



Estudo do Fluxo da Água e do Transporte de Contaminantes em Aquíferos Subterrâneos

Capitão-Tenente (EN) Roberto Cruxen Daemon D'Oliveira

Ajudante da Divisão de Estruturas da DOCM. Graduado em Engenharia Civil pela Universidade Federal do Rio de Janeiro. Mestrando em Engenharia de Transporte pelo Instituto Militar de Engenharia.

Colaboradores: *Carolina Ferreira Reis, Graduada em Engenharia Civil; Marcelo de Miranda Reis, Graduado em Engenharia Civil e Carlos Alexandre Bastos de Vasconcellos, Graduado em Engenharia Civil*

O presente artigo tem por objetivo comparar soluções numéricas utilizando o método de diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF), com soluções analíticas para a equação de advecção-dispersão relacionada ao problema de infiltração de um contaminante pontual e instantâneo em aquíferos subterrâneos. Diversos exemplos são apresentados, mostrando a convergência e acurácia dos métodos numéricos em relação à solução analítica.

Introdução

A partir da década de 80, com o aumento da preocupação ambiental, as atenções no campo da modelagem de águas subterrâneas se voltaram para a contaminação dessas águas. Auxiliados pelos computadores, pesquisadores puderam tentar prever o comportamento desses contaminantes nos aquíferos, a fim de minimizar os danos provocados e/ou eliminá-los (Feitosa e Filho, 1997).

Tal previsão pode ser realizada por meio de modelos matemáticos que representam a realidade, os quais utilizam o método dos elementos finitos (MEF) e/ou método das diferenças finitas (MDF) para resolver as equações diferenciais que

governam tais fenômenos físicos. Tendo em vista a importância do método no auxílio à preservação dos aquíferos, este artigo utiliza-se de métodos computacionais para a resolução de modelagens matemáticas por MEF e MDF, a fim de compará-las com o método analítico e propor a solução mais adequada a problemas de campo reais.

Transporte de Contaminantes por Advecção-Dispersão

O transporte por advecção é aquele em que sólidos dissolvidos ou calor são transportados à mesma velocidade da água do aquífero. Esse termo é preferido à convecção, pois, sendo rigoroso, convecção se refere à

movimentação de fluidos devido às diferenças de temperatura.

Outra maneira de movimentação de contaminantes em águas subterrâneas é a dispersão. Essa se refere à mistura e ao espalhamento causado em parte por difusão molecular e em parte por variações na velocidade, intrínsecas ao meio poroso. Em muitos problemas de campo, esse fator pode ser desprezado devido à heterogeneidade de grande escala do aquífero. Nesse caso, a dispersão ocorre pela movimentação seletiva do contaminante em volta das unidades menos permeáveis (Freeze e Cherry, 1979).

Se um traçador for injetado instantaneamente em um campo de fluxo uniforme, o mesmo se dispersa na direção do fluxo (longitudinal) e na direção perpendicular ao fluxo (transversal). Neste caso, ocorrerá uma maior dispersão na direção longitudinal do que na transversal. A Figura 1 mostra que o ponto inicial toma forma de uma nuvem elíptica, cuja concentração diminui a partir do centro seguindo a distribuição Gaussiana e o centro da nuvem representa o ponto inicial deslocado apenas por advecção. As distribuições de concentração longitudinal e transversal na elipse são mostradas pela superposição dos gráficos (Wang e Anderson, 1982).

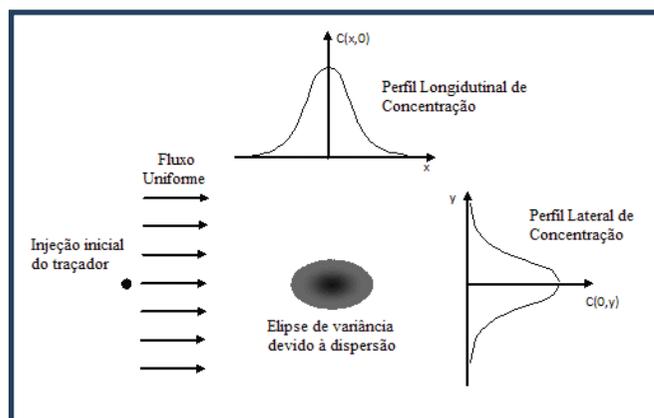


Figura 1 - Dispersão de um ponto de fonte instantânea em um campo de fluxo uniforme.

