**UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO
ESCOLA DE ENGENHARIA DE SÃO CARLOS
DEPARTAMENTO DE HIDRÁULICA E SANEAMENTO
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM CIÊNCIAS DA ENGENHARIA AMBIENTAL**

MARIA DE LOURDES PIMENTEL PIZARRO

**Simulação de Fluxo de Água e Transporte de Solutos na Zona
Não-Saturada do Solo pelo Método de Elementos Finitos Adaptativo**

**São Carlos
2009**

MARIA DE LOURDES PIMENTEL PIZARRO

**Simulação de Fluxo de Água e Transporte de Solutos na Zona
Não-Saturada do Solo pelo Método de Elementos Finitos Adaptativo**

Tese apresentada à Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São Paulo como parte dos requisitos para a obtenção do Título de Doutor em Ciências da Engenharia Ambiental

Área de concentração: Ciências da Engenharia Ambiental

Orientador: Prof. Assoc. Edson Cezar Wendland

São Carlos
2009

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, por qualquer meio convencional ou eletrônico, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Ficha catalográfica preparada pela Seção de Tratamento
da Informação do Serviço de Biblioteca – EESC/USP

P695s Pizarro, Maria de Lourdes Pimentel
Simulação de fluxo de água e transporte de solutos na
zona não-saturada do solo pelo método de elementos
finitos adaptativo / Maria de Lourdes Pimentel Pizarro ;
orientador Edson Cezar Wendland. -- São Carlos, 2009.

Tese (Doutorado-Programa de Pós-Graduação e Área de
Concentração em Ciências da Engenharia Ambiental) --
Escola de Engenharia de São Carlos da Universidade de São
Paulo, 2009.

1. Zona não-saturada. 2. Equação de Richards.
3. Equação de advecção-dispersão. 4. Modelo numérico.
5. Chorume. 6. Aterro sanitário. 7. Método de elementos
finitos. I. Título.

FOLHA DE JULGAMENTO

Candidata: Licenciada MARIA DE LOURDES PIMENTEL PIZARRO.

Tese defendida e julgada em 02/10/2009 perante a Comissão Julgadora:

Prof. Associado **EDSON CEZAR WENDLAND (Orientador)**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

Aprovado

Prof. Associado **VALDIR SCHALCH**
(Escola de Engenharia de São Carlos/USP)

APROVADO

Prof. Associado **JARBAS HONÓRIO DE MIRANDA**
(Escola Superior de Agricultura "Luiz de Queiroz"/USP)

Aprovado

Prof. Dr. **LAERCIO APARECIDO LUCAS**
(Academia da Força Aérea/AFA)

APROVADO

Prof. Dr. **JOSÉ EDUARDO ALAMY FILHO**
(Universidade Federal de Uberlândia/UFU)

APROVADO

Prof. Associado **IVALDO LUIZ GAETA ESPINDOLA**
Coordenador do Programa de Pós-Graduação em
Ciências da Engenharia Ambiental

Prof. Titular **GERALDO ROBERTO MARTINS DA COSTA**
Presidente da Comissão da Pós-Graduação da EESC

**A meus pais, Maria e Vicente, a meu marido
Miguel e aos meus filhos Patrícia e Eduardo**

Dedico

AGRADECIMENTOS

A

Deus.

Prof. Dr. Edson Cezar Wendland, da Escola de Engenharia de São Carlos – USP, toda minha admiração, gratidão e reconhecimento na orientação deste trabalho.

Minha família que, com dedicação e carinho, soube compreender e incentivar durante esta longa jornada.

Prof. Dr. Marcelo Pereira de Souza, da Escola de Engenharia de São Carlos – USP, pelo apoio e presteza.

Prof. Dr. Valdir Schalch, da Escola de Engenharia de São Carlos – USP, pelo apoio e colaboração.

Prof. Dr. Evaldo L. Gaeta Espíndola, da Escola de Engenharia de São Carlos – USP, pela colaboração.

M. Sc. Eng. Tiago Luís D. Forti, doutorando da Universidade de Campinas, pela preciosa contribuição no desenvolvimento do código computacional.

Me. Agnaldo Monteiro Farias, doutorando da Universidade de Campinas, pela valiosa colaboração a este trabalho.

Prof. Dr. Jarbas Honório de Miranda, doutor pela Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz” - USP, pela valiosa contribuição a este trabalho.

