosidade do solo.

Um fenômeno importante observado na Figura 4.4, presente principalmente nos solos lateríticos *in-situ* a 7.0 m é que a concentração relativa (c/c_0) de alguns íons, caso específico Cu^{2+} , supera o valor unitário ($c/c_0 > 1$). Segundo Matos (1995), isto pode ser associado ao fenômeno de desorção, no qual íons de metais mais fracos, do ponto de vista do intercâmbio químico, presentes no solo são substituídos por íons mais competentes provenientes da solução contaminante, deslocando então os mais fracos para o exterior que depois se adicionam à substância contaminante que percola, aumentando o grau de concentração de algum íon em específico da solução inicial.

O fato de o processo desorcivo ter sido observado nos solos lateríticos *in-situ* a 7.0 m e não ter sido observado com clareza nos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m de profundidade pode estar associado ao descrito por Carvalho (2001), referindo-se ao incremento no tempo de estabilização. O aumento da tortuosidade faz com que a substância contaminante permaneça mais tempo em contato com as partículas sólidas do solo e, desta forma, com os elementos químicos que o compõem, acarretando em tempo suficiente para que ocorra a troca iônica. No caso dos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m, o processo foi mais acelerado e não houve tempo suficiente para que ocorresse esta interação.

No caso do solo laterítico compactado, os valores obtidos para o fator de retardo a partir do MMQ foram similares, não superando uma diferença de 7%. O valor dado por de Nascentes (2003) pode ter diferido do obtido nesta pesquisa pelo fato da utilização da massa específica seca do solo e da porosidade. Nascentes (2003) utilizou em sua análise as propriedades do solo em estado natural e para esta pesquisa foram utilizadas tais propriedades após do processo de compactação. No entanto, a diferença apresentada entre os valores considera-se ainda pequena.

De forma geral, os valores de retardo obtidos para o solo laterítico compactado são altos quando comparados aos encontrados nos solos lateríticos *in-situ*. O processo de compactação foi possivelmente um dos fatores que mais contribuiu para o processo de retardo.

Diferentemente de Carvalho (2001), Nascentes (2003) eliminou o teor de matéria orgânica por meio de processos químicos de oxidação. Analisando os resultados obtidos nas Tabela 4.1 e 4.2 juntamente com a Tabela 3.2, observa-se que as propriedades de porosidade e massa específica seca antes da compactação dos solos lateríticos de Nascentes (2003) são similares às determinadas para o solo laterítico *in-situ* a 7.0 m de Carvalho (2001). Quando se compacta o solo, a massa específica seca do material aumenta (massa específica seca máxima) e a porosidade diminui levando a um aumento do coeficiente de retardo. Esta comparação reafirma que o fator de retardo é influenciado de forma importante pela macro e micro estrutura do solo, especificamente pela distribuição dos tamanhos dos poros do material modificada pelos processos de compactação.

No caso do solo laterítico *in-situ*, os íons contaminantes deslocam-se através dos macroporos do solo procurando sempre os caminhos mais fáceis para percolar, contrariamente ao que ocorreu no solo laterítico compactado. A compactação altera a estrutura diminuindo a facilidade de percolação dos íons contaminantes através dos macroporos, sendo então possível que o contaminante inicie seu processo de percolação através dos microporos fazendo com que o processo de contaminação demore mais, o que se traduz, em um aumento do coeficiente de retardo.

4.6. ANÁLISE PARAMÉTRICA E DE SENSIBILIDADE

No item anterior foram apresentadas importantes variações e diferenças entre os parâmetros calculados pelo método dos mínimos quadrados e os parâmetros apresentados nos trabalhos de referência. Neste tópico será apresentada uma análise paramétrica e de sensibilidade dos parâmetros anteriormente analisados (coeficiente de dispersividade α_x e coeficiente de retardo R). Para isto são estabelecidas inicialmente as faixas físicas de variação, limitadas pelos valores máximos concebíveis (*HCV, Higher Conceivable Values*) e os valores mínimos concebíveis (*LCV, Lower Conceivable Values*). Estes limites serão definidos a partir dos valores experimentais obtidos. Os valores médios calculados, denominados para este trabalho como (*MCV*) corresponderam aos valores da solução analítica unidimensional avaliada com os parâmetros de transporte otimizados no processo de calibração.

Esta solução baseia-se na Regra dos Três Sigmas ("*Three Sigma Rule*"), citada por Duncan (2000) e explicada por Otálvaro & Cordão-Neto (2011), como uma metodologia que assume uma distribuição normal padrão da variável e calcula o desvio padrão considerando

que um deslocamento de até três desvios padrões para ambos os lados da média inclui 99.73% da amostra total. Logo, o desvio padrão é obtido por:

$$\sigma[x_i] = \frac{HCV - LCV}{6} \quad (4.9)$$

onde, $\sigma[x_i]$ é o desvio padrão da variável aleatória x_i que no caso em estudo pode ser o coeficiente de dispersividade ou o coeficiente de retardo. Estes dois limites foram estabelecidos e encontram-se apresentados na Figura 4.8 para os solos lateríticos *in-situ* (a) e (b) e compactados (c).

Esta análise paramétrica e de sensibilidade foi executada apenas para os resultados de um dos íons de cada pesquisador. Para o caso dos solos lateríticos *in-situ*, o íon escolhido foi o Pb^{2+} e, no caso do solo laterítico compactado, o íon escolhido foi o Cd^{2+} . Esta escolha foi fundamentada no fato de que estes íons apresentaram os melhores ajustes entre os valores calculado e o medido experimentalmente (Figuras 4.2 e 4.3).

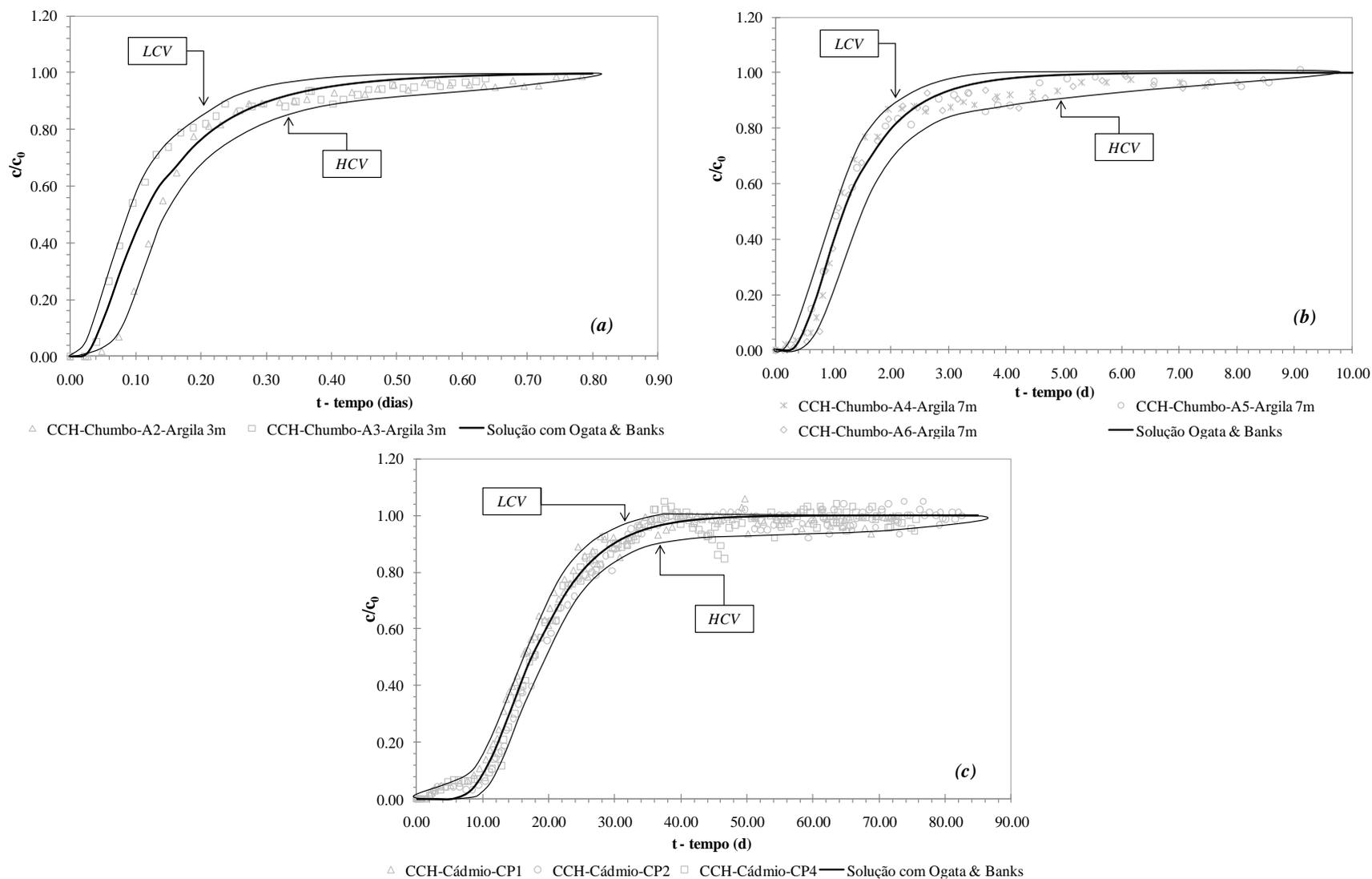


Figura 4.8. Limites *HCV* e *LCV*. (a) solo laterítico *in-situ* à 3.0 m íons Pb^{2+} , (b) solo laterítico *in-situ* a 7.0 m íons Pb^{2+} , (c) solo laterítico compactado íons Cd^{2+} .

4.6.1. Análise Paramétrica da Solução Unidimensional de Ogata & Banks (1961)

Uma das principais motivações para a análise paramétrica está relacionada à alta não linearidade da solução analítica do problema de transporte proposta por Ogata & Banks (1961).

Seguindo o procedimento descrito no Item 3.2.4, o coeficiente de dispersividade longitudinal α_x e o coeficiente de retardo R foram alterados de forma independente (alterando um parâmetro e deixando fixos os outros) até atingir os limites HCV e LCV . Da mesma forma, foram realizadas variações paramétricas da velocidade linear média v_x . Deste modo, foram obtidos aproximadamente, os parâmetros máximos e mínimos que quando são inseridos na solução analítica unidimensional de Ogata & Banks (1968) atingem os máximos e mínimos valores obtidos experimentalmente.

É importante explicar que os conceitos do HCV e LCV são aplicáveis apenas aos parâmetros e não à resposta da solução. Estes limites podem mudar o comportamento da concentração relativa (c/c_0). Ou seja, o HCV , por exemplo, para o fator de retardo R significa o máximo valor de retardo utilizado no modelo para que o processo de contaminação demore mais tempo. Esta definição é igualmente aplicada para os parâmetros α_x , e K_d e funciona no caso oposto para definir o LCV . Para o parâmetro de velocidade linear média v_x a identificação de HCV e LCV muda totalmente na Figura 4.8, mais o conceito continua sendo igual, já que, na medida em que se tem o máximo valor de v_x se tem um tempo menor de contaminação.

Nas Tabelas 4.3 até 4.5 são apresentados os parâmetros de transporte com os quais foram feitas as análises paramétricas. Da mesma forma, nas Figuras 4.8 até 4.10 são apresentados os resultados das análises paramétricas, comparando os critérios gráficos de **tempo de estabilização** (t_e) e de **inclinação do trecho de contaminação** (m_e), explicados no Item 3.2.4. Os parâmetros de transporte localizados entre o LCV e o MCV e o HCV são parâmetros que correspondem ao ponto médio entre ambos os trechos.

Tabela 4.3. Parâmetros de transporte de contaminantes que definem os limites *LCV* e *HCV* utilizados na análise paramétrica, para o caso do solo laterítico *in-situ* a 3 m.

PARÂMETROS	α_x	K_d	R	v_x
LCV	0.0110	0.00206	5.10	3.80
-	0.0227	0.00248	5.93	4.15
MCV	0.0343	0.00290	6.77	4.49
-	0.0502	0.00338	7.72	5.15
HCV	0.0660	0.00386	8.67	5.80

Tabela 4.4. Parâmetros de transporte de contaminantes que definem os limites *LCV* e *HCV* na análise paramétrica, para o caso do solo laterítico *in-situ* a 7 m.

PARÂMETROS	α_x	K_d	R	v_x
LCV	0.0100	0.0010	4.8699	0.3450
-	0.0155	0.0012	5.3902	0.3798
MCV	0.0210	0.0013	5.9107	0.4147
-	0.0295	0.0015	6.5549	0.4474
HCV	0.0380	0.0017	7.1993	0.4800

Tabela 4.5. Parâmetros de transporte de contaminantes que definem os limites *LCV* e *HCV* na análise paramétrica, para o caso do solo laterítico compactado.

PARÂMETROS	α_x	K_d	R	v_x
LCV	0.0044	0.0091	35.7070	0.1895
-	0.0068	0.0096	37.5377	0.1985
MCV	0.0091	0.0101	39.3684	0.2066
-	0.0121	0.0106	41.3516	0.2175
HCV	0.0150	0.0111	43.3349	0.2280

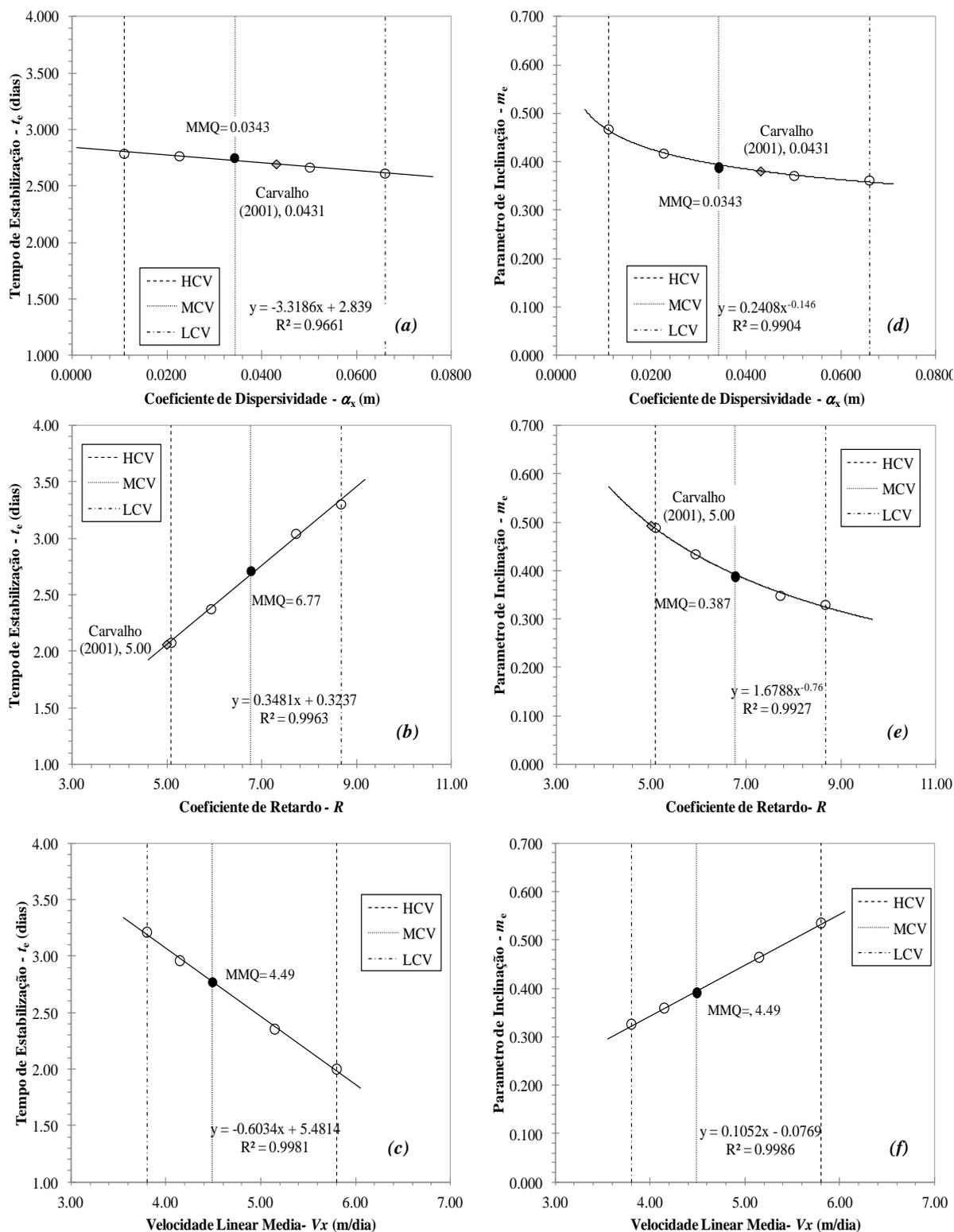


Figura 4.9. Variação dos critérios gráficos de t_e e m_e com base na variação do coeficiente de dispersividade (α_x), do coeficiente de retardo (R) e da velocidade linear média (v_x). Caso do solo laterítico *in-situ* a 3 m.

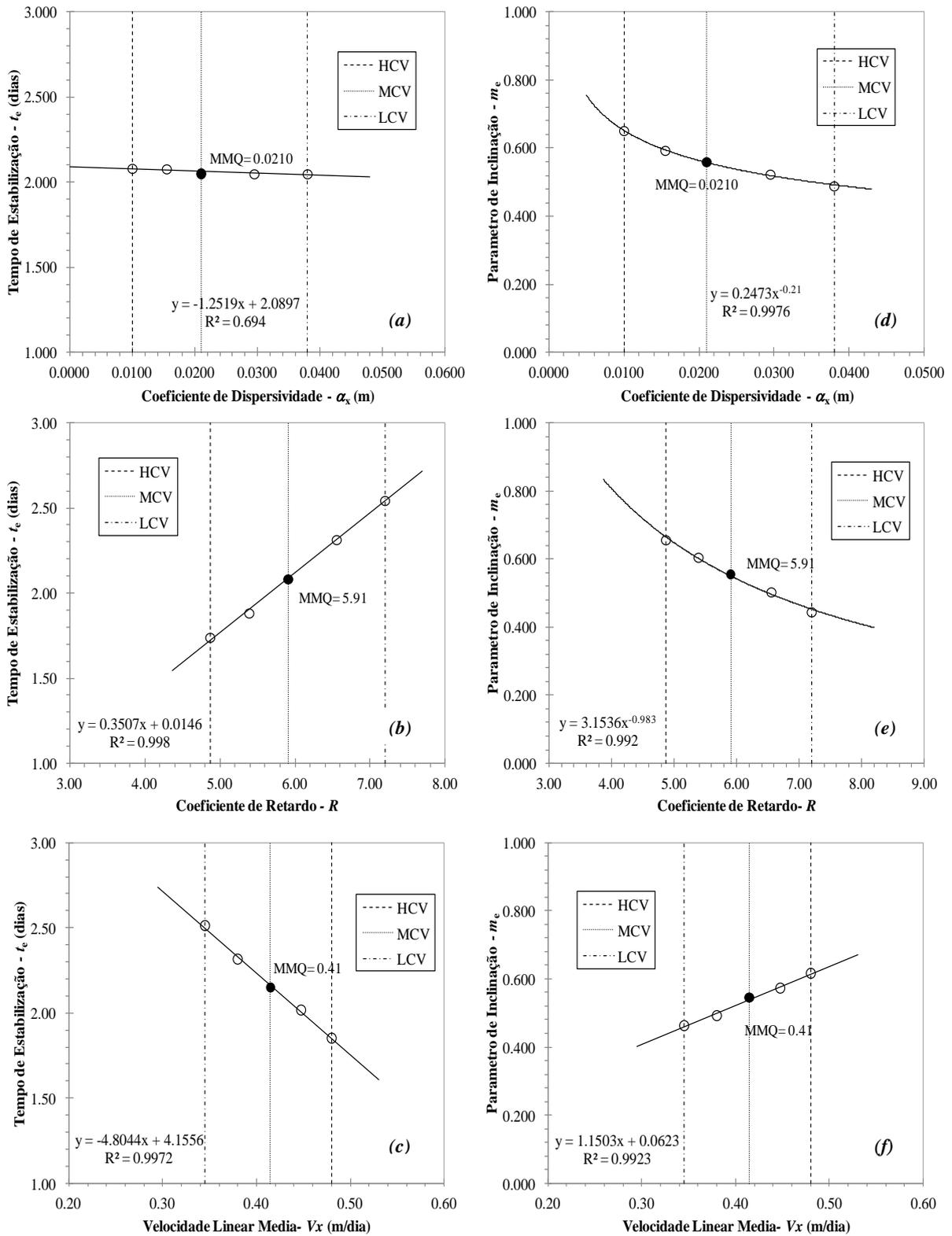


Figura 4.10. Variação dos critérios gráficos de t_e e m_e com base na variação do coeficiente de dispersividade (α_x), do coeficiente de retardo (R) e da velocidade linear média (v_x). Caso do solo laterítico *in-situ* a 7 m.

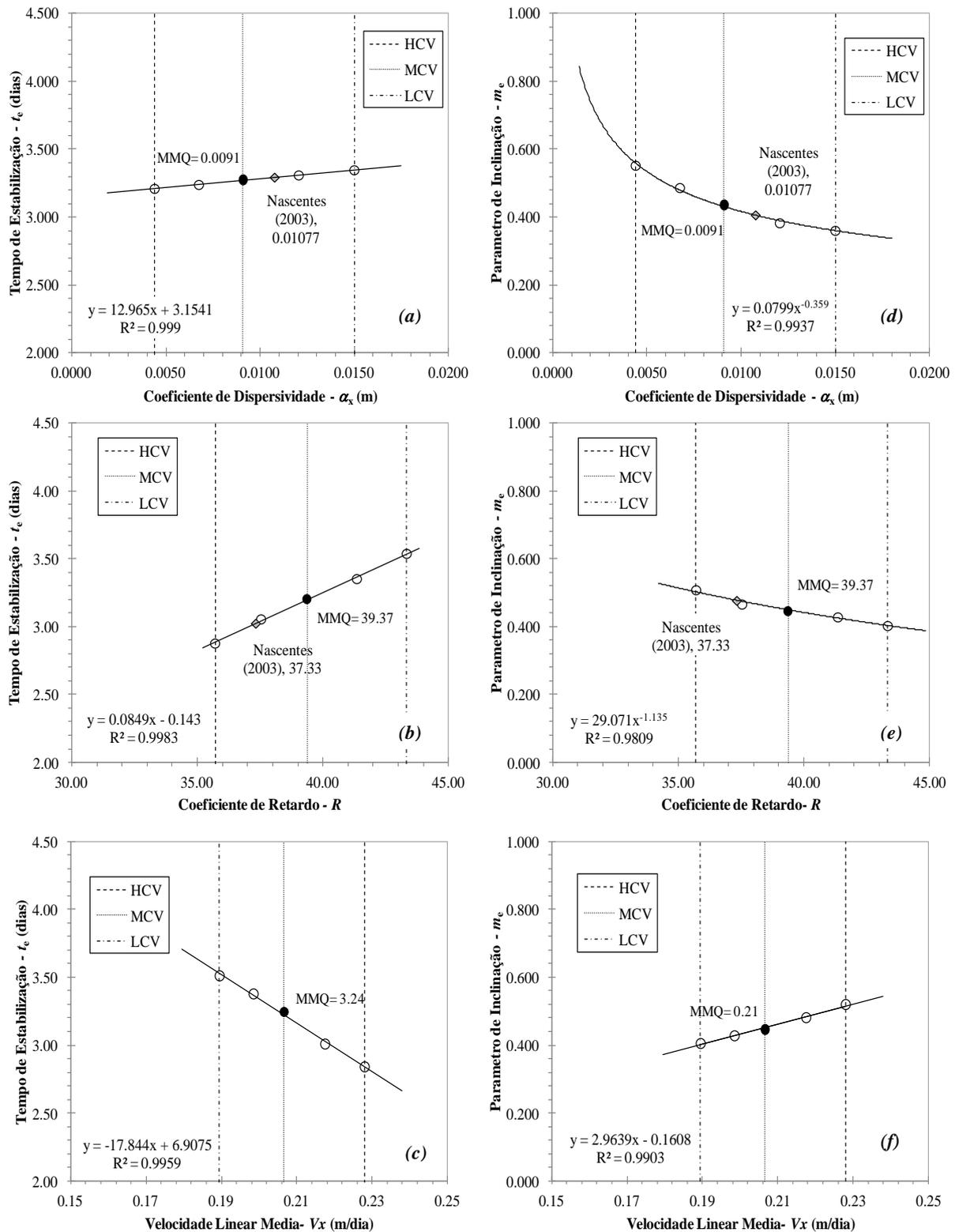


Figura 4.11. Variação dos critérios gráficos de t_e e m_e com base na variação do coeficiente de dispersividade (α_x), do coeficiente de retardo (R) e da velocidade linear média (v_x). Caso do solo laterítico compactado.

De uma forma geral, o comportamento da solução do problema de transporte proposto por Ogata & Banks (1961) apresenta importantes mudanças geométricas, que levam a situações que afetam o comportamento de transporte.

Quando se analisa o critério geométrico de **tempo de estabilização** (t_e) com a variação dos três parâmetros (α_x , R e v_x) para os três solos lateríticos constata-se que:

Gráficos α_x versus t_e : Em relação ao coeficiente de dispersividade (α_x), não são observadas alterações importantes com respeito a este parâmetro gráfico. À medida que o coeficiente de dispersividade varia, o t_e fica estável e tende a uma constante.

Gráficos R versus t_e : Quando o fator de retardo varia observa-se uma alteração significativa no tempo de estabilização. À medida que o retardo aumenta, o tempo de estabilização aumenta mantendo um comportamento linear com uma inclinação próxima à unidade (1 (R):1 (t_e)) no caso dos solos lateríticos *in-situ*. Para o solo laterítico compactado, esta inclinação é da ordem de 1.25 (R):1 (t_e). Do ponto de vista geométrico, à medida que R aumenta, a resposta se desloca para a direita e vice-versa com tudo, a forma da curva de chegada se conserva. Este comportamento é coerente com o fenômeno físico, já que na medida em que o coeficiente de retardo é maior, o fenômeno de contaminação demora mais tempo.

Gráficos v_x versus t_e : O comportamento continua sendo linear mudando apenas a inclinação do ajuste, que passa a ser negativa. Este ajuste indica que, quando a velocidade linear média de percolação do contaminante aumenta, o processo de contaminação se acelera e o tempo de estabilização diminui. Geometricamente, esta resposta se evidencia pelo fato de que a curva de contaminação se desloca para a esquerda quando a velocidade linear média aumenta e vice-versa.

Quando se analisa o critério geométrico de **inclinação do trecho de contaminação** (m_e) com a variação dos três parâmetros (α_x , R e v_x) nos três materiais observa-se que:

Gráficos α_x versus m_e : O comportamento da inclinação do trecho de contaminação começa a diminuir quando o coeficiente de dispersividade aumenta. Este comportamento possui um ajuste potencial devido à alta não linearidade da função influenciada pelo parâmetro de dispersividade. Quando o coeficiente de dispersividade é próximo a zero, a inclinação da curva tenderá a ser vertical ($m_e=1$). Isto indica que o processo de contaminação total será

atingido em um tempo muito pequeno. À medida que o coeficiente de dispersividade aumenta, a inclinação começa a se abater e o processo de contaminação dura um tempo maior. Finalmente, pode-se observar juntamente com a análise de t_e que o coeficiente de dispersividade influenciará mais a geometria ou forma da curva de concentração.

Gráficos R versus m_e : Nestes gráficos observa-se um ajuste similar ao encontrado nos gráfico de α_x versus m_e . O coeficiente de retardo gera um deslocamento da curva de chegada para a esquerda quando diminui e para a direita quando aumenta. As curvas sempre partiram da condição inicial ($c/c_0 = 0$) e, em sua parte final deve atingir a máxima concentração relativa ($c/c_0 = 1$), logo assim, ela também experimentara uma alteração da inclinação do trecho de contaminação mantendo sua forma para manter as condições iniciais e de contorno impostas.

Gráficos v_x versus m_e : Nestes gráficos é possível identificar um comportamento linear no qual o trecho de estabilização aumenta de forma proporcional ao aumento da velocidade linear média. Isto fisicamente é coerente no sentido que, na medida em que aumenta a velocidade de percolação do contaminante, o processo de contaminação é atingido mais rapidamente. É interessante perceber que sendo este o único processo linear estabelecido pelas hipóteses da solução analítica, as respostas encontradas são efetivamente lineares.

Nas Figuras 4.8 e 4.10(a) até (d) foram superpostos os resultados obtidos por Carvalho (2001) e Nascentes (2003). Observa-se que as respostas se concentram no interior dos limites considerados. De forma particular, o coeficiente de dispersividade destas duas pesquisas foi sempre maior, no entanto, muito próximo ao resultado que neste trabalho é denominado de ótimo. Pode ser que tal variação não gere uma mudança significativa na resposta da solução. No caso do coeficiente de retardo, o valor ficou próximo ao LCV . A solução se deslocou para a esquerda da solução ótima. Desta forma, as metodologias utilizadas por estes dois pesquisadores podem gerar uma solução subestimada quando são aplicadas.

4.6.2. Análise de Sensibilidade na Solução Unidimensional de Ogata & Banks (1961)

Esta análise foi realizada segundo o estabelecido no Capítulo 3 no Item 3.2.4.2. Para realizar esta análise é preciso obter preliminarmente alguns parâmetros estatísticos sobre cada uma das variáveis que participam da solução analítica do problema de transporte. Parâmetros estatísticos como a média (μ), o desvio padrão (σ) que pode ser calculado pela Eq. (4.9) e o coeficiente de variação são apresentados na Tabela 4.6.

Tabela 4.6. Parâmetros estatísticos dos principais parâmetros de transporte.

MATERIAL	PARÂMETROS	MÉDIA (μ)	DESVIO PADRÃO (σ)	VARIÂNCIA (σ^2)	COEFICIENTE DE VARIAÇÃO (%)
Solo Laterítico <i>in-situ</i> à 3.0m	α_x	0.0343	0.0092	0.0001	26.72
	K_d	0.0029	0.0003	9.0E-08	10.33
	R	6.77	0.60	0.3557	8.81
	ν_x	4.49	0.33	0.1111	7.42
Solo Laterítico <i>in-situ</i> à 7.0m	α_x	0.0210	0.0047	2.2E-05	22.22
	K_d	0.0013	0.0001	1.1E-08	7.91
	R	5.91	0.39	0.1507	6.57
	ν_x	0.41	0.02	0.0005	5.43
Solo Laterítico Compactado	α_x	0.0091	0.0018	3.1E-06	19.41
	K_d	0.0108	0.0003	1.1E-07	3.09
	R	39.37	1.27	1.6162	3.23
	ν_x	0.21	0.01	4.1E-05	3.11

Na Tabela 4.6 observa-se de uma forma geral que todos os parâmetros dos solos lateríticos *in-situ* apresentaram um maior coeficiente de variação em relação ao valor médio quando comparados ao solo laterítico compactado. Isto pode ser uma consequência do processo de elaboração dos corpos de prova. Nas amostras compactadas procurou-se por manter as mesmas condições composicionais do solo levando a um controle sobre algumas das características como umidade, densidade, porosidade e teor de alguns materiais indesejáveis como material orgânico ou inerte com a retirada destes por metodologias químicas.

Condições composicionais como as apresentadas anteriormente não podem ser controladas com grande sucesso nos solos lateríticos *in-situ*. Grande parte das variações neste tipo de solo podem estar relacionadas com a inclusão de pequenas heterogeneidades na composição dos corpos de prova, mas observa-se que entre os corpos de prova localizados a diferentes profundidades, as variações são muito similares.

Serão necessários os parâmetros estatísticos da porosidade (n) e da massa específica seca do solo (ρ_d) já que a parcela de sorção representada pelo coeficiente de retardo (R) considera estas duas propriedades. Estes parâmetros estatísticos são apresentados na Tabela 4.7 como resultado da compilação de diversos dados e análises de diferentes pesquisas relativas ao transporte de contaminantes realizadas no Brasil em solos tropicais lateríticos.

Tabela 4.7. Parâmetros estatísticos de porosidade (n) e massa específica seca (ρ_d) em estado *in-situ* e compactado de solos lateríticos

MATERIAL	PARÂMETROS	MÉDIA (μ)	DESVIO PADRÃO (σ)	VARIÂNCIA (σ^2)	COEFICIENTE DE VARIAÇÃO (%)
Solo Laterítico <i>in-situ</i>	n	0.58	0.0473	0.0022	8.16
	ρ_d	1153	98.8	9761	8.57
Solo Laterítico Compactado	n	0.39	0.0165	0.0003	4.23
	ρ_{dmax}	1640	70.3	4935	4.28

Os resultados das análises de sensibilidade de cada solo se apresentam de três formas (Figuras 4.12 e 4.13). A primeira (gráficos (a)) são gráficos de barras em três dimensões onde são plotados a porcentagem de participação (%) de cada um dos parâmetros (α_x , K_d , R , n , ρ_d , v_x) em oito tempos diferentes. O segundo (gráficos (b)) são gráficos de barras num espaço bidimensional indicando o valor exato de participação e proporcionando uma perspectiva conjunta dos resultados. No terceiro gráfico (gráficos (c)), apresenta-se a variância da concentração relativa com o tempo ($V[C_r]$) sobre as curvas de c/c_0 contra t do material e íon anteriormente selecionado. Neste tipo de gráfico se analisará o tempo onde se apresenta a maior variação da resposta.

Nas Figuras 4.11 e 4.12(a) e (b) observa-se que a participação do coeficiente de dispersividade (α_x), nas duas situações, possui uma tendência a um comportamento côncavo para cima. Este parâmetro gera uma maior contribuição na parte inicial do processo de contaminação e na parte final onde inicia a estabilização do fenômeno. Observa-se um ponto onde esta participação é mínima. Tal fenômeno é observado para qualquer variação do coeficiente de dispersividade e ocorre em um tempo específico que não é o mesmo em todos os casos. No solo laterítico *in-situ*, esta situação ocorreu em um tempo de 0.21 dias. Já para o solo laterítico compactado, o mesmo comportamento foi observado próximo a 23 dias.

Matematicamente, este ponto coincide com o ponto de inflexão da curva de chegada da pluma de contaminação, já que nestas curvas se observa uma mudança de concavidade (Figuras 4.4 e 4.5). Neste caso, a segunda derivada da concentração relativa em relação ao coeficiente de dispersividade será nula neste ponto. Isto indica que para qualquer variação do coeficiente de dispersividade, a resposta na função de concentração relativa não sofrerá mudança neste ponto.

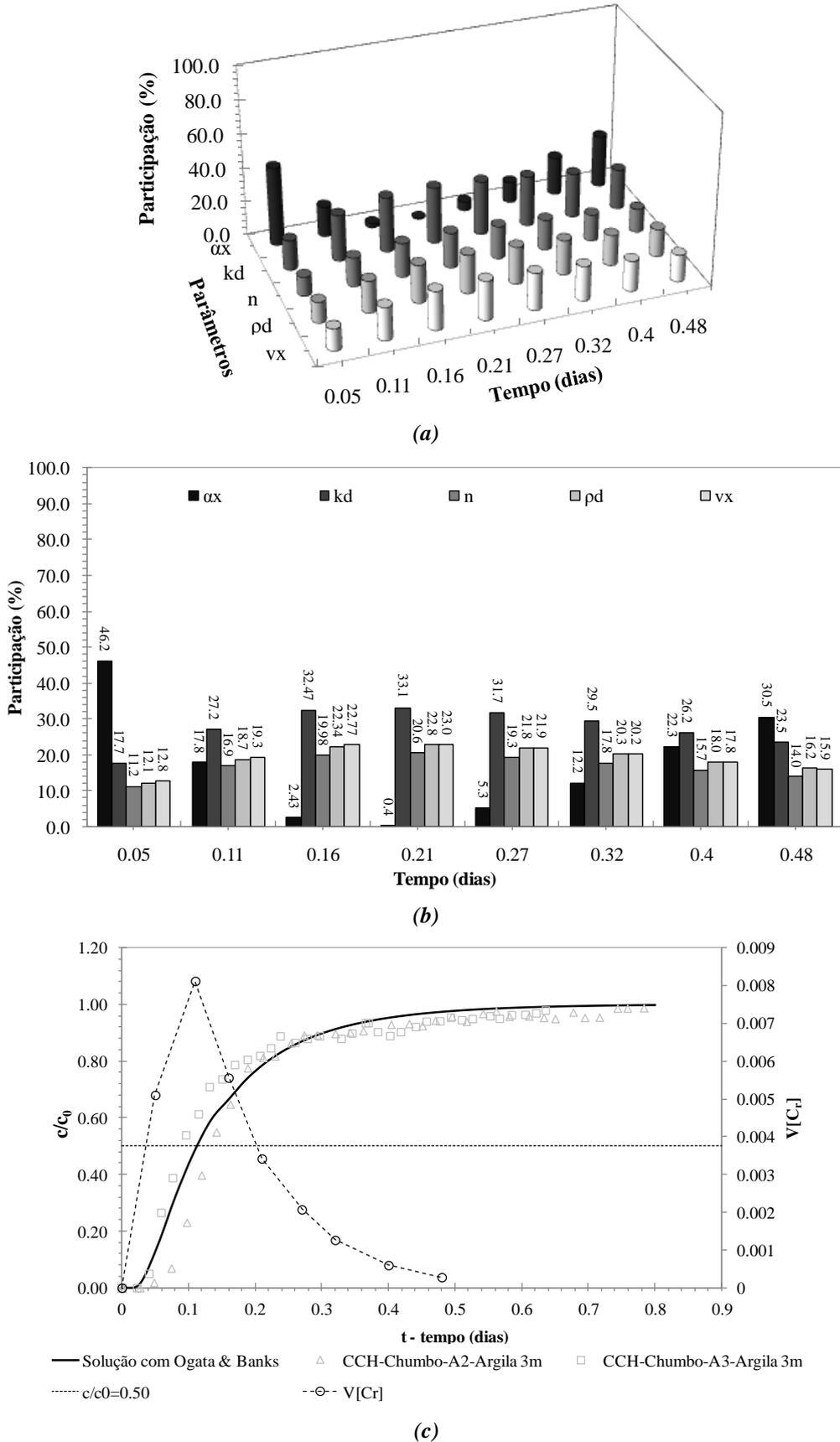


Figura 4.12. Análise de sensibilidade dos parâmetros de transporte sobre a solução analítica unidimensional de Ogata & Banks (caso do solo laterítico *in-situ*).