Equação de Governo

Segundo Bear (1972, 1979), a dispersão de um contaminante em um aquífero é devida principalmente à heterogeneidade do meio, sendo, portanto, um resultado da existência de uma distribuição estatística dos caminhos do escoamento dentro das heterogeneidades locais.

Considere um campo de escoamento na qual a velocidade média linear tem as componentes v_x e v_y . O traçador é deslocado pelo fluxo de campo e ainda sofre dispersão. A velocidade microscópica em qualquer ponto do aquífero pode variar da velocidade linear média. As componentes v_x^* e v_y^* da velocidade microscópica relativa às componentes da velocidade média (v_x e v_y) representam o movimento dispersivo.

A massa de fluxo é a quantidade de massa que cruza uma unidade de área perpendicular ao movimento do fluxo por unidade de tempo. A massa de fluxo dispersivo é a massa de fluxo que resulta das componentes de velocidade v_x^* e v_y^* . Em um volume infinitesimal sobre um ponto do aquífero, a descarga específica do mesmo através de uma face perpendicular à direção x é nv_x^* , em que n é a porosidade. Se C é a concentração do contaminante como uma massa por unidade de volume de água, então a massa dispersiva de fluxo na direção x será:

$$f_x^* = nCv_x^* \quad (1)$$

Similarmente, o fluxo dispersivo na direção y é dado por:

$$f_y^* = nCv_y^* \quad (2)$$

Define-se a componente longitudinal e transversal do coeficiente de dispersão para um campo de fluxo uniforme na direção x em que $v_x = \bar{v}_x$ e $v_y = 0$. A componente longitudinal do coeficiente de dispersão é definida por analogia à Lei de Fick de difusão. Especificamente, o fluxo dispersivo é considerado proporcional

ao gradiente da concentração na direção de escoamento vezes a porosidade, ou seja,

$$nCv_x^* = -nD_L \frac{\partial C}{\partial x} \quad (3)$$

Analogamente, a componente transversal D_T do coeficiente de dispersão pode ser definida como:

$$nCv_y^* = -nD_T \frac{\partial C}{\partial y} \quad (4)$$

A massa total de fluxo na direção x (f_x) é a soma dos fluxos advectivos e dispersivos. Desta forma:

$$f_x = n(C\bar{v}_x + Cv_x^*) \quad (5)$$

Considerando a hipótese de fluxo uniforme na direção x implica que a massa total de fluxo na direção y é devida apenas ao fluxo dispersivo, logo:

$$f_y = nCv_y^* \quad (6)$$

O princípio da conservação de massa requer que o operador divergente do fluxo seja igual à taxa de decréscimo da concentração de soluto por unidade de volume do aquífero. Assim, tem-se que:

$$\frac{\partial f_x}{\partial x} + \frac{\partial f_y}{\partial y} = -n \frac{\partial C}{\partial t} \quad (7)$$

A multiplicação da derivada da concentração de soluto no lado direito da equação pela porosidade visa a representar a variação da massa de soluto por unidade de volume do aquífero, ao invés de por unidade de volume de água, pois a concentração é definida pela massa de soluto por volume de água.

Aplicando as Eqs. (3), (4), (5) e (6) na Eq. (7), obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(nD_L \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(nD_T \frac{\partial C}{\partial y} \right) - \frac{\partial}{\partial x} (nC\bar{v}_x) = n \frac{\partial C}{\partial t} \quad (8)$$

Para um meio homogêneo em um campo de fluxo uniforme, o coeficiente de dispersão e a porosidade são independentes da posição. Desta forma, a Eq. (8) torna-se:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \bar{v}_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (9)$$

Método Numérico

Nesta seção serão apresentadas as formulações dos métodos de elementos finitos e diferenças finitas para a discretização da Eq. (9). Para fins de comparação dessas formulações será utilizado para a aproximação temporal o método de Euler explícito, sendo verificado o critério de convergência.