Me. Alessandro de Jesus Firmiano, pela amizade, companheirismo, valiosa colaboração e discussões que ajudaram na realização da pesquisa.

Prof. Dr. Laércio Aparecido Lucas, doutor pelo Instituto de Ciências Matemáticas de São Carlos – USP, pelas valiosas sugestões dadas ao trabalho.

Profa. Dra. Sônia de Almeida, doutora pelo Instituto de Química de Araraquara - UNESP, pelas sugestões a este trabalho.

Me. Carlos Alberto F. Bispo, doutorando da Escola de Engenharia de São Carlos – USP, pela colaboração.

Meus amigos da Academia da Força Aérea, que sempre estiveram presentes nos momentos difíceis.

Meus amigos do Laboratório de Hidráulica Computacional, pelo apoio e incentivo.

Seção de Pós-Graduação, em particular a Claudete e Nelson, pelo atendimento atencioso e cordial.

Ao Sistema de Bibliotecas da USP, em especial à equipe da Biblioteca Central e da Matemática, indispensável na realização deste trabalho.

CRHEA, pelo apoio institucional e pela formação multidisciplinar direcionada à proteção do meio ambiente.

Departamento de Hidráulica e Saneamento, em especial a Rose e Pavi pela atenção e presteza.

Comissão Permanente do Magistério da Aeronáutica, COPEMA, da Academia da Força Aérea, em particular ao Brig Ar Marco Antonio Carballo Perez, ao Cel Av Pedro de Carvalho e Silva, ao Prof. Dr. Leomarcos Formiga, ao Prof. Me. Antonio Luiz Ferrari e a Profa. Me. Rosângela de O. Colabone, pelo apoio e pela dispensa semanal concedida para que este trabalho pudesse ser desenvolvido.

Agradeço

RESUMO

PIZARRO, M. L. P. **Simulação de Fluxo de Água e Transporte de Solutos na Zona Não-Saturada do Solo pelo Método de Elementos Finitos Adaptativo**. 2009. 185 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

Devido aos riscos de contaminação dos recursos naturais solo e água, ao alto custo, ao tempo e ao esforço humano nas investigações de campo, os modelos matemáticos, aliados às técnicas numéricas e aos avanços computacionais, constituem uma ferramenta importante na previsão do deslocamento de solutos, contribuindo assim, para o controle de alterações ambientais. No Brasil, a modelação de fluxo e transporte de solutos na zona não-saturada é voltada, quase que exclusivamente, aos problemas relacionados às atividades agrícolas. Entretanto, tão importante quanto a problemática dos produtos químicos nas atividades agrícolas é a questão de poluição e contaminação do solo e da água por chorume, gerado pelos resíduos sólidos domiciliares. Neste trabalho, é desenvolvido e validado um modelo computacional unidimensional para simulação de fluxo e transporte de solutos na zona não-saturada do solo. O modelo matemático é dado pela equação diferencial parcial não-linear de Richards, que rege o movimento de água no solo, e a equação diferencial parcial linear de advecção-dispersão, do transporte de solutos, acompanhadas das condições iniciais e de contorno. A Equação de Richards é dada em função do potencial matricial da água e a Equação de Transporte de Solutos estima a evolução temporal da concentração de solutos no perfil do solo. Devido à dificuldade de se obter soluções analíticas destas equações, são resolvidas numericamente pelo Método de Elementos Finitos. As referidas equações são resolvidas utilizando-se malhas uniformes inicialmente. Com a finalidade de obter simulações mais eficientes, a um custo computacional reduzido, é empregada a adaptatividade com refinamento h na malha de elementos finitos. A função interpolação polinomial utilizada é de grau 2 ou maior que garante a conservação de massa. Na Equação de Richards, a derivada temporal é aproximada por um quociente de diferença finita e é aplicado o esquema de Euler Explícito e na Equação de Advecção-Dispersão, é aproximada por um quociente de diferença finita, aplicando-se o esquema de Euler Implícito, devido à linearidade da equação. O sistema operacional é o Linux Ubuntu 32 bits, o ambiente de programação é o PZ, escrito em linguagem de programação C⁺⁺. Na validação do modelo, utilizam-se dados disponíveis na Literatura. Os resultados são comparados, utilizando-se malhas uniformes e malhas adaptativas com refinamento h . Usando-se as malhas uniformes para o problema de Richards e de transporte de potássio, o tempo de execução é de 22 minutos e a memória utilizada de 6164 Kb. Com as malhas adaptadas, o tempo de execução é de 3 minutos e 27 segundos, consumindo 5876 Kb de memória. Houve, portanto, uma redução de 84,32% no tempo de execução, usando-se malhas adaptativas. A utilização da função interpolação polinomial de grau 2 ou maior e o refinamento h , permitem uma boa concordância do modelo na comparação com soluções disponíveis na Literatura.