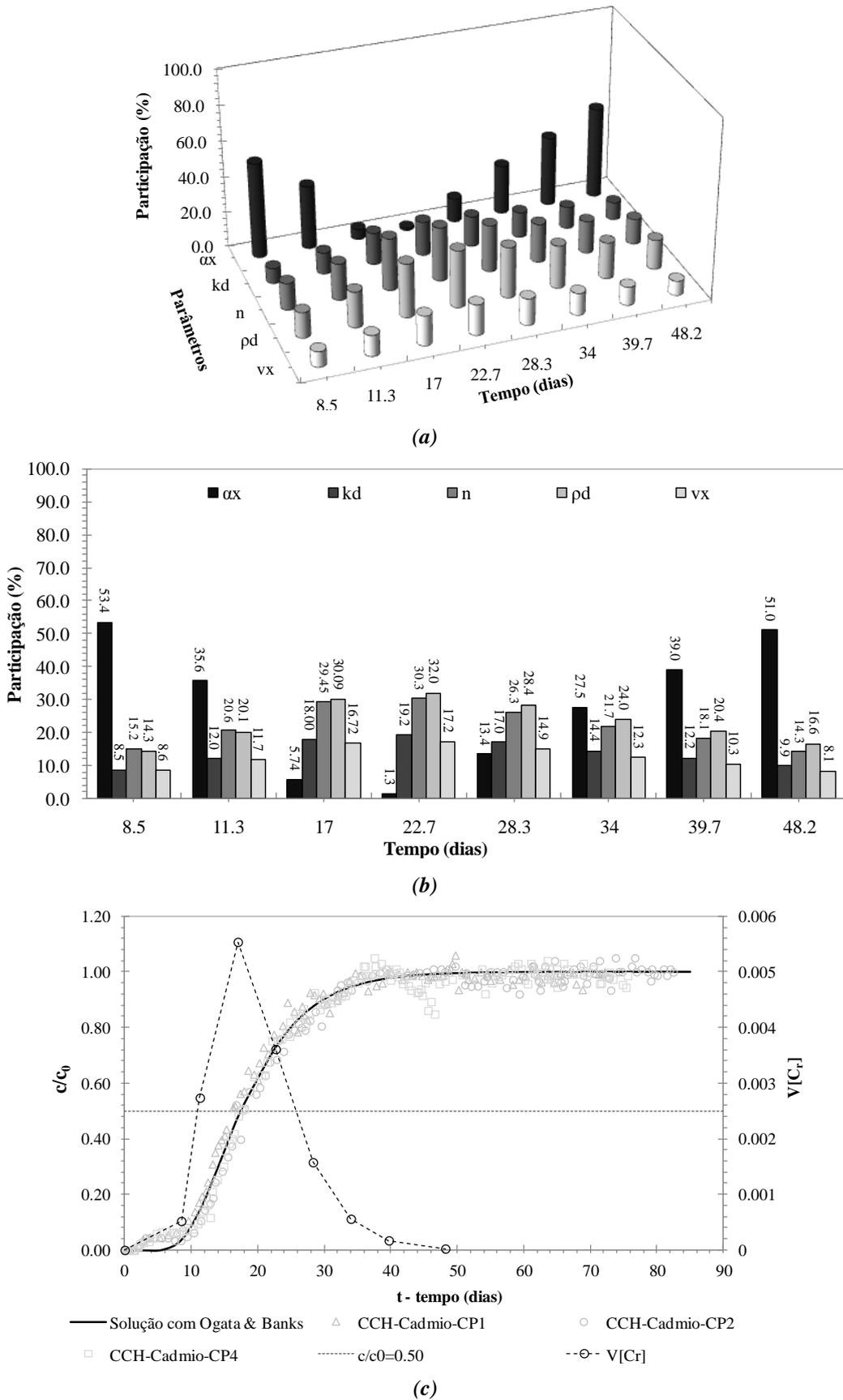


Figura 4.13. Análise de sensibilidade dos parâmetros de transporte sobre a solução analítica unidimensional de Ogata & Banks (caso do solo laterítico compactado)

Nas Figura 4.12 e 4.12(a) e (b) é possível observar que quando se tem a participação mínima do coeficiente de dispersividade nota-se, também, a máxima participação do coeficiente de retardo (R) que é função do coeficiente de distribuição (K_d), da massa específica seca (ρ_d) e da porosidade do solo (n). Consequentemente, o comportamento do coeficiente de retardo é côncavo para baixo e, este comportamento é limitado pelas condições de contorno estabelecidas para a solução.

Comparando os dois solos foi possível confirmar dois comportamentos, mencionados anteriormente, referentes ao coeficiente de retardo. Nas Figuras 4.11 e 4.12(a) e (b) se observam diferenças entre a participação do coeficiente de distribuição e as propriedades do material que atuam no fenômeno sorcivo em ambos os solos. No solo laterítico *in-situ* a 3 m, o coeficiente de distribuição (K_d) apresenta uma maior influencia em relação às propriedades de porosidade e massa específica seca do solo, mantendo uma participação de 33% quando comparado aos 22% que apresentaram as propriedade dos materiais (ρ_d e n). No solo laterítico compactado, o comportamento é completamente contrário. Observa-se uma maior participação das propriedades do solo, principalmente da massa específica seca (ρ_d) com uma participação de 32% e da porosidade (n) com uma participação de 30% sobre uma participação de 19% referente ao coeficiente de distribuição.

Esta análise de sensibilidade confirmou o fato de que nos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m de profundidade, o retardo é controlado pelos efeitos do coeficiente de distribuição. Este é afetado diretamente pela presença da matéria orgânica que gera uma maior adsorção devido à alta capacidade de intercâmbio iônico e elevada superfície específica, aumentando o efeito do retardo.

A presença de matéria orgânica, no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, é altamente provável devido à localização do material próximo à superfície e por causa dos processos de execução dos ensaios, nos quais, a matéria orgânica foi impossível de retirar dadas as condições *in-situ* dos corpos de prova. Observou-se o contrário no solo compactado. Os corpos de prova foram manipulados. O teor de matéria orgânica foi retirado por meio de processos químicos de oxidação. Finalmente, se gerou uma modificação da estrutura do solo durante os processos de compactação, incrementando a massa específica seca. Isto faz com que este parâmetro controle o processo de retardo do contaminante quando percola o solo laterítico.

Na participação da velocidade linear média observou-se que esta obedece a um comportamento similar ao observado no coeficiente de retardo. Assim, a velocidade linear média controla também o posicionamento da curva de contaminação só que de forma contrária ao que foi explicado para o coeficiente de retardo.

Comparando os resultados das Figuras 4.11 e 4.12, observa-se que a velocidade linear média tem uma maior participação nos solos lateríticos *in-situ* quando comparados aos solos compactados. As modificações na estrutura do solo pela compactação farão com que as velocidades de percolação diminuam e, simplesmente, a parcela do processo advectivo deixe de ser representativa, e outros fenômenos, por exemplo, os sorcivos, dominem o processo. Ao diminuir a velocidade de percolação, tem-se uma maior interação entre o contaminante e as partículas sólidas. Consequentemente existirão fenômenos de adsorção ou desorção entre as fases sólida e líquida.

Como foi possível calcular a variância da concentração relativa em função do tempo, a partir da solução de Ogata & Banks, esta foi plotada junto com a curva de chegada da pluma de contaminação (Figura 4.12(c) e Figura 4.13(c)). Para ambos os gráficos, as maiores variâncias na concentração relativa oscilam entre $0.0005 < V[C_r] < 0.0053$ para o caso do solo laterítico compactado e entre $0.0012 < V[C_r] < 0.0082$ para o caso do solo laterítico *in-situ* a 3.0 m. O maior intervalo de variância da concentração relativa é observado no solo laterítico *in-situ* quando comparado ao solo laterítico compactado.

Foi calculada a variância máxima para os dois solos. No caso, do solo laterítico compactado, o valor encontrado foi $V[C_r]_{\text{Max}}=0.0055$. No caso do solo laterítico *in-situ*, o valor foi $V[C_r]_{\text{Max}}=0.0081$. Destaca-se que estes valores máximos se localizam muito próximos ao ponto correspondente ao valor onde a concentração relativa é de $c/c_0 = 0.5$, para os dois materiais. Lembrando que as metodologias utilizadas por Carvalho (2001) para o cálculo do coeficiente de retardo e do coeficiente de dispersão hidrodinâmica são feitas neste ponto, foi realizada uma análise adicional adotando o mesmo procedimento apresentado neste capítulo (calibração, otimização e análise de sensibilidade), com a diferença que agora os resultados foram plotados em um espaço de volume de poros (V_p) contra a concentração relativa (c/c_0), utilizando o solo laterítico compactado quando atuam os íons de cádmio (Cd^{2+}). Os resultados são apresentados na Figura 4.14.

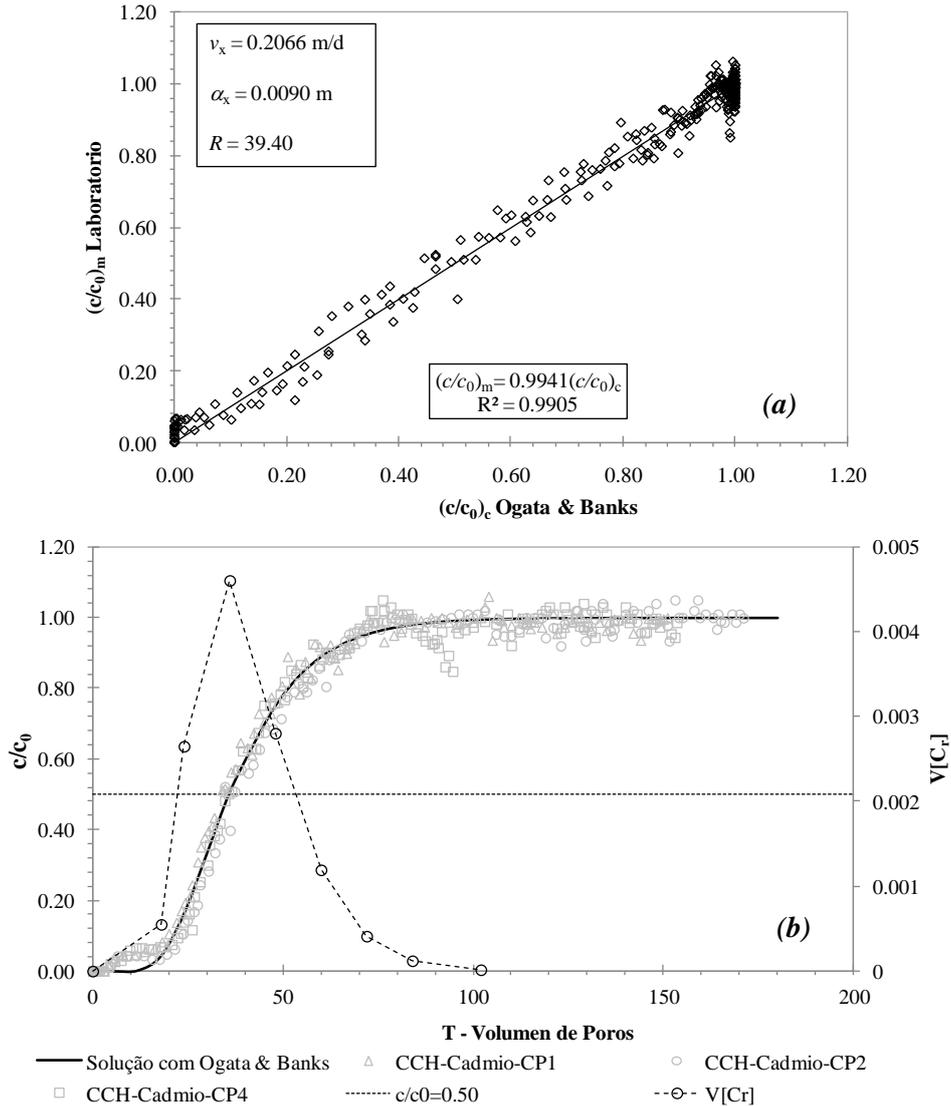


Figura 4.14. (a) Processo de calibração pelo método dos mínimos quadrados íon Cd^{2+} . (b) Comportamento da variância da concentração relativa com o tempo ($V[c/c_0(t)]$). Espaço de Volume de poros (V_p) versus concentração relativa (c/c_0)

Na Figura 4.14(a), observa-se que os parâmetros de transporte obtidos no espaço (c/c_0 versus T), utilizando diretamente os dados experimentais de volume de poros e fazendo o processo de calibração pelo método dos mínimos quadrados, são exatamente iguais aos obtidos nas análises iniciais, no espaço (c/c_0 versus t).

Na Figura 4.14(b), a variância da concentração relativa em relação ao tempo mantém o mesmo comportamento observado na análise inicial, isto é, apresenta um valor máximo muito próximo ao ponto $c/c_0 = 0.5$. Assim observa-se que o ponto $c/c_0 = 0.5$ corresponde efetivamente à maior variação da concentração relativa. Isto indica que os parâmetros de transporte, determinados neste ponto, estarão sujeitas a uma grande variabilidade.

CAPÍTULO 5

5. SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

5.1. ASPECTOS GERAIS

As soluções analíticas são uma poderosa ferramenta para o estudo do processo de transporte de contaminantes em meios porosos e aquíferos subterrâneos. Domenico & Robbins (1985), Domenico (1987), Wexler (1992) e Domenico & Schwartz (1998) focaram seus estudos em decidir qual das soluções analíticas existentes na literatura poderia ser aplicada nos diversos problemas de campo. Para a escolha de soluções analíticas figuram entre os desafios na modelagem do transporte de contaminantes, determinar: os mecanismos que representam o fenômeno, as dimensões e concentração da fonte contaminante, a velocidade de infiltração, a estimativa do tempo que o contaminante leva para atingir o lençol freático e a determinação das componentes de dispersividade necessárias nos problemas tridimensionais.

Existem diversas soluções analíticas em múltiplas dimensões capazes de resolver a equação de transporte apresentada na Eq.(2.43). Cleary & Unga (1978) obtiveram uma série de soluções analíticas exatas que representavam uma fonte contaminante em um domínio tridimensional de comprimento x (semi-infinito) e dimensões y e z finitas. Os valores de contorno do problema especificavam restrições de fluxo nos limites horizontais e verticais do domínio e a solução era composta por duas séries infinitas. Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987) resolveram a Eq.(2.43) utilizando uma aproximação em três dimensões que descreve o avanço de uma pluma contaminante, considerando efeitos de advecção-dispersão-retardo com decaimento de primeira ordem de uma fonte contaminante finita. A solução de Domenico (1987) foi fundamentada em um enfoque previamente publicado por Domenico & Robbins (1985) para modelar uma pluma contaminante desconsiderando o decaimento. A grande vantagem do modelo de Domenico (1987) é que este fornece uma solução que não precisa de procedimentos de integração numérica. Devido a esta vantagem computacional a solução de Domenico (1987) tem sido vastamente utilizada para resolver diferentes problemas

de transporte com o auxílio de vários códigos e ferramentas computacionais. Wexler (1992) obteve também uma solução analítica para os mesmos valores e condições de contorno do problema de Cleary & Unga (1978), mas considerando um domínio infinito nas direções y e z . A solução de Wexler (1992) foi uma extensão de uma solução proposta anteriormente por Sagar (1982), incluindo principalmente o fenômeno de retardo. Este apresentou uma solução analítica exata ao problema de transporte considerado anteriormente por Domenico (1987). As soluções de Sagar (1982) e Wexler (1992) estão constituídas por uma integral que deve ser avaliada de forma numérica. Outros autores como Leij et al. (1991) e Batu (1996) conseguiram obter uma solução analítica exata para o problema multidimensional de transporte. No entanto, foram utilizadas condições de contorno, especialmente da fonte contaminante, mais complexas quando comparadas com as explicadas anteriormente. Entre estas complicações está a consideração de múltiplas fontes com concentrações variáveis.

West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) enumeram diferentes revisões feitas nas soluções analíticas de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987). Essa revisão indicou que existem diferentes opiniões em relação à aplicabilidade da solução de Domenico. Dado que a solução analítica de Domenico foi fundamentada em um enfoque heurístico, alguns pesquisadores têm expressado seu ceticismo com respeito à sua validade (West & Kueper, 2004). Por este motivo, West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) centraram suas observações em compreender a natureza das aproximações envolvidas na solução de Domenico. Srinivasan *et al.* (2007) realizaram uma análise matemática rigorosa sobre a origem e desenvolvimento desta solução. Os resultados permitiram entender os comportamentos observados durante o processo de simulação dos três solos lateríticos estudados e ajudaram a desenvolver algumas pautas gerais para o uso adequado da solução de Domenico (1987).

Tendo em vista os problemas matemáticos observados por West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) na solução analítica multidimensional de Domenico (1987), neste capítulo deseja-se observar o comportamento dessa solução para os três tipos de solos lateríticos analisados comparando-a com a solução analítica proposta por Cleary & Unga (1978).

Neste Capítulo apresenta-se a segunda etapa desta dissertação correspondente ao processo de simulação nos espaços bi e tridimensional aplicando as soluções analíticas de Domenico (1987) e Cleary & Unga (1978). Em primeiro lugar, serão explicadas as considerações e hipóteses de cada solução para melhor compreensão das capacidades e das limitações

existentes. Posteriormente, serão encontrados os parâmetros de transporte necessários para a execução do processo de simulação multidimensional. Estes parâmetros de transporte serão determinados partindo-se dos parâmetros no espaço unidimensional em escala laboratorial determinados no Capítulo 4. Com o auxílio da teoria das semelhanças e da análise dimensional, estes parâmetros serão levados a uma escala de campo fictícia determinada para a execução das simulações. Na escala de campo serão aplicadas as duas soluções analíticas escolhidas para todos os materiais estudados no Capítulo 3 e 4. O resultado esperado será a distribuição e avanço das plumas contaminantes nos espaços multidimensionais para um determinado tempo. Este capítulo finalizará com uma análise de sensibilidade utilizando procedimentos similares aos adotados por Srinivasan *et al.* (2007) para examinar o comportamento das duas soluções analíticas para os solos lateríticos em condições *in-situ* e compactadas. Espera-se com este processo de simulação verificar a eficácia de diferentes métodos de solução, validando-os com as previsões esperadas sobre o comportamento físico-químico do processo. Espera-se também, analisar e avaliar o comportamento do transporte dos solutos caracterizados quando interagem com o meio poroso selecionado.

5.2. CONSIDERAÇÕES DAS SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS

As soluções analíticas multidimensionais consideradas permitem simular o processo de avanço no tempo e no espaço de uma pluma contaminante que se espalha em um meio poroso saturado em um espaço bi e tridimensional. A escolha dessas duas soluções foi fundamentada no fato de que elas não utilizam nenhum processo de integração numérica, resultando assim sempre em uma solução fechada do problema de transporte. Isto é uma grande vantagem em relação às outras soluções analíticas multidimensionais existentes.

De uma forma geral, todas as soluções analíticas adotam uma série de considerações simplificadoras das propriedades e condições de contorno do domínio de estudo. Algumas destas considerações não são realistas, e outras, são idealizadas para que a equação diferencial parcial do problema possua solução exata. As soluções multidimensionais apresentadas neste capítulo supõem um meio poroso homogêneo, saturado, de comprimento semi-infinito e largura que pode ser infinita ou semi-infinita. No caso de ser infinita, considera-se que as fronteiras impermeáveis nas bordas estarão suficientemente afastadas para se ter um efeito insignificante sobre a distribuição do contaminante na área de interesse.

No limite inicial do domínio considerado, existirá uma superfície que representará a fonte contaminante com dimensões específicas e uma substância contaminante com concentração inicial (c_0) homogênea, conhecida e constante. Essa substância é injetada no sistema a uma velocidade constante e com uma taxa de injeção pequena, evitando que o campo de velocidades do sistema seja alterado. Durante todo o processo de contaminação, o contaminante mantém as propriedades de densidade e viscosidade constantes. Cada solução analítica considerará condições geométricas de fonte e domínio particulares, as quais serão explicadas mais na frente e que são ilustradas nas Figuras 5.1 e 5.2.

O contaminante é sujeito ao mecanismo físico de advecção só na direção x . Ou seja, a direção de fluxo de água e contaminante existirá unicamente e de forma constante na direção longitudinal com uma velocidade (v_x). Entretanto, o contaminante estará sujeito ao mecanismo de dispersão nas três direções, longitudinal (x) e transversal (y e z), representadas pelos coeficientes de dispersividade α_x , α_y e α_z , respectivamente. Esses coeficientes são considerados constantes. Nas duas soluções, os autores assumem que o contaminante sofre um mecanismo de decaimento de primeira ordem. Mas, neste trabalho, o valor considerado para o decaimento será nulo ($\lambda = 0$). Ambas as soluções poderão ser manipuladas para diferentes geometrias em que ocorra o processo de contaminação no meio poroso envolvido, necessitando apenas da modificação na posição da fonte contaminante.

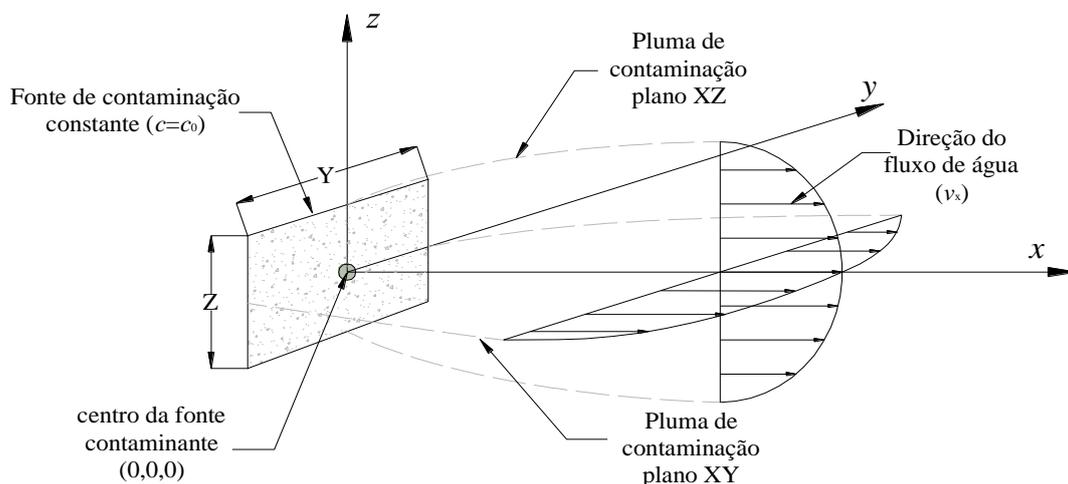


Figura 5.1. Geometria e sistema cartesiano de eixos para a solução analítica de Domenico (1987). Transporte tridimensional num domínio infinito devido a uma fonte de largura (Y) e altura (Z) (modificado de Guyonnet & Neville, 2004).

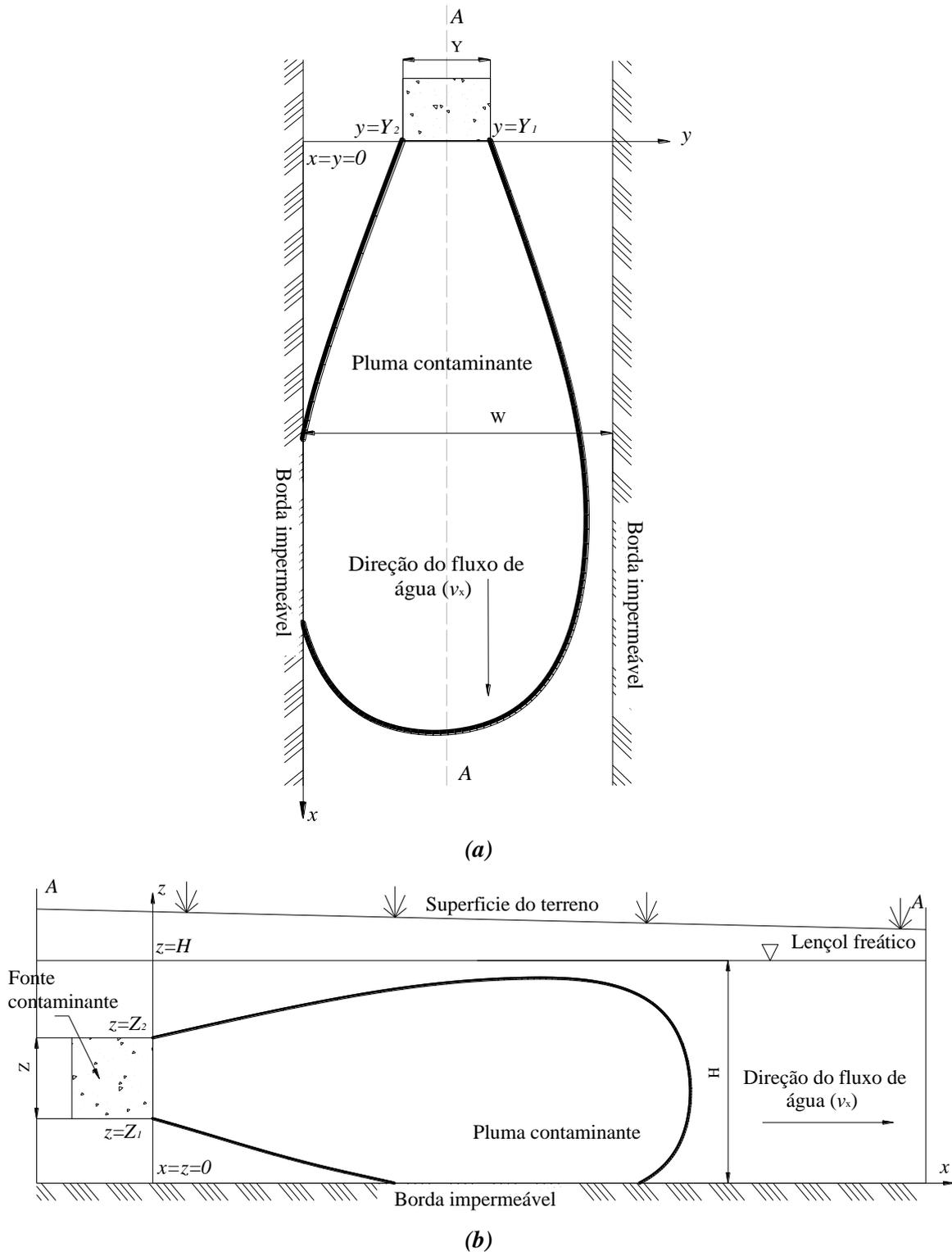


Figura 5.2. Geometria e sistema cartesiano de eixos na solução analítica de Cleary & Ungs (1978). (a) Vista em planta do transporte da pluma contaminante. (b) Seção A-A, transporte tridimensional num domínio de largura (W) e altura (H) finita (modificado de Wexler, 1992).

5.3. PARÂMETROS DE TRANSPORTE PARA AS SOLUÇÕES ANALÍTICAS MULTIDIMENSIONAIS

No caso de compostos inorgânicos (metais pesados), caso em análise nesta dissertação, são consideradas até dez variáveis de entrada que deverão ser determinadas para modelar o problema. Isso inclui as dimensões de uma fonte contaminante definida por um espaço finito (x, y, z), a concentração da fonte (c_0), a velocidade linear média de fluxo no solo (v_x), o tempo de transporte do contaminante desde o primeiro momento que faz contato com o lençol freático (t), os mecanismos sorcivos (K_d e/ou R) e, finalmente, as três componentes de dispersividade para o problema geral que é o problema de transporte tridimensional (α_x, α_y e α_z). Quando se trata de compostos orgânicos, surgem variáveis adicionais como o decaimento radioativo (λ) e/ou a biodegradação que finalmente levam à diminuição da concentração cujas equações serão expressas, mas não aplicadas, nesta dissertação.

Nos capítulos anteriores foi possível medir, calcular e analisar os parâmetros de transporte, utilizando métodos de calibração e otimização sobre dados experimentais obtidos no laboratório em ensaios unidimensionais (ensaio de coluna), de uma série de soluções contaminantes constituídas principalmente por íons de metais pesados. Esses parâmetros foram obtidos para corpos de prova de solos lateríticos moldados em condições *in-situ* e compactados. Os parâmetros ajustados foram finalmente o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x), coeficiente de retardo (R) e a velocidade linear média de percolação (v_x).

É possível utilizar alguma das expressões analíticas que serão apresentadas neste capítulo para realizar um processo de calibração e otimização, determinando de forma direta e independente cada uma das variáveis anteriormente enunciadas como foi realizado para o caso unidimensional. Para realizar isto, é indispensável contar com uma série de dados experimentais avaliados nas três dimensões do espaço. Os parâmetros de transporte para realização da simulação serão os determinados no Capítulo 4.

5.3.1. Influência da Escala no Coeficiente de Dispersividade

Madle (2002) define o coeficiente de dispersividade como uma propriedade dependente da escala do domínio estudado. O coeficiente de dispersividade determina o grau em que um contaminante diluído se espalhará em um domínio. Especificamente, o efeito da “escala” refere-se às medidas, cálculos e calibrações existentes na literatura (Domenico & Robbins, 1984, Domenico, 1987, Wexler, 1992 e Domenico & Schwartz, 1998). Esses autores sugerem

que as magnitudes dos coeficientes de dispersividade dependem do tamanho do domínio em que são obtidas as observações. Segundo Domenico & Robbins (1984), esse efeito pode ser dividido em duas partes relacionadas: ao aumento da magnitude dos coeficientes de dispersão em função da distância medida no campo e das muitas ordens de magnitude da diferença entre as medidas realizadas em campo, as obtidas em laboratório e os valores utilizados nos procedimentos de calibração.

Segundo Domenico & Robbins (1984) são dois os argumentos que explicam os efeitos da escala sobre os valores do coeficiente de dispersividade: a *heterogeneidade* e os *requisitos da modelagem*.

Heterogeneidade: Refere-se ao número, tamanho e disposição das variabilidades encontradas no meio poroso. Na escala macroscópica, um maior número de heterogeneidades pode ser encontrado e, neste caso, pode-se esperar uma maior dispersividade. Em um ensaio laboratorial, o mecanismo da dispersão mecânica, do ponto de vista microscópico, é devido às diferenças nas velocidades nos canais entre partículas e pelos caminhos tortuosos impostos à solução contaminante (*microdispersão*). Na escala de campo, tem-se camadas e zonas onde a condutividade hidráulica pode apresentar variações. Se a dispersão mecânica pode ser causada por pequenas diferenças de velocidade do fluxo no interior do solo poroso, é provável que também apresentará variações significativas quando a solução contaminante passar através de regiões com valores de condutividade hidráulica diferentes (*macrodispersão*).

Requisitos da Modelagem: A magnitude do coeficiente de dispersividade depende do caráter do modelo adotado e do processo de calibração escolhido assim como da qualidade da calibração. Um caso muito comum é quando procedimentos de campo e técnicas de calibração do modelo não consideram plenamente o efeito tridimensional da dispersão. Como resultado, incide-se em uma superestimação dos valores dispersivos quando a dimensionalidade do modelo calibrado não coincide com a do sistema natural.

5.3.2. Transformação dos Parâmetros de Laboratório nos Parâmetros de Campo

Neste tópico, serão determinados os parâmetros dispersivos necessários para executar os processos de simulação nos espaços multidimensionais. Um dos objetivos na estimativa destes parâmetros é continuar utilizando os parâmetros de transporte encontrados a partir dos ensaios unidimensionais em escala de laboratório e que foram otimizados a través do método dos mínimos quadrados (MMQ). Para conseguir passar da escala laboratorial para a escala de

campo se utilizou a teoria de análise dimensional, aplicando-se o teorema de “Π”-Buckingham e a teoria das semelhanças (Martínez, 2008).

5.3.2.1. Análise Dimensional no Modelo de Transporte

A análise dimensional é um método utilizado para verificar a aplicabilidade de equações em experimentos sistemáticos. A partir desse tipo de análise, se obtém uma série de expressões adimensionais. Essas permitirão utilizar os resultados experimentais obtidos em condições limitadas em situações com diferentes dimensões geométricas, cinemáticas e dinâmicas, inclusive em casos nos quais as propriedades do fluido e do fluxo são diferentes das observadas durante a etapa experimental.

5.3.2.2. Teorema “Π” de Buckingham Aplicado à Equação de Advecção-Dispersão

Com o Teorema “Π”-Buckingham é possível simplificar um fenômeno, ao reduzir o número de variáveis associadas com o mesmo. Pela análise dimensional, são obtidas expressões ou monômios adimensionais que descrevem o fenômeno físico com a mesma precisão que o fenômeno inicial, contudo, com menos variáveis. Matematicamente, o teorema estabelece que, em um problema físico com n variáveis e m dimensões distintas, as variáveis podem ser agrupadas em $(n - m)$ expressões adimensionais independentes, dadas por:

$$F(V_1, V_2, V_3, V_4, \dots, V_n) = 0 \Rightarrow G(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_{n-m}) = 0 \quad (5.1)$$

onde F e G são funções, V_1, V_2, \dots, V_n são n variáveis dimensionais e $\pi_1, \pi_2, \dots, \pi_{n-m}$ são as $n - m$ expressões ou monômios adimensionais.

Os monômios $G(\pi_1, \pi_2, \pi_3, \dots, \pi_{n-m})$ são obtidos a partir do produtório das variáveis de referência V_i elevadas a expoentes (ε_{ik}) que conduzem o monômio ao estado adimensional:

$$\pi_k = \prod_{i=1}^n V_i^{\varepsilon_{ik}} \quad k = 1, 2, 3, \dots, n - m \quad (5.2)$$

Os expoentes ε_{ik} na Eq. (5.2) são determinados pela condição de que cada expressão seja adimensional. Isto é feito substituindo as dimensões $M, L,$ e T (massa M , distância L , e tempo T) das variáveis V_i pelos expoentes ε_{ik} e, finalmente, igualando-se o produtório a zero.

Neste caso, se quer encontrar o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) quando se tem uma mudança nas condições de escala do modelo. A análise dimensional é possível partindo-se da função analítica que descreve o problema advectivo–dispersivo–reativo:

$$\frac{c(x,t)}{c_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \left[\frac{x - v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x}{\alpha_x} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \right\} \quad (5.3)$$

Desta forma, a função pode ser definida por seis variáveis:

$$F(c/c_0, x, t, \alpha_x, v_x, R) = 0 \quad (5.4)$$

A análise dimensional para as variáveis dessa função é descrita por:

$$R = [\text{adimensional}], c/c_0 = [\text{adimensional}], x = [L], t = [T], \alpha_x = [L], v_x = [L.T^{-1}] \quad (5.5)$$

Para aplicar o Teorema “Π”-Buckingham, pode-se expressar a Eq. (5.5) como uma matriz de m -linhas definida pelas dimensões envolvidas e n -colunas correspondentes às variáveis do problema:

$$\begin{matrix} [x] & [t] & [\alpha_x] & [v_x] & [c/c_0] & [R] \\ \begin{bmatrix} M \\ L \\ T \end{bmatrix} & \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & -1 & 0 & 0 \end{bmatrix} & & & & \end{matrix} \quad (5.6)$$

O número de monômios é obtido pela diferença entre o número de variáveis e o número de dimensões ($m - n$). Neste caso, ($m - n$) será igual a dois (2), já que se têm de fato quatro variáveis ($m = 4$), uma vez que c/c_0 e R já são adimensionais, e duas dimensões ($n = 2$), uma vez que nenhuma variável considera dimensão de massa (M). Para determinar os monômios, se faz o produto entre a matriz da Eq.(5.6) pelo vetor de expoentes das magnitudes envolvidos (ε_{ik}) e iguala-se o resultado a um vetor nulo:

$$\begin{bmatrix} 1 & 0 & 1 & 1 \\ 0 & 1 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{Bmatrix} \varepsilon_x \\ \varepsilon_t \\ \varepsilon_{\alpha_x} \\ \varepsilon_{v_x} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} 0 \\ 0 \end{Bmatrix} \quad (5.7)$$

Desta forma, os expoentes podem ser encontrados resolvendo o sistema (Eq. (5.7)):

$$\varepsilon_x + \varepsilon_{\alpha_x} + \varepsilon_{v_x} = 0, \quad \varepsilon_t - \varepsilon_{v_x} = 0 \quad (5.8)$$

Na Eq. (5.8), observa-se quatro incógnitas arbitrárias, o que permite encontrar infinitos conjuntos de soluções linearmente independentes que satisfazem o problema. A escolha da

solução foi feita de forma a conduzir a uma resposta que envolvesse parâmetros físicos conhecidos, como o número de Neumann e o número de Courant. Desta forma, foram obtidos dois conjuntos de soluções linearmente independentes, dados por: $\varepsilon_x=-2$, $\varepsilon_t=1$, $\varepsilon_{\alpha x}=1$ e $\varepsilon_{v_x}=1$ ou $\varepsilon_x=-1$, $\varepsilon_t=1$, $\varepsilon_{\alpha x}=0$ e $\varepsilon_{v_x}=1$. Aplicando-se a Eq. (5.2) e as soluções obtidas anteriormente é possível encontrar dois monômios adimensionais correspondentes ao problema dispersivo-advectivo:

$$\pi_1 = \frac{\alpha_x v_x}{\left(\frac{x^2}{t}\right)}, \quad \pi_2 = \frac{v_x}{\left(\frac{x}{t}\right)} \quad (5.9)$$

Estes dois monômios encontrados referem-se às duas constantes adimensionais denominadas de número de Neumann (N) no caso do π_1 e número de Courant (C) no caso do π_2 . Fisicamente, o número de Courant indica a relação entre, a velocidade física (v_x) e a velocidade numérica do transporte (x/t). O número de Neumann representa a relação entre a dispersão mecânica real ($\alpha_x v_x$) e a dispersão numérica (x^2/t). Estes números controlam a estabilidade nas soluções numéricas do problema de transporte. Para que uma solução seja estável é preciso que estes dois números cumpram algumas restrições mas, por enquanto, estes valores serão utilizados neste capítulo para transformar o parâmetro dispersividade de uma escala laboratorial a uma escala de campo.