Método de Elementos Finitos

Este método numérico baseia-se no método de Galerkin, cuja soma dos resíduos da solução aproximada \hat{C} dentro do domínio Ω , ponderados pelas funções de interpolação nodais $N_L(x,y)$, é definida como sendo nula. Isto pode ser descrito com a seguinte expressão (Bathe, 1996):

$$\iint_{\Omega} \left(D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_T \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - \bar{v}_x \frac{\partial C}{\partial x} - \frac{\partial C}{\partial t} \right) N_L(x,y) dx dy \quad (10)$$

onde $L = 1, 2, \dots, N$; sendo N o número de nós do domínio Ω . Considerando um elemento quadrangular de nós $ijmn$, a solução aproximada dentro desse elemento é a interpolação dos valores nodais, logo:

$$\hat{C}(x,y,t) = N_i^e(x,y)C_i(t) + N_j^e(x,y)C_j(t) + N_m^e(x,y)C_m(t) + N_n^e(x,y)C_n(t) \quad (11)$$

Os termos da segunda derivada são integrados por partes e a integração sobre o domínio do problema é feita elemento por elemento da seguinte forma:

$$\sum_e \left\{ \iint_e \left(D_L \frac{\partial \hat{C}^e}{\partial x} \frac{\partial N_L}{\partial x} + D_T \frac{\partial \hat{C}^e}{\partial y} \frac{\partial N_L}{\partial y} + \bar{v}_x \frac{\partial \hat{C}^e}{\partial x} N_L + \frac{\partial \hat{C}^e}{\partial t} N_L \right) dx dy \right\}$$

$$= \int_{\Gamma} \left(D_L \frac{\partial \hat{C}}{\partial x} n_x + D_T \frac{\partial \hat{C}}{\partial y} n_y \right) N_L d\Gamma, \quad (12)$$

onde Γ é o contorno do domínio Ω e $\bar{n} = (n_x, n_y)$ é o vetor unitário na direção normal ao contorno considerado.

O sistema de equações representadas pela Eq.(12) pode ser escrito na forma matricial da seguinte forma:

$$([D] + [U])\{C\} + [P] \left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\} = \{f\} \quad (13)$$

em que $\{C\}$ é o vetor das concentrações nodais, $\{\partial C/\partial t\}$ é o vetor derivada temporal das concentrações nodais, $[D]$ é a matriz dispersão, $[U]$ é a matriz advectiva e a matriz $[P]$ corresponde à capacidade de dispersão do aquífero. Além disso, o vetor $\{f\}$ corresponde aos fluxos prescritos no contorno e as fontes de concentração no domínio.

O termo da derivada da concentração em relação ao tempo é aproximado através do método de Euler explícito por meio da expressão:

$$\left\{ \frac{\partial C}{\partial t} \right\} = \frac{1}{\Delta t} (\{f\}^{n+\Delta t} - \{f\}^n) \quad (14)$$

Método de Diferenças Finitas

Este método numérico consiste em discretizar a própria equação que governa o fenômeno físico em estudo. Para isso, será introduzida a seguinte notação:

$$C(x,y,t) = C(i\Delta x, j\Delta y, n\Delta t) \equiv C_{ij}^n \quad (15)$$

Aplicando-se na Eq. (9) o esquema de diferenças finitas de Euler avançado no tempo e centrado no espaço, obtém-se:

$$D_L \frac{C_{i+1,j}^n - 2C_{ij}^n + C_{i-1,j}^n}{(\Delta x)^2} + D_T \frac{C_{i,j+1}^n - 2C_{ij}^n + C_{i,j-1}^n}{(\Delta y)^2}$$

$$- \bar{v}_x \frac{C_{i+1,j}^n - C_{i-1,j}^n}{2\Delta x} = \frac{C_{ij}^{n+1} - C_{ij}^n}{\Delta t} \quad (16)$$

cujo erro de truncamento é $O[\Delta t, (\Delta x)^2]$, ou seja, primeira ordem no tempo e segunda ordem no espaço. Colocando a concentração no passo de tempo (n+1) em evidência, a Eq. (16) pode ser reescrita como:

$$C_{ij}^{n+1} = C_{ij}^n - (c/2) \cdot (C_{i+1,j}^n - C_{i-1,j}^n) + r_x \cdot (C_{i+1,j}^n - 2C_{ij}^n - C_{i-1,j}^n)$$

$$+ r_y \cdot (C_{i,j+1}^n - 2C_{ij}^n + C_{i,j-1}^n) \quad (17)$$

onde os coeficientes c (número de Courant), r_x e r_y são definidos por:

$$c = (v_x \Delta t / \Delta x); \quad r_x = (D_L \Delta t / (\Delta x)^2); \quad e \quad r_y = (D_T \Delta t / (\Delta y)^2) \quad (18)$$