Palavras-chave: Zona não-saturada, Equação de Richards, Equação de Advecção-dispersão, modelo numérico, chorume, aterro sanitário, Método de Elementos Finitos.

ABSTRACT

PIZARRO, M. L. P. **Simulation of Water Flow and Solute Transport in the Unsaturated Zone of the Soil by Adaptative Finite Element Method.** 2009. 185 f. Tese (Doutorado) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2009.

Due to the risks of contamination of soil and water resources, the high cost, time and human effort in the field investigations, the mathematical models, combined with numerical techniques and computational advances, are important tools in forecasting the movement of solutes thereby contributing to the control of environmental alteration. In Brazil, modeling of flow and solute transport in the unsaturated zone is focused, almost exclusively, on problems related to agricultural activities. However, as important as the problematization of chemicals products in agricultural activities is the issue of pollution and contamination of soil and water by leachate, generated by municipal solid wastes. In this work, an one-dimensional computational model for simulation of flow and solute transport in the unsaturated soil has been developed and validated. The mathematical model is given by the Richards's non-linear partial differential equation, which determines the movement of water in the soil, and the advection-dispersion linear partial differential equation, of the solute transport, together with initial and boundary conditions. The Richards equation is a function of the water pressure head and the Solute Transport equation estimate the temporal evolution of the solutes concentration in the soil profile. Due to the difficulty of obtaining analytical solutions of these equations, they are solved numerically using the Finite Element Method. The governing equations are solved using initially a uniform mesh. In order to obtain more efficient simulations with low computational cost, adaptativity with h refinement on the finite element mesh is implemented. The interpolation function is of degree two or higher, assuring mass conservation. In Richards' equation, the temporal derivative is approximated by Euler Explicit finite difference. For the advection-dispersion equation, due to the linearity of the equation, an implicit finite difference scheme is used. The code is written in the programming language C++ based on the programming environment PZ using operating system Linux Ubuntu 32 bit. Model results are validated in comparison with data available in the Literature. The results are evaluated using uniform meshes and with h refinement adaptive mesh. Using the uniform meshes for the problem of Richards and transport of potassium, the running time is 22 minutes and 6164 Kb of memory is used. With the adapted meshes, the execution time is 3 minutes and 27 seconds, consuming 5,876 Kb of memory. Therefore there was a reduction of 84.32% in execution time, using adaptive meshes. The interpolation function with degree two or higher and the h refinement, with reduction of the computation time, showed a good agreement in comparison with the Literature.

Keywords: Unsaturated Zone, Richards Equation, Advection-dispersion Equation, numerical modeling, leachate, sanitary landfill, Finite Element Method

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 -	Elemento de solo não-saturado.....	34
Figura 2 -	Esquema do experimento montado por Darcy.....	35
Figura 3 -	Etapas da modelação.....	48
Figura 4-	Aproximação por diferenças finitas para a derivada em relação ao tempo do potencial hidráulico.....	56
Figura 5 -	Discretização de domínios: A, uma dimensão; B, duas dimensões; C, três dimensões.....	64
Figura 6 -	Solução aproximada para elemento unidimensional com dois nós.....	67
Figura 7 -	Funções interpolação linear para elemento unidimensional com dois nós	68
Figura 8 -	Função teste para o nó i no Método de Galerkin.....	69
Figura 9-	Níveis de refinamento da malha.....	110
Figura 10 -	Processo de desrefinamento. a) Dois elementos filhos; b) Elemento grosso linear; c) Elemento grosso quadrático.....	112
Figura 11 -	a) Solução aproximada em uma malha uniforme refinada com 2^6 elementos e $p = 1$; b) ilustração dos nós da malha uniforme refinada com 2^6 elementos e $p = 1$	122
Figura 12 -	Comparação da solução obtida com a malha uniforme fina (2^6 elementos e $p = 1$) e a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990)....	123
Figura 13 -	a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p=1$ e $\varepsilon = 0,01$; b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.....	124
Figura 14 -	a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p=1$ e $\varepsilon = 0,001$; b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.....	125
Figura 15 -	a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\varepsilon = 0,01$; b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\varepsilon = 0,01$	127
Figura 16 -	a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\varepsilon = 0,001$; b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\varepsilon = 0,001$	128