É possível deduzir outra expressão linearmente dependente, expressa como a relação entre o número de Courant e o número de Neumann, esta relação é o número de Peclet:

$$P_e = \frac{\pi_2}{\pi_1} = \frac{C}{N} = \frac{x}{\alpha_x} \quad (5.10)$$

5.3.2.3. Teoria da Semelhança e Princípio de Similitude

Martínez (2008) explica que nos ensaios experimentais de fluxo, às vezes não é possível realizá-los na escala real, sendo necessário utilizar um protótipo. Isto ocorre devido ao tamanho ou pela dificuldade de reproduzir as condições reais do fluxo. Assim, realizam-se ensaios com modelos em escala reduzida e que são geometricamente semelhantes. Com o objetivo de simular o fenômeno de campo apresentado nesta dissertação e dispondo-se de alguns ensaios laboratoriais dos solos daqueles locais em escala reduzida, pretende-se modelar e avaliar o efeito que esta mudança de escala produz, analisando desta forma o comportamento do fenômeno de transporte no campo a partir de informações laboratoriais.

Utilizando a teoria de semelhança e os parâmetros adimensionais encontrados com o Teorema “Π”-Buckingham, supõe-se a validade das seguintes expressões:

$$N_{(Lab)} = N_{(campo)} \quad C_{(Lab)} = C_{(campo)} \quad P_{e(Lab)} = P_{e(campo)} \quad (5.11)$$

Substituindo as Eq. (5.9) e (5.10) na Eq. (5.11) tem-se, finalmente, que:

$$\frac{\alpha_{x,(Lab)} v_{x,(Lab)}}{\frac{x_{(Lab)}^2}{t_{(Lab)}}} = \frac{\alpha_{x,(campo)} v_{x,(campo)}}{\frac{x_{(campo)}^2}{t_{(campo)}}} \quad (5.11a)$$

$$\frac{v_{x,(Lab)}}{\frac{x_{(Lab)}}{t_{(Lab)}}} = \frac{v_{x,(campo)}}{\frac{x_{(campo)}}{t_{(campo)}}} \quad (5.11b)$$

$$\frac{x_{(Lab)}}{\alpha_{x,(Lab)}} = \frac{x_{(campo)}}{\alpha_{x,(campo)}} \quad (5.11c)$$

Com as Eqs. (5.11a) a (5.11c) é possível determinar a dispersividade longitudinal para qualquer escala do domínio que se pretende estudar utilizando os coeficientes de dispersividade medidos no laboratório. Na Figura 5.4 apresentam-se os gráficos de coeficientes de dispersividade para as diferentes escalas do domínio estudado, representadas pela distância x que corresponde à distância do ponto de estudo à fonte contaminante.

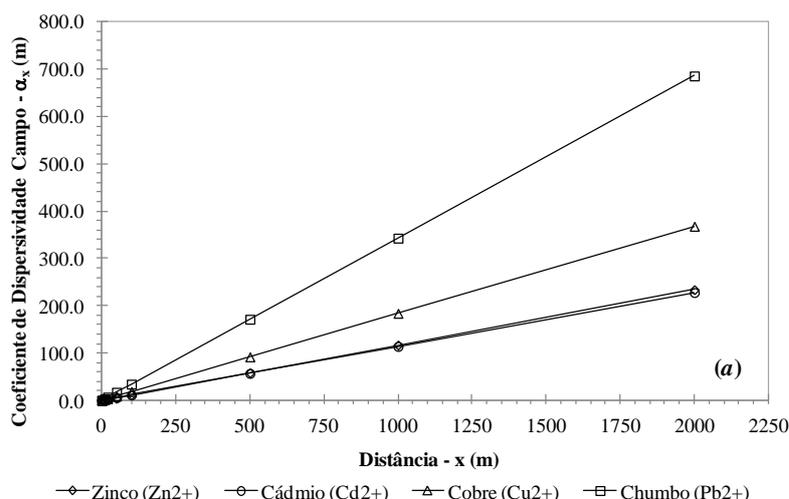


Figura 5.3. Determinação dos coeficientes de dispersividade longitudinal no campo a partir dos coeficientes de dispersividade longitudinal de laboratório. (a) solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, (b) solo laterítico *in-situ* a 7.0 m, (c) solo laterítico compactado.

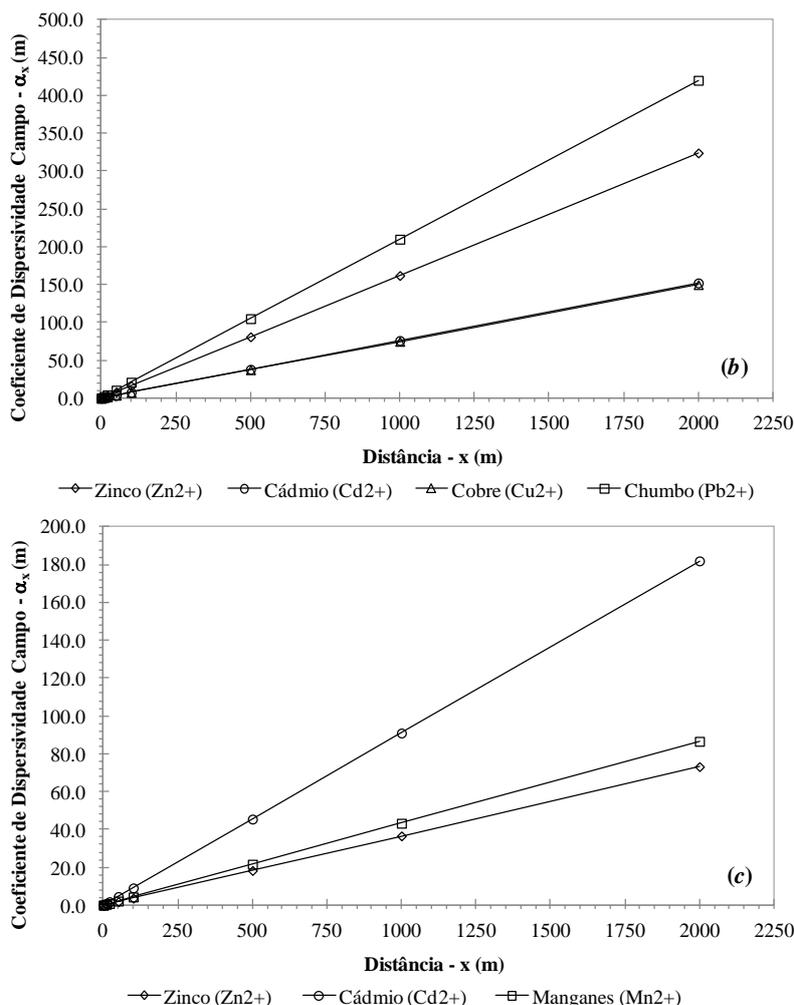


Figura 5.4. (Cont.) Determinação dos coeficientes de dispersividade longitudinal no campo a partir dos coeficientes de dispersividade longitudinal de laboratório. (a) solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, (b) solo laterítico *in-situ* a 7.0 m, (c) solo laterítico compactado.

A linearidade existente entre o aumento da escala e o coeficiente de dispersividade decorre do fato de se reproduzir o meio analisado na etapa de laboratório em escalas maiores. Como consequência, todas as propriedades do material avaliadas na etapa experimental se conservam. Entre estas propriedades tem-se a distribuição dos poros, os tamanhos das partículas, assim como, propriedades de permeabilidade que fazem com que o campo de velocidades seja o mesmo.

Uma vez obtidos os coeficientes de dispersividade longitudinal, Gelhar *et al.* (1992) estabelece que os valores de α_y e α_z variam tipicamente em uma e duas ordens de magnitude, respectivamente, menores que o coeficiente de dispersividade longitudinal α_x . Lembrando o proposto por Gelhar *et al.*(1992) os coeficientes podem ser calculados como:

$$\alpha_y = 0.1\alpha_x \quad (5.12)$$

$$\alpha_z = 0.01\alpha_x \quad (5.13)$$

Finalmente, na Tabela 5.1 se apresentam as condições inicial e de contorno do problema correspondentes à escala real de campo e as dimensões da fonte contaminante, estas condições fazem referencia ao problema ilustrado na Figura 5.2. Também são apresentados os parâmetros de transporte (α_x , α_y , α_z e R) e os parâmetros geotécnicos (n , ρ_d , v_x)

Tabela 5.1. Condições de entrada para o processo de simulação bi e tridimensional.

CONDIÇÕES DE ENTRADA		Solo Laterítico <i>in-situ</i> 3m				Solo Laterítico <i>in-situ</i> 7m				Solo Laterítico Compactado		
CONDIÇÕES INICIAL E DE CONTORNO		Zinco (Zn ²⁺)	Cádmio (Cd ²⁺)	Cobre (Cu ²⁺)	Chumbo (Pb ²⁺)	Zinco (Zn ²⁺)	Cádmio (Cd ²⁺)	Cobre (Cu ²⁺)	Chumbo (Pb ²⁺)	Zinco (Zn ²⁺)	Cádmio (Cd ²⁺)	Manganes (Mn ²⁺)
Tempo de Análise	t (d)			500				5000				43800
Comprimento do Domínio	W (m)			960				960				960
Largura do Domínio	H (m)			960				960				960
Comprimento da Fonte	Y (m)			240				240				240
Largura da Fonte	Z (m)			100				100				100
Distância Analisada	x (m)			1250				1250				1250
PARÂMETROS GEOTÉCNICAS												
Porosidade	n			0.58				0.42				0.43
Massa Específica Seca	ρ_d (Kg/m ³)			1153				1578				1640
Velocidade Linear Média	v_x (m/d)			4.4929				0.4147				0.2066
PARÂMETROS DE TRANSPORTE												
Dispersividade Longitudinal	α_x (m)	146.25	142.5	230.0	428.75	202.5	95.13	93.4	262.5	45.75	113.75	54.13
Dispersividade Transv. Horizontal	α_y (m)	14.625	14.25	23.00	42.875	20.25	9.513	9.34	26.25	4.575	11.375	5.413
Dispersividade Transv. Vertical	α_z (m)	1.4625	1.425	2.300	4.2875	2.025	0.9513	0.934	2.625	0.458	1.1375	0.541
Coeficiente de Retardo	R	2.056	2.224	4.447	6.773	2.1939	1.849	3.315	5.9107	26.65	39.368	18.47

5.4. SOLUÇÕES ANALÍTICAS BIDIMENSIONAIS.

Estas soluções simulam o transporte de contaminantes originário de fontes que interagem com o domínio em estudo. Este deve ser suficientemente amplo para garantir a existência de gradientes de concentração na direção horizontal e gradientes de concentração na direção perpendicular ao eixo de avanço da pluma de contaminação. Isto permite que a pluma contaminante se espalhe na direção longitudinal (α_x) e transversal horizontal (α_y), respectivamente. O mesmo domínio deve ser suficientemente fino para garantir que os gradientes de concentração na direção z , perpendicular ao eixo da pluma de contaminação seja

desprezível, ou seja, o espalhamento da pluma contaminante na direção transversal vertical seja nulo, $\alpha_z = 0$. (Figura 5.2(b)). A equação que governa o fenômeno é dada por:

$$\frac{\partial c(x, y, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} - v'_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (5.14)$$

5.4.1. Solução Analítica Bidimensional de Domenico (1987)

A solução analítica proposta por Domenico (1987) foi fundamentada na solução proposta por Domenico & Palciauskas (1982) e Domenico & Robbins (1985). A solução de Domenico (1987) é uma solução aproximada para a Eq. (5.14). As condições inicial e de contorno, ilustradas na Figura 5.1, são:

$$c(x, y, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 \leq x \leq \infty, -\infty \leq y \leq \infty \quad (5.15a)$$

$$c(0, y, t) = c_0, \quad -Y/2 \leq y \leq Y/2, \quad \forall \quad t > 0 \quad (5.15b)$$

$$c(0, y, t) = 0, \quad y < -Y/2 \quad \text{ou} \quad y > Y/2 \quad (5.15c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} = 0 \quad (5.15d)$$

Para as condições inicial e de contorno do domínio (Eq. (5.15a) até Eq. (5.15d)), Domenico (1987) apresentou uma solução analítica composta por dois termos:

$$c(x, y, t) = \frac{c_0}{4} f_x(x, t) f_y(y, t) \quad (5.16)$$

$$f_x(x, t) = \exp \left\{ \left(\frac{x}{2\alpha_x} \right) \left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}} \right) \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x - v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x / v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right) + \exp \left\{ \left(\frac{x}{2\alpha_x} \right) \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}} \right) \right\} \cdot \operatorname{erfc} \left(\frac{x + v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x / v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right) \quad (5.16a)$$

$$f_y(y, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{y + Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y - Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] \quad (5.16b)$$

onde $c(x, y, t)$ é a concentração do contaminante no espaço bidimensional $[\text{M}/\text{L}^3]$; (x, y) é o ponto da análise $[\text{L}]$ da concentração no tempo t $[\text{T}]$; o v'_x é a velocidade linear média do

contaminante dividida inicialmente pelo fator de retardo ($v'_x = v_x/R$); α_x , α_y são os coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal horizontal respectivamente [L], λ é o decaimento radioativo e Y representa a largura da fonte contaminante [L].

Na Eq. (5.16), o termo $f_x(x, t)$ denota a solução analítica unidimensional proposta por Bear (1979) em sua forma completa, inclusive considerando o fenômeno sorcivo, adotando o fator de retardo. O termo $f_y(y, t)$ considera o efeito da dispersão transversal devido à fonte de tamanho finito no espaço bidimensional com dimensão Y .

5.4.2. Solução Analítica Bidimensional de Cleary & Ungs (1978)

Cleary & Ungs (1978) determinaram uma solução analítica bidimensional para a solução da equação Eq. (5.14). As condições inicial e de contorno, ilustradas na Figura 5.2, foram:

$$c(x, y, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 < x < \infty, 0 \leq y \leq W \quad (5.17a)$$

$$c(0, y, t) = c_0, \quad Y_1 \leq y \leq Y_2 \quad (5.17b)$$

$$c(0, y, t) = 0, \quad y < Y_1 \quad \text{ou} \quad y > Y_2 \quad (5.17c)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow W} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial c(x, y, t)}{\partial y} = 0 \quad (5.17d)$$

Dadas as condições inicial e de contorno do domínio em estudo, Cleary & Ungs (1978) apresentaram uma solução analítica exata definida por uma série infinita:

$$c(x, y, t) = c_0 \sum_{n=0}^{\infty} L_n P_n \cos(\eta y) \cdot \left\{ \exp \left[\frac{x(v'_x - \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x - \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x}} \right] + \exp \left[\frac{x(v'_x + \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x + \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x}} \right] \right\} \quad (5.18)$$

onde,

$$L_n = \begin{cases} 1/2, & n = 0 \\ 1, & n > 0 \end{cases} \quad (5.18a)$$

$$P_n = \begin{cases} \frac{Y_2 - Y_1}{W}, & n = 0 \\ \frac{[\sin(\eta Y_2) - \sin(\eta Y_1)]}{n\pi}, & n > 0 \end{cases} \quad (5.18b)$$

$$\eta = n\pi / W, \quad n = 0, 1, 2, 3, \dots \quad (5.18c)$$

$$\beta = \sqrt{v_x^2 + 4\alpha_x v'_x (\eta^2 \alpha_y v'_x + \lambda)}$$

onde Y_1 e Y_2 correspondem às coordenadas dos pontos inferior e superior da fonte contaminante que definem a dimensão de largura [L], respectivamente, e W é a largura correspondente ao espaço entre as fronteiras impermeáveis [L] (Figura 5.2 (a))

Os termos da série da Eq. (5.18) tendem a oscilar. De fato, para pequenos valores de x , é necessária uma grande quantidade de termos para que se observe pouca oscilação no resultado da concentração. Para o caso de grandes valores de x , a série converge rapidamente. Neste caso, para que a oscilação do valor da concentração relativa não ultrapasse a ordem de 1×10^{-4} são necessários pelos menos 60 termos.

5.4.1. Comparação dos Resultados entre as Soluções Analíticas Bidimensionais

Com as condições de entrada estabelecidas na Tabela 5.1 e utilizando as soluções analíticas no espaço bidimensional, foram realizadas as simulações considerando duas componentes de dispersividade (α_x e α_y). Foram feitas simulações para os solos lateríticos *in-situ* e compactado. Nas Figuras 5.4 e 5.5. Nelas as plumas contaminantes são representadas pelos contornos que correspondem aos valores de concentração relativa (c/c_0) em um espaço XY . Para facilitar a comparação dos resultados, os gráficos foram plotados em uma mesma escala. C&U indica a solução de Cleary & Unga (1978).

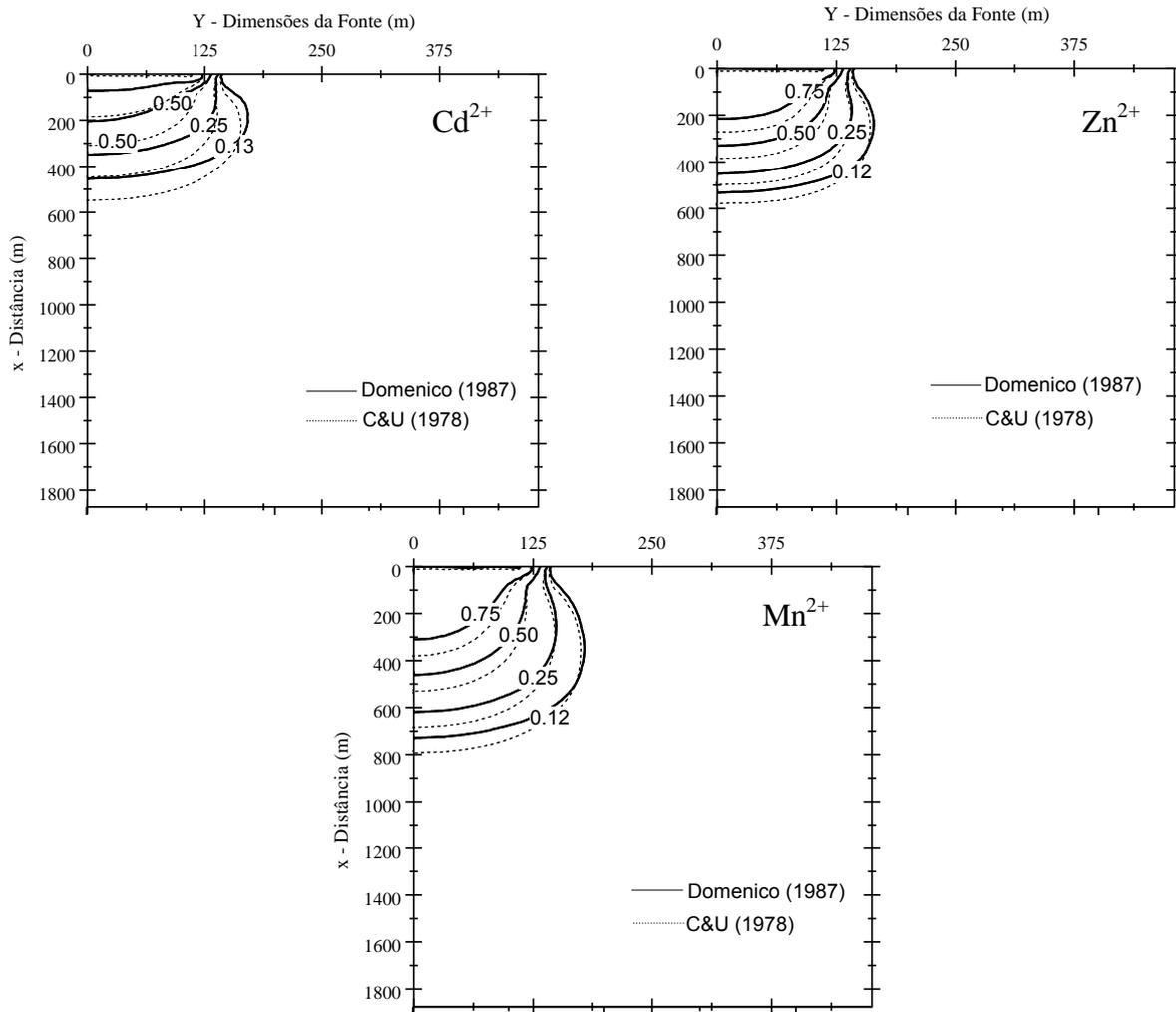


Figura 5.5. Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) no espaço XY para os íons dos metais pesados no solo laterítico compactado.

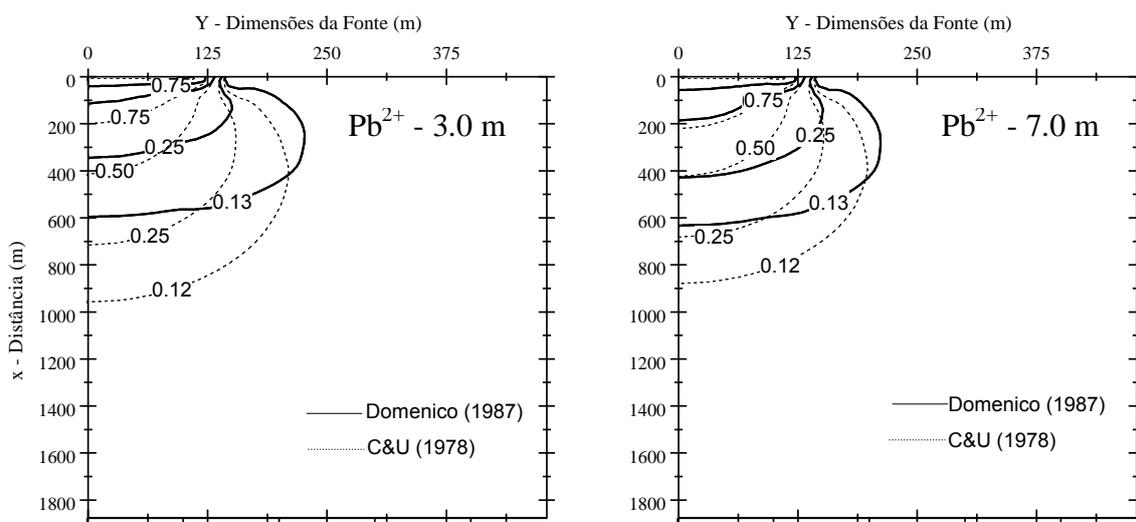


Figura 5.6. Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

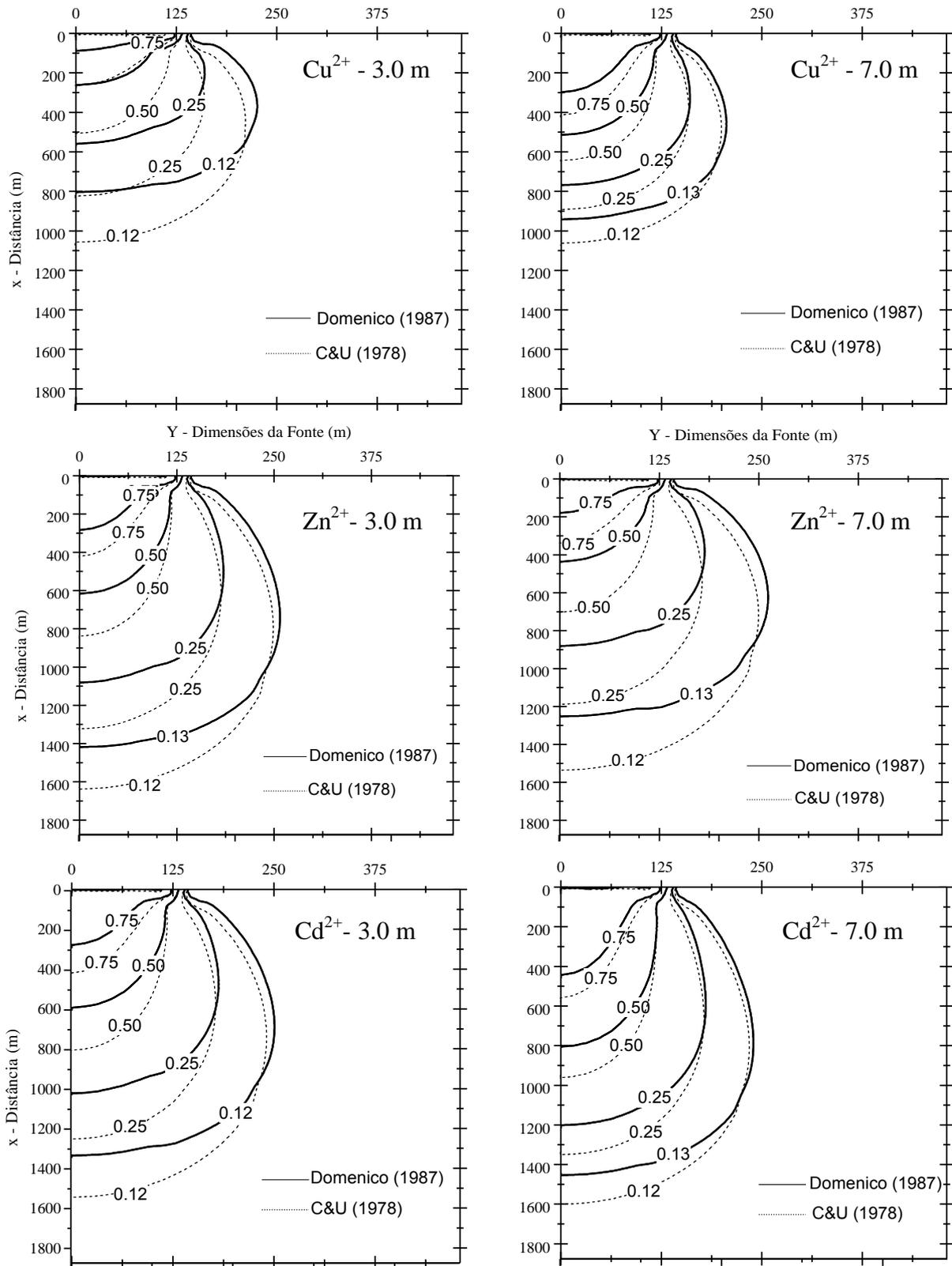


Figura 5.7. (Cont.) Análise bidimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

5.5. SOLUÇÕES ANALÍTICAS TRIDIMENSIONAIS

As soluções tridimensionais são particularmente úteis para simular o transporte de plumas de contaminação em situações nas quais as fontes contaminantes possuem dimensões conhecidas. Estas soluções são aplicadas em meios suficientemente amplos, em todas suas dimensões, para que ocorra a propagação de gradientes longitudinais e transversais da massa contaminante. Com essas considerações, a equação que governa o fenômeno de transporte é dada por:

$$\frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial t} = D_x^h \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + D_y^h \frac{\partial^2 c}{\partial y^2} + D_z^h \frac{\partial^2 c}{\partial z^2} - v'_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (5.19)$$

5.5.1. Soluções Analíticas Tridimensionais de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987)

A solução analítica proposta por Domenico (1987) foi fundamentada na solução proposta por Domenico & Robbins (1985). Esta é uma solução aproximada para a Eq. (5.19). Srinivasan *et al* (2007) apresentaram de forma detalhada as condições inicial e de contorno para esta equação (Figura 5.1):

$$c(x, y, z, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 \leq x \leq \infty, -\infty \leq y \leq \infty, -\infty \leq z \leq \infty \quad (5.20a)$$

$$c(0, y, z, t) = c_0, \quad -Y/2 \leq y \leq Y/2, -Z/2 \leq z \leq Z/2, \quad \forall \quad t > 0 \quad (5.20b)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial x} = 0, \quad \lim_{y \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial y} = 0, \quad \lim_{z \rightarrow \pm\infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \quad (5.20c)$$

Dadas as condições inicial e de contorno do domínio em estudo, Domenico (1987) apresentou uma solução analítica composta por três termos independentes:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0}{8} f_x(x, t) f_y(y, t) f_z(z, t) \quad (5.21)$$

onde,

$$f_x(x, t) = \operatorname{erfc} \left[\frac{x - v'_x t}{2\sqrt{D_x^m t}} \right] + \exp \left[\frac{v'_x x}{D_x^m} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x + v'_x t}{2\sqrt{D_x^m t}} \right] \quad (5.21a)$$

$$f_y(y, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{y+Y/2}{2\sqrt{D_y^{h'}t}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y-Y/2}{2\sqrt{D_y^{h'}t}} \right] \quad (5.21b)$$

$$f_z(z, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{z+Z/2}{2\sqrt{D_z^{h'}t}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z-Z/2}{2\sqrt{D_z^{h'}t}} \right] \quad (5.21c)$$

Domenico & Robbins (1985) substituem nas Eqs. (5.21b) e (5.21c), que representam os termos dispersivos transversais $f_y(y, t)$ e $f_z(z, t)$, o tempo t por x/v'_x . Além disso, sabendo que $D_x^{m'} = \alpha_x v'_x$, $D_y^{m'} = \alpha_y v'_x$ e $D_z^{m'} = \alpha_z v'_x$, tem-se, finalmente, que:

$$f_x(x, t) = \operatorname{erfc} \left[\frac{x-v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x}{\alpha_x} \right] \operatorname{erfc} \left[\frac{x+v'_x t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \quad (5.22a)$$

$$f_y(y, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{y+Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{y-Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}} \right] \quad (5.22b)$$

$$f_z(z, t) = \operatorname{erf} \left[\frac{z+Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right] - \operatorname{erf} \left[\frac{z-Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}} \right] \quad (5.22c)$$

onde α_x , α_y , α_z são os coeficientes de dispersividade longitudinal, transversal horizontal e transversal vertical respectivamente [L], Y representa a largura da fonte contaminante [L]; Z representa a altura ou espessura da fonte contaminante [L]. Neste caso, os termos $f_y(y, t)$ e $f_z(z, t)$ consideram o efeito da dispersão transversal devido à fonte de tamanho finito no espaço tridimensional com dimensões Y e Z , independentemente do tempo e da solução unidimensional que só considera a dispersão longitudinal.

Domenico (1987) incorpora o efeito do fenômeno de decaimento de primeira ordem, substituindo o termo $f_x(x, t)$ que denota a solução analítica de Ogata & Banks (1961) pela solução analítica proposta por Bear (1979) apresentada no Capítulo 4. Neste caso, a forma completa da expressão foi apresentada por Martin-Hayden & Robbins (1997) e é dada por:

$$c(x, y, z, t) = \frac{C_0}{8} f_x^*(x, t) f_y(y, t) f_z(z, t) \quad (5.23)$$

onde,

$$f_x^*(x,t) = \exp\left\{\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right)\left(1 - \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}}\right)\right\} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x - v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}}\right) + \exp\left\{\left(\frac{x}{2\alpha_x}\right)\left(1 + \sqrt{1 + \frac{4\lambda\alpha_x}{v'_x}}\right)\right\} \cdot \operatorname{erfc}\left(\frac{x + v'_x t \sqrt{1 + 4\lambda\alpha_x/v'_x}}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}}\right) \quad (5.23a)$$

$$f_y(y,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{y+Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{y-Y/2}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] \quad (5.23b)$$

$$f_z(z,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{z+Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{z-Z/2}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] \quad (5.23c)$$

Desta forma, a solução definitiva de Domenico (1985) foi apresentada em um sistema tridimensional, tendo sido compartimentada em um conjunto de soluções uni e bidimensionais. Para fundamentar essa idéia, Domenico & Robbins (1985) utilizaram o *princípio de superposição*.

Para conhecer a concentração máxima da pluma contaminante basta determinar a concentração ao longo do eixo de simetria. Isto é possível de ser realizado, fazendo $y = z = 0$ nas Eqs. (5.23b) e (5.23c), ou seja:

$$c_{\max}(x,0,0,t) = \frac{c_0}{8} f_x^*(x,t) f_y^*(0,t) f_z^*(0,t) \quad (5.24)$$

onde,

$$f_y^*(0,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{Y}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{Y}{2\sqrt{\alpha_y x}}\right] \quad (5.24a)$$

$$f_z^*(0,t) = \operatorname{erf}\left[\frac{Z}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] - \operatorname{erf}\left[\frac{Z}{2\sqrt{\alpha_z x}}\right] \quad (5.24b)$$

Na Eq. (5.23), se o termo de decaimento de primeira ordem (λ) for nulo, o fator de retardo (R) for igual à unidade e as dimensões da fonte (Y e Z) forem suficientemente grandes a ponto de fazer com que o argumento da função erro seja infinito ($\operatorname{erf}(+\infty) = 1$), a solução será reduzida ao caso unidimensional proposto por Ogata & Banks (1961).

5.5.2. Solução Analítica Tridimensional de Cleary & Ungs (1978)

Cleary & Ungs (1978) apresentam uma solução exata para a Eq. (5.19). As condições inicial e de contorno que foram estabelecidas a partir da Figura 5.2 são:

$$c(x, y, z, 0) = 0, \quad \forall \quad 0 < x < \infty, 0 < y < W \text{ e } 0 < z < H, \quad (5.25a)$$

$$c(x, y, z, t) = c_0, \quad x = 0 \text{ e } Y_1 \leq y \leq Y_2 \text{ e } Z_1 \leq z \leq Z_2, \quad (5.25b)$$

$$c(x, y, z, t) = 0, \quad x = 0 \text{ e } y < Y_1 \text{ ou } y > Y_2 \text{ e } z < Z_1 \text{ ou } z > Z_2; \quad (5.25c)$$

$$\begin{aligned} \lim_{x \rightarrow \infty} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial x} = 0 \quad \lim_{y \rightarrow 0} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial y} = 0 \quad \lim_{y \rightarrow W} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial y} = 0 \\ \lim_{z \rightarrow 0} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \quad \lim_{z \rightarrow H} \frac{\partial c(x, y, z, t)}{\partial z} = 0 \end{aligned} \quad (5.25d)$$

Nestas condições, a solução analítica é composta por uma série infinita dupla dada por:

$$\begin{aligned} c(x, y, z, t) = c_0 \sum_{m=0}^{\infty} \sum_{n=0}^{\infty} L_{mn} O_m P_n \cos(\zeta z) \cos(\eta y) \\ \cdot \left\{ \exp \left[\frac{x(v'_x - \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x - \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] + \exp \left[\frac{x(v'_x + \beta)}{2\alpha_x v'_x} \right] \operatorname{erf} \left[\frac{x + \beta t}{2\sqrt{\alpha_x v'_x t}} \right] \right\} \end{aligned} \quad (5.26)$$

$$L_{mn} = \begin{cases} 1/2 & m = 0 \text{ e } n = 0 \\ 1 & m = 0 \text{ e } n > 0 \\ 1 & m > 0 \text{ e } n = 0 \\ 2 & m > 0 \text{ e } n > 0 \end{cases} \quad (5.26a)$$

$$O_m = \begin{cases} \frac{Z_2 - Z_1}{H}, & m = 0 \\ \frac{[\sin(\zeta Z_2) - \sin(\zeta Z_1)]}{m\pi}, & m > 0 \end{cases} \quad (5.26b)$$

$$P_n = \begin{cases} \frac{Y_2 - Y_1}{W}, & n = 0 \\ \frac{[\sin(\eta Y_2) - \sin(\eta Y_1)]}{n\pi}, & n > 0 \end{cases} \quad (5.26c)$$

$$\begin{aligned}\zeta &= m\pi / H, & m &= 0, 1, 2, 3, \dots \\ \eta &= n\pi / W, & n &= 0, 1, 2, 3, \dots\end{aligned}\tag{5.26d}$$

$$\beta = \sqrt{v_x^2 + 4\alpha_x v_x' (\eta^2 \alpha_y v_x' + \zeta^2 \alpha_z v_x' + \lambda)}$$

onde Y_1 e Y_2 correspondem as coordenadas dos pontos inferior e superior da fonte contaminante que definem a dimensão de largura [L], respectivamente; Z_1 e Z_2 correspondem às coordenadas dos pontos inferior e superior da fonte contaminante que definem a dimensão de altura [L], respectivamente; W é a largura correspondente ao espaço entre as fronteiras impermeáveis [L] (Figura 5.2(a)) e H é a espessura do domínio (Figura 5.2(b)).

Os termos das séries da Eq. (5.26) tendem a oscilar. De fato, para pequenos valores de x , é necessária uma grande quantidade de termos para que se observe pouca oscilação no resultado da concentração. Para o caso de grandes valores de x , a série converge rapidamente. Neste caso, para que a oscilação do valor da concentração relativa não ultrapasse a ordem de 1×10^{-4} são necessários entre 80 a 100 termos.

5.5.3. Comparação dos Resultados entre as Soluções Analíticas Tridimensionais

Utilizando-se agora as soluções analíticas no espaço tridimensional, foram realizadas as simulações considerando as três componentes de dispersividade (α_x , α_y e α_z) para todos os íons de metais pesados nos solos lateríticos *in-situ* e compactados. Os resultados destas análises tridimensionais são apresentados nas Figuras 5.6 e 5.7. Nelas as plumas contaminantes são representadas pelos contornos que correspondem aos valores de concentração relativa (c/c_0) em um espaço XY . A ordem de apresentação dos resultados foi feito conservando os mesmos padrões de escala utilizados na análise bidimensional.