Segundo Özişik (1994), aplicando-se a análise de Fourier para estabelecer o critério de estabilidade do presente método numérico tem-se:

$$c \leq 1; \quad r_x \leq 1/2; \quad e \quad r_y \leq 1/2 \quad (19)$$

Exemplos Numéricos

Dois exemplos são apresentados para ilustrar a metodologia empregada nesse trabalho. O objetivo do problema é simular a dispersão em um campo de fluxo uniforme e unidirecional, recaindo na seguinte equação diferencial apresentada na Eq. (9).

Considerando $D_T = 0$, a Eq. (9) torna-se unidimensional e pode ser escrita como:

$$D_L \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - \bar{v}_x \frac{\partial C}{\partial x} = \frac{\partial C}{\partial t} \quad (20)$$

sendo a condição inicial e as condições de contorno definidas por:

$$\begin{cases} C(x,0) = 0, & \forall x \\ C(0,t) = C_0, & \text{para } t > 0 \\ C(\infty,t) = 0, & \text{para } t > 0 \end{cases} \quad (21)$$

A solução analítica do problema estabelecido pela Eq. (20) e condições apresentadas na Eq. (21) apresentada por Ogata e Banks (1961) é:

$$C(x,t) = \frac{C_0}{2} \left\{ \exp\left(\frac{\bar{v}_x x}{D_L}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{x+\bar{v}_x t}{2\sqrt{D_L t}}\right) + \operatorname{erfc}\left(\frac{x-\bar{v}_x t}{2\sqrt{D_L t}}\right) \right\} \quad (22)$$

onde a função erro complementar $\operatorname{erfc}(z)$ é definida por:

$$\operatorname{erfc}(z) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_z^{\infty} e^{-u^2} du \quad (23)$$

Exemplo 1

Neste exemplo, será considerado o domínio $0 \leq x \leq 100m$ e $0 < t \leq 400$ dias, velocidade média do fluxo igual a $v_x = 0.1$ m/dia e o coeficiente de dispersão longitudinal igual a $D_T = 1.0$ m²/dia. A fim de observar a convergência dos métodos, baseado no critério de estabilidade da Eq. (18), foram testados três casos com malhas e intervalos de tempo diferentes:

- caso 1a: $\Delta x = 10.0$ m e $\Delta t = 5.0$ dias;
- caso 1b: $\Delta x = 1.0$ m e $\Delta t = 10.0$ dias; e
- caso 1c: $\Delta x = 5.0$ m e $\Delta t = 20.0$ dias.

A seguir as Fig. 2, 3 e 4 mostram a simulação numérica desses três casos:

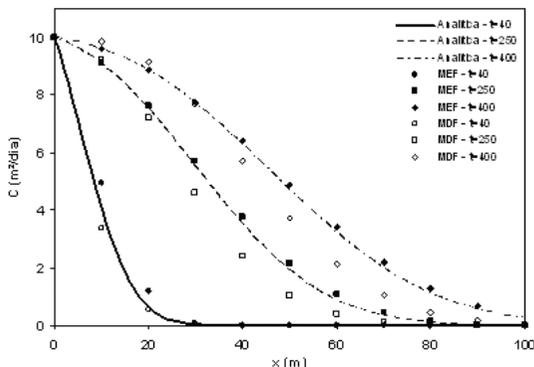


Figura 2 - Concentração ao longo do eixo x para o caso 1a

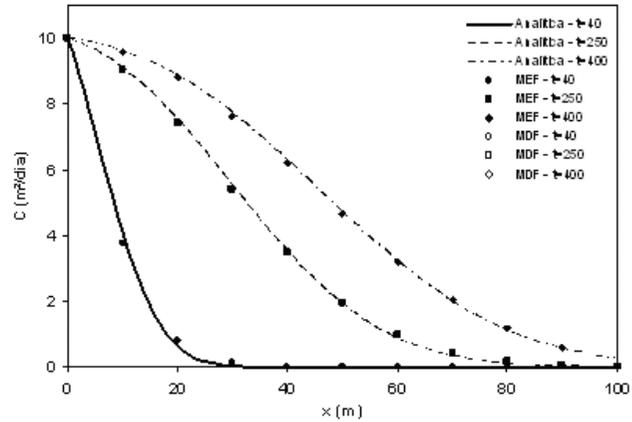


Figura 3 - Concentração ao longo do eixo x para o caso 1b.

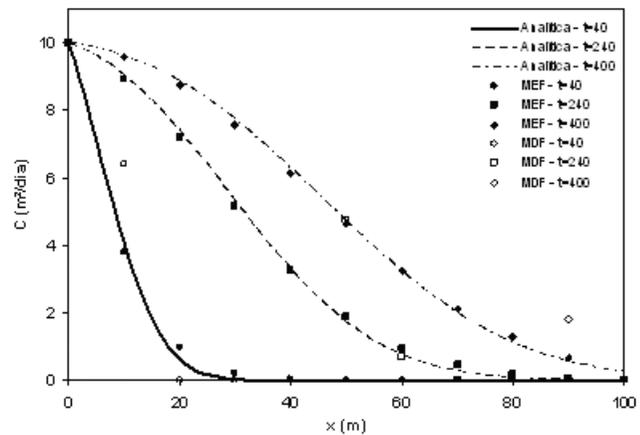


Figura 4 - Concentração ao longo do eixo x para o caso 1c.

Exemplo 2

Neste exemplo, será considerado o domínio $0 \leq x \leq 200m$ e $0 < t \leq 500$ dias, fixou-se um tamanho de malha espacial de $\Delta x = 10.0$ m e intervalo de tempo igual a $\Delta t = 100.0$ dias. A fim de observar a convergência dos métodos, baseado no critério de estabilidade da Eq. (18), foram testados três casos com coeficientes físicos diferentes:

- caso 2a: $v_x = 0.1$ m/dia e $D_L = 0.5$ m²/dia ;
- caso 2b: $v_x = 0.1$ m/dia e $D_L = 0.1$ m²/dia ; e
- caso 2c: $v_x = 0.2$ m/dia e $D_L = 0.1$ m²/dia.

A seguir as Fig. 5, 6 e 7 mostram a simulação numérica desses três casos:

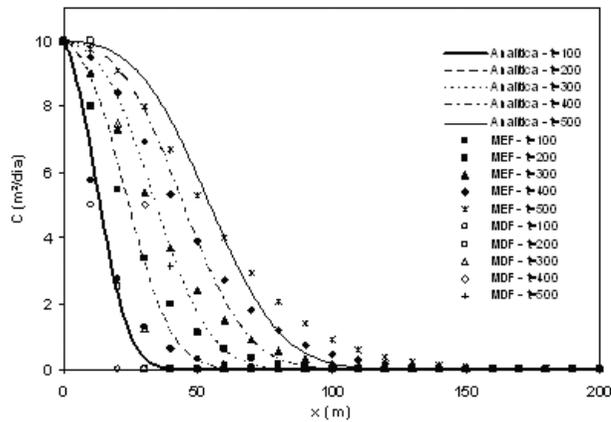


Figura 5 - Concentração ao longo do eixo x para o caso 2a.

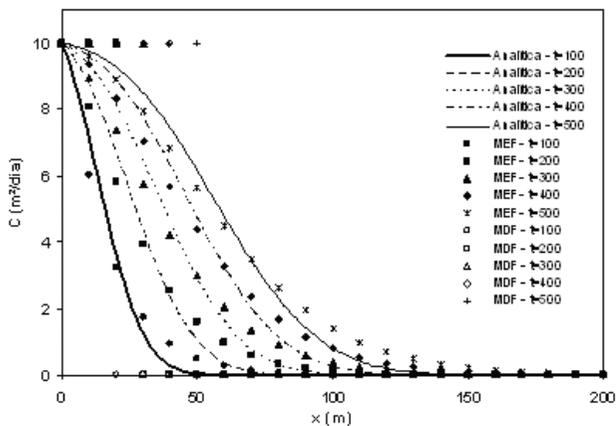


Figura 6 - Concentração ao longo do eixo x para o caso 2b.