Figura 17 -	Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 1$ e $\varepsilon = 0,001$) e a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).....	129
Figura 18 -	a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,1$; b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.....	130
Figura 19 -	a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$; b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.....	131
Figura 20 -	a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$; b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação...	132
Figura 21 -	a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$; b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$	133
Figura 22 -	a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$; b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$	134
Figura 23 -	Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$) e a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).....	136
Figura 24 -	Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$) e a solução de Prasad, Kumar e Sekhar (2001).....	137
Figura 25 -	Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$) e as soluções de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e de Prasad, Kumar e Sekhar (2001).....	137
Figura 26 -	Número de elementos da malha adaptada da Equação de Richards na iteração 1000, 2000, 3000, ..., 450000.....	140
Figura 27 -	Potencial Matricial ψ no instante final da simulação: passo de tempo 450000; 1,75 h; a) malha uniforme com 2^7 elementos e $p = 2$; b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$	141
Figura 28 -	Potencial Matricial ψ em vários instantes da simulação; a) malha uniforme com 2^7 elementos e $p = 2$; b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$	142
Figura 29 -	Umidade θ no instante final da simulação (passo de tempo 450000; 1.75h); a) malha uniforme com 2^7 elementos e $p = 2$; b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$	144

Figura 30 -	Umidade θ em vários instantes simulados; a) malha uniforme com 2^7 elementos e $p = 2$; b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$	145
Figura 31 -	Comparação do perfil de umidade obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha uniforme (2^7 elementos e $p = 2$).....	146
Figura 32 -	Comparação do perfil de umidade obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$).....	146
Figura 33 -	Número de elementos da malha adaptada do transporte de solutos nos passos de tempo 1, 2, 3,...,450.....	148
Figura 34 -	θC no instante final da simulação (passo de tempo 450; 1,75 h); a) malha uniforme com 2^6 elementos e $p = 3$; b) malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$	149
Figura 35 -	θC em vários instantes de simulação. a) malha uniforme com 2^6 elementos e $p = 3$; b) malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$	150
Figura 36 -	Concentração C no instante final da simulação (passo de tempo 450; 1,75 h). a) malha uniforme com 2^6 elementos e $p = 3$; b) malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$	152
Figura 37 -	Concentração C em vários instantes de simulação. a) malha uniforme com 2^6 elementos e $p = 3$; b) malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$	153
Figura 38 -	Comparação do perfil de concentração do íon potássio obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha uniforme (2^6 elementos e $p = 3$).....	154
Figura 39 -	Comparação do perfil de concentração do íon potássio obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha adaptada ($p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$).....	154
Figura 40 -	Curva de Regressão Linear considerando o potencial matricial na Malha Uniforme Fina e no Método de Celia, Bouloutas e Zarba.....	157

Figura 41 -	Curva de Regressão Linear com os potenciais matriciais obtidos pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) e pelo Método de Celia, Boulotas e Zarba.....	159
Figura 42 -	Curva de Regressão Linear com os potenciais matriciais obtidos pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) e pelo Método de Prasad, Kumar e Sekhar.....	160
Figura 43 -	Curva de Regressão Linear considerando a umidade obtida pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a umidade obtida experimentalmente por Miranda et al.....	161
Figura 44 -	Curva de Regressão Linear considerando a umidade obtida pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a umidade obtida por Miranda et al. (MIDI)	162
Figura 45 -	Curva de Regressão Linear da concentração de potássio do Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a concentração de potássio obtida pelo Método de Miranda et al. (Observada experimentalmente).....	163
Figura 46 -	Curva de Regressão Linear da concentração de potássio do Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a concentração de potássio obtida pelo Método de Miranda et al. (MIDI).....	164