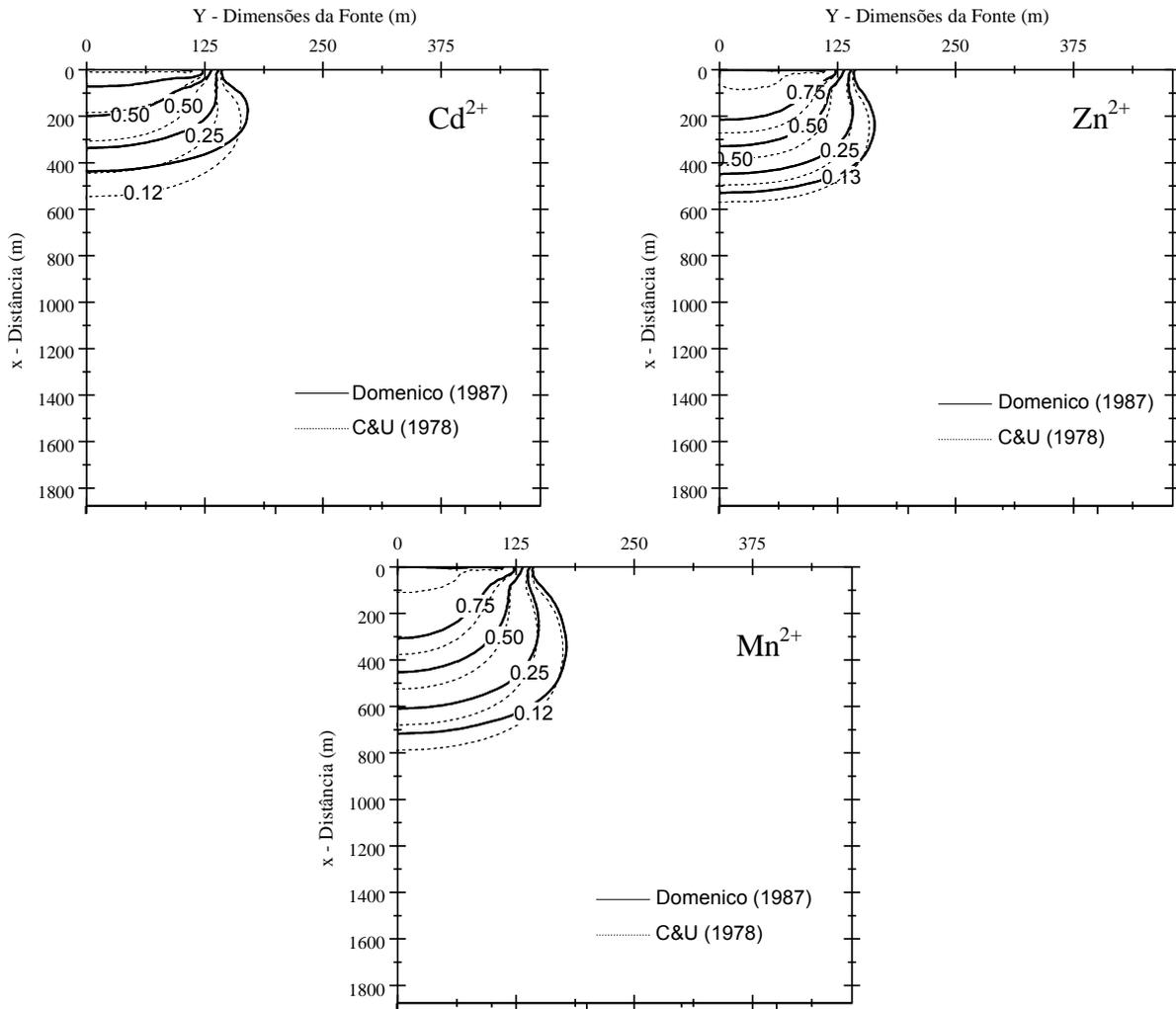


Figura 5.8. Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) no espaço XY para os íons dos metais pesados no solo laterítico compactado.

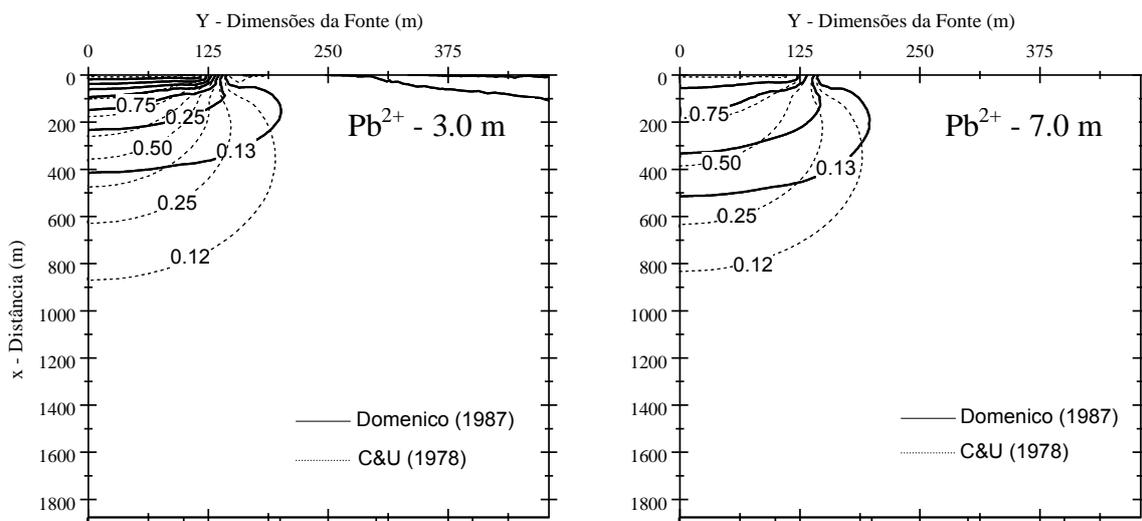


Figura 5.9. Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

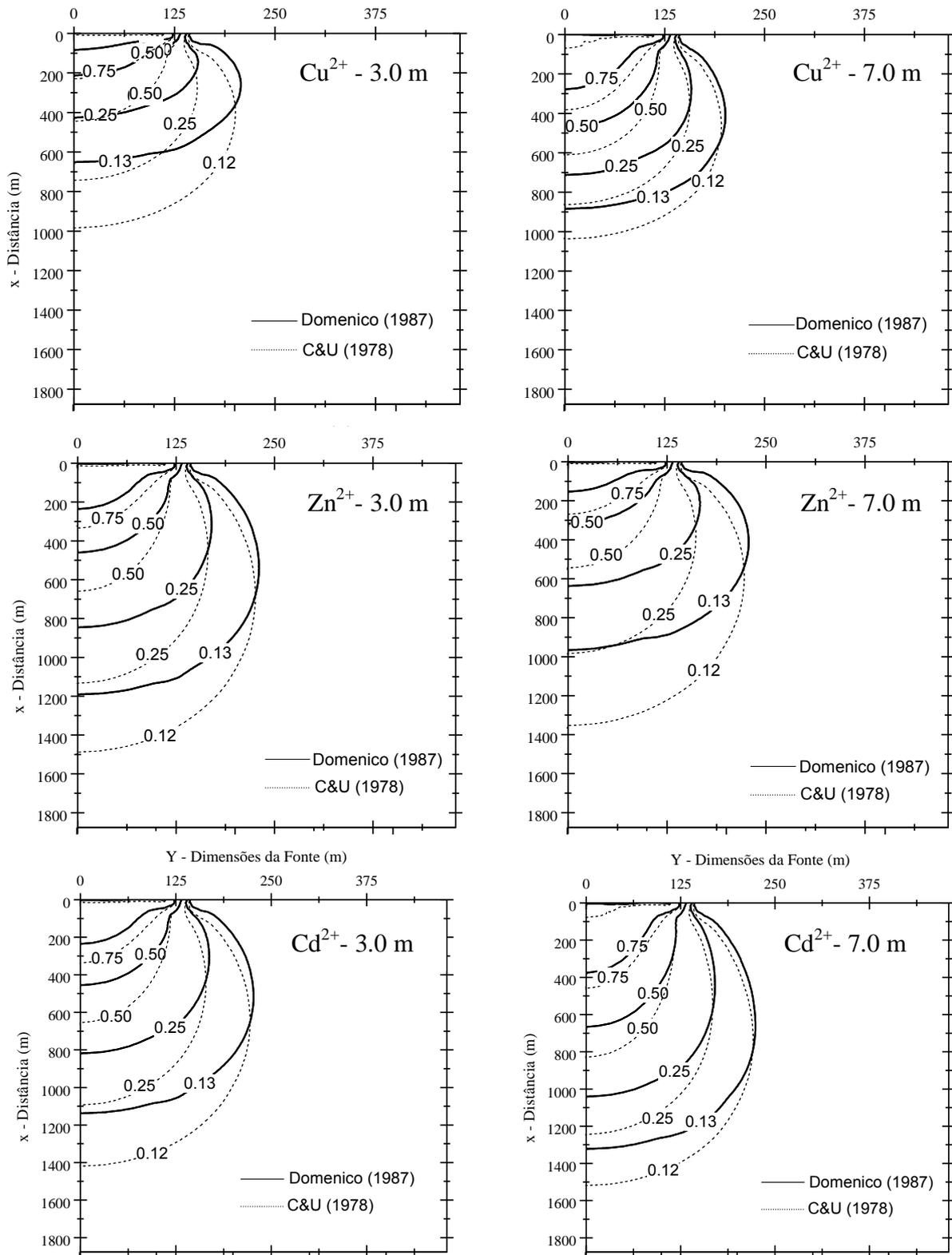


Figura 5.10. (Cont.) Análise tridimensional de plumas contaminantes (c/c_0) espaço XY no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m e solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

5.6. ANÁLISE DO COMPORTAMENTO DAS PLUMAS CONTAMINANTES NOS ESPAÇOS BI E TRIDIMENSIONAIS

Preliminarmente, vão ser comparados os resultados obtidos entre as simulações bi e tridimensionais, utilizando como balizador as concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$, correspondentes aos valores de concentração ao longo do eixo longitudinal da pluma quando $x = 0$. Nas Figuras 5.8 e 5.9 apresenta-se uma comparação, entre as concentrações relativas máximas determinadas nos modelos analíticos bi e tridimensionais de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978), para os três solos lateríticos estudados e os correspondentes íons contaminantes. Também são apresentadas, nas Figuras 5.10 e 5.11, as seções transversais das plumas de contaminação. Foram obtidas duas seções transversais para cada uma das plumas, em dois pontos localizados em distâncias diferentes medidas a partir da fonte contaminante.

Nas Figuras 5.9 e 5.11 observa-se que nos solos lateríticos *in-situ* as plumas do espaço tridimensional localizam-se retardadas em relação às plumas do espaço bidimensional. Isto é explicado pelo fato de que, por considerações de contorno, na formulação analítica bidimensional, deixa-se de considerar uma componente dispersiva correspondente ao coeficiente de dispersividade transversal vertical (α_z). A função desta componente dispersiva é gerar uma nova trajetória de espalhamento da massa contaminante. Consequentemente, as plumas contaminantes em duas dimensões apresentaram um maior avanço do que as tridimensionais. Neste caso, o fenômeno começará um processo de estabilização acelerado como consequência da componente adicional de dispersividade.

O mesmo fenômeno não acontece no solo laterítico compactado. Neste material, não se observa uma mudança tão pronunciada como nas análises bidimensionais devido à presença ou à ausência da componente dispersiva transversal vertical. Isso pode ser observado na Figura 5.11 para o solo laterítico compactado, onde as concentrações máximas relativas, determinadas nos espaços bi e tridimensional, encontram-se superpostas uma sobre a outra.

Este fenômeno deve ter sido influenciado pelo processo de compactação que afetou diretamente o incremento do coeficiente de retardo nestes materiais. O retardo é um parâmetro que, diferentemente do coeficiente de dispersão e de dispersividade, não considera a tridimensionalidade do sistema. Logo, sua grandeza permanece igual em todas as direções do espaço, atuando diretamente no tensor de coeficientes de dispersão mecânica. Assim, o retardo é simplesmente um valor escalar ($1/R$) que multiplica todas as componentes do tensor. Ou seja, no fenômeno de transporte considerando os mecanismos de adsorção, representados

pelo coeficiente de retardo, a componente de dispersão mecânica (D^m) é reduzida pela magnitude deste coeficiente. Neste caso, a dispersão mecânica no sentido transversal vertical (D_z^h) é muito baixa, e quando dividida por um valor de retardo (R) muito grande, seu efeito torna-se praticamente desprezível. Finalmente, pode-se dizer que nos solos compactados, o efeito da dispersividade transversal é desprezível. Isto é interessante, devido ao fato de que o problema de contaminação, para este tipo de material em condições compactadas, poderia, em princípio, ser simulado em condições bidimensionais.

Para os solos lateríticos compactados (Figuras 5.4 e 5.6) observa-se que para um tempo de análise próximo aos 120 anos (43800 dias) o avanço dos íons contaminantes só consegue chegar até aproximadamente a metade da distância de análise ($x = 600$ m). Em princípio, este efeito é devido à condição do próprio material e ao significativo efeito que a compactação estabelece no fenômeno sorcivo. As plumas apresentadas nas Figuras 5.4 e 5.6 foram plotadas na ordem de menor para maior deslocamento dos íons contaminantes. O Cd^{2+} apresentou os maiores coeficientes de dispersividade, que em teoria representam a capacidade de um soluto de se espalhar num meio poroso. O Cd^{2+} também apresentou menores deslocamentos, quando comparado com o Mn^{2+} . Além disso, o Cd^{2+} conservou o maior fator de retardo comparado com os outros íons. Esse comportamento também foi observado experimentalmente por Nascentes (2003) como foi apresentado no Capítulo 3 no Item 3.3.3.2.

Nos solos lateríticos *in-situ*, apresentados nas Figuras 5.5 e 5.7 (esquerda) para o solo a 3 m e (direita) para o solo a 7 m, o comportamento observado nas plumas foi diferente em relação ao solo laterítico compactado. Conservando o padrão de apresentação das análises anteriores, as Figuras 5.5 e 5.7 foram plotadas na ordem de menor para maior deslocamento dos íons contaminantes. Para os dois solos *in-situ*, o íon contaminante que se deslocou menos foi o Pb^{2+} e o íon que se deslocou mais foi o íon Cd^{2+} . Esse comportamento também foi observado experimentalmente por Carvalho (2001). Os tempos da análise para os dois materiais foram diferentes: para o solo laterítico *in-situ* a 3 m, o tempo foi de $t = 500$ dias e para o solo laterítico *in-situ* a 7 m, o tempo foi de $t = 5000$ dias, o que corresponde a dez vezes o tempo do primeiro solo. Embora os tempos de análise sejam diferentes, nas Figuras 5.5 e 5.7 observa-se que as distâncias atingidas pelas plumas de cada íon nos dois materiais são similares. Esse comportamento também foi observado nos resultados unidimensionais, onde o tempo para atingir o processo de estabilização na concentração, foi uma ordem de magnitude maior no solo com maior profundidade.

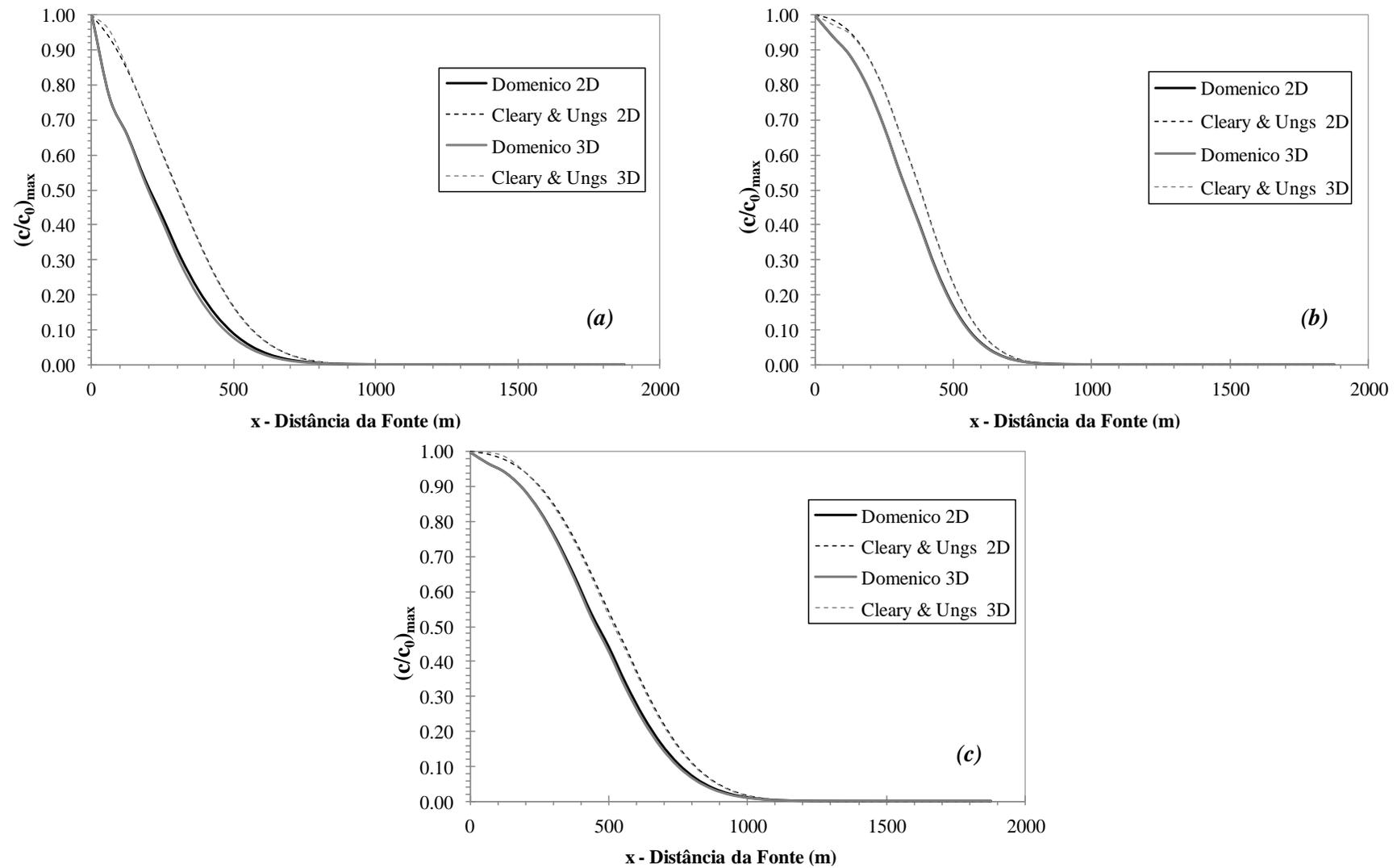


Figura 5.11. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para os solo laterítico compactado. (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} .

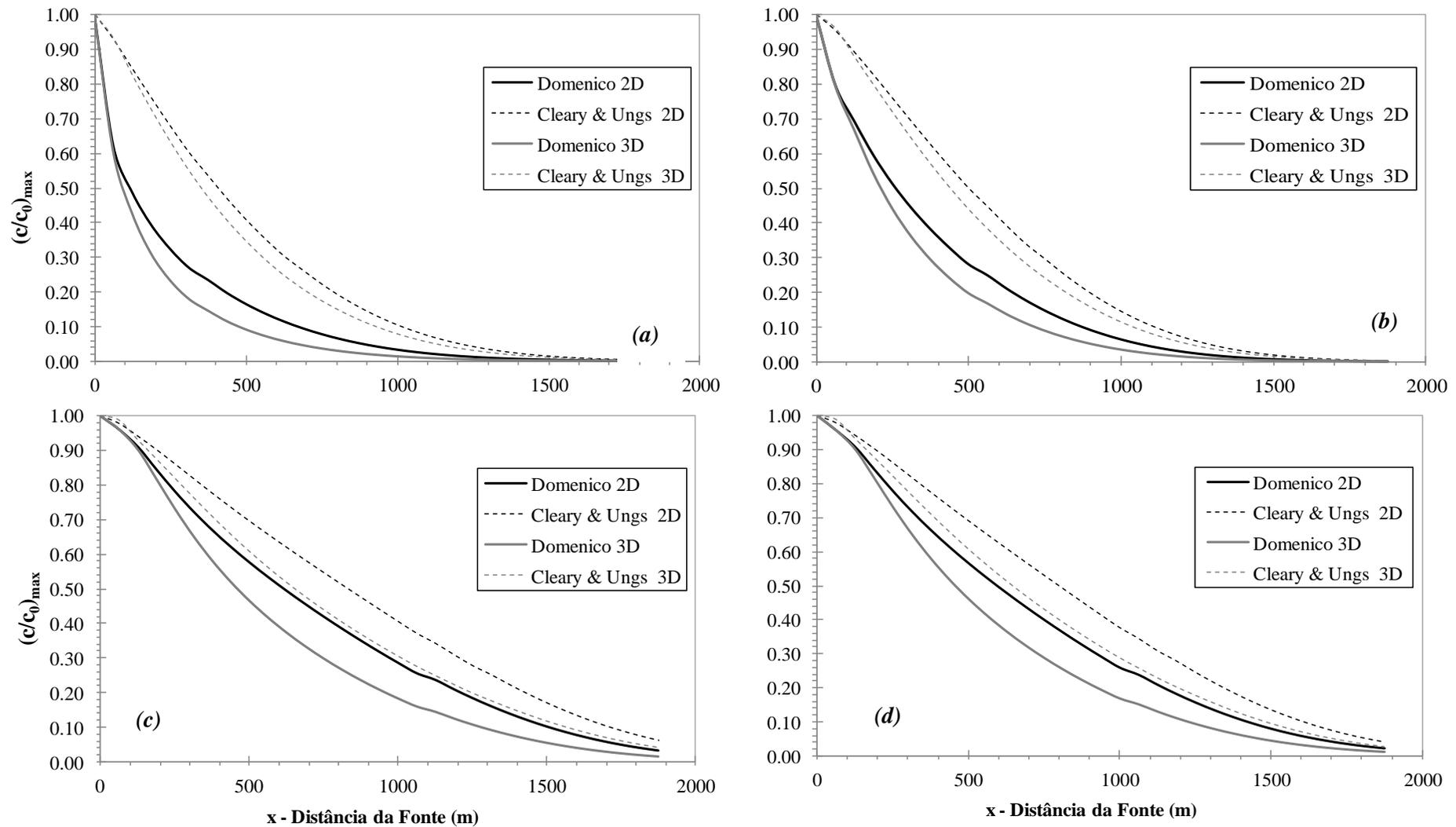


Figura 5.12. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

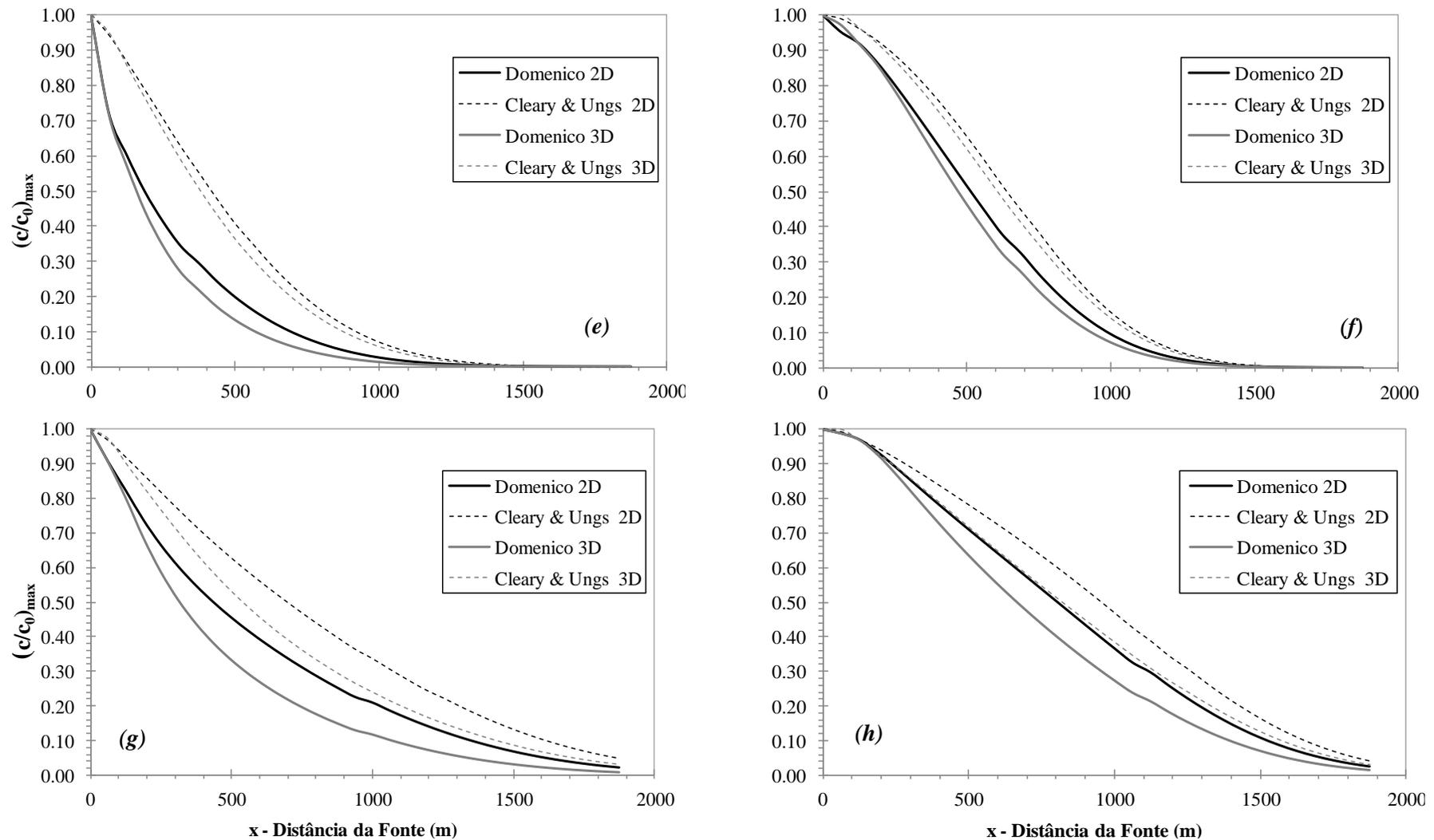


Figura 5.13. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido longitudinal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

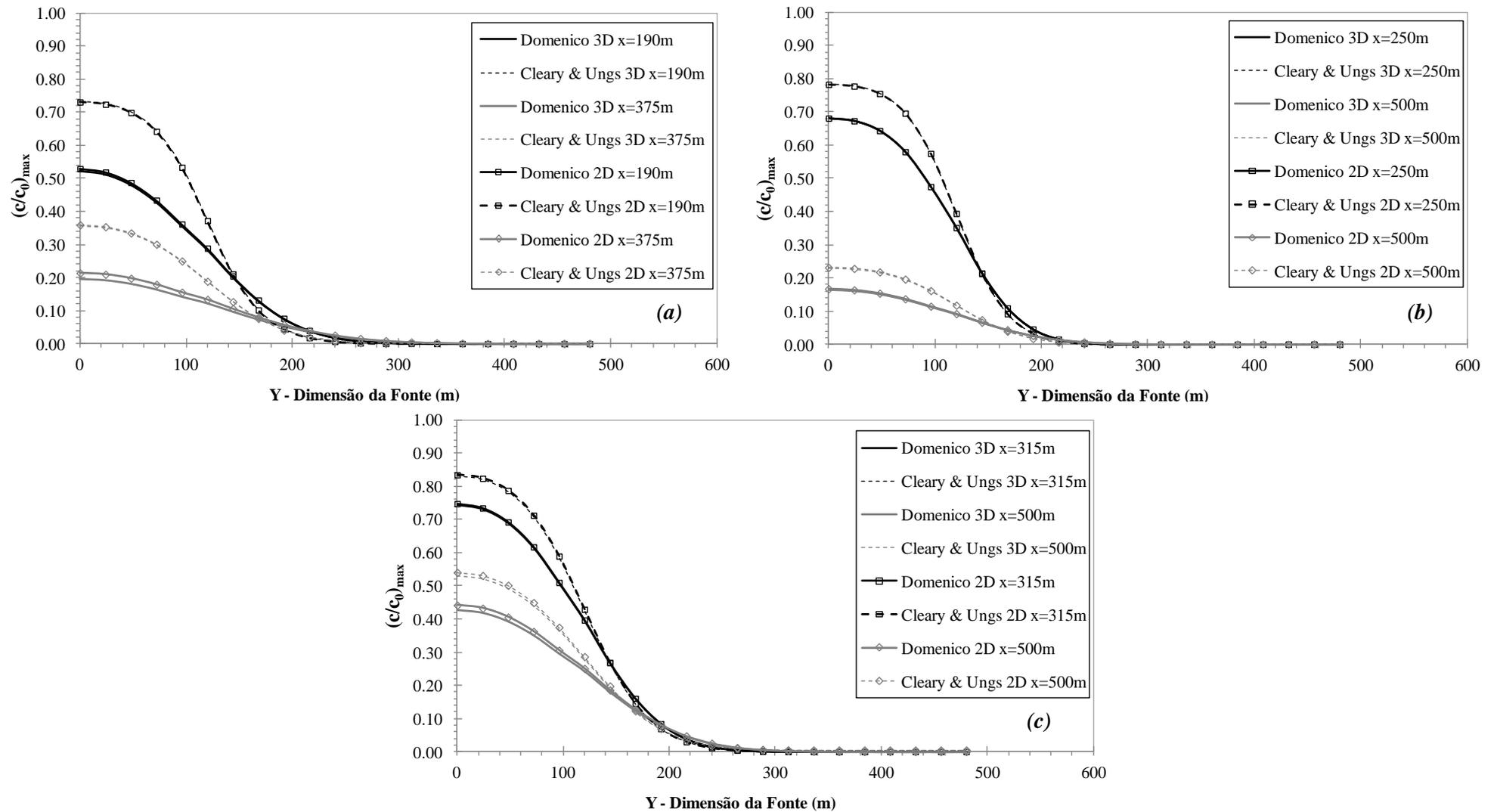


Figura 5.14. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para o solo laterítico compactado. (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} .

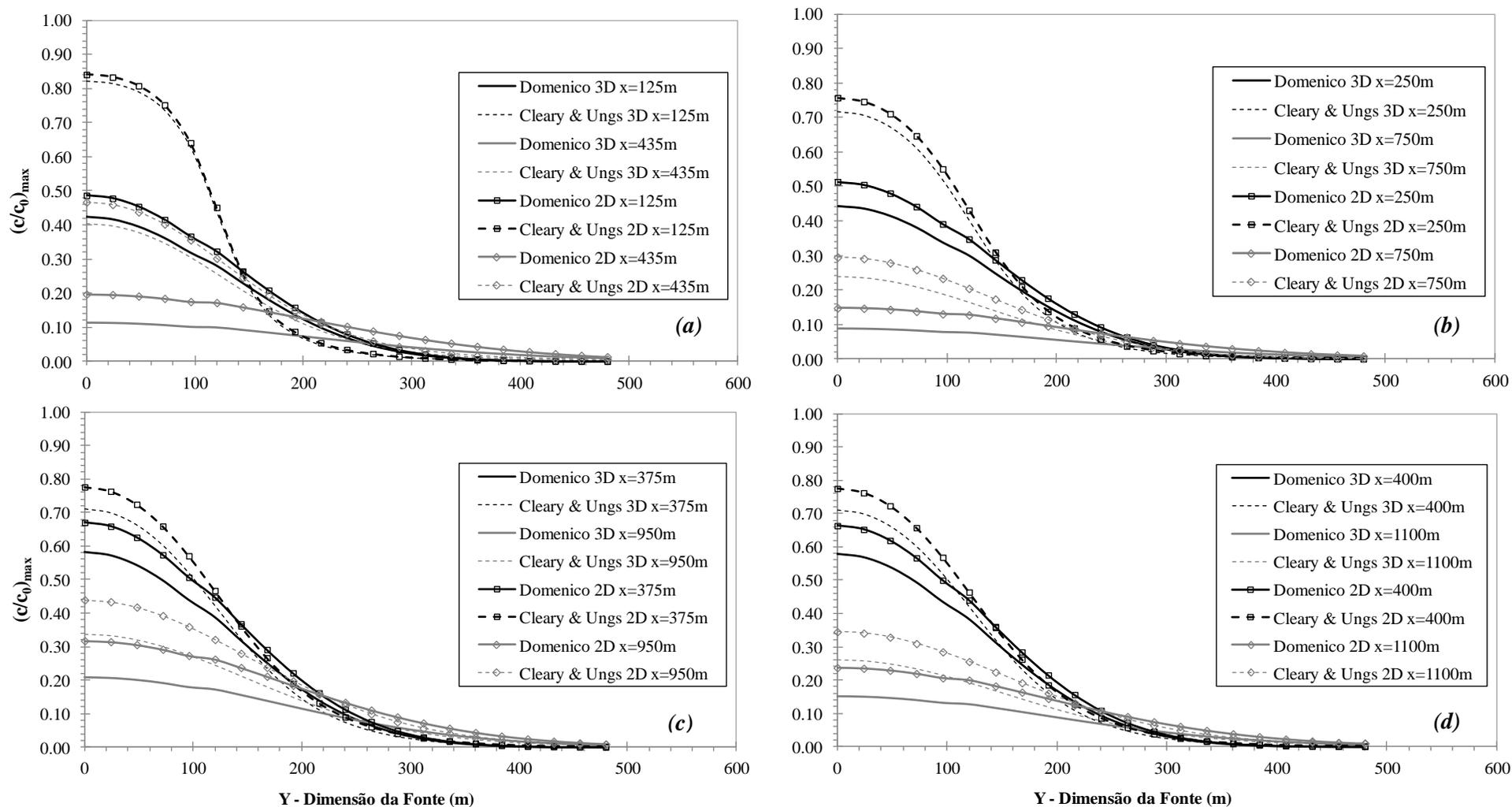


Figura 5.15. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

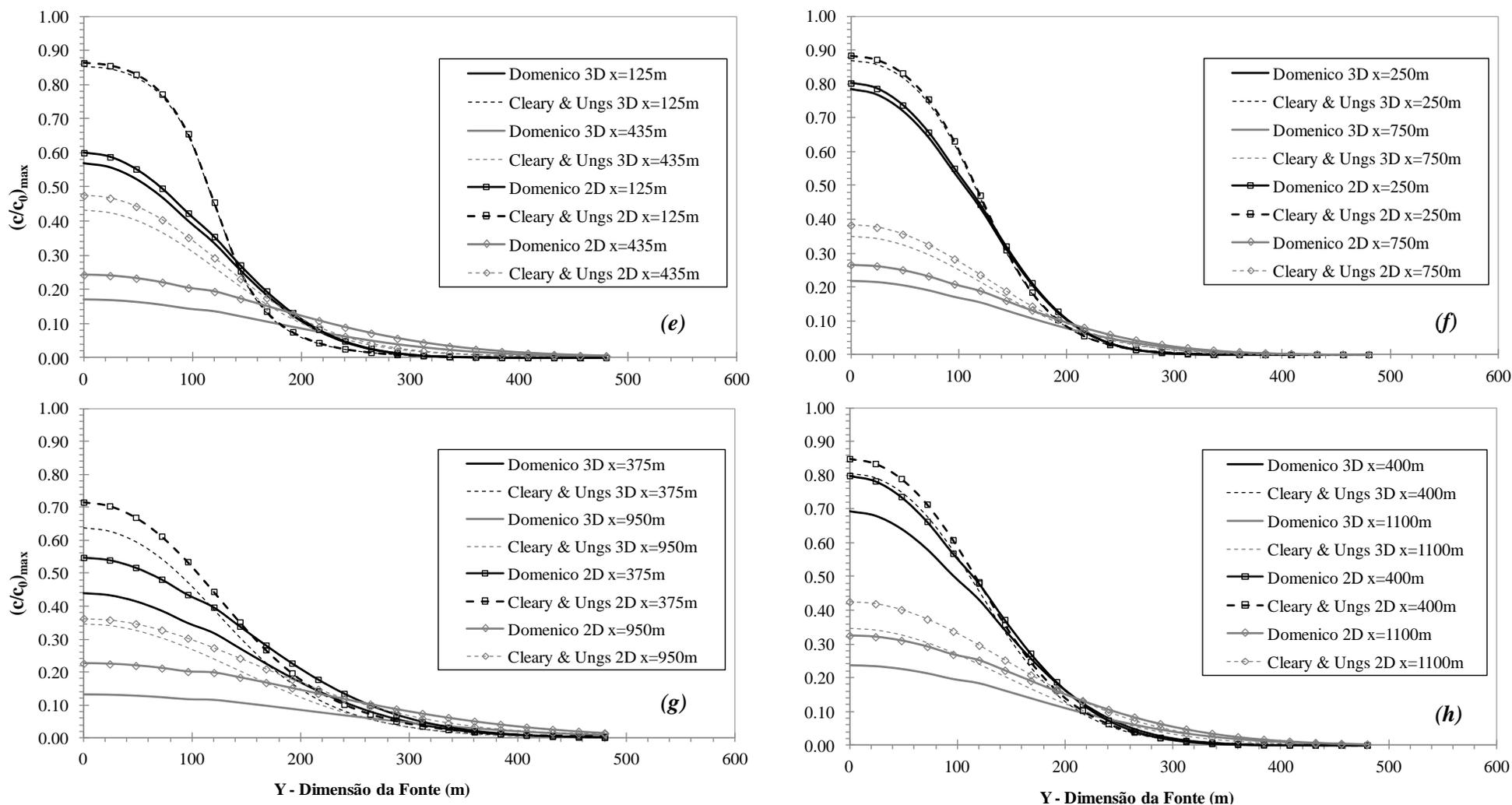


Figura 5.16. (Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ no sentido transversal entre as duas soluções analíticas bi e tridimensionais utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

Nos resultados apresentados se faz sempre uma comparação entre as plumas contaminantes obtidas pelas soluções de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978). Apresentam-se em todos os casos fortes discrepâncias associadas com o valor da concentração relativa em determinados pontos do domínio e ao avanço das plumas contaminantes.

De uma forma geral, observa-se que nos solos lateríticos compactados as duas soluções apresentam uma melhor proximidade quando comparadas com as plumas dos solos lateríticos *in-situ*. Particularmente, as plumas para os solos lateríticos *in-situ* a 3 m apresentaram as maiores divergências entre as duas soluções quando comparadas com o solo laterítico *in-situ* a 7 m. Também observa-se, nas Figuras 5.10 e 5.11, que a maior divergência entre as duas soluções analíticas se apresenta sobre o eixo longitudinal da pluma contaminante, quando $x = 0$. Para medir a magnitude dessa divergência determinou-se a diferença média absoluta existente entre os valores de concentração relativa máxima das duas soluções:

$$\overline{\delta V} = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N |\delta V_i| \quad (5.27)$$

onde $\overline{\delta V}$ é a magnitude da diferença média absoluta dos N pontos da curva que compõe a concentração máxima relativa, δV_i corresponde à diferença no i -ésimo ponto entre a concentração máxima relativa obtida pela solução analítica de Domenico e a concentração máxima relativa obtida pela solução analítica de Cleary & Ungs (1978). Os resultados são apresentados na Figura 5.17 mediante diagramas de barras que comparam as magnitudes das diferenças médias absolutas entre os diferentes íons contaminantes utilizados, assim como, também, as magnitudes das mesmas diferenças para as análises bi e tridimensionais.

Na Figura 5.17 identifica-se uma leve diferença entre as soluções analíticas bi e tridimensionais para todos os solos e íons utilizados. Esta diferença variou, de forma geral, apenas entre 0.003 e 0.008 podendo ser causada pela presença da componente dispersiva transversal vertical (α_z). Destaca-se que se tem uma maior diferença entre os materiais que apresentaram maiores valores de coeficiente de dispersividade longitudinal, como o Cd^{2+} no solo laterítico compactado e o Pb^{2+} e o Cu^{2+} no solo laterítico *in-situ*. Como foi enunciado anteriormente, o coeficiente de dispersividade transversal vertical foi considerado duas ordens de magnitude menor que a componente dispersiva longitudinal (α_x), logo, quanto maior a componente dispersiva longitudinal, maior poderia ser a influência da componente dispersiva transversal vertical no fenômeno de transporte.