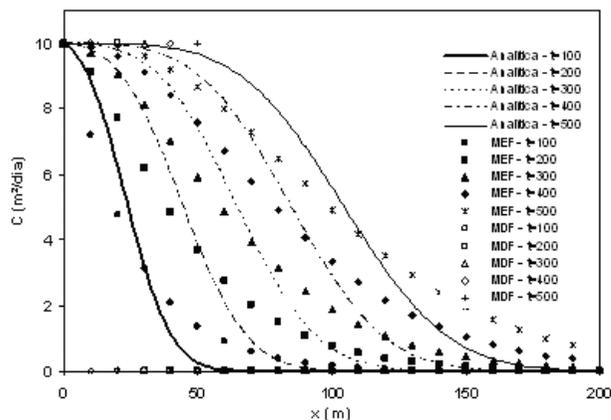


Figura 7 - Concentração ao longo do eixo x para o caso 2c.

Conclusões

Da análise dos resultados apresentados pode-se observar que o MDF apenas convergiu no caso 1a, onde o critério de convergência apresentado na Eq. (19) foi atendido pelos dados da simulação. No caso 2a, embora o critério também fosse atendido, o MDF não convergiu devido ao passo de tempo ser relativamente grande.

Por outro lado, o MEF apresentou excelentes resultados para todos os casos dos exemplos 1 e 2, convergindo em todos os casos simulados, tendo perdido precisão apenas nos tempos $t = 400$ dias e $t = 500$ dias do exemplo 2.

Portanto, o presente artigo pode comparar soluções numéricas utilizando o MDF e o MEF com soluções analíticas para a equação de advecção-dispersão para o problema de infiltração de um contaminante pontual e instantâneo em aquíferos subterrâneos, concluindo que o MEF apresenta uma formulação mais robusta, mesmo utilizando um esquema de avanço no tempo de primeira ordem.

É certo que a presente pesquisa avançará, no tempo, assim como outros esquemas usuais da literatura, tais como Crank-Nicolson e Runge-Kutta (Wood, 1990), que são de ordem mais elevadas, e esquemas mais recentes, tal como a Aproximação Explícita de Green (Vasconcellos, 2008), que ainda não foi aplicada para a equação de advecção-dispersão.

Referências

- Bathe, K.J., 1996. *Finite Element Procedures in Engineering Analysis*. 2 Ed., Prentice-Hall: Englewood Cliffs, New Jersey, USA.
- Bear J., 1972. *Dynamics of Fluids in Porous Media*. Elsevier, New York, USA.
- Bear J., 1979. *Hydraulics of Groundwater*. McGraw-Hill, Inc., Haifa, Israel.
- Feitosa, F.A.C. e Filho, J.M., 1997. *Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações*, CPRM, LABHID-UFPE, Fortaleza-CE, Brasil.
- Freeze, R.A. e Cherry, J.A., 1979. *Groundwater*. Englewood Cliffs, N.J.: Prentice-Hall.
- Ogata, A. e Banks, R.B., 1961, *A Solution of the Differential Equation of Longitudinal Dispersion in Porous Media*. U.S. Geol. Survey Professional Paper 411-A, 7 pp.
- Özişik, M.N., 1994. *Finite Difference Methods in Heat Transfer*. CRC Press, Inc. Florida, USA.
- Vasconcellos, C.A.B., 2008. *Modelagem de Águas Subterrâneas utilizando a Aproximação Explícita de Green e o Método dos Elementos Finitos*, Tese de Doutorado, COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil.
- Wang, H.F. e Anderson, M.P., 1982. *Introduction to Groundwater Modeling: Finite Difference and Finite Element Methods*, Academic Press, Inc., San Diego, USA.
- Wood, W.L., 1990. *Practical Time Stepping Schemes*. Clarendon Press, Oxford, USA.