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 -	Condutividade hidráulica de alguns materiais.....	37
Tabela 2 -	Tempo de processamento e consumo de memória na solução da Equação de Richards.....	139
Tabela 3 -	Tempo de processamento e consumo de memória na solução das Equações de Richards e de Transporte de Solutos.....	156
Tabela 4 -	Potenciais Matriciais versus Profundidade dos Métodos a serem comparados.....	157
Tabela 5 -	Potenciais Matriciais versus Profundidade dos Métodos a serem comparados.....	158
Tabela 6 -	Umidade versus Profundidade da Malha Adaptada e de Miranda et al. (2005) (Observada experimentalmente e MIDI).....	160
Tabela 7 -	Profundidade versus Concentração do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (Observada experimentalmente e MIDI).....	162

LISTA DE SIGLAS

BASIC	Beginner's All-purpose Symbolic Instructional Code
BTCs	Curvas breakthrough
CCA	Cobre, Cromo e Arsênio
CETESB	Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
CHAIN-2D	Software para escoamento não-saturado desenvolvido por Simunek e van Genuchten (1994)
CXTFIT	stands for fitting (i.e., FIT) the $C(x,t)$ (i.e., solute concentration as a function of position x and time t) to measurements
EDP	Equações Diferenciais Parciais
EPA	U.S. Environmental Protection Agency
FEMWATER	Finite Element Model of Water
FILL	Flow Investigation for Landfill
FULFILL	Software para escoamento não-saturado desenvolvido por Noble e Arnold (1991)
GMRes	Método do Resíduo Mínimo Generalizado
HELP	Hydrologic Evaluation of Landfill Performance
HYDRUS-1D	Software para escoamento não-saturado desenvolvido por Simunek, Sejna e van Genuchten (1998)
HYDRUS-2D	Software para escoamento não-saturado desenvolvido por Simunek, Sejna e van Genuchten (1999)
IBGE	Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística
IMASS-C	Simulação de Movimento de Água e Solutos no Solo, considerando a presença de Cultura
IMSL	International Mathematical and Statistical Libraries
LDL ^t	Segunda versão de Cholesky, sendo L uma matriz diagonal inferior, D uma matriz diagonal e, L^t , a transposta de L .
LRS	Leachate Recirculation Sistem
LSOR	Line Sucessive Over-Relaxation
LU	Decomposição LU, sendo L , uma matriz triangular inferior, e U , uma matriz triangular superior.

MATLAB	Matrix Laboratory
MEF	Método de Elementos Finitos
MIDI	Miscible Displacemen
MODFLOW	Flow Model
MT3D	Modular Mass Transport 3-Dimensions
MULTIMED	Multimedia Exposure Assessment Model
PELMO 1.5	Pesticide Leaching Model 1.5
PELMO 2.0	Pesticide Leaching Model 2.0
PORFLOW	Software para escoamento não-saturado desenvolvido por Runchal e Sagar (1998)
PRZM-1	Pesticide Root Zone Model - 1
PZ	Ambiente de POO (programação orientada a objeto) desenvolvido por Devloo (1997)
SEFTRAN	A Simple and Efficient Flow and Transport code
SIMASS	Simulação de Movimento de Água e Solutos no Solo
SOR	Successive Over-Relaxation
SSOR	Symmetric Successive Over-Relaxation
SSMC	State–Space Mixing Cell
SUTRA	The United States Geological Survey’s Saturated-Unsaturated Flow and Transport
TPZCompEl	Classe que implementa o Elemento Computacional
TPZGeoEL	Classe que implementa a Geometria do Elemento
TPZGeoMesh	Classe com o conjunto dos Elementos Geométricos
TPZMaterial	Classe que implementa a Formulação Integral

LISTA DE SÍMBOLOS

PZ	ambiente de programação
C ⁺⁺	linguagem de programação
η	porosidade [L ³ /L ³]
θ	umidade volumétrica [L ³ /L ³]
S	grau de saturação []
V_a	volume de água do solo [L ³]
V_v	volume de vazios ou volume de poros do solo [L ³]
Q	vazão [L ³ /T]
K	condutividade hidráulica L/T]
A	área da seção transversal [L ²]
$(h_1 - h_2)$	diferença de pressão entre os pontos 1 e 2 [L]
L	comprimento [L]
q	fluxo de água [L/T]
t	tempo [T]
H	potencial hidráulico ou potencial total da água no solo ou carga hidráulica [L]
grad H	gradiente do potencial hidráulico [L/L]
Re	número de Reynolds
k	permeabilidade intrínseca do meio poroso [L ²]
ρ	massa específica da água [M/L ³]
μ	viscosidade dinâmica do fluido [M/LT]
g	gravidade [L/T ²]
z	comprimento na direção vertical ou coordenada vertical [L]
ψ_p	componente de pressão
ψ_g	componente gravitacional
ψ_{os}	componente osmótica
ψ_m	componente matricial
P ₀	pressão que atua sobre a água padrão
C	concentração do soluto [M/L ³]
v_z	velocidade da água nos poros na direção z [L/T]