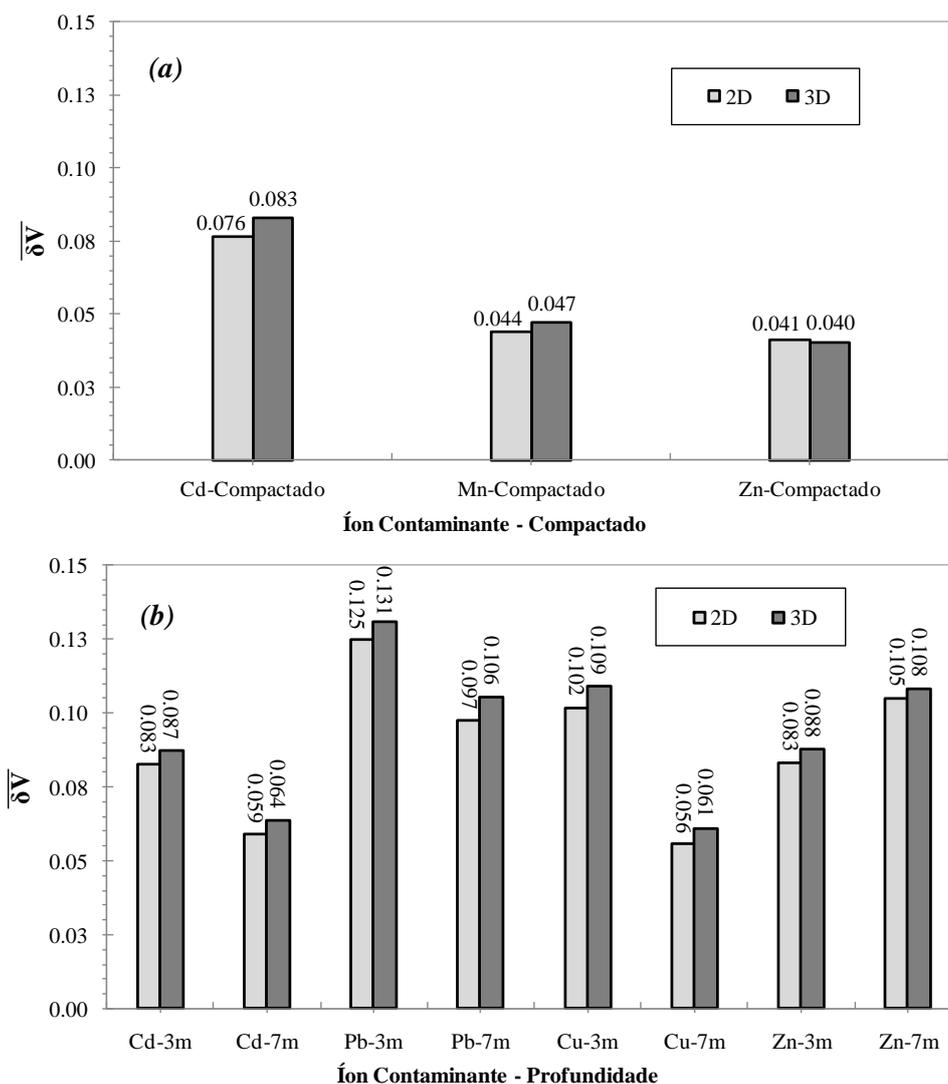


Figura 5.17. Comparação nos espaços bi e tridimensionais da magnitude das diferenças médias absolutas entre as soluções analíticas de Domenico e Cleary & Ungs (a) para os solos lateríticos compactados e (b) para os solos lateríticos *in-situ*.

Como se observa na Figura 5.17, nos solos lateríticos compactados a maior magnitude de diferenças médias absolutas se apresenta principalmente nos íons Cd^{2+} com valores iguais a 0.083 para o caso tridimensional e 0.076 para o caso bidimensional. Nos íons Zn^{2+} e Mn^{2+} , as aproximações foram melhores e as magnitudes de diferenças médias absolutas foram da ordem de 0.040 e 0.047 no caso tridimensional e de 0.041 e 0.044 para o bidimensional. Estes últimos representam quase a metade da diferença média absoluta apresentada no íon Cd^{2+} .

No caso dos solos lateríticos *in-situ* (Figura 5.17(b)), a magnitude da diferença média absoluta para algumas plumas superou o valor de 0.1. De forma particular, observa-se que os solos que apresentaram uma diferença menor foram os solos lateríticos *in-situ* a 7 m. No caso

particular dos íons Pb^{2+} e Zn^{2+} , a diferença é muito mais pronunciada comparada com os íons Cu^{2+} e Cd^{2+} onde se tem uma melhor aproximação entre as duas soluções. Nestes materiais, a mínima e máxima magnitude de diferença média absoluta oscilou entre 0.056 a 0.105 na análise bidimensional e de 0.061 e 0.108 na análise tridimensional. Estes valores corresponderam aos íons contaminantes Cu^{2+} e Zn^{2+} , respectivamente.

Finalmente, nos solos lateríticos *in-situ* a 3 m de profundidade se observou a maior diferença entre as plumas contaminantes. Observa-se na Figura 5.17(b) que os íons Pb^{2+} e Cu^{2+} apresentaram as máximas diferenças médias absolutas com magnitudes que estiveram entre 0.131 e 0.106 para o caso tridimensional e entre 0.125 e 0.102 para o caso bidimensional. As mínimas diferenças médias absolutas foram obtidas para as plumas dos íons Cd^{2+} e Zn^{2+} com magnitudes de 0.088 e 0.083 para ambos os íons em ambos os espaços.

Uma magnitude média da diferença média absoluta de todas as análises é apresentada na Tabela 5.2. Observa-se que a média das magnitudes das diferenças médias absolutas dos solos lateríticos compactados corresponde a 50% do valor obtido para a média das magnitudes das diferenças médias absolutas dos solos lateríticos *in-situ* a 3 m.

Tabela 5.2. Magnitude média da diferença média absoluta de todas as análises.

SOLO LATERÍTICO	$\overline{\delta V}$
condições <i>in-situ</i> 3m	0.113
condições <i>in-situ</i> 7m	0.082
condições compactadas	0.054

Existe um fenômeno comum observado em todas as soluções analíticas. Este fenômeno está associado a dois comportamentos relacionados à forma de propagação da pluma contaminante deduzida pela solução analítica de Domenico (1987) comparada com a solução de Cleary & Ungs (1978). Os comportamentos podem ser observados nas Figuras 5.5 a 5.7. O primeiro ocorre no sentido longitudinal da pluma, visto a partir do eixo longitudinal quando $x = 0$, onde se localiza a maior diferença média absoluta entre as duas soluções analíticas (Figuras 5.8 a 5.11). Para Domenico (1987), observa-se um menor avanço da pluma contaminante comparado com a solução de Cleary & Ungs (1978). Isto indica que para uma mesma distância Domenico (1987) proporciona um menor valor de concentração. O segundo comportamento ocorre no sentido transversal da pluma, onde os valores de concentração

encontrados por Domenico(1987) são agora maiores que os valores de concentração determinados pela solução de Cleary & Unga(1978).

West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007) realizaram uma análise matemática rigorosa da solução analítica de Domenico & Robbins (1985) e Domenico (1987), encontrando vários problemas importantes nas soluções propostas. Um deles é relacionado ao fenômeno de propagação da pluma contaminante. Os autores explicam que existe uma interpretação errônea na conceituação da formulação do problema de Domenico (1987) referente ao *tempo de análise* ($t = x/v$) no processo de contaminação (Eqs. (5.21b) e (5.21c)). Esta interpretação está vinculada à massa dispersiva na direção transversal, que neste caso não dependerá do *tempo de simulação* (t) (tempo para o qual o usuário realmente esperará encontrar a concentração) (Srinivasan *et al.*, 2007). Por esta razão matemática, atribui-se a Domenico (1987) uma super estimação do tempo de análise de todas as partículas ao longo do eixo longitudinal, permitindo, assim, que no sentido transversal seja requerido um maior tempo para que o mecanismo de dispersão ocorra. Como consequência, existirá uma diminuição da concentração na parte longitudinal da pluma e, portanto, a solução analítica de Domenico sempre levará a uma subestimação do avanço e da concentração total na direção longitudinal.

Para entender isto de forma detalhada, considerou-se o caso do solo laterítico em condições *in-situ* a 7 m para o íon Cu^{2+} onde se tem uma velocidade linear média de $v = 0.4147$ m/ano, um coeficiente de retardo de $R = 3.315$ (Tabela 5.1). Além disso, a distribuição da pluma de concentração foi prevista para um tempo de simulação de 5000 dias em um ponto a 1250 m da fonte. A solução de Domenico estima o *tempo de análise* no ponto de interesse, fazendo $t = x/(v/R) = 10000$ dias. Na realidade este tempo é maior do que o *tempo de simulação* requerido inicialmente ($t = 5000$ dias). Esta é uma hipótese pouco realista já que a pluma de contaminante de 5000 dias não pode considerar a dispersão de uma pluma de 10000 dias.

Com todas as considerações realizadas, foi possível estabelecer um ponto em comum nos comportamentos de divergência entre as duas soluções. Elaborou-se assim a Figura 5.18 que apresenta uma representação gráfica, mediante um diagrama de barras, das magnitudes dos parâmetros de transporte apresentados na Tabela 5.1. Nesta figura, nos eixos das ordenadas são plotados o coeficiente de retardo (eixo esquerdo) e os coeficientes de dispersividade (eixo direito).

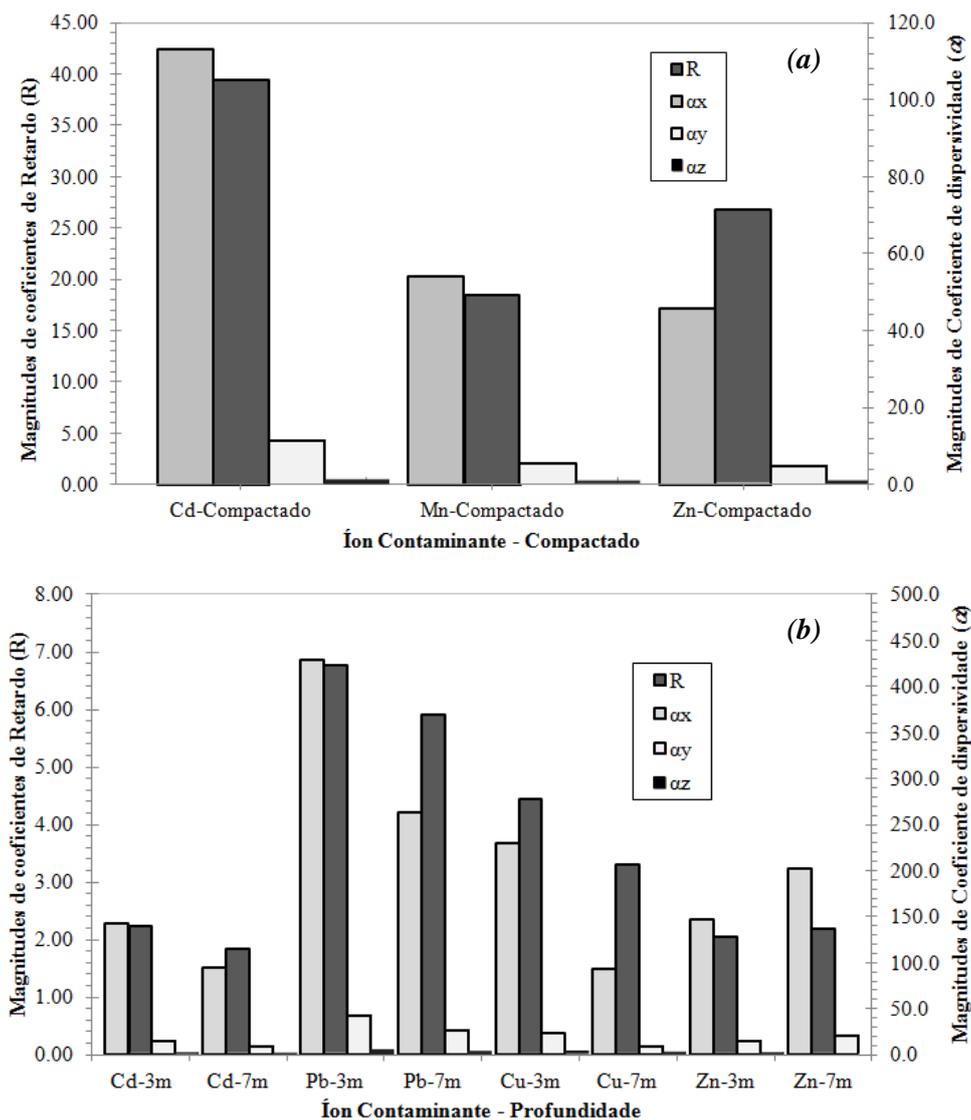


Figura 5.18. Representação gráfica das magnitudes dos parâmetros de transporte para todos os solos lateríticos e íons analisados.

Como se pode observar nas Figuras 5.12 e 5.13, os íons que apresentaram as menores magnitudes de diferença média absoluta entre as duas soluções coincidem com os íons que possuem as menores magnitudes do coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x). No caso dos solos lateríticos *in-situ* extraídos a 3 m, que correspondem aos solos com maiores diferenças, o parâmetro dispersivo variou entre $150 \text{ m} < \alpha_x < 430 \text{ m}$, aproximadamente. Estes valores correspondem aos coeficientes de dispersividade mínimo e máximo referentes aos íons Zn^{2+} e Pb^{2+} , respectivamente.

Observa-se que, na Figura 5.17(b), o Zn^{2+} foi um dos íons que apresentou o menor valor de diferença média absoluta e o íon Pb^{2+} apresentou a máxima diferença entre as duas soluções.

No entanto, para os solos lateríticos compactados, o coeficiente de dispersividade apresentou uma variação entre $45 \text{ m} < \alpha_x < 115 \text{ m}$, sendo o valor de $\alpha_x = 115 \text{ m}$ correspondente ao íon Cd^{2+} que apresentou a maior magnitude de diferença média absoluta entre as duas soluções. Segundo West *et al.* (2007) e Srinivasan *et al.* (2007), a diferença na forma de propagação da pluma de Domenico (1987) em relação à de Cleary & Ungs (1978) é consequência da interpretação errada do *tempo de análise* ($t = x/v$) que pode ser atenuada quando o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) tende a ser nulo. De uma forma mais específica Srinivasan *et al.* (2007) explica que o processo de derivação feito por Domenico (1987), onde o tempo nos termos de dispersão transversal é substituído por x/v , só é válido quando o coeficiente de dispersividade longitudinal tende a zero ($\alpha_x \rightarrow 0$). Para todos os valores do coeficiente de dispersividade longitudinal, com exceção do valor nulo, a solução terá um erro finito.

Srinivasan *et al.* (2007) explicam que para todas as partículas que estejam localizadas atrás da frente advectiva ($x = vt$), o tempo de análise utilizado na solução de Domenico $t = x/v$ será menor do que o tempo de simulação. No entanto, para partículas que estejam na frente advectiva, o tempo da análise $t = x/v$ será maior do que o tempo de simulação. Esta consideração indica que atrás da frente advectiva, a solução de Domenico (1987) comparada com a solução de Cleary & Ungs (1978) poderia apresentar as melhores aproximações, desde que fosse mantida a restrição de um valor de coeficiente de dispersividade longitudinal muito baixo. Finalmente, a distribuição espacial deste erro será muito sensível ao valor de α_x e à posição da frente advectiva (vt).

Dentre outros erros importantes, do ponto de vista matemático, considerados por Domenico (1987), e que afetam de uma forma mais global a distribuição da pluma nesta solução, pode-se citar o método de solução, chamado por Domenico & Robbins (1985) de *superposição* e apresentado nas Eqs. (5.16) e (5.21), que consiste em escolher as soluções bi e tridimensionais como sendo um produto de cada uma das soluções unidimensionais em cada uma das direções. West *et al.* (2007) afirma que este procedimento não é matematicamente rigoroso e introduz erros de aproximação em relação às técnicas exatas. Tendo em vista, que as Eqs. (5.16) e (5.21) não são soluções para a equação de transporte de massa originalmente proposta e, por isto, não se pode falar em uma verdadeira conservação da massa.

5.7. ANÁLISE DE SENSIBILIDADE

Com o propósito de verificar alguns comportamentos analisados no Item 5.6, foi feita uma análise de sensibilidade alterando todos os parâmetros de transporte. Esta análise foi fundamentada na metodologia adotada por Srinivasan *et al.* (2007) que consistiu em alterar os parâmetros enunciados em uma ordem de magnitude acima e abaixo da magnitude dos parâmetros da análise inicial, apresentados na Tabela 5.1. Esta escolha de alteração foi focada em observar de uma forma exagerada os comportamentos analisados. Neste caso, trabalhar com alterações pequenas poderá acarretar em uma pequena variação na resposta das plumas. Finalmente, esta metodologia garante que os fenômenos que foram discutidos no Item 5.6 serão observados nos materiais selecionados.

Para efeitos desta análise foram selecionados dois solos lateríticos e cada um com um íon contaminante em específico. A escolha foi fundamentada nas Figuras 5.12 e 5.13. Escolheu-se como primeiro material, o solo laterítico *in-situ* a 3 m com o íon Cu^{2+} , que apresentou uma das maiores diferenças médias absolutas e o maior coeficiente de dispersividade longitudinal. O segundo material foi o solo laterítico compactado com o íon Zn^{2+} , que teve a menor diferença média absoluta e o menor coeficiente de dispersividade.

5.7.1. Análise de Sensibilidade Coeficientes de Dispersividade ($\alpha_x, \alpha_y, \alpha_z$)

Os coeficientes de dispersividade foram alterados considerando uma ordem de magnitude abaixo dos parâmetros de dispersividade utilizados na análise inicial. Não foi considerado o outro extremo, já que o comportamento do fenômeno foi observado nas Figuras 5.4 a 5.7, quando os coeficientes de dispersividade eram altos. Os resultados desta análise foram apresentados na Figura 5.19.

Observa-se, comparando a Figura 5.10 com a Figura 5.19 para o caso do solo laterítico *in-situ* (íon Cu^{2+}), que a diferença existente entre as duas soluções analíticas apresentou uma importante diminuição quando o coeficiente de dispersividade longitudinal (α_x) é menor. No entanto, para o solo laterítico compactado (íon Zn^{2+}), esta diferença foi praticamente nula (Figura 5.8) e, as duas soluções são praticamente coincidentes. A melhoria entre as duas soluções foi mais evidente no sentido longitudinal, especialmente sobre o eixo longitudinal da pluma contaminante.

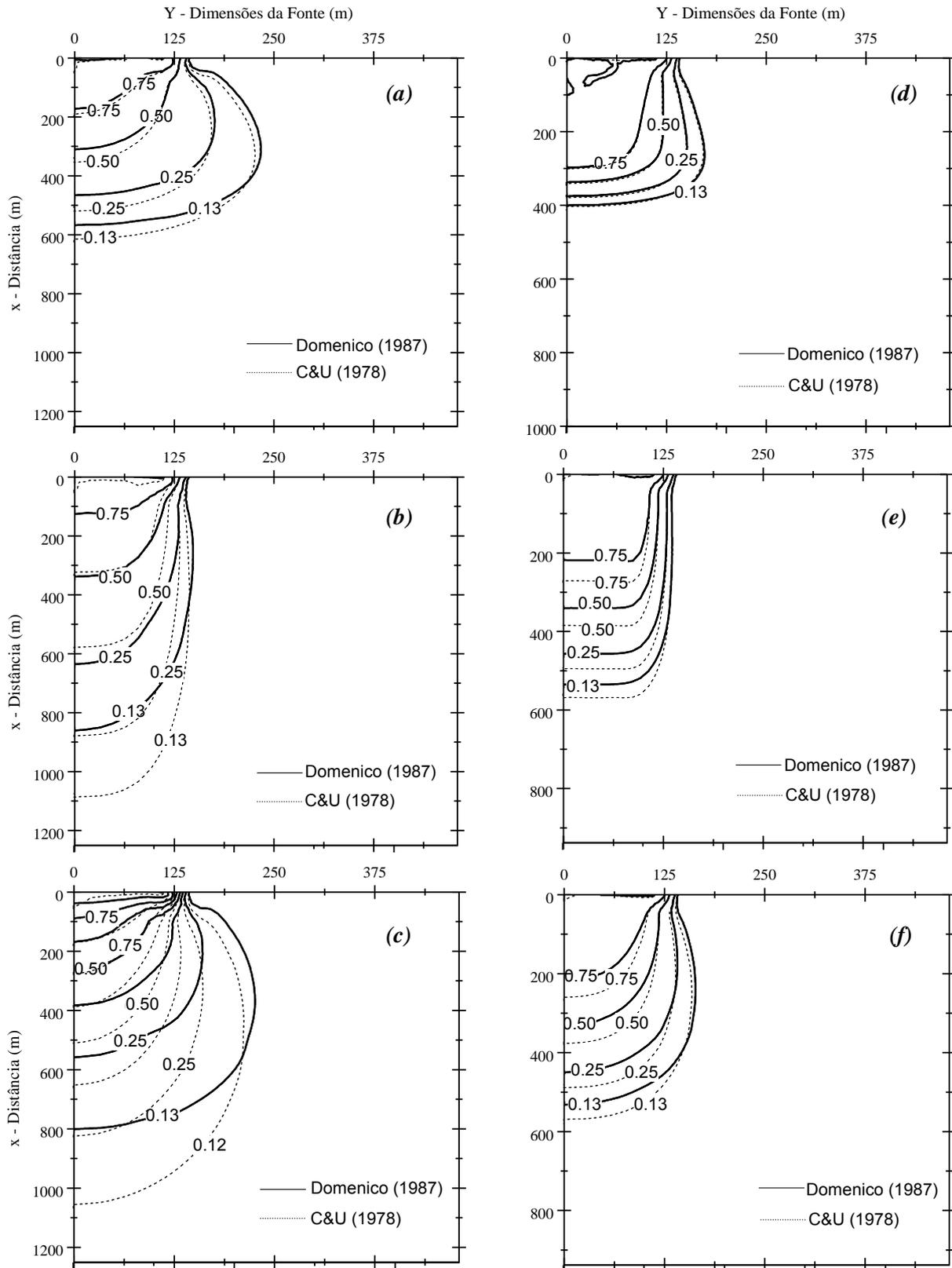


Figura 5.19. Alteração dos coeficientes de dispersividade longitudinal e transversais, (a) $\alpha_x/10$, (b) $\alpha_y/10$ e (c) $\alpha_z/10$ correspondem ao solo laterítico *in-situ* a 3 m para o íon Cu^{2+} (d) $\alpha_x/10$, (e) $\alpha_y/10$ e (f) $\alpha_z/10$ correspondem ao solo laterítico compactado para o íon Zn^{2+} .

No caso do coeficiente de dispersividade transversal horizontal (α_y), comparando-se as três Figuras 5.6, 5.7 e 5.14, observa-se que as plumas apresentaram uma distância de avanço similar à obtida na análise inicial, entretanto, não se evidencia uma diminuição na diferença entre as duas soluções analíticas com a diminuição do parâmetro de dispersividade. O mesmo caso acontece com o coeficiente de dispersividade transversal vertical (α_z). Para os dois solos a diminuição do coeficiente de dispersividade transversal vertical não gerou nenhum tipo de mudança importante nas plumas de contaminação e, como consequência, nenhuma diminuição na diferença entre as duas soluções.

5.7.1. Análise de Sensibilidade Coeficiente de Retardo (R) e Velocidade Linear Média de Percolação (v_x)

Neste caso, o coeficiente de retardo e a velocidade linear média foram alterados uma ordem de magnitude acima e abaixo do valor considerado na análise inicial. O fato de aumentar e diminuir a velocidade linear média uma ordem de magnitude, por exemplo, consiste em alterar de forma inversa o coeficiente de retardo ($v'_x=v_x/R$), ou seja, multiplicar a v_x por um fator 10 corresponde a dividir o retardo R pelo mesmo fator, e vice-versa. Isto explica o fato de que na Figura 5.20 tem-se apenas as plumas contaminantes para o caso da alteração da velocidade linear média.

Comparando a Figura 5.20 com a Figura 5.8 para o caso do solo laterítico compactado e com a Figura 5.10 para o solo laterítico *in-situ*, observa-se que o principal efeito na alteração da velocidade linear média e no fator de retardo produz como consequência uma alteração no avanço da pluma contaminante. Este efeito é muito mais notório no sentido longitudinal das plumas, sentido no qual só atua a velocidade linear média. No entanto, o efeito de redução entre as duas soluções analíticas, foi observado unicamente quando se aumentou a velocidade linear média e diminuiu o coeficiente de retardo. É neste ponto onde a localização da frente advectiva apresenta uma influência importante na aproximação entre as duas soluções. Quando se aumenta a velocidade linear média ou se diminui o coeficiente de retardo, ocorre um aumento da frente advectiva ($x = vt$).

Para os dois solos lateríticos apresentados, as frentes advectivas representadas por $v_x \cdot 10$ ou $R/10$ estão localizadas a uma distância $x = 5100$ m para o solo laterítico *in-situ* e a uma distância $x = 3400$ m para o solo laterítico compactado. Portanto, grande parte da massa da pluma contaminante se localizada atrás da frente advectiva. Conseguir que a solução de

Domenico (1987) apresenta uma melhor resposta no caso do solo laterítico *in-situ* é quase impossível já que, para este material, a frente advectiva se localiza a uma distância menor do que o ponto no qual o fenômeno já se encontra totalmente estabilizado.

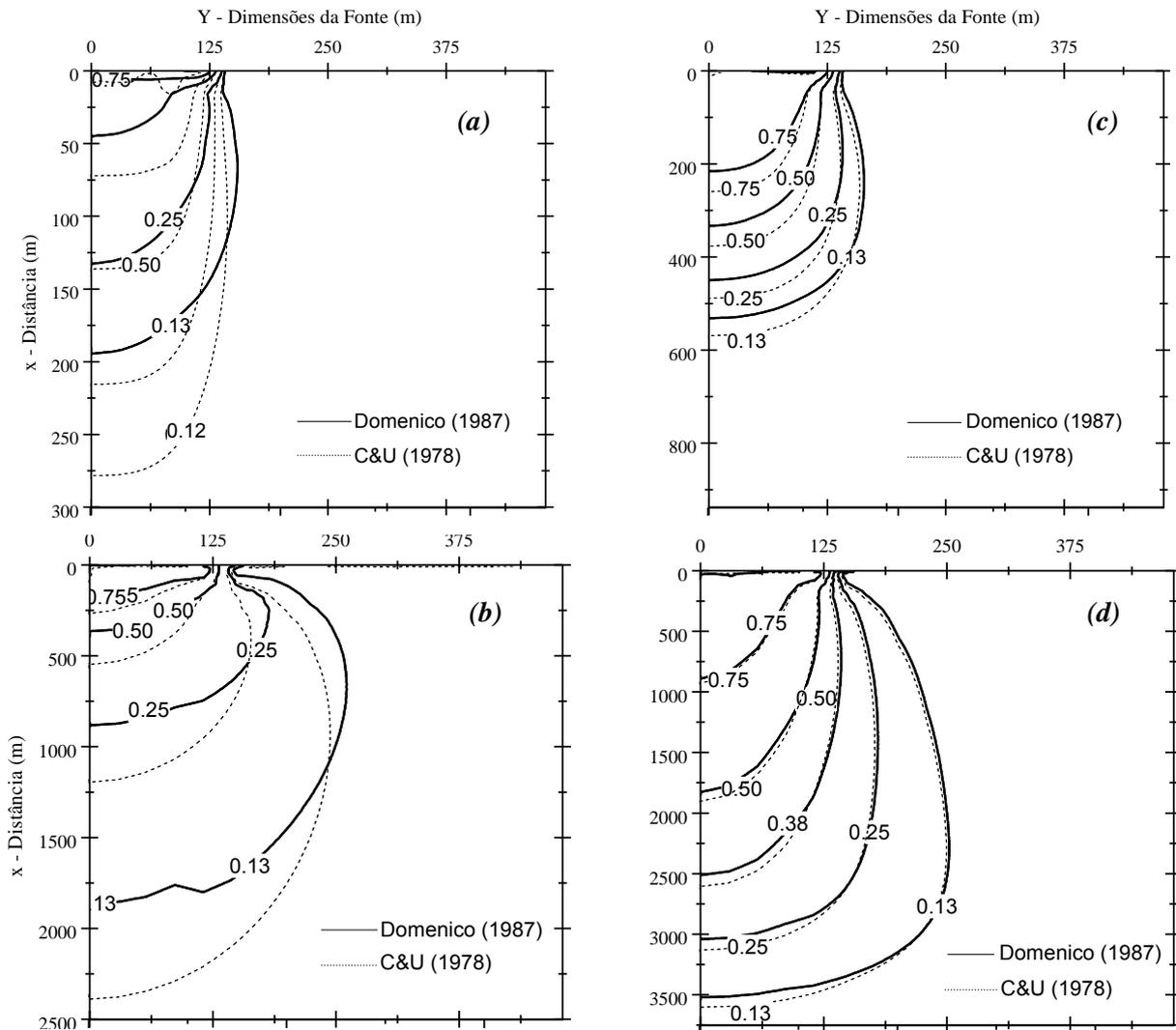


Figura 5.20. Alteração da velocidade linear média e do coeficiente de retardo, (a) $v_x/10$ e (b) $v_x \cdot 10$ correspondem ao solo laterítico *in-situ* a 3 m para o íon Cu^{2+} , (c) $v_x/10$ e (d) $v_x \cdot 10$ correspondem ao solo laterítico compactado para o íon Zn^{2+} .

A Figura 5.21 apresenta uma representação da análise de sensibilidade para o cálculo da diferença média absoluta entre as duas soluções considerando as alterações aos parâmetros de transporte. Observa-se, comparando estes resultados com os apresentados na Figura 5.17, que se teve uma redução importante na magnitude da diferença média absoluta quando o coeficiente de dispersividade longitudinal é reduzido em uma ordem de magnitude do valor inicial. No caso do solo laterítico compactado (íon Zn^{2+}) (Figura 5.21(a)), a diferença passou

de 0.040 para 0.0015 e, no caso do solo laterítico *in-situ* (íon Cu^{2+}) (Figura 5.21(b)), a diferença passou de 0.109 a 0.0290. Assim também, o incremento da velocidade linear média ou a redução do coeficiente de retardo aumentou a precisão da solução de Domenico (1987). Com isto, conseguiu-se diminuir de forma importante a magnitude da diferença média absoluta, passando no caso do solo laterítico compactado de 0.040 para 0.0121 aproximadamente e, no caso do solo laterítico *in-situ*, de 0.109 para 0.044.

Alguns parâmetros, como os de dispersividade transversal, não acarretaram em uma modificação importante em relação à variação da magnitude da diferença média absoluta.

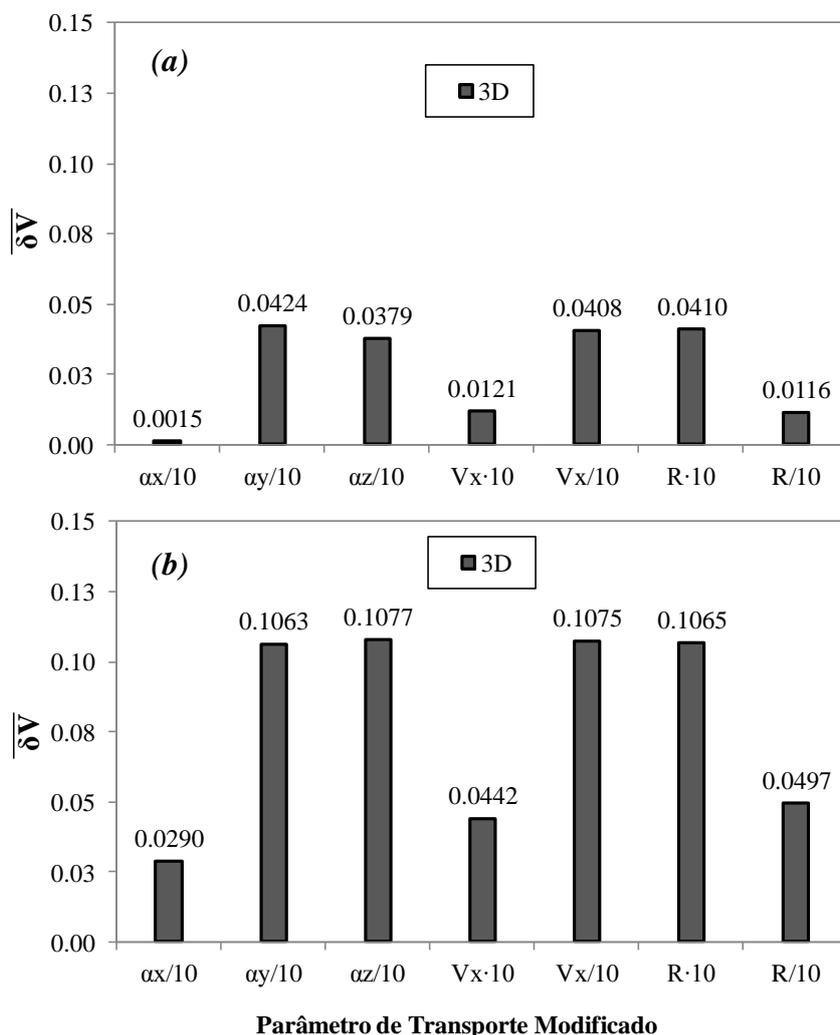


Figura 5.21. Magnitude das diferenças médias absolutas entre as soluções analíticas de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978) considerando a alteração dos parâmetros de transporte na análise de sensibilidade (a) para o solo laterítico compactado. (b) para o solo laterítico *in-situ*.

Com as análises realizadas, se compartilha e ratifica a idéia manifestada por Srinivasan *et al.* (2007) que explicaram que “a velocidade linear média e o coeficiente de retardo tem pouco efeito sobre a precisão da solução de Domenico (1987). No entanto, estes dois parâmetros contribuem de forma importante na determinação da localização da frente advectiva afetando assim a exatidão da solução. Em termos semelhantes, o tempo de simulação teria um efeito similar à velocidade linear média de percolação”. Então se conclui que o erro da solução de Domenico (1987) será baixo na resolução de problemas de transporte que tenham baixos valores de dispersividade longitudinal, altas velocidades de advecção e grandes tempos de simulação.

CAPÍTULO 6

6. SOLUÇÕES NUMÉRICAS MULTIDIMENSIONAIS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES

6.1. ASPECTOS GERAIS

No caso de problemas de transporte de contaminantes em escalas regionais, em que há incertezas das condições de homogeneidade do solo (principalmente relacionadas aos coeficientes de dispersividade) e quando as condições inicial e de contorno são complexas, não é possível obter soluções analíticas. Konikow (1998) adverte que, devido à irregularidade das fronteiras e à heterogeneidade dos domínios comumente analisados, as soluções analíticas na prática não são viáveis, para este tipo de problema. Neste caso, onde as condições de contorno têm um maior grau de complexidade são aplicadas técnicas numéricas.

As soluções obtidas por métodos numéricos solucionam a Eq. (2.43) pela aplicação de metodologias de aproximação. Este tipo de solução é mais eficaz que as soluções analíticas, no sentido de que podem ser analisados domínios com diversas geometrias, inclusive, conservando a heterogeneidade do sistema. No entanto, estas soluções podem ter problemas do ponto de vista numérico, denominados de *dispersão numérica*, os quais podem gerar soluções que, no caso específico de propagação de frentes dispersivas de plumas de contaminantes, não reflitam o fenômeno real (Mandle, 2002).

Nas soluções numéricas, as variáveis contínuas são substituídas por variáveis discretas definidas em pontos pré-definidos. A Eq. (2.43) que define a concentração $c(x, y, z, t)$ no problema de transporte, é substituída por um número finito de equações algébricas que definem a concentração em pontos específicos. Este sistema de equações algébricas, em geral, é resolvido utilizando técnicas matriciais iterativas ou diretas (Konikow, 1998).

A principal diferença entre uma solução analítica e uma solução numérica, consiste em que, na primeira, trata-se de determinar a distribuição espaço-temporal das variáveis de estado do problema. Por exemplo, $c = c(x, t)$ como funções contínuas do espaço e do tempo. Uma solução numérica proporciona informação sobre estas variáveis só em um conjunto

selecionado de pontos no espaço e no tempo. A informação sobre o que ocorre em todos os pontos de interesse é obtida mediante interpolação.

Batu (2006) explicam que as principais metodologias numéricas utilizadas são:

- Método dos Elementos Finitos (MEF)
- Método das Diferenças Finitas (MDF)
- Método das Características
- Método dos Elementos de Contorno (MEC)

Das metodologias expostas anteriormente as mais aceitas na solução da equação de fluxo e de transporte de contaminantes e que serão utilizadas e explicadas neste capítulo, são o Método das Diferenças Finitas (MDF) e o Método dos Elementos Finitos (MEF). Cada uma destas classes de aproximação numérica requer principalmente que, o domínio do modelo e o tempo sejam discretizados. Neste processo de discretização o domínio é representado por uma rede de células ou elementos. Para o caso do tempo de simulação, este é representado por intervalos de tempo. A precisão da aproximação dependerá da qualidade dos dados de entrada do modelo, do tamanho da discretização no espaço e no tempo (quanto maior for a discretização, maior será a precisão da aproximação) e do método numérico utilizado para resolver as equações do modelo.

6.2. MÉTODO DAS DIFERENÇAS FINITAS (MDF)

Batu (2006) explica que dos métodos mencionados anteriormente, o MDF é o mais utilizado e aplicado na modelagem numérica dos problemas de transporte. Isto se deve a várias razões: a primeira consiste nos princípios fundamentais do MDF, os quais são facilmente compreensíveis e não requerem uma forma avançada em matemática aplicada; a segunda é que o MDF possui uma fundamentação teórica consistente, e finalmente, a simplicidade algébrica das equações resultantes e o desenvolvimento de algoritmos da solução são relativamente mais fáceis.

Cavalcante (2000 e 2004) resume que, o MDF aproxima derivadas pela taxa de variação em pequenos intervalos finitos, a partir da expansão das equações diferenciais em séries de Taylor. No domínio do espaço, a malha geralmente se mantém constante durante a resolução do problema. No domínio do tempo, o incremento pode ser variável.