$\frac{\partial}{\partial t}$	operador de derivada parcial em relação a t
$\frac{\partial}{\partial z}$	operador de derivada parcial em relação a z
J_d	fluxo de difusão do soluto [$M/L^2 T$]
D_d	coeficiente de difusão [L^2/T]
$\frac{\partial C}{\partial z}$	gradiente de concentração [M/L^4]
$^{\circ}C$	graus Celsius
$\frac{\partial^2}{\partial z^2}$	operador de derivada parcial de segunda ordem em relação a z
D^*	coeficiente de difusão efetiva [L^2/T]
ϖ	coeficiente de tortuosidade do solo []
α	coeficiente de dispersividade dinâmica [L]
D	coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2/T]
D_l	coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal [L^2/T]
D_t	coeficiente de dispersão hidrodinâmica transversal [L^2/T]
α_l	coeficiente de dispersividade longitudinal [L]
α_t	coeficiente de dispersividade transversal [L]
d	diâmetro médio do poro [L]
β_l	valor da ordem de 1,75
β_t	valor da ordem de 0,055
S_C	quantidade de soluto []
K_d	coeficiente de distribuição [L^3/M]
R	fator de retardamento
ρ_b	densidade aparente do solo [M/L^3]
$T_{1/2}$	meia-vida
λ	coeficiente de decaimento de 1a. ordem [T^{-1}]
t_0	instante inicial [T]
t_f	instante final [T]
Δt	intervalo de tempo [T]
ϕ	variável dependente

∇^2	operador laplaciano
$\frac{\partial^2}{\partial x^2}$	operador de derivada parcial de segunda ordem em relação a x
$\frac{\partial^2}{\partial y^2}$	operador de derivada parcial de segunda ordem em relação a y
T	temperatura [$^{\circ}\text{C}$]
α_T	coeficiente de difusividade térmica do material
v_x	velocidade positiva
$\frac{\partial}{\partial y}$	operador de derivada parcial em relação a y
$\frac{\partial^2}{\partial y^2}$	operador de derivada parcial de segunda ordem em relação a y
v_y	velocidade de propagação de ϕ (variável dependente)
τ	coeficiente de dispersão de ϕ (variável dependente)
ψ	potencial matricial [L]
ψ_0	potencial matricial na posição $z = 0$ [L]
Γ_1	fronteira
q_0	fluxo inicial de água [L/T]
Γ_2	fronteira
a	constante
b	constante
c	constante
Γ_3	fronteira
$[C]$	matriz C
$\left\{ \dot{\psi} \right\}$	vetor de derivadas do potencial matricial nos nós
$[K]$	matriz K
$\{\psi\}$	vetor potencial matricial nos nós
$\{F\}$	vetor F
F	função conhecida
ψ_1	potencial matricial no nó 1 [L]

ψ_p	potencial matricial no nó p
ε	variável
ω	variável
$\{\psi\}_t$	vetor potencial matricial nos nós no instante t
$\{\psi\}_{t+\Delta t}$	vetor potencial matricial nos nós no instante $t + \Delta t$
$\{F\}_t$	vetor F no instante t
$\{F\}_{t+\Delta t}$	vetor F no instante $t + \Delta t$
$\mathfrak{D}$	operador diferencial
$\hat{\phi}$	solução aproximada
φ_i	funções interpolação
α_i	valores das variáveis nos nós
m	número de nós da malha
$R(x, y, z)$	erro ou resíduo da solução aproximada
$v(x, y, z)$	função teste
Ω	domínio do problema.
$\underline{e}$	elemento
$\hat{\phi}^{(e)}$	valor de $\hat{\phi}$, para todo elemento $\underline{e}$
$\varphi_i^{(e)}$	funções interpolação nos elementos (uma função interpolação por nó)
n	número de nós do elemento
$\underline{i}$	nó
$\underline{j}$	nó
$[\varphi^{(e)}]$	matriz formada pelas funções interpolação
$\{\alpha\}$	vetor α cujas coordenadas são os valores das variáveis em cada nó
$z_i^{(e)}$	coordenadas dos nós
$z_j^{(e)}$	coordenadas dos nós
$L^{(e)}$	comprimento do elemento $(L^{(e)} = z_j^{(e)} - z_i^{(e)})$
$H^1(\Omega)$	espaço de funções
$V(\Omega)$	espaço de funções
$\Pi^1(\Omega)$	subespaço de funções de elementos finitos

$\Pi_0^1(\Omega)$	subespaço de funções de elementos finitos
u	variável de estado
h	parâmetro relacionado à discretização da malha no refinamento
p	parâmetro relacionado à ordem dos polinômios no refinamento
$\Delta t \rightarrow 0$	símbolo de tendência: intervalo de tempo tende a zero
Δz	tamanho da variação espacial
$\Delta z \rightarrow 0$	variação do espaço tende a zero
Pe	número de Péclet
Cr	número de Courant
$K(\theta)$	condutividade hidráulica do solo não-saturado [L/T]
q_z	fluxo vertical não-saturado [L/T]
$C_s(\psi)$	capacidade hídrica específica [1/L]
$D(\theta)$	difusividade hidráulica não-saturada [L.L/T]
v	velocidade da água nos poros
A'	área da seção transversal de poros ocupados pela água
θ_i	umidade volumétrica uniforme θ_i na profundidade infinita [L ³ /L ³]
θ_0	umidade volumétrica na superfície do solo (umidade inicial) [L ³ /L ³]
ψ_s	potencial matricial na saturação [L]
b	parâmetro de ajuste []
θ_s	umidade volumétrica no ponto de saturação [L ³ L ⁻³]
B	parâmetro de ajuste []
K_s	condutividade hidráulica do solo saturado [LT ⁻¹]
a	parâmetro de ajuste []
γ	parâmetro de ajuste []
θ^*	umidade volumétrica normalizada [L ³ L ⁻³]
θ_r	umidade volumétrica residual do solo [L ³ L ⁻³]
α	parâmetro que depende do solo [L ⁻¹]
n	parâmetro que depende do solo []
Pb	chumbo
Cu	cobre
Cd	cádmio
As	arsênio

$\psi^{inicial}(z)$	potencial matricial no instante $t = 0$ [L]
ψ_L	potencial matricial na posição L [L]
S_e	saturação efetiva
m	parâmetro que depende do solo []
$\mathcal{G}$	elemento do espaço de funções de quadrado integrável
$L^2(\Omega)$	espaço de funções de quadrado integrável
v	função teste
dz	diferencial de z
ψ^{n+1}	incógnita da Equação de Richards
n_f	número de funções
$\overline{\psi}$	função aproximante da função variável de estado
$\overline{v}$	função aproximante da função teste
D_{zz}	coeficiente de dispersão mecânica [L^2/T]
$C^{inicial}(z)$	concentração no instante $t = 0$ [M/L^3]
C_o	concentração na posição $z = 0$ [M/L^3]
C_L	concentração na posição $z = L$ [M/L^3]
θC	variável de estado: produto entre a umidade e a concentração
$\overline{\theta C}$	função aproximante da função variável de estado
$[K]^{-1}$	inversa da matriz K
n_{div}	número de vezes que se divide o elemento inicial da malha
$2^{n_{div}}$	número de elementos da malha
p	ordem da função polinomial por partes
ψ^1	solução do primeiro passo de tempo
ε_{grad}	limite pré-estabelecido para desrefinamento
ε	parâmetro de adaptação
$ du_{E_n} $	valor da derivada da solução aproximada de u em cada elemento
$\max du $	gradiente máximo da solução aproximada
u^{novo}	solução no elemento recém criado
Ω_e^{novo}	subdomínio

$u^{original}$	solução no elemento original
$\sum_{j=1}^{n_{fel}}$	somatório
n_{fel}	número de funções φ do elemento
α_j^{novo}	variáveis
φ_i^{novo}	funções interpolação
Ω_1^{orig}	domínio de um elemento filho
Ω_2^{orig}	domínio de um elemento filho
$u_1^{original}$	solução original em Ω_1^{orig}
$u_2^{original}$	solução original em Ω_2^{orig}
z_1	limite inferior do elemento novo
z_2	limite superior do elemento novo

SUMÁRIO