Nesta metodologia, todo o sistema de equações diferenciais governantes do problema físico é substituído diretamente por expressões algébricas escritas em função das variáveis de campo em pontos discretos do espaço-tempo. Desse modo, uma equação diferencial pode ser transformada num sistema de equações algébricas que fornece valores aproximados para solução do problema nos pontos nodais que definem a malha do MDF. Fortuna (2000) explica que a solução dada por esta metodologia não é completamente exata devido a erros inerentes ao processo de discretização das equações, erros de arredondamento dos cálculos feitos no computador e erros na aproximação numérica das condições inicial e de contorno.

6.2.1. Malha do MDF e Convenção de Discretização

No MDF existem basicamente duas convenções sobre a localização dos nós. A primeira é denominada de formulação de *Bloco Centrado* e a segunda é a formulação de *Ponto Centrado*, como se ilustra na Figura 6.1. Nas duas convenções, o aquífero é dividido por um conjunto de linhas paralelas que são perpendiculares entre si.

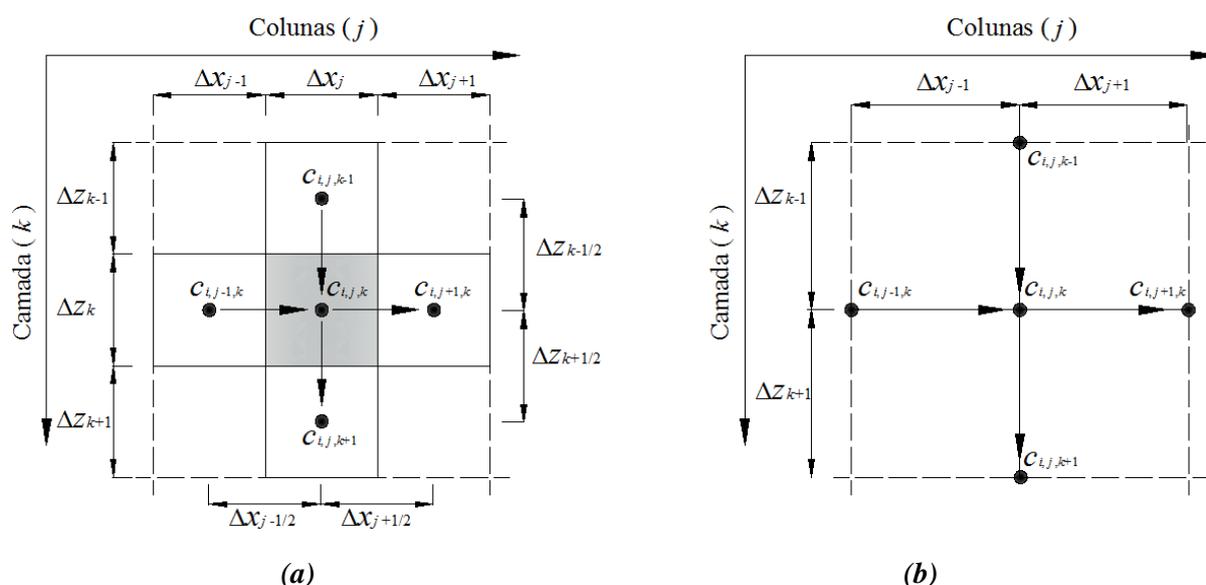


Figura 6.1. Malha do MDF e convenção de discretização. (a) Esquema do bloco centrado
(b) Esquema do ponto centrado

6.2.1.1. Formulação do Bloco Centrado

Nesta formulação, cada bloco ou célula cúbica é formada por um conjunto de planos paralelos e os nós correspondem aos centros destes blocos ou cubos. É nestes pontos que são calculados os valores da concentração. Os parâmetros hidráulicos e químicos como, condutividade hidráulica ou dispersividade são considerados uniformes em cada bloco.

6.2.1.2. Formulação do Ponto Centrado

Na formulação do ponto centrado, os nós são os pontos de intersecção entre os planos paralelos e os blocos são gerados ao redor dos nós. Assim como na formulação do bloco centrado, a informação é calculada nestes pontos de intersecção.

6.2.2. Formulações em Diferenças Finitas

Seja x_0 um número real qualquer e Δx um número real positivo. A malha de passo Δx associada a x_0 é representada pelo conjunto de pontos mostrados à seguir:

$$x_i = x_0 \pm i \cdot \Delta x \quad \forall i = 1, 2, \dots \quad (6.1)$$

Nos pontos desta malha serão calculadas as aproximações da taxa de mudança da concentração $c(x, t)$ em um mecanismo de transporte advectivo controlado por uma componente de velocidade linear média $v(x, t)$, acoplado a um mecanismo de transporte dispersivo $D_x^h(x, t)$ no caso unidimensional. A idéia geral do MDF consiste na discretização das derivadas de $v(x, t)$ e $D_x^h(x, t)$ que aparecem na equação diferencial do modelo matemático de transporte de contaminantes.

A ferramenta matemática básica na definição de aproximações para as derivadas é a série de Taylor. O mérito da série de Taylor é o de afirmar como várias informações sobre a função em estudo, no ponto x , podem ser usadas na avaliação da mesma numa vizinhança deste ponto, isto é, no ponto $x + \Delta x$. Assumindo-se que $v(x, t)$ e $D_x^h(x, t)$ possuem derivadas em relação a x , até a ordem $n + 1$, estas funções podem ser expandidas na forma da série de Taylor.

Seja então uma função $c(x, t)$ no espaço unidimensional, suficientemente suave, que representa o sistema acoplado $v(x, t)$ e $D_x^h(x, t)$. Neste caso, a expansão em série de Taylor é:

$$\begin{aligned} c(x \pm \Delta x, t) = & c(x, t) \pm \Delta x \frac{\partial}{\partial x} c(x, t) + \frac{\Delta x^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, t) \pm \frac{\Delta x^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial x^3} c(x, t) + \dots \\ & \dots + \frac{\Delta x^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial x^n} c(x, t) \pm \frac{\Delta x^{n+1}}{(n+1)!} \frac{\partial^{n+1}}{\partial x^{n+1}} c(x, t) \end{aligned} \quad (6.2)$$

Considerando os dois primeiros termos da Eq. (6.2)

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c(x + \Delta x, t) - c(x, t)}{\Delta x} + \varepsilon(\Delta x) \quad (6.3)$$

Na Eq. (6.3), o termo $\varepsilon(\Delta x)$ indica os termos truncados que fisicamente representam o erro dado pela aproximação que será da ordem do Δx . Para fazer com que este erro seja desprezível é necessário adotar o termo Δx muito pequeno. A formulação dada na Eq. (6.3) é denominada de aproximação em **diferenças em avanço no espaço**. Utilizando o mesmo procedimento matemático é possível obter a aproximação em diferenças em **atraso no espaço** dada pela Eq. (6.4) e subtraindo a função negativa da função positiva que resulta da expansão de Taylor, se obtém a aproximação em **diferenças centradas no espaço** dada pela Eq. (6.5):

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x,t) = \frac{c(x,t) - c(x-\Delta x,t)}{\Delta x} + \varepsilon(\Delta x) \quad (6.4)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} c(x,t) = \frac{c(x+\Delta x,t) - c(x-\Delta x,t)}{2\Delta x} + \varepsilon(\Delta x^2) \quad (6.5)$$

Nota-se que a Eq. (6.5) é uma melhor aproximação quando comparada com as aproximações dadas pelas Eqs. (6.3) e (6.4), já que o valor do erro de truncamento é da ordem Δx^2 . A Figura 6.2 mostra uma interpretação gráfica das três aproximações anteriormente explicadas, sendo possível reiterar que a aproximação por diferenças centradas resulta em uma melhor representação da inclinação no ponto x .

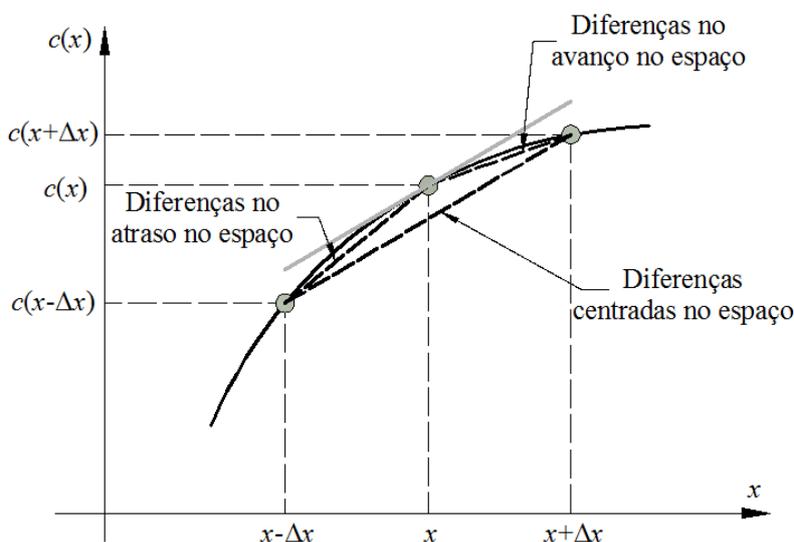


Figura 6.2. Interpretação geométrica das aproximações em diferenças finitas em atraso, centrado e avanço da equação diferencial.

Para determinar as derivadas de ordem superior deve-se somar a função positiva e a função negativa que resulta da expansão de Taylor enunciada na Eq.(6.2) e levando-se em conta que os termos de ordem superior tendem a zero chega-se a:

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x,t) = \frac{c(x+\Delta x,t) + 2c(x,t) + c(x-\Delta x,t)}{\Delta x^2} + \varepsilon(\Delta x^4) \quad (6.6)$$

Para problemas transientes, é necessário considerar as variações no tempo das correspondentes soluções. Seja t_0 um número real qualquer e Δt um número real positivo. A malha de passo Δt associada a t_0 é representada pelo conjunto de pontos:

$$t_i = t_0 \pm i \cdot \Delta t \quad \forall i = 1, 2, \dots \quad (6.7)$$

Da mesma forma, assumindo que $v(x,t)$, $D_x^h(x,t)$ e $c(x,t)$ possuem derivadas em relação a t , até a ordem $n+1$, estas funções, também, podem ser expandidas na forma da série de Taylor:

$$\begin{aligned} c(x, t + \Delta t) = & c(x, t) + \Delta t \frac{\partial}{\partial t} c(x, t) + \frac{\Delta t^2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial t^2} c(x, t) + \frac{\Delta t^3}{3!} \frac{\partial^3}{\partial t^3} c(x, t) + \dots \\ & \dots + \frac{\Delta t^n}{n!} \frac{\partial^n}{\partial t^n} c(x, t) + \frac{\Delta t^{n+1}}{(n+1)!} \frac{\partial^{n+1}}{\partial t^{n+1}} c(x, t) \end{aligned} \quad (6.8)$$

O último termo da Eq. (6.8) representa o erro da aproximação $\varepsilon(\Delta t)$ pelo polinômio de grau n . A série de Taylor é usada na discretização das derivadas, fazendo $n=1$ na Eq. (6.8) tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{c(x, t + \Delta t) - c(x, t)}{\Delta t} + \varepsilon(\Delta t) \quad (6.9)$$

A Eq. (6.9) é conhecida como aproximação em *diferenças finitas em avanço no tempo* e fornece a aproximação com erro da ordem de Δt . As discretizações de primeira e segunda ordem podem ser efetuadas da mesma forma para a variável tempo.

A notação anterior pode ser simplificada escrevendo, c_i^n para definir a expressão $c(x_i, t^n)$. Assim, a nomenclatura que será utilizada neste este Capítulo será dada por:

$$c(x_i \pm \Delta x, t^n \pm \Delta t) = c_{i \pm l}^{n \pm k} \quad k = \Delta x, l = \Delta t \quad (6.10)$$

De posse da nomenclatura apresentada na Eq. (6.10), apresentam-se, na Tabela 6.1, as equações do espaço e do tempo segundo este padrão:

Tabela 6.1. Equações algébricas em diferenças finitas no espaço e no tempo

➤ Diferenças finitas em atraso no espaço	$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c_i^n - c_{i-1}^n}{\Delta x}$	(6.11)
➤ Diferenças finitas centrado no espaço	$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c_{i+1}^n - c_{i-1}^n}{2\Delta x}$	(6.12)
➤ Diferenças finitas em avanço no espaço	$\frac{\partial}{\partial x} c(x, t) = \frac{c_{i+1}^n - c_i^n}{\Delta x}$	(6.13)
➤ Diferenças finitas em atraso no tempo	$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{c_i^n - c_i^{n-1}}{\Delta t}$	(6.14)
➤ Diferenças finitas centrado no tempo	$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{c_i^{n+1} - c_i^{n-1}}{2\Delta t}$	(6.15)
➤ Diferenças finitas avanço no tempo	$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = \frac{c_i^{n+1} - c_i^n}{\Delta t}$	(6.16)
➤ Diferenças finitas centrado no espaço de segunda ordem	$\frac{\partial^2}{\partial x^2} c(x, t) = \frac{c_{i+1}^n + 2c_i^n + c_{i-1}^n}{\Delta x^2}$	(6.17)

Todas as expressões mostradas anteriormente valem também para funções multidimensionais. No caso tridimensional, as variáveis dependentes e os parâmetros das equações são calculados numa malha de pontos distribuídos em três direções, enquanto o tempo evolui. Dessa forma uma variável dependente, por exemplo, $c=c(x, y, z, t)$, ou algum parâmetro das equações, ao ser avaliado no tempo t^n , no ponto de coordenadas x_i, y_j, z_k receberá a notação seguinte:

$$c(x_i, y_j, z_k, t^n) = c_{i,j,k}^n \quad (6.18)$$

A expansão de Taylor para o caso tridimensional pode ser elaborada do mesmo jeito como aparece na Eq. (6.2) e aplicando, então, as mesmas metodologias matemáticas é possível encontrar cada uma das equações em diferenças finitas para o caso tri e bidimensional.

6.2.3. Solução Numérica Unidimensional do Modelo de Transporte pelo MDF.

Utilizando as formulações em diferenças finitas é possível resolver a Eq. (6.19) para o caso unidimensional correspondente ao problema de transporte advectivo dispersivo radioativo com decaimento de primeira ordem:

$$\frac{\partial}{\partial t} c(x, t) = D_x^m \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} - v'_x \frac{\partial c}{\partial x} - \lambda' c \quad (6.19)$$

Aplicando o algoritmo de *diferenças finitas em avanço no tempo* e substituindo os termos espaciais de primeira e segunda ordem e reordenando para encontrar a concentração no tempo $n + 1$ (Cavalcante, 2010), a Eq. (6.19) pode ser aproximada por:

$$c_i^{n+1} = \left(\frac{D_x^{m'}}{\Delta x^2} \Delta t \right) c_{i-1}^n + \left(1 - 2 \frac{D_x^{m'}}{\Delta x^2} \Delta t + \frac{v'_x \Delta t}{\Delta x} - \lambda' \Delta t \right) c_i^n + \left(\frac{D_x^{m'}}{\Delta x^2} \Delta t - \frac{v'_x \Delta t}{\Delta x} \right) c_{i+1}^n \quad (6.20)$$

Da Eq. (6.20) pode-se perceber dois termos importantes que são:

$$C = \frac{v'_x \Delta t}{\Delta x} \quad N = \frac{D_x^{m'}}{\Delta x^2} \Delta t \quad (6.21)$$

Estes termos são o número de Courant (C) e número de Neumann (N) e seus significados físicos foram apresentados no Capítulo 5. Para que uma solução seja estável é preciso que estes dois números cumpram as seguintes condições:

$$C = \frac{v'_x \Delta t}{\Delta x} \leq 1 \quad N = \frac{D_x^{m'}}{\Delta x^2} \Delta t \leq \frac{1}{2} \quad (6.22)$$

Caso não se cumpram as duas condições dadas, a solução será numericamente instável. Deve-se entender por estabilidade numérica como uma descrição de como os erros nos dados de entrada se propagam através do algoritmo. Num método estável, erros devido às aproximações são atenuados durante o processo de computação. Em um método instável, qualquer erro no processamento é ampliado conforme o andamento do cálculo. Métodos instáveis geram rapidamente erros e são inúteis para o processamento numérico. Substituindo a Eq. (6.21) na Eq. (6.20), a função da concentração se escreve na forma:

$$c_i^{n+1} = f_1 c_{i-1}^n + f_2 c_i^n + f_3 c_{i+1}^n \quad (6.23)$$

onde:

$$f_1(C, N) = N \quad f_2(C, N) = 1 - 2N + C - \lambda' \Delta t \quad f_3(C, N) = N - C \quad (6.24)$$

A Eqs. (6.23) e (6.24) podem ser reescritas em termos do número de Péclet, definido matematicamente na Eq. (5.10):

Dividindo então a Eq. (6.23) por N para aplicar a definição da Eq. (6.24), segue que:

$$c_i^{n+1} = N \left[c_{i-1}^n + \left(\frac{1}{N} - 2 + P_e - \frac{\lambda \Delta t}{N} \right) c_i^n + (1 - P_e) c_{i+1}^n \right] \quad (6.25)$$

Dado que nesta dissertação estão sendo analisados contaminantes inorgânicos, os quais não sofreram o fenômeno de decaimento radioativo, o valor do λ poderá ser considerado nulo, na Eq. (6.25).

6.2.1. Comparação da Solução Analítica com a Solução Numérica por MDF.

Conforme explicado no item 3.2.3.2, as soluções analíticas obtidas com Ogata & Banks (1961) para o caso unidimensional foram comparadas com a solução numérica utilizando o método das diferenças finitas (MDF). Para reproduzir isto foi elaborado um código de programação em Visual Basic ® da Eq. (6.25). Os resultados deste processo comparativo são apresentados na Figura 6.3 para o caso dos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m e 7.0 m de profundidade e na Figura 6.5 para os solos lateríticos compactados.

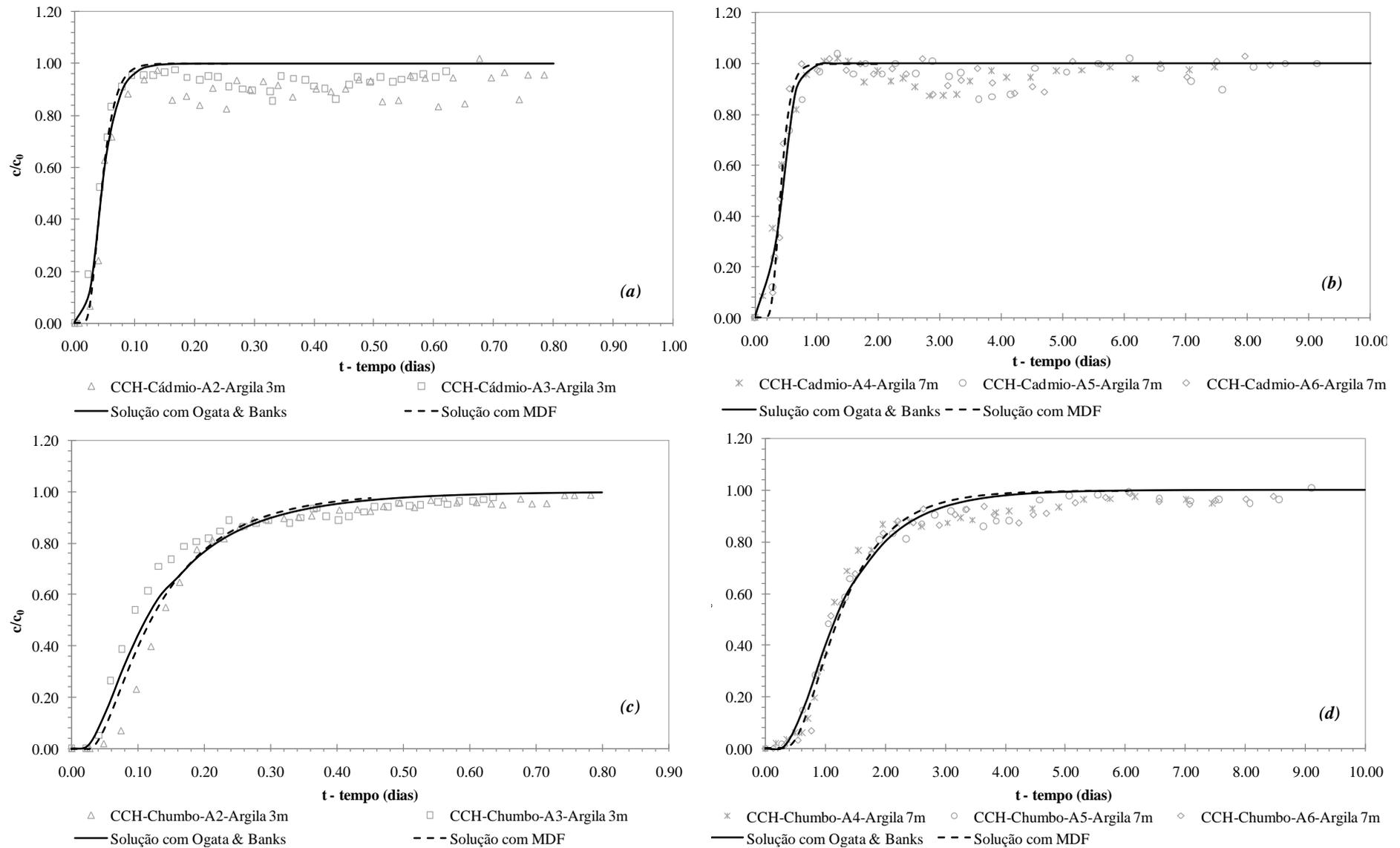


Figura 6.3. Comparação das soluções analíticas de Ogata & Banks com a solução numérica obtida pelo MDF para o solo laterítico *in-situ*.

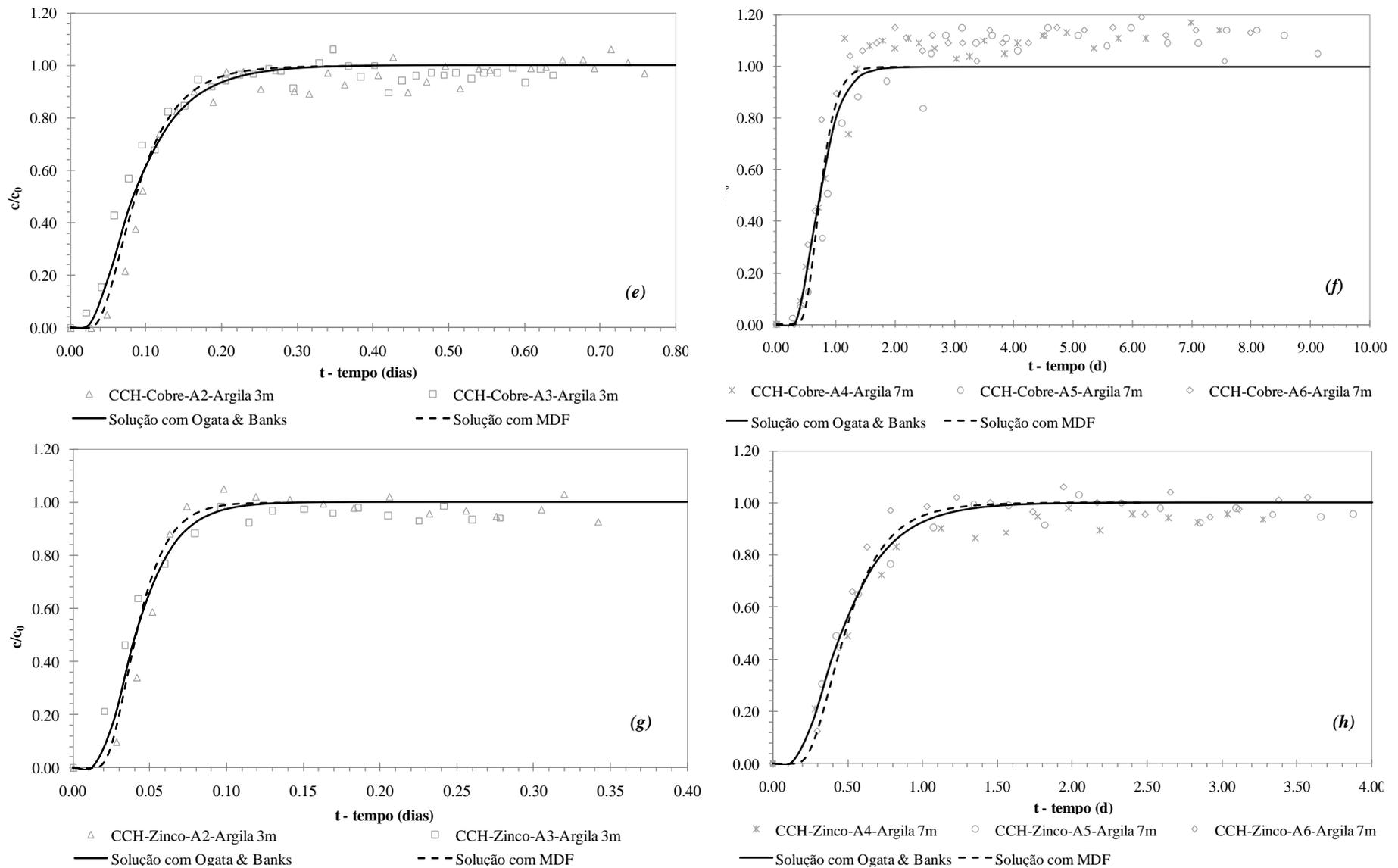


Figura 6.4. (Cont.) Comparação das soluções analíticas de Ogata & Banks com a solução numérica obtida pelo MDF no solo laterítico *in-situ*.

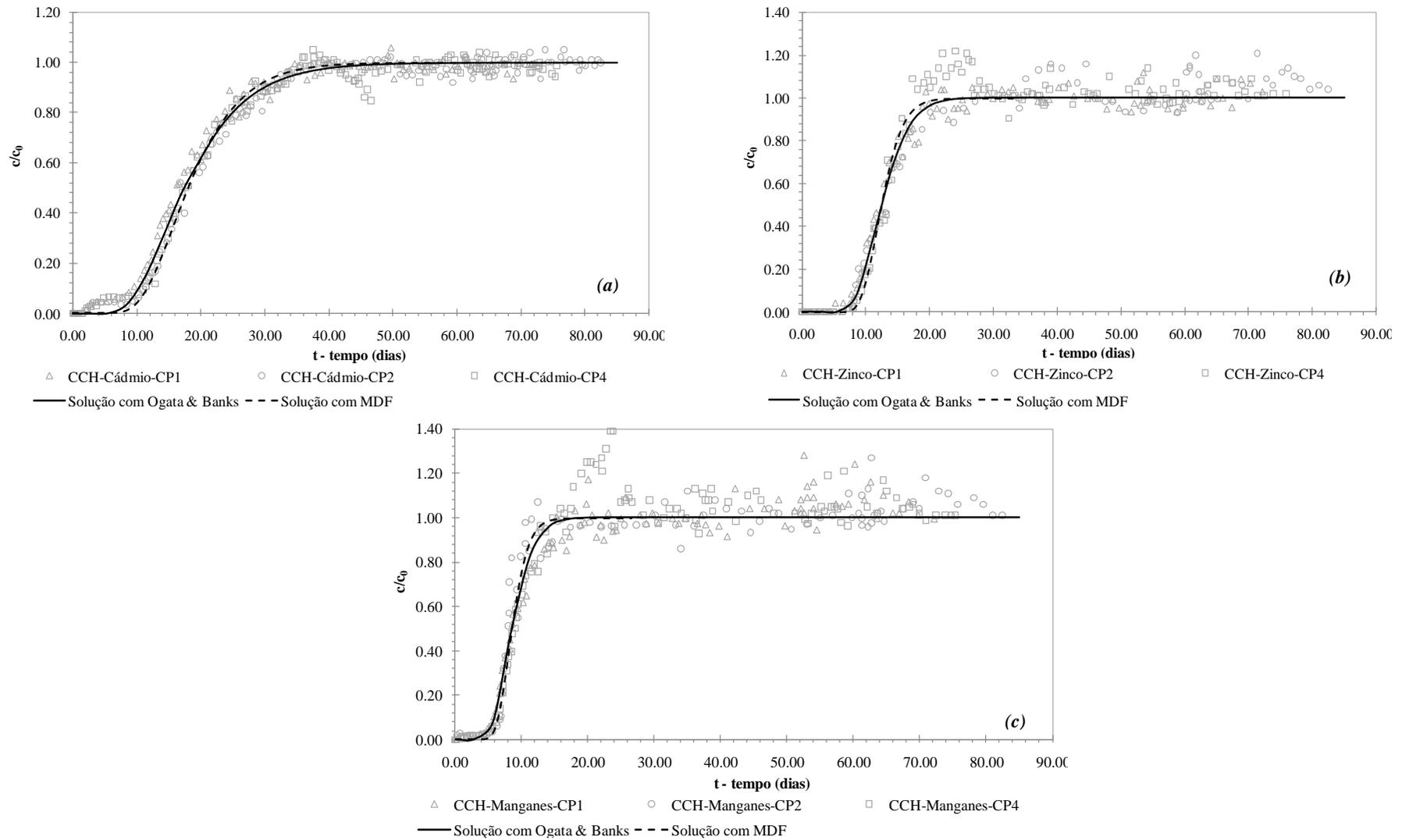


Figura 6.5. Comparação das soluções analíticas de Ogata & Banks com a solução numérica obtida pelo MDF para no solo laterítico compactado.

Observa-se nas Figuras 6.3 e 6.4, uma boa aproximação entre a solução analítica e a aproximação numérica por MDF. No entanto, continua-se observando que existe certa divergência entre as duas soluções. Esta divergência é devida à própria natureza da solução numérica, definida como uma aproximação, e ao detalhamento na discretização do domínio, tanto no espaço representado por Δx como do tempo Δt para conseguir atingir as condições numéricas estabelecidas pela Eq. (6.22). A discretização do domínio, no espaço unidimensional, se apresenta na Tabela 6.2 assim como os valores do número de Courant (C), do número de Neumann (N) e, finalmente, do número de Péclet (Pe). O número de Péclet foi definido para o intervalo Δx .

Tabela 6.2. Resumo da discretização no tempo e no espaço do domínio de estudo. Condições de estabilidade numérica e Número de Péclet.

SOLO LATERÍTICO	ÍON	Δx (m)	Δt (d)	C	N	Pe
Solo Laterítico in-situ 3.0m	Cd^{2+}	0.0072	0.0011	0.32	0.50	0.63
	Pb^{2+}	0.0145	0.0047	0.21	0.50	0.42
	Cu^{2+}	0.0100	0.0027	0.27	0.50	0.54
	Zn^{2+}	0.0070	0.0010	0.30	0.50	0.60
Solo Laterítico in-situ 7.0m	Cd^{2+}	0.0050	0.0073	0.33	0.50	0.66
	Pb^{2+}	0.0104	0.0367	0.25	0.50	0.50
	Cu^{2+}	0.0050	0.0130	0.34	0.50	0.67
	Zn^{2+}	0.0093	0.0139	0.28	0.50	0.57
Solo Laterítico Compactado	Cd^{2+}	0.0048	0.2450	0.26	0.50	0.53
	Zn^{2+}	0.0023	0.0900	0.31	0.50	0.62
	Mn^{2+}	0.0025	0.0680	0.31	0.50	0.62

Observa-se, de forma geral na Tabela 6.2, que para conseguir atingir os parâmetros de estabilidade numérica da solução, o domínio de estudo correspondente ao corpo de prova analisado no laboratório, foi discretizado no espaço (Δx) com valores entre 0.0023 m e 0.0145 m. Os mínimos valores de Δx corresponderam aos íons que atuaram no solo laterítico compactado. Os valores máximos se apresentaram quase todos no solo laterítico *in-situ* a 3 m.

Os valores dos números de Courant e de Neumann foram ajustados até se conseguir uma aproximação numérica que se ajustasse ao máximo possível às medidas experimentais e, assim, se aproximasse da melhor forma à resposta da solução analítica de Ogata & Banks (1961). Considerando isto, o número de Neumann foi adotado como sendo o limite do estabelecido pela Eq. (6.22). No entanto, o número de Courant adotado assumiu valores muito menores do que o estabelecido na restrição. Inclusive, o número de Courant assumiu valores menores do que o assumido para o número de Neumann, variando entre $0.21 < C < 0.34$.

O fato de que a aproximação numérica por MDF apresenta melhores resultados quando se atinge a máxima restrição de Neumann indica que o mecanismo físico que predominou nos processos de transporte foi o dispersivo. Isto também pode ser observado na magnitude do número de Péclet. Bear & Cheng (2010) explicam que o número de Péclet expressa a relação entre os mecanismos advectivos e dispersivos-difusivos. Quando $P_e \gg 1$, o mecanismo dominante é o advectivo e quando $P_e \ll 1$, o mecanismo dominante é o dispersivo. Observa-se na Tabela 6.2 que para todos os casos o número de Péclet não superou o valor da unidade, portanto considera-se que o mecanismo que teve maior participação no transporte foi o dispersivo.

Perkins & Johnson (1963) propõem uma forma de identificar o tipo de mecanismo físico de transporte que atuou no processo de transporte a partir do número de Péclet. Na Figura 6.6 apresenta-se esta metodologia, plotando as magnitudes dos números de Péclet, calculados experimentalmente e numericamente. No cálculo experimental utilizou-se o tamanho das partículas médias como aparece na Eq. (2.21) e, no cálculo numérico foram plotados os valores apresentados na Tabela 6.2.

Observa-se pela Figura 6.6 que os números de Péclet obtidos na parte experimental e numérica localizam-se em uma faixa entre $0.4 < P_e < 1.2$. Segundo o estabelecido por Perkins & Johnson (1963), quando Péclet varia entre $0,2 < P_e < 3$ o fenômeno de transporte se localiza em uma zona de transição onde os efeitos da difusão e dispersão mecânica são da mesma ordem de grandeza. Esta abordagem não reflete realmente os resultados obtidos durante esta pesquisa para os solos lateríticos por duas razões. A primeira relaciona-se com a contribuição difusiva. De forma muito geral para os dados obtidos nesta pesquisa, o valor médio do coeficiente de difusão, considerando uma tortuosidade para um solo argiloso siltoso de $\tau=0.35$ (Shackelford, 2000) foi de $D^* = 2.5 \times 10^{-5}$ m²/dia, o que comparado com os valores de dispersividade mecânica cuja ordem é de $D^m = 3 \times 10^{-2}$ m²/dia é quase desprezível e não gera

nenhuma modificação na magnitude do coeficiente de dispersão hidrodinâmica. Em segundo lugar, tem-se que os valores obtidos na relação D_x^h/D_0 , quando comparados com as magnitudes apresentadas na Figura 2.5, são superiores. Observa-se que as magnitudes obtidas nos solos lateríticos estudados são superiores em relação à tendência apresentada por Perkins & Johnson (1963), que em teoria corresponderiam a análises com solos de climas temperados. Observa-se que esta diferença é muito maior para os solos lateríticos *in-situ* a 3 m e os que melhor se aproximam da tendência da Figura 2.5 são os solos lateríticos compactados. Uma das razões deste comportamento pode estar relacionado com a porosidade dos materiais. O solo laterítico *in-situ* a 3 m apresentou a maior magnitude de porosidade assim como os máximos valores de coeficiente de dispersividade e de velocidade linear média e, como consequência, os maiores coeficientes de dispersão hidrodinâmica. Na medida em que a porosidade se reduz, o coeficiente de dispersão se reduz correspondendo ao solo laterítico compactado e aproximando-se mais da tendência apresentada na Figura 2.5.

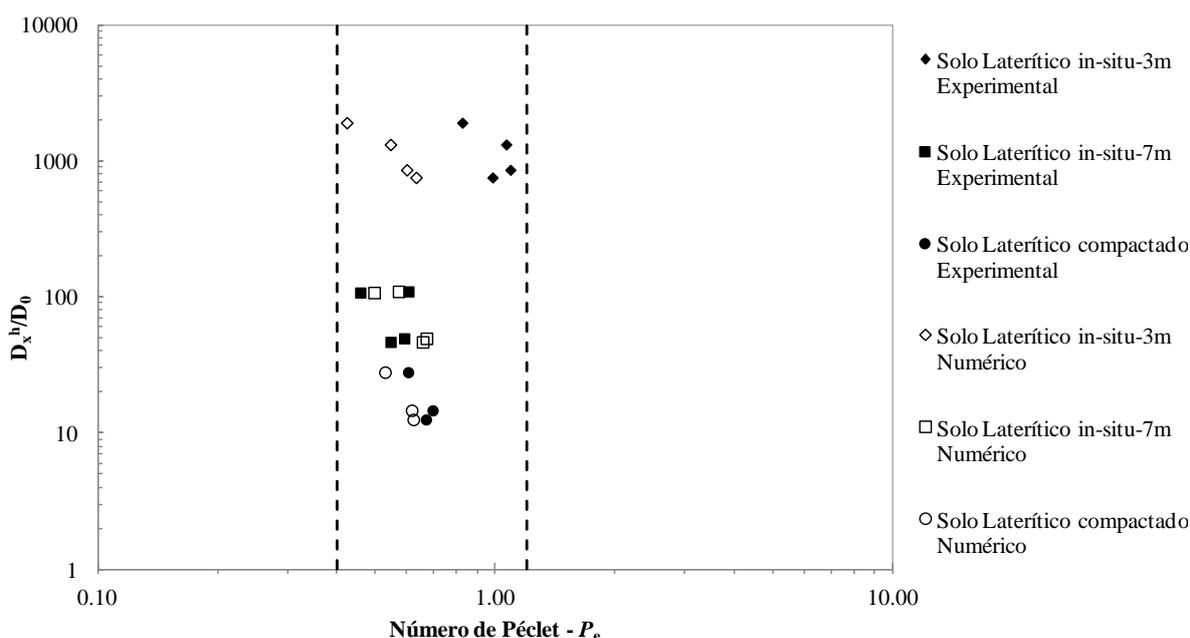


Figura 6.6. Gráfico D_x^h/D_0 versus número de Péclet experimental e numérico, obtidos por Perkins & Johnson (1963).

Partindo da Eq. (2.21) é possível chegar à seguinte expressão:

$$P_e = \frac{\Delta x}{\alpha_x} \quad (6.26)$$

A Eq. (6.26) estabelece que o coeficiente de dispersividade longitudinal e o número de Péclet são inversamente proporcionais. Este comportamento foi plotado na Figura 6.7 considerando os resultados obtidos para os solos lateríticos estudados.

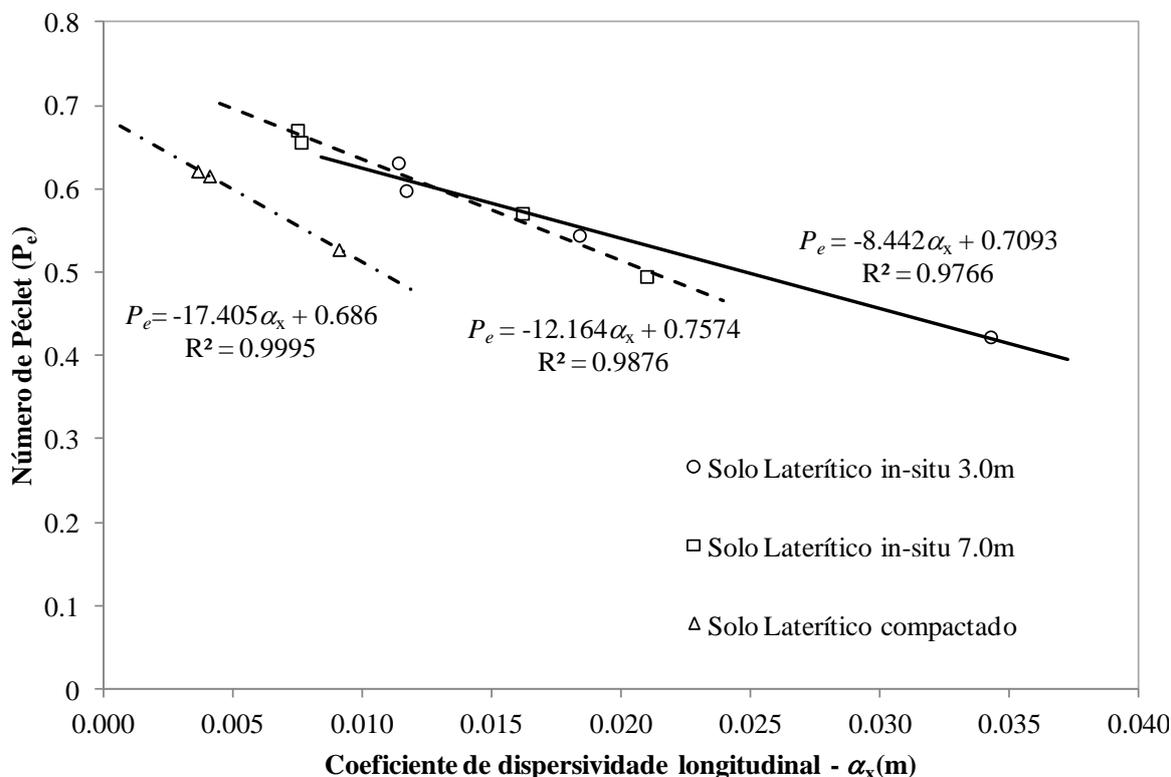


Figura 6.7. Relação do coeficiente de dispersividade longitudinal e do número de Péclet.

Observa-se que na medida em que o coeficiente de dispersividade diminui, o número de Péclet aumenta e o ajuste se apresenta de forma linear com inclinação negativa. No entanto, o comportamento real da Eq. (6.26) é hiperbólico e não linear. O comportamento linear observado nesta análise deve-se à obtenção de poucos dados para representar a tendência original.

Percebe-se que os solos laterítico *in-situ* a 3 m apresentaram uma menor inclinação e, esta aumenta para os solos lateríticos *in-situ* a 7 m, sendo máxima para os solos lateríticos compactados. Este comportamento associado à inclinação pode estar relacionado à possível variabilidade do fenômeno de transporte nestes materiais, sendo o solo laterítico *in-situ* a 3 m o material que apresentou as maiores divergências dentro de todo o comportamento de transporte analisado e o solo laterítico compactado o material que apresentou a menor variabilidade.

É importante lembrar, a partir da Eq (6.26), que o coeficiente de dispersividade depende da escala do domínio em estudo. Desta forma, o número de Péclet dependerá igualmente da escala, podendo ser determinado tanto em uma escala local, analisado para um Δx ou, em um espaço global considerando a dimensão total do domínio em estudo qualquer.

6.3.MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS (MEF)

O MEF é um método aproximado de cálculo de sistemas contínuos. Este método pode ser descrito como uma técnica para resolver (de forma aproximada) um problema governado por uma equação diferencial por meio de sistema de equações algébricas que relacionam a variável procurada em um número finito de pontos.

Zienkiewicz, 1971 explica de forma sucinta o procedimento de abordagem de uma análise MEF. Este autor descreve o procedimento da seguinte forma:

Inicialmente, divide-se o domínio do problema em um número de subdomínios, denominados elementos finitos, conectados entre si por meio de um número finito de pontos, denominados pontos nodais ou nós. Como a divisão do domínio pode ser qualquer, este método apresenta grande vantagem no tratamento de casos com geometria complexa. Ainda, cada elemento pode ter propriedades próprias, o que permite resolver casos heterogêneos. O método pode ser aplicado inclusive em fenômenos não lineares e dependentes do tempo.

A distribuição da variável cuja solução é procurada dentro dos elementos finitos é aproximada por uma função particular, chamada função de interpolação. A partir desta função é possível relacionar o valor da variável do problema nos nós de cada elemento com a geometria e propriedades do elemento, dando origem ao sistema de equações do elemento. Este sistema de equações pode ser apresentado na forma matricial, sendo a matriz dos coeficientes denominada matriz de comportamento do elemento.

Considerando a conexão dos elementos por meio dos pontos nodais é possível associar as equações dos elementos, montando um sistema global de equações para o problema. Introduzem-se, então, valores conhecidos da variável do problema no contorno (introdução das condições de contorno). Por último, resolve-se o sistema de equações global, obtendo os valores da variável do problema nos pontos nodais.

O MEF possui um requerimento central no qual os valores das variáveis de campo variam em cada elemento, utilizando funções específicas controladas por parâmetros. A formulação

consiste em ajustar estes parâmetros minimizando os termos relativos aos erros ou a energia. Os programas de MEF frequentemente combinam os elementos das matrizes por meio de uma matriz de rigidez global, o que normalmente não é feito nos programas de MDF, pois é relativamente eficiente gerar as equações de diferenças finitas a cada passo.

Uma das formas de resolução do método consiste, inicialmente, na escrita das equações diferenciais parciais na forma variacional. A determinação da solução aproximada do problema variacional se reduz fundamentalmente ao estudo das funções coordenadas ϕ_i , onde $i=1, \dots, n$. Estas devem satisfazer condições de regularidade e podem estar definidas sobre todo o domínio Ω ou apenas em parte dele. O MEF propõe uma técnica sistemática para determinar estas funções coordenadas.

No cálculo variacional, procura-se a função $u(x, y)$ que dentre todas as funções admissíveis é a solução exata para minimizar um determinado funcional. A função $u(x, y)$, suposta exata, é substituída por uma função aproximada $v(x, y)$, formada por uma combinação linear de funções $\phi_i(x, y)$, tal que:

$$u(x, y) \cong v(x, y) = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i(x, y) \quad (6.27)$$

As funções $\phi_i(x, y)$, denominadas funções de forma, são funções lineares independentes e cada uma delas individualmente satisfaz as condições de contorno. Essas funções são contínuas até o grau $m-1$, sendo m a ordem da maior derivada do funcional. Os coeficientes a_i a serem determinados, são denominados parâmetros nodais e a função $v(x, y)$ é conhecida como função aproximadora.

6.3.1. Método de Resolução de Galerkin

O método de Galerkin não requer a existência de um funcional. Ele utiliza diretamente a equação diferencial que descreve matematicamente o problema a ser analisado. Para resolver um sistema de equações diferenciais, ou uma equação diferencial pelo método de Galerkin, substitui-se nele, ou nela, uma ou mais funções aproximadoras que devem satisfazer as condições de contorno (Reddy, 1988).

Como as funções aproximadoras não são a solução exata da equação diferencial, ou do sistema de equações diferenciais, tem-se um ou mais resíduos que devem ser ponderados por

meio de funções ponderadoras, e o produto entre a função residual e cada função ponderadora é suposto igual a zero no domínio da integração, determinando condição de ortogonalidade.

Suponha-se um sistema de equações lineares da forma:

$$Lv = f \quad (6.28)$$

onde, L é um operador diferencial e v é a função que satisfaz certas condições de contorno.

Admite-se uma função aproximada \bar{v} para v da forma:

$$\bar{v} = \sum_{i=1}^n a_i \phi_i \quad (6.29)$$

onde ϕ_i são funções que satisfazem as condições de contorno do problema.

Substituindo v por \bar{v} , a igualdade da Eq. (6.28) não se verifica mais, havendo então um erro dado por:

$$\varepsilon = L\bar{v} - f \quad (6.30)$$

O método de Galerkin exprime a condição de ortogonalidade entre a função ε e as funções ponderadoras ϕ_i , resultando em:

$$\int_V (L\bar{v} - f) \phi_i dV = 0; \quad i = 1, 2, \dots, n \quad (6.31)$$

6.3.2. Software FlexPDE V.5.0 ®

Com o objetivo de acoplar os mecanismos físicos advectivos e dispersivos assim como os mecanismos de interação entre o solo e o contaminante, mecanismos que finalmente compõem o modelo de transporte de contaminantes; foi utilizado a ferramenta computacional denominada FlexPDE ®. Este programa é capaz de resolver qualquer tipo de equação diferencial, com domínio bem definido, pelo método dos elementos finitos.

O FlexPDE ® trata-se de um "*scripted finite element model builder and numerical solver*", como descreve o utilitário de ajuda do programa. Ou seja, o *software* FlexPDE ® produz a formulação do problema em termos de elementos finitos a partir da equação diferencial, gera a malha (auto-adaptativa), resolve (para as condições de contorno especificadas) e apresenta os resultados graficamente (pós-processamento).

O programa gera a formulação de elementos finitos a partir da equação diferencial. Esta é especificada por meio de uma linguagem em “*script*” fácil de programar, em formato ASCII. Isto só é possível com o desenvolvimento de programas com linguagem que incorporem álgebra simbólica, com capacidade de integrar e diferenciar. Ou seja, o programa aplica linguagem simbólica para integrar por partes a equação diferencial especificada, de modo a reduzir as equações de segunda ordem e criar equações de Galerkin. Depois deriva estas equações simbolicamente para gerar a matriz Jacobiana do sistema de equações acoplado. Finalmente resolve e apresenta os resultados.

O software FlexPDE® resolve qualquer número de equações diferenciais acopladas, desde segunda ordem no espaço e de primeira ordem no tempo, problemas bidimensionais e tridimensionais, problemas estacionários ou transientes, diferentes condições de contorno (incluindo periódicas), malha auto-adaptativa (transparente ao usuário) definida apenas por uma medida de erro, diferentes zonas de propriedades (heterogeneidade), problemas lineares e não-lineares e diferentes modelos constitutivos.

6.3.3. Comparação das Soluções Analíticas Bidimensionais com a Solução Numérica por MEF.

Conforme ao ilustrado na Figura 3.1 e explicado no item 3.2.3.2 do Capítulo 3, as soluções analíticas obtidas com Ogata & Banks (1961) para o caso unidimensional foram comparadas com a solução numérica utilizando o método dos elementos finitos (MEF) implementando a programação no software FlexPDE®. A análise será feita no espaço bidimensional, considerando o resultado observado no Capítulo 5, onde a componente dispersiva transversal vertical α_z não apresentou uma contribuição importante à resposta do modelo para estes materiais. Aproveitando-se desta vantagem, foi elaborado um código considerando apenas duas componentes dispersivas α_x e α_y . O domínio em estudo foi considerado como um meio homogêneo, suficientemente amplo para garantir a existência de gradientes de concentração na direção horizontal e gradientes de concentração na direção perpendicular ao eixo de avanço de uma pluma de contaminação. Ao mesmo tempo, o domínio foi considerado é suficientemente delgado para garantir que uma das direções desses gradientes de concentração, perpendicular ao eixo da pluma de contaminação, seja desprezível (espalhamento da pluma contaminante na direção transversal vertical é nulo $\alpha_z = 0$).

Considerando estas condições, o domínio bidimensional adotado no FlexPDE[®] teve um comprimento de 2000 m na direção x considerada a direção longitudinal do domínio em estudo, uma largura de 960 m na direção y , uma fonte contaminante de largura $Y=240$ m localizada em $x=0$ e, finalmente, para considerar a bidimensionalidade se teve uma espessura desse domínio de 0.4 vezes o tamanho da fonte contaminante.

Os resultados deste processo comparativo de simulação entre as soluções analíticas bidimensionais apresentadas no Capítulo 5 e a aproximação numérica por MEF são apresentados na Figura 6. para o caso dos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m e 7.0 m de profundidade e na Figura 6.9 para os solos lateríticos compactados.

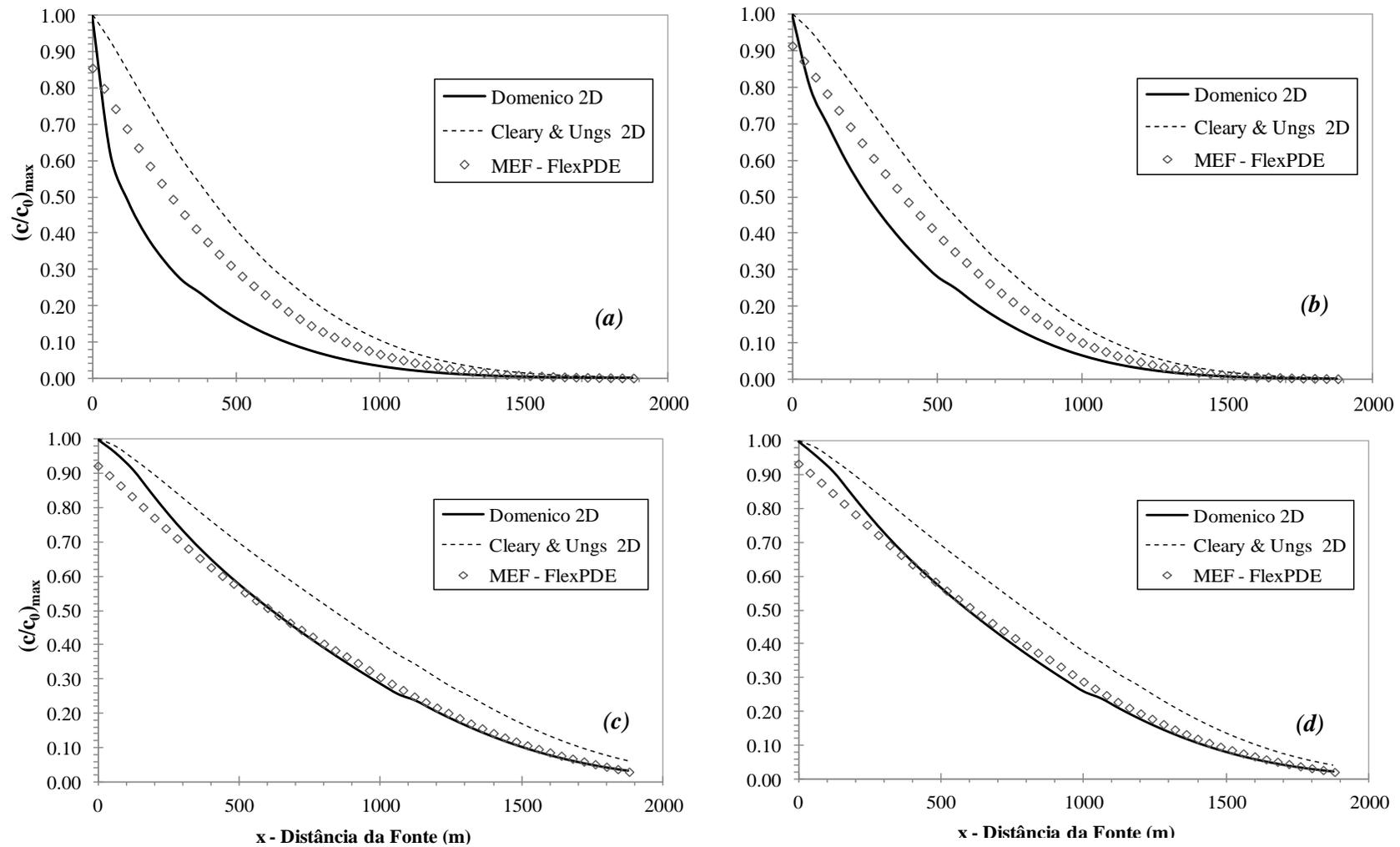


Figura 6.8. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ obtidas pelas diferentes soluções analíticas e numéricas no espaço bidimensional utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

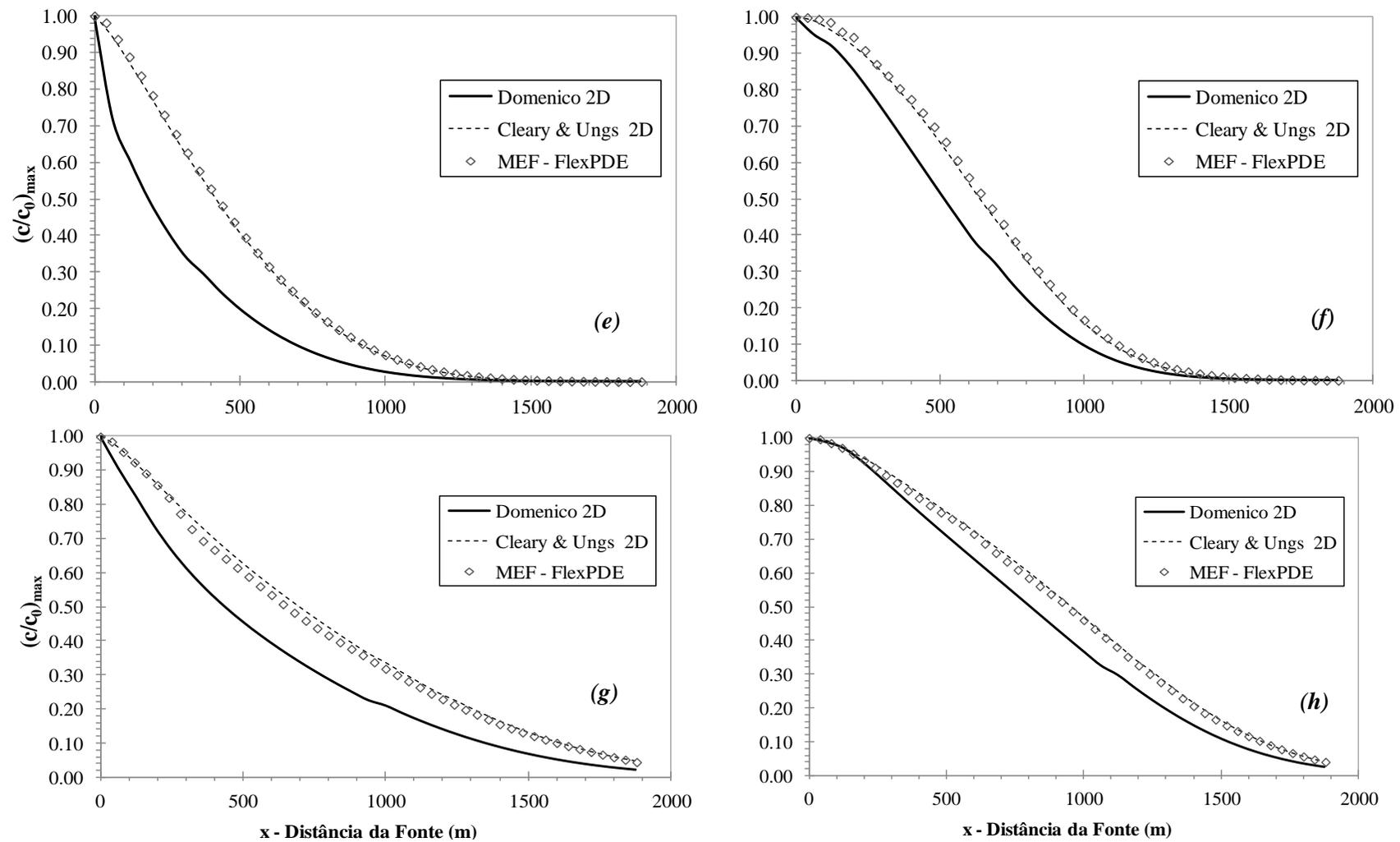


Figura 6.7.(Cont.) Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{max}$ obtidas pelas diferentes soluções analíticas e numéricas no espaço bidimensional utilizadas para (a) íon Pb^{2+} (b) íon Cu^{2+} (c) íon Zn^{2+} (d) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 3.0 m, e (e) íon Pb^{2+} (f) íon Cu^{2+} (g) íon Zn^{2+} (h) íon Cd^{2+} no solo laterítico *in-situ* a 7.0 m.

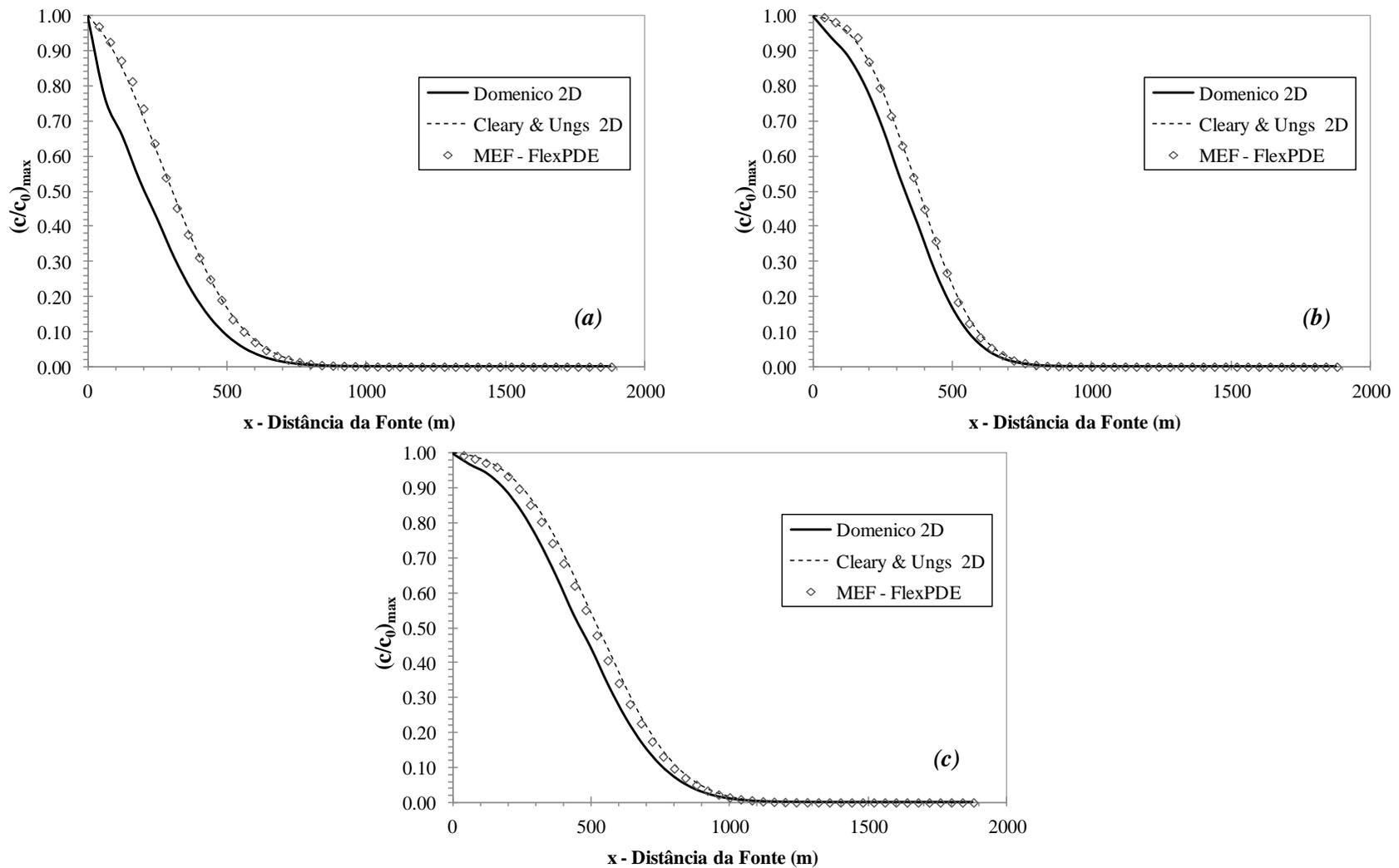


Figura 6.9. Comparação das concentrações relativas máximas $(c/c_0)_{\max}$ obtidas pelas diferentes soluções analíticas e numéricas no espaço bidimensional para os solos lateríticos compactado (a) íon Cd^{2+} , (b) íon Zn^{2+} e (c) íon Mn^{2+} .

Observa-se nas Figuras 6.7 e 6.8 que nos solos lateríticos *in-situ* a 7.0 m e compactado a aproximação numérica por MEF se ajusta quase de forma perfeita à solução analítica bidimensional de Cleary & Ungs (1978).

Para os solos laterítico *in-situ* a 3 m observa-se que, entre a solução analítica bidimensional de Cleary & Ungs (1978) e a aproximação numérica pelo MEF, houve uma discrepância importante. Esta discrepância se manifesta ao longo de todo o domínio estudado. Em alguns íons contaminantes a solução se superpõe à solução de Domenico (1987), e em outros, a resposta ficou limitada pelas duas soluções analíticas. Este efeito pode ser associado à **dispersão numérica** manifestada em significativas oscilações no trecho inicial da curva, fazendo com que os valores de concentração relativa sejam menores, inclusive que os valores de concentração estabelecidos pelas condições inicial e de contorno. A dispersão numérica fará com que o erro se propague ao longo do domínio em estudo. Esta dispersão pode ser consequência das altas magnitudes nos parâmetros de transporte e do nível de discretização da malha. As respostas obtidas na Figura 6.(a) até (d) corresponderam à máxima discretização possível da malha, obtendo-se uma resposta que ainda não se ajusta satisfatoriamente às condições física do processo.

CAPÍTULO 7

7. CONCLUSÕES

7.1. CONCLUSÕES DA ANÁLISE UNIDIMENSIONAL ANALÍTICA

Os parâmetros de transporte de três solos lateríticos em diferentes condições foram encontrados usando diferentes metodologias. Os resultados mostram que a utilização de metodologias aplicadas diretamente aos dados experimentais pode gerar resultados que não correspondem perfeitamente às características do contaminante. As metodologias que envolvem a minimização do erro entre o medido experimentalmente e o calculado pelos modelos analíticos oferecem parâmetros de transporte que se ajustam de forma razoável aos dados experimentais reduzindo a variabilidade e conservando as condições de não linearidade do modelo.

Os solos lateríticos em condições *in-situ* apresentaram uma importante variação do coeficiente de retardo com a profundidade. Os coeficientes de retardo foram maiores a uma profundidade de 3.0 m em relação aos coeficientes de retardo obtidos a 7.0 m para o mesmo perfil de solo. Supõe-se que estas variações sejam devidas à presença de matéria orgânica, cujos teores são maiores em superfície devido à decomposição de plantas e animais. A grande capacidade de troca iônica e superfície específica da matéria orgânica geram uma maior partição dos íons contaminantes aumentando finalmente o processo de retardo da solução contaminante.

O processo de compactação mudou a estrutura do solo. Esta condição gera um aumento do fator de retardo o qual é maior do que o solo laterítico *in-situ* como consequência da percolação do fluido contaminante pelos microporos do solo. O processo de compactação faz com que os macroporos, os quais eram o caminho preferencial do fluxo durante o estado *in-situ*, sejam fechados.

Os coeficientes de retardo nos solos lateríticos *in-situ* para ambas as profundidades foram mais influenciados pelo coeficiente de distribuição do que pela porosidade e pela massa específica seca. Isto como se deve à presença de matéria orgânica. No caso do solo laterítico

compactado a situação é diferente, sendo as propriedades de porosidade e massa específica seca, as que controlam o processo de retardo do contaminante quando comparadas ao coeficiente de distribuição. Por isto foi possível estabelecer que o mecanismo sorcivo, representado pelo fator de retardo, é constituído por dois fatores, um químico representado pela contribuição do coeficiente de distribuição e outro físico representado pelas propriedades de porosidade e massa específica seca do material, sendo estas últimas as que geraram as maiores modificações no incremento do fator de retardo.

As observações da análise paramétrica evidenciaram que as variações no coeficiente de dispersividade (α_x) controlaram principalmente a forma e a geometria da curva de chegada. No caso do coeficiente de retardo (R), as modificações alteraram principalmente a posição e o deslocamento da curva de chegada, não afetando consideravelmente a forma, como ocorre com o coeficiente de dispersividade.

Estabelecer quantitativamente qual é o parâmetro que apresenta maior participação no processo de contaminação unidimensional com base na solução analítica de Ogata & Banks (1967) é difícil. No entanto, é possível concluir, para os solos lateríticos estudados, que o fenômeno de transporte, quando se utiliza esta solução analítica apresenta uma maior contribuição em primeiro lugar devido às propriedades de massa específica seca (ρ_d) e porosidade (n), seguido do coeficiente de distribuição (K_d) e, finalmente, do coeficiente de dispersividade (α_x).

Um fenômeno importante observado experimentalmente principalmente nos solos lateríticos *in-situ* a 7.0 m foi o fenômeno de desorção. O fato de o processo desorcivo ter sido observado nos solos lateríticos *in-situ* a 7.0 m e não ter sido observado com clareza nos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m está associado ao incremento no tempo de estabilização. O aumento da tortuosidade faz com que a substância contaminante permaneça mais tempo em contato com as partículas sólidas do solo e com os componentes químicos que o compõem, acarretando em tempo suficiente para que ocorra a troca iônica. No caso dos solos lateríticos *in-situ* a 3.0 m, o processo foi mais acelerado e não houve tempo suficiente para que ocorra esta interação.

A velocidade linear média tem uma maior participação nos solos lateríticos *in-situ* quando comparados aos solos compactados. As modificações na estrutura do solo pela compactação fazem com que as velocidades de percolação diminuam e a parcela do processo advectivo deixa de ser representativa. Dessa forma, outros fenômenos, por exemplo, os sorcivos, passam

a dominar o processo. Ao diminuir a velocidade de percolação, tem-se uma maior interação entre o contaminante e as partículas sólidas. Conseqüentemente, existirão fenômenos de adsorção ou desorção entre as fases sólida e líquida.

7.2. CONCLUSÕES DA ANÁLISE MULTIDIMENSIONAL ANALÍTICA

No solo laterítico compactado, não se observa divergência alguma quando se comparam as concentrações máximas relativas, determinadas nos espaços bi e tridimensional. Este fenômeno é influenciado pelo processo de compactação que afetou diretamente o incremento do coeficiente de retardo nestes materiais. A não tridimensionalidade deste coeficiente faz com que sua grandeza permaneça igual em todas as direções do espaço. Assim, o retardo é simplesmente um valor escalar ($1/R$) que multiplica todas as componentes do tensor. Finalmente, pode-se dizer que nos solos compactados, o efeito da dispersividade transversal é desprezível. Isto é interessante, devido ao fato que o problema de contaminação, para este tipo de material em condições compactadas, poderia, em princípio, ser simulado em condições bidimensionais.

Nas análises multidimensionais de transporte realizadas sobre os três solos lateríticos estudados, a ordem de deslocamento dos íons pode ser determinada. Para os dois solos em condições *in-situ*, o íon contaminante que se deslocou menos foi o Pb^{2+} e o íon que se deslocou mais foi o íon Cd^{2+} . A sequência de mobilidade para os íons estudados para os dois materiais foi então $Pb^{2+} < Cu^{2+} < Zn^{2+} < Cd^{2+}$. No caso dos solos lateríticos compactados, o íon Mn^{2+} foi o íon que apresentou o maior deslocamento seguido do íon Zn^{2+} e finalmente do íon Cd^{2+} .

Na comparação entre as plumas contaminantes obtidas pelas soluções de Domenico (1987) e Cleary & Ungs (1978) foram observadas em todos os casos fortes discrepâncias associadas ao valor da concentração relativa em determinados pontos do domínio e ao avanço das plumas contaminantes. De forma geral, o solo laterítico compactado apresentou a menor divergência entre as duas soluções analíticas quando comparadas com as plumas dos solos lateríticos *in-situ*. Particularmente, as plumas para os solos lateríticos *in-situ* extraídos a 3 m apresentaram as maiores divergências entre as duas soluções quando comparadas ao solo laterítico *in-situ* a 7 m. A maior divergência entre as duas soluções analíticas ocorre sobre o eixo longitudinal da pluma contaminante quando $x = 0$.

Na comparação entre as plumas contaminantes obtidas pelas soluções de Domenico (1987) e Cleary & Unga (1978), para os três solos lateríticos estudados, observou-se que, para uma mesma distância a solução de Domenico (1987) proporciona um menor valor de concentração no sentido longitudinal da pluma. Já no sentido transversal, os valores de concentração encontrados por Domenico (1987) são maiores que os valores de concentração determinados pela solução de Cleary & Unga (1978).

As análises experimentais e de simulação aqui realizadas corroboram observações de outros pesquisadores que descrevem que o erro da solução de Domenico (1987) será baixo na resolução de problemas de transporte que tenham baixos valores de dispersividade longitudinal, altas velocidades de advecção e grandes tempos de simulação.

7.3. CONCLUSÕES DA ANÁLISE MULTIDIMENSIONAL NUMÉRICA

Nas análises numéricas, o MDF para o caso unidimensional se apresentou como um método de boas aproximações para a solução analítica unidimensional proposta por Ogata & Bank (1961). No entanto, a programação com a ferramenta Visual Basic® para Microsoft Excel® se mostrou pouco eficiente devido ao alto tempo de processamento da resposta.

As análises numéricas forneceram uma ótima ferramenta para observar e conferir as incertezas observadas na solução de Domenico (1987). Observou-se nestas análises que a metodologia numérica utilizando o MEF teve melhores aproximações para a solução analítica bidimensional de Cleary & Unga (1978), principalmente nos solos lateríticos *in-situ* a 7.0 m e no solo laterítico compactado. Para os solos lateríticos *in-situ* a 3 m observa-se que, entre a solução analítica bidimensional de Cleary & Unga (1978) e a aproximação numérica, houve uma discrepância importante. Este efeito pode ser associado à *dispersão numérica*.

7.4. SUGESTÕES PARA PESQUISAS FUTURAS

Esta modelagem multidimensional de transporte de contaminantes inorgânicos em solos tropicais lateríticos pode ser aplicada e ampliada da mesma forma, considerando solos em condições não saturadas, realizando-se também análises paramétricas e de sensibilidade que apresentem a importância e contribuição das variáveis não saturadas na distribuição e avanço da pluma contaminante.

Utilizando uma metodologia similar à realizada nesta dissertação, sugere-se analisar o comportamento de uma pluma contaminante real em um meio poroso local, como o solo laterítico da cidade de Brasília. Esta análise poderá considerar de forma mais ampla os efeitos

de escala, ajudando a entender os efeitos que esta condição gera sobre os parâmetros de transporte.

Sugere-se ainda realizar análises numéricas multidimensionais utilizando programas disponíveis no mercado como Visual MODFLOW® e FlexPDE®, considerando a informação apresentada nesta dissertação. Estas análises poderão avaliar a interação conjunta dos três solos lateríticos estudados. As análises poderiam ajudar a entender o fenômeno de transporte em *liners* de argila compactada para proteção de solos em condições *in-situ*. Da mesma forma poderiam ser investigadas diferentes metodologias de remediação, considerando barreiras impermeáveis.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- Batu, V. (1996). A Generalized Three-dimensional Analytical Solute Transport Model for Multiple Rectangular First-Type Sources. *Journal of Hydrology* 174, 57–82p.
- Batu V. (2006). *Applied Flow and Solute Transport Modeling in Aquifers Fundamental Principles and Analytical and Numerical Methods*. Eds: Taylor & Francis, New York, N. Y. USA. 698 p.
- Bear, J. (1979). *Hydraulics of Groundwater*. McGraw-Hill, New York, N.Y.U.S.A, 26-269 p.
- Bear, J. and Bachmat, Y (1990). *Introduction to Modeling Phenomena of Transport in Porous Media*. Kluwer, Dordrecht, 553 p.
- Bear, J. & Cheng., A. (2010). *Modeling Ground Water Flow and Contaminant Transport*. Ed, Springer, New York, NY. USA.
- Bear, J. & Verruijt, A., (1987). *Modelling Groundwater Flow and Pollution*. Reidel Publishing Co., Dordrecht, Holland: 414 p.
- Berkowitz, B., Dror, I. & Yaron, B. (2008). Contaminant Geochemistry, Interactions and Transport in the Subsurface Environment. Ed, Springer, Berlin, Heidelberg, 220-223 p.
- Burnett, R. D. & Frind, E. O. (1987). An Alternating Direction Galerkin Technique for Simulation of Groundwater Contaminant Transport in Three Dimensions, 2, Dimensionality Effects, *Water Resour. Res.* 23(4), 695- 705p.
- Boscov, M. E., Oliveira, E., Ghilardi, M.P. & Silva, M. M. (1999). Difusão de Metais A Traves de Uma Argila Laterítica Compactada. 4º Congresso Brasileiro de Geotecnia Ambiental, REGEO '99, Instituto Tecnológico de Aeronáutica, São Jose dos Campos, SP, Brasil, 323-330 p.
- Camapum de Carvalho, J., Sales, M .M., Souza, N. M., Melo, M. T. S., (2006). Processos Erosivos no Centro-Oeste Brasileiro. FINATEC, Brasília, 464 p.
- Carvalho A. L. (2001) Contaminação de Águas Subsuperficiais em Área de Disposição de Resíduos Sólidos Urbanos: O Caso do Antigo Lixão de Viçosa (MG). Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa, M.G, 148 p.
- Cavalcante, A. L. B. (2000) Efeito do Gradiente de Permeabilidade na estabilidade de Barragens de Rejeito Alteadas pelo Método de Montante. Dissertação de Mestrado, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 190 p.
- Cavalcante, A. L. B. (2004). Modelagem e Simulação do Transporte por Arraste de Sedimentos Heterogêneos Acoplado ao Mecanismo de Tensão-deformação-poropressão Aplicado a Barragens de Rejeitos. Tese de Doutorado, Universidade de Brasília, Brasília, DF, 313 p.
- Cavalcante, A. L. B., (2010) Notas de Aula da Disciplina de Transporte de Contaminantes e Sedimentos, ministrada em 2010. Programa de Pós Graduação em Geotecnia, UnB.

- Cleary, R. W., & Unga, M. J., (1978), Analytical Models for Groundwater Pollution and Hydrology: Princeton University, Water Resources Program Report 78-WR-15, 165 p.
- Costa, P. (2002). Avaliação em Laboratório de Parâmetros de Transporte do Chorume no Aterro Sanitário de Sauípe/Ba. Rio de Janeiro: Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Civil. 190 p.
- De Groot, S.R. and Mazur, P (1962). Non-equilibrium Thermodynamics. North- Holland Pub. Co., Amsterdam, The Netherlands, 510 p.
- Domenico, P.A., & Paliciauskas V.V. (1982). Alternative Bound- Aries In Solid Waste Management. Ground Water, Vol. 20, N° 3: 303–311.
- Domenico, P. A. & Robbins, G.A. (1984) A Dispersion Scale Effect in Model Calibrations and Field Tracer Experiments. Science Journal of Hydrology. Vol. 70:123-132 p.
- Domenico, P.A. & Robbins, G.A. (1985). A New Method of Contaminant Plume Analysis. Ground Water, Vol. 23, N° 4. 476-485 p.
- Domenico, P. (1987). 1. An Analytical Model for Multidimensional Transport of a Decaying Contaminant Species. Journal of Hydrology, Vol. 91, N° 1-2, 49-58 p.
- Domenico, P.A. & Schwartz, F.W. (1998). Physical and Chemical Hydrogeology. Ed, 2nd, John Wiley and Sons. Inc, New York, NY, USA, 506, p.
- Duncan, J. M. (2000). Factors of Safety and Reliability in Geotechnical Engineering. Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering, ASCE, Vol. 130, N°10, 985 – 1003 p.
- EPA, Environmental Protection Agency, (1992). Technical Resource Document: Batch-type Procedures for Estimating Soil Adsorption of Chemicals, EPA/530-SW-87-006-F. Office of Solid Waste and Emergency Response, Washington, DC, 100 p.
- Fetter, C.W. (2008). Contaminant Hydrogeology. Ed. 2nd, Waveland Press, Inc. London, U.K. 234 p.
- Fel, L. & Bear J. (2010). Dispersion and Dispersivity Tensors in Saturated Porous Media with Uniaxial Symmetry. Transport in Porous Media. Vol. 85, N° 1, 259-258 p.
- Flex PDE ® Versão 5.0 (2005). Flex PDE ® User Guide, PDE Solutions Inc. 61 p.
- Fortuna, A. (2000). Técnicas Computacionais para Dinâmica dos Fluidos, Conceitos Basicos e Aplicações. Editora Universidade de São Paulo. São Paulo, SP, Brasil, 426 p.
- Franke, O. L., Reilly, T.E., Bennett, G.D., (1987). Definition of Boundary and Initial Conditions in the Analysis of Saturated Ground-Water Flow Systems – An Introduction. Techniques of Water-Res. Invests. of the U.S. Geol. Survey, Book 3, Ch. B5: 15 pp.
- Freeze, R. A. & Cherry, J.A. (1979). Groundwater. Pretice- Hall, Inc. NY, U.S.A. 604.p.
- Gelhar L, Welty C, Rehfeldt K (1992). A Critical Review of Data on Field Scale Dispersion in Aquifers. Water Resources Research. Vol. 28, N° 7, 1955-1974 p.
- Gidigas, M. D. (1974) Degree of Weathering in the Identification of Lateritic Materials for Engineering Purposes – A Review, Eng. Geol., 8, 213–266.

- Guyonnet, D., & C. Neville. (2004). Dimensionless Analysis of Two Analytical Solutions for 3-D Solute Transport In Groundwater. *Journal of Contaminant Hydrology*. Vol. 75, N°. 1–2. 141–153 p.
- Harr, M. E. (1985). *Reliability – Based Design in Civil Engineering*. McGraw-Hill Publishing Company, New York, USA, 291 p.
- Hassett I. J., & Banwart W. L., (1989). The Sorption of Non-polar Organics by Soils and Sediments in: Sawhney BL, Brown K. (Eds) *Reactions And Movement Of Organic Chemicals In Soils* Soil Science Society of America, Madison, WI, 31–45 p.
- Knox, C. R., Sabatini, D.A & Canter, L.W. (1993) *Subsurface Transport and Fate Process*, Boca Raton (Florida), Lewis Publishers.
- Kinokow L. F. & Bredehoeft J.D. (1984). USGS-Chapter C2: Computer Model Of Two-Dimensional Solute Transport And Dispersion In Ground Water. US Geological Survey, Reston, Virginia, USA, 94 p.
- Konikow, L. F., (1998). Use of Numerical Models to Simulate Groundwater Flow and Transport. US Geological Survey, Reston, Virginia, USA. 75-116 p.
- Kumar G.P. (2004). *Groundwater Flow Models*. National Institute of Hydrology. 27 p.
- Leij, F. J., Dane, J. H. (1990). Analytical Solutions of The One Dimensional Advection Equation and Two or Three Dimensional Dispersion Equation. *Journal: Water Resources Research*, Vol. 26 N°. 7, 1475-1482 p.
- Lin, J. G. & Chen, S. Y. (1998). The Relationship Between Adsorption of Heavy Metal and Organic Matter in River Sediments. *Environmental International*. Vol. 24, N° 3, 345–352p.
- Mandle, R. (2002). *Groundwater Modeling Guidance*. Department of Environmental Quality, Michigan, USA. p. 54.
- Martínez, J. (2008). *Análisis Dimensional: Apuntes de Mecánica de Fluidos*. Escuela Politécnica Superior de Ingeniería de Guijón. Universidad de Oviedo, España.
- Martin-Hayden J. M. & Robbins G. (1997). Plume Distortion and Apparent Attenuation Due to Concentration Averaging in Monitoring Wells. *Ground Water*. Vol. 35, N° 2. 339-346p.
- Matos A. T. (1995). *Fatores de Retardamento e Coeficientes de Dispersão- Difusão do Zinco, Cádmio, Cobre e Chumbo em Solos do Município de Viçosa – MG*. Viçosa: Universidade Federal de Viçosa. Tese Doutorado em Solos e Nutrição de Plantas. 1995. 183 p.
- Matos, A. T., Fontes, M. P. F., Costa, L. M. Martinez, M. A. (2001). Mobility of Heavy Metals as Related to Soil Chemical and Mineralogical Characteristics of Brazilian Soils. *Environmental Pollution* Vol. 111, 429-435 p.
- McLellan, J. K. & Rock, C.A. (1988). Pretreating Landfill Leachate With Peat to Remove Metals. *Water, Air, Soil Pollut.* 37. p. 203-215.
- Mitchell, J. E. & Sitar, N. (1982) Engineering properties of tropical residual soils, In: *Proc. ASCE Geotech. Engrg. Spec. Conf.*, ASCE, New York, pp. 30–57.
- Mitchell, J. K. & Soga, K. (2005). *Fundamentals of Soil Behavior*, John Willey & Sons, 3rd Edition, New York. 105 p.

- Nascentes, C. R. (2003). Coeficiente de Dispersão Hidrodinâmica e Fator de Retardamento de Metais Pesados em Solo Residual Compactado. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal de Viçosa, M.G, 131 p.
- Ogata, A. & Banks, R. B. (1961). Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media. U.S. Geol. Surv. Prof. Pap. 411-A: 7 pp.
- Ogata, A. (1970). Theory Of Dispersivity in Granular Medium. US Geological Survey, Professions Paper. 411p.
- Otálvaro, I. F. & Cordão-Neto, M. P. (2011). Probabilistic Assessment Stability on a Unsaturated Soil Slopes. 14th Pan-American Conference on Soil Mechanics and Geotechnical Engineering (PCSMGE), Toronto, Canada.
- Perkins, T. K. & Johnston, O. C., (1963). A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media. Society of Petroleum Engineering Journal, Vol.3.
- Qasim, S. R., & Chiang, W., (1994) Sanitary Landfill Leachate: Generation, Control and Treatment. Technomic Publishing Company, PA, USA, 140.
- Reddy, R. N. (1988). Variational Formulations and Methods, in Finite Element Analysis for Engineering Design. Edited by J.N. Reddy, C.S. Krishnamoorthy and K.N. Seetharamu, Lecture Notes in Engineering, Springer-Verlag.
- Reilly T. E., Franke O. L., Bennett G. D. (1987). The Principle of Superposition and Its Application in Ground-Water Hydraulics. U.S Geological Survey Techniques of Water Resources Investigations, Book 3, Chapter B6.
- Ritter, E., Ehrlich, M. & Barbosa, M. C. (1995). A Difusão Molecular no Transporte de Contaminantes Através Dos Solos. III Simpósio sobre Barragens de Rejeitos e Disposição de Resíduos. Ouro Preto, MG. Brasil 409-423 p.
- Rowe, R. K., Quigley, R.M. & Booker, J. R. (1995). Clayey Barrier System for Waste Disposal Facilities, ed. FN SPON, 390 p.
- Sagar, B., (1982). Dispersion in Three Dimensions: Approximate Analytical Solutions. American Society of Civil Engineers, Journal of Hydraulics Division, Vol. 108, N°. HYL, 47-62 p.
- Scheidegger, A. E., (1961). General Theory of Dispersion in Porous Media: Journal: Geophys. Research. Vol.: 66, N°. 10, 3273-3278 p.
- Schwartz F. W., (1990). Ground Water Models: Scientific and Regulatory Applications. Canadian Geotechnical Journal. Vol.: 27 N°6. 841-841 p.
- Schwartz, F.W. & Zhang, H. (2003). Fundamentals Ground Water Modelling. John Wiley and Sons. Inc, New York, NY, USA, Cap 23.
- Shackelford, C. D., (1993). Geotechnical Practice for Waste Disposal,. Chapman & Hall. Inc., London, UK, Cap. 3
- Shackelford, C. D., (1994). Waste-Soil Interactions That Alter Hydraulic Conductivity. In: Hydraulic Conductivity and Waste Contaminant Transport in Soil. ASTM STP 1/42, Philadelphia.

- Shackelford, C. D., (2000). Contaminant Transport & Fate Issues. Transporte de Poluentes em Solos e Remediação de Solos Contaminados. Escola Politécnica, Universidade de São Paulo. V. 2.
- Sparks, D.L., (1996). Environmental Soil Chemistry. Academic Press, San Diego
- Sperling, M. V., (2005). Introdução à Qualidade das Águas e ao Tratamento de Esgotos. Princípios do Tratamento Biológico de Águas Residuárias. Vol 1. Ed. UFMG, Belo Horizonte, MG. 452 p.
- Sposito, G. (1989). The Surface Chemistry of Soils. Oxford University Press, New York, NY, USA. 234p.
- Srinivasan, V, Clement, T P & Lee, K. K., (2007). Domenico Solution – Is It Valid?. Ground Water, Vol. 45, N°. 2. 136-146 p.
- Stevenson, F. J., (1985). Geochemistry of Soil Humic Substances. In Humic Substances in Soil, Sediment and Water – Geochemistry, Isolation and Characterization. John Wiley and Sons, USA. 1985. (citado por Matos, 1995).
- Stigliani, W. M., (1988). Changes in Valued “Capacities” of Soils and Sediments as Indicators of Nonlinear and Time -Delayed Environmental Effects. Environ. Monit. Assess, V.10. N°. 3. p.245-307.
- Van der Perk, M. (2007). Soil and Water Contamination: From Molecular To Catchment Scale. Ed, Taylor & Francis, London, UK, 171-214 p.
- Weber, W. J.; McGinley, P. M.; Katz, L. E. (1991) Sorption Phenomena in Subsurface Systems: Concepts, Models, and Effects On Contaminant Fate and Transport. Water Resource. Vol.: 25 N° 5, 499 – 528 p.
- West, M. R., & Kueper B. (2004). Natural Attenuation Of Solute Plumes in Bedded Fractured Rock. In Proceedings of the U.S. EPA/NGWA Fractured Rock Conference: State of Science and Measuring Success in Remediation. National Ground Water Association, NGWA.
- West. M. R., Kueper. B. H., Unga. M. J. (2007). On The Use and Error of Approximation in The Domenico (1987) Solution. Journal Groundwater. Vol 45 N°2, 126-35p.
- Wexler, E. J. (1992). USGS Chapter B7: Analytical Solutions for One-, Two-, and Three-Dimensional Solute Transport in Ground-Water Systems with Uniform Flow. Reston, Virginia: USGS.
- Woldt, W. (1990). Ground Water Contamination Control: Detection and Remedial Planning. Teses (Doutorado), Nebraska University, Lincoln, Nebraska, USA.
- Young, R. N., Mohamed, A. O. & Warkentin, B. P., (1992), Principles of Contaminant Transport in Soils. Geotechnical Research Centre, McGill Univ., Montreal, Quebec, Canada.
- Zheng, C., Bennett, G. D.(1995). Applied Contaminant Transport Modeling, Theory and Practice. Van Nostrand Reinhold, New York, USA.

- Zheng, C. & Wang, P. P. (1999). MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide. U.S. Army Corps of Engineers.
- Zienkiewicz, N. (1971). The Finite Element Method in Engineering Science. New York, USA: McGraw-Hill.

APÊNDICE A

A. CODIGOS DE PROGRAMAÇÃO VISUAL BASIC® PARA MICROSOFT EXCEL 2007 ®

A.1 SOLUÇÃO ANALÍTICA UNIDIMENSIONAL DE OGATA & BANKS (1968)

Ver Tabela A.I(a)

Function Gerf(F#) As Double

```
G# = Abs(F)

h# = 1# / (1# + 0.5 * G#)

Answer# = h# * (-1.13520398 + h# * (1.48851587 + h# * (-0.82215223 + h# *
0.17087277)))

Answer# = h# * (0.09678418 + h# * (-0.18628806 + t# * (0.27886807 +
Answer#)))

Answer# = (h# * Exp(-G# * G# - 1.26551223 + h# * (1.00002368 + h# *
(0.37409196 + Answer#))))

If F# >= 0# Then Gerf = 1# - Answer# Else Gerf = -1# + Answer#

End Function
```

Function GerfC(F#) As Double

```
GerfC = 1# - Gerf(F#)

End Function
```

Sub OgataBanks()

'Parâmetros da fonte

c0 = Cells(5, 5)

'Parâmetros Hidráulicos

Dim Kx, Vx As Double

Dim i, h, n, B As Integer

h = Cells(11, 5) 'Espessura do Liner

B = Cells(13, 5) 'Espessura do Chorume

```

i = Cells(14, 5)
If L > 0 Then
Cells(14, 5) = (L + B) / L
End If

Vx = Cells(15, 5)
n = Cells(12, 5)
Kx = Cells(10, 5)
If Kx > 0 Then
Cells(10, 5) = (Kx * i) / n
Else
MsgBox "Insira a Velocidade de Infiltração Vx"
End If

'Parâmetros Dispersividade
Dim ax As Double
ax = Cells(17, 5) 'dispersividade longitudinal

'Parâmetros de Adsorção
Dim p, Kd, R As Double
p = Cells(19, 5) 'Densidade específica seca
Kd = Cells(20, 5) 'Coeficiente de distribuição
R = Cells(21, 5) 'Coeficiente de retardo

'Parâmetros Fixos da Análise (Análise da pluma num tempo t e uma profundidade z fixa)
x = Cells(8, 5)

'Intervalo de x
For j = 10 To 39
t = Cells(7, j)
Range("I8") = 0 'Condição de contorno e inicial

'Função de Ogata & Banks
Cells(8, j) = (1 / 2) * (GerfC((x - (Vx / R) * t) / (2 * (Sqr(ax * (Vx / R) * t)))) + Exp(x / ax) * GerfC((x + (Vx / R) * t) / (2 * (Sqr(ax * (Vx / R) * t)))))

```

Next j

End Sub

A.2 SOLUÇÃO ANALÍTICA UNIDIMENSIONAL DE BEAR (1979)

Ver Tabela A.I(a)

Function Gerf(F#) As Double

G# = Abs(F)

h# = 1# / (1# + 0.5 * G#)

Answer# = h# * (-1.13520398 + h# * (1.48851587 + h# * (-0.82215223 + h# * 0.17087277)))

Answer# = h# * (0.09678418 + h# * (-0.18628806 + t# * (0.27886807 + Answer#)))

Answer# = (h# * Exp(-G# * G# - 1.26551223 + h# * (1.00002368 + h# * (0.37409196 + Answer#))))

If F# >= 0# Then Gerf = 1# - Answer# Else Gerf = -1# + Answer#

End Function

Function GerfC(F#) As Double

GerfC = 1# - Gerf(F#)

End Function

Sub Bear()

'Parâmetros da Fonte

c0 = Cells(5, 5)

'Parâmetros Hidráulicos

Dim Kx, Vx As Double

Dim i, h, n, B As Integer

h = Cells(11, 5) 'Espessura do Liner

B = Cells(13, 5) 'Espessura do Chorume

i = Cells(14, 5)

If L > 0 Then

Cells(14, 5) = (L + B) / L

End If

```

Vx = Cells(15, 5)
n = Cells(12, 5)
Kx = Cells(10, 5)
If Kx > 0 Then
Cells(10, 5) = (Kx * i) / n
Else
MsgBox "Insira a Velocidade de Infiltração Vx"
End If

'Parâmetros Dispersividade
Dim ax As Double
ax = Cells(17, 5) 'dispersividade longitudinal

'Parâmetros de Adsorção
Dim p, Kd, R As Double
p = Cells(19, 5) 'Densidade específica seca
Kd = Cells(20, 5) 'Coeficiente de distribuição
R = Cells(21, 5) 'Coeficiente de retardo

'Parâmetros Fixos da Análise (Análise da pluma num tempo t e uma profundidade z fixa)
x = Cells(8, 5)

'Degradação
Dim lambda As Double
lambda = Cells(23, 5)

'Intervalo de t
For j = 10 To 39
t = Cells(7, j)
Range("I10") = 0 'Condição de contorno e inicial

'Função de Bear
S = Sqr(1 + ((4 * lambda * ax) / (Vx / R)))
W = Exp((x / (2 * ax)) * (1 - S))
A = GerfC(((x - (Vx / R) * t) * S) / (2 * Sqr(ax * (Vx / R) * t)))

```

```

WW = Exp((x / (2 * ax)) * (1 + S))
AA = GerfC(((x + (Vx / R) * t) * S) / (2 * Sqr(ax * (Vx / R) * t)))
Cells(10, j) = (1 / 2) * ((W * A) + (WW * AA))
Next j
End Sub

```

A.3 SOLUÇÃO ANALÍTICA TRIDIMENSIONAL DE DOMENICO (1987)

Ver Tabela A.I(b)

Function Gerf(F#) As Double

```

G# = Abs(F)
h# = 1# / (1# + 0.5 * G#)
Answer# = h# * (-1.13520398 + h# * (1.48851587 + h# * (-0.82215223 + h# *
0.17087277)))
Answer# = h# * (0.09678418 + h# * (-0.18628806 + t# * (0.27886807 +
Answer#)))
Answer# = (h# * Exp(-G# * G# - 1.26551223 + h# * (1.00002368 + h# *
(0.37409196 + Answer#))))
If F# >= 0# Then Gerf = 1# - Answer# Else Gerf = -1# + Answer#
End Function

```

Function GerfC(F#) As Double

```

GerfC = 1# - Gerf(F#)
End Function

```

Sub Domenico()

'Parâmetros da Fonte

```
Dim c0, C, L As Single
```

```
c0 = Cells(5, 5)
```

```
C = Cells(8, 5) 'Corresponde ao valor Y
```

```
L = Cells(9, 5) 'Corresponde ao Valor Z
```

'Parâmetros Hidráulicos

```
Dim Kx, Vx As Double
```

```
Dim i, h, n, B As Double
```

h = Cells(14, 5) 'Espessura do Liner

B = Cells(16, 5) 'Espessura do Chorume

Vx = Cells(18, 5)

n = Cells(15, 5)

Kx = Cells(13, 5)

'Parâmetros Dispersividade

Dim ax, ay, az As Double

ax = Cells(20, 5) 'dispersividade longitudinal

ay = Cells(21, 5) 'dispersividade transversal horizontal

az = Cells(22, 5) 'dispersividade transversal vertical

'Parâmetros de Adsorção

Dim p, Kd, R As Single

p = Cells(24, 5) 'Densidade específica seca

Kd = Cells(25, 5) 'Coeficiente de distribuição

R = Cells(26, 5) 'Coeficiente de retardo

Vxx = (Vx / R)

'Degradação

Dim lambda As Single

lambda = Cells(28, 5)

'Parâmetros fixos da Análise (Análise da pluma num tempo t e uma profundidade z fixa)

Dim t, z As Double

t = Cells(6, 5)

z = Cells(11, 5) 'Profundidade da Análise

'Intervalos de x e y

Dim x, y As Double

For j = 6 To 46

For i = 42 To 71

y = Cells(40, j)

x = Cells(i, 5)

'Condições de contorno e iniciais

Range("F41:T41") = 0

Range("U41:AE41") = 1

Range("AF41:AT41") = 0

'Fator de Bear

Dim w As Double

w = Sqr(1 + ((4 * lambda * ax) / (Vxx)))

'Equações

Dim f10, f20, f30, f100, f200, f300 As Double

f10 = Exp((x / (2 * ax)) * (1 - w))

f100 = GerfC(((x - (Vxx) * t) * w) / (2 * Sqr(ax * (Vxx) * t)))

f20 = Gerf((y + (C / 2)) / (2 * Sqr(ay * x)))

f200 = Gerf((y - (C / 2)) / (2 * Sqr(ay * x)))

f30 = Gerf((z + (L / 2)) / (2 * Sqr(az * x)))

f300 = Gerf((z - (L / 2)) / (2 * Sqr(az * x)))

'Equação de Domenico

Dim f1, f2, f3 As Double

f1 = f10 * f100

f2 = f20 - f200

f3 = f30 - f300

Cells(i, j) = (1 / 8) * (f1 * f2 * f3)

Next i

Next j

End Sub

A.4 SOLUÇÃO ANALÍTICA TRIDIMENSIONAL DE CLEARY & UNGS (1978)

Ver Tabela A.I(c)

Function Gerf(F#) As Double

G# = Abs(F)

h# = 1# / (1# + 0.5 * G#)

```
Answer# = h# * (-1.13520398 + h# * (1.48851587 + h# * (-0.82215223 + h# *
0.17087277)))
```

```
Answer# = h# * (0.09678418 + h# * (-0.18628806 + t# * (0.27886807 +
Answer#)))
```

```
Answer# = (h# * Exp(-G# * G# - 1.26551223 + h# * (1.00002368 + h# *
(0.37409196 + Answer#))))
```

```
If F# >= 0# Then Gerf = 1# - Answer# Else Gerf = -1# + Answer#
```

```
End Function
```

Function GerfC(F#) As Double

```
GerfC = 1# - Gerf(F#)
```

```
End Function
```

Sub Cleary & Ungs()

'Parâmetros da Fonte

```
Dim c0, W, YY, y1, y2, L, ZZ, z1, z2 As Single
```

```
c0 = Cells(5, 5)
```

'Largura

```
W = Cells(8, 5)
```

```
YY = Cells(10, 5) 'Equivalente ao valor de Y comprimento da fonte
```

```
y1 = (W / 2) - (YY / 2) 'Limite inferior da fonte
```

```
y2 = (W / 2) + (YY / 2) 'Limite superior da fonte
```

```
Cells(12, 5) = y1
```

```
Cells(13, 5) = y2
```

'Comprimento

```
L = Cells(9, 5)
```

```
ZZ = Cells(11, 5)
```

```
z1 = (L / 2) - (ZZ / 2) 'Limite inferior de la fuente
```

```
z2 = (L / 2) + (ZZ / 2) 'limite superior de la fuente
```

```
Cells(14, 5) = z1
```

```
Cells(15, 5) = z2
```

'Parâmetros Hidráulicos

```
Dim Kx, Vx, ii, h, ne, B As Single
```

```

h = Cells(20, 5)    'Espessura do Liner
B = Cells(22, 5)    'Espessura do Chorume
ii = Cells(23, 5)

If h > 0 Then
Cells(23, 5) = (h + B) / h
End If

Vx = Cells(24, 5)
ne = Cells(21, 5)

'Parâmetros Dispersividade
Dim ax, ay, az As Single
ax = Cells(26, 5)    'dispersividade longitudinal
ay = Cells(27, 5)    'dispersividade transversal horizontal
az = Cells(28, 5)    'dispersividade transversal vertical

'Parâmetros de Adsorção
Dim p, Kd, R As Single
p = Cells(30, 5)     'Densidade Específica seca
Kd = Cells(31, 5)    'Coeficiente de distribuição
R = Cells(32, 5)     'Coeficiente de retardo
Vxr = Vx / R

'Degradação
Dim lambda As Single
lambda = Cells(34, 5)

'Parâmetros Fixos da Análise (Análise da pluma num tempo t e uma profundidade z fixa)
Dim t, z As Single
t = Cells(6, 5)
z = Cells(17, 5)

'Condições de Contorno e Iniciais
Range("F47:T47") = 0
Range("U47:AE47") = 1

```

```
Range("AF47:AT47") = 0
```

```
'Inicio do Contador
```

```
For j = 6 To 46
```

```
For i = 48 To 77
```

```
y = Cells(46, j)
```

```
x = Cells(i, 5)
```

```
Dim k As Double
```

```
k = 60
```

```
serie = 0
```

```
For n = 0 To k
```

```
For m = 0 To k
```

```
namda = (WorksheetFunction.Pi() * n) / W
```

```
eta = (WorksheetFunction.Pi() * m) / L
```

```
Dim Om1, Pn1 As Single
```

```
Om1 = (z2 - z1) / L
```

```
Pn1 = (y2 - y1) / W
```

```
Dim Lmn, Pn, Om As Single
```

```
If n = 0 And m = 0 Then
```

```
Lmn = 0.5
```

```
Om = Om1
```

```
Pn = Pn1
```

```
ElseIf n > 0 And m = 0 Then
```

```
Lmn = 1
```

```
Om = Om1
```

```
Pn = (Sin(namda * y2) - Sin(namda * y1)) / (n * WorksheetFunction.Pi())
```

```
ElseIf n = 0 And m > 0 Then
```

```
Lmn = 1
```

```
Om = (Sin(eta * z2) - Sin(eta * z1)) / (m * WorksheetFunction.Pi())
```

```
Pn = Pn1
```

```

Else
Lmn = 2
Om = (Sin(eta * z2) - Sin(eta * z1)) / (m * WorksheetFunction.Pi())
Pn = (Sin(namda * y2) - Sin(namda * y1)) / (n * WorksheetFunction.Pi())
End If

'Factor de Bear
Dim Be As Single
Be = Sqr(Vxr ^ 2 + (4 * ax * Vxr) * ((namda ^ 2 * ay * Vxr) + (eta ^ 2 * az
* Vxr) + lambda))

'Ecuacion de Wexler
Dim AA, CC, f0, f1, f2 As Single
AA = (x * (Vxr - Be)) / (2 * ax * Vxr)
CC = (x * (Vxr + Be)) / (2 * ax * Vxr)
f0 = Lmn * Om * Pn * Cos(namda * y) * Cos(eta * z)
f1 = Exp(AA) * GerfC((x - (Be * t)) / (2 * Sqr(ax * Vxr * t)))
f2 = Exp(CC) * GerfC((x + (Be * t)) / (2 * Sqr(ax * Vxr * t)))
serie = (f0 * (f1 + f2)) + serie
Next m
Next n
Cells(i, j) = serie
Next i
Next j
End Sub

```

A.5 SOLUÇÃO NUMÉRICA UNIDIMENSIONAL PELO METODO DAS DIFERENÇAS FNITAS DA EQUAÇÃO ADVECTIVA DISPERSIVA REATIVA

Ver Tabela A.I(c)

Sub difinitasADR()

'Condições Iniciais e de Contorno

Range("J8", "J400") = 1

Range("K8", "BD8") = 0

'Discretização do Tempo e Espaço

Dim Dx, Dt As Single

Dx = Range("E9")

Dt = Range("E10")

'Parâmetros de Entrada

'Concentração da Fonte

c0 = Cells(5, 5)

'Parâmetros Hidrogeológicos

'Parâmetros Hidráulicos

Dim Kx, Vx As Double

Dim i, h, ne, B As Integer

h = Cells(13, 5) 'Espessura do Liner

B = Cells(15, 5) 'Espessura do Chorume

i = Cells(16, 5)

If h > 0 Then

Cells(16, 5) = (h + B) / h

End If

Vx = Cells(17, 5)

ne = Cells(14, 5)

'Parâmetros Dispersividade

Dim Dhx As Double

Dhx = Cells(19, 5) 'dispersividade longitudinal

'Parâmetros de Adsorção

Dim p, Kd, R As Double

p = Cells(21, 5) 'densidade especifica seca

Kd = Cells(22, 5) 'Coeficiente de distribuicao

R = Cells(23, 5) 'coeficiente de retardo

'Condições de Estabilidade

```

Cells(25, 5) = ((Vx / R) * Dt) / Dx 'Numero de Courant (C)
C = Cells(25, 5)
Cells(26, 5) = ((Dhx / R) * Dt) / Dx ^ 2 'Numero de Neumann (N)
N = Cells(26, 5)
If Cells(25, 5) <= 1# Then
Cells(25, 6) = "Estavei"
Else
Cells(25, 6) = "Inestavei"
End If
If Cells(26, 5) <= 0.5 Then
Cells(26, 6) = "Estavei"
Else
Cells(26, 6) = "Inestavei"
End If
'Calculo Numero de Peclet
Pe = ((Vx / R) * Dx) / (Dhx / R)
Cells(28, 5) = Pe
'Calculo da Concentração
'Calculo das funções
f1 = 1
f2 = ((1 / N) - 2 + Pe)
f3 = (1 - Pe)
For j = 10 To 55
For i = 8 To 399
Cells(i + 1, j + 1) = ((f1 * Cells(i, j)) + (f2 * Cells(i, j + 1)) + (f3 *
Cells(i, j + 2))) * N
Next i
Next j
End Sub

```

Tabela A.I. Localização e referencia das células utilizadas nas diferentes programações em Visual Basic ® aplicadas a Microsoft Excel ®. (a) Solução analítica de Ogata & Banks (1968) e Bear (1979) (b) Solução analítica de Domenico (1987) (c) Solução analítica de Cleary & Ungs (1978)

	A	B	C	D	E	F
1						
2						
3						
4	PARÂMETROS DE ENTRADA					
5	CONCENTRAÇÃO DA FONTE					
6	Concentração inicial	C_0	0	mg/m^3		
7	Tempo de Análise	t	85	d		
8	DIMENSÕES DA FONTE					
9	Longitud estudada	x	0.1	m		
10	PARAMETROS HIDROGEOLOGICOS					
11	Condutividade Hidraulica	K_x	0	m/d		
12	Espessura do Liner	h	0	m		
13	Porosidade	n	0.39	--		
14	Espessura do Chorume	B	0	m		
15	Gradiente	i	1	m/m		
16	Velocidade de infiltração	v_x	0.2066	m/d		
17	PARAMETROS DE DISPERSIVIDADE					
18	Dispersividade Long.	α_x	0.0091	m		
19	PARAMETROS DE ADSORÇÃO					
20	Densidad especifica seca	ρ	1640	Kg/m^3		
21	Coefficiente de distribuição	K_d	0.0091	m^2/kg		
22	Coefficiente de Retardo	R	39.379	--		
23	DEGRADAÇÃO					
24	Decaimento Radioativo	λ	0	--		

(a)

	A	B	C	D	E	F
1						
2						
3						
4	PARÂMETROS DE ENTRADA					
5	CONCENTRAÇÃO DA FONTE					
6	Concentração inicial	C_0	1	mg/m^3		
7	Tempo de Análise	t	43800	d		
8	DIMENSÕES DA FONTE					
9	Comprimento da Fonte	Y	240	m		
10	Largura Fonte	Z	100	m		
11	Longitud estudada	x	1250	m		
12	Profundidade Fonte	z	0	m		
13	PARAMETROS HIDROGEOLOGICOS					
14	Condutividade Hidraulica	K_x	0	m/d		
15	Espessura do Liner	L	0	m		
16	Porosidade	n	0.43	--		
17	Espessura do Chorume	B	0	m		
18	Gradiente	i	1	m/m		
19	Velocidade de infiltração	v_x	0.207	m/d		
20	PARAMETROS DE DISPERSIVIDADE					
21	Dispersividade Long.	α_x	113.25	m		
22	Dispersividade Trans. Ho	α_y	11.33	m		
23	Dispersividade Trans. Ve	α_z	1.13	m		
24	PARAMETROS DE ADSORÇÃO					
25	Densidad especifica seca	ρ	1640	Kg/m^3		
26	Coefficiente de distribuição	K_d	0.0101	m^2/kg		
27	Coefficiente de Retardo	R	39.368	--		
28	DEGRADAÇÃO					
29	Decaimento Radioativo	λ	0	--		

(b)

	A	B	C	D	E	F
1						
2						
3						
4	PARÂMETROS DE ENTRADA					
5	CONCENTRAÇÃO DA FONTE					
6	Concentração inicial	C_0	1	mg/m^3		
7	Tempo de Análise	t	43800.0	d		
8	DIMENSÕES DA FONTE					
9	Comprimento do Aquífero	l'	960.0	m		
10	Largura do Aquífero	L	960.0	m		
11	Comprimento da fonte	Y'	240.0	m		
12	Largura da Fonte	Z'	100.0	m		
13	Comp. Inferior da fonte	Y''	360.00			
14	Comp. Superior da fnte	Z''	600.00			
15	Larg. Inferior da fonte	Z''	430.00			
16	Larg. Superior da fnte	Z''	530.00			
17	Profundidade Fonte	x	1250.0	m		
18	Punto de evaluacion	z	480.0	m		
19	PARAMETROS HIDROGEOLOGICOS					
20	Condutividade Hidraulica	K_x	0.00	m/d		
21	Espessura do Liner	h	0.00	m		
22	Porosidade	n	0.39	--		
23	Espessura do Chorume	B	0.00	m		
24	Gradiente	i	1.00	m/m		
25	Velocidade de infiltração	v_x	0.207	m/d		
26	PARAMETROS DE DISPERSIVIDADE					
27	Dispersividade Long.	α_x	113.25	m		
28	Dispersividade Trans. Hor.	α_y	11.33	m		
29	Dispersividade Trans. Vert.	α_z	1.13	m		
30	PARAMETROS DE ADSORÇÃO					
31	Densidad especifica seca	ρ	1640	Kg/m^3		
32	Coefficiente de distribuição	K_d	0.009127	m^2/kg		
33	Coefficiente de Retardo	R	39.3789	--		
34	DEGRADAÇÃO					
35	Decaimento Radioativo	λ	0.00	--		

(d)

	A	B	C	D	E	F
1						
2						
3						
4	PARÂMETROS DE ENTRADA					
5	CONCENTRAÇÃO DA FONTE					
6	Concentração inicial	C_0		mg/m^3		
7	PARÂMETROS DE DISCRETIZAÇÃO DA MALHA					
8	Longitud estudada	x	0.1	m		
9	Tempo de Análise	t	85	d		
10	Pasos No espaço	Δx	0.00250	m		
11	Pasos No tempo	Δt	0.0680	d		
12	PARAMETROS HIDROGEOLOGICOS					
13	Condutividade Hidraulica	K_x	0	m/d		
14	Espessura do Liner	h	0	m		
15	Porosidade	n	0.43	--		
16	Espessura do Chorume	B	0	m		
17	Gradiente	i	1	m/m		
18	Velocidade de infiltração	v_x	0.2066	m/d		
19	PARAMETROS DE DISPERSIVIDADE					
20	Coef de Dis Long o Disper M	Dhx	0.0008	m^2/d		
21	PARAMETROS DE ADSORÇÃO					
22	Densidad especifica seca	ρ	1560	Kg/m^3		
23	Coefficiente de distribuição	K_d	0.0048	m^2/kg		
24	Coefficiente de Retardo	R	18.414	--		
25	CONDIÇÕES DE ESTABILIDADE					
26	Numero de Courant	C	0.31	<i>Estavei</i>		
27	Numero de Neumann	\mathcal{N}	0.50	<i>Estavei</i>		
28	NUMERO DE PECLET					
29	Numero de Peclet	P_e	0.6158			

(c)

A.6 SOLUÇÃO NUMÉRICA BIDIMENSIONAL PELO METODO DOS ELEMENTOS FINITOS DA EQUAÇÃO ADVECTIVA DISPERSIVA REATIVA

TITLE 'ANÁLISE BIDIMENSIONAL DIFUSÃO-ADVECÇÃO REATIVO'

VARIABLES

c(0.01) {Acuracia da concentração}

SELECT ERRLIM=0.001

COORDINATES

cartesian3

DEFINITIONS

!Dimensões da fonte contaminante

B=240 {corresponde à dimensão Y da fonte (m)}

LE=2000 {corresponde ao comprimento de estudo X (m)}

T1=43800 {corresponde ao tempo da análise (dias)}

V=0.207 {velocidade advectiva direção x m/dias}

D1=23.4428 {Coeficiente de dispersão longitudinal m²/dia}

D2=2.34428 {Coeficiente de dispersão transversal m²/dia}

R=39.368 {Coeficiente de retardo}

M = 1*upulse(y-1.5*B,y-2.5*B) {superfície de fluxo de contaminante}

INITIAL VALUES

c = 0

EQUATIONS

$(D1/R)*dxx(c)+(D2/R)*dyy(c) - (V/R)*dx(c) = dt(c)$

EXTRUSION

surface 'Base' z=-0.4*B

layer 'Medio'

surface 'Terreno' z=0

BOUNDARIES

REGION 1

```

start(0,0)
value(c) = 0 line to (LE,0)
value(c) = 0 line to (LE,4*B)
value(c) = 0 line to (0,4*B)
Value (c)=0 line to (0,2.5*B)
natural(c) = M*(1-c) line to (0,1.5*B)
value (c)=0 line to close
FEATURE      { Localizacion dA fonte }
start (0.001,1.5*B) line to (0.001,2.5*B)
TIME 0 to T1 by 100

```

PLOTS

```

for t=T1
elevation(c) from (0,2*B) to (LE,2*B)
table(c) from (0,2*B) to (LE,2*B)
contour(c) on z=0
contour(c) on z=-0.4*B
Surface(c) on z=0

```

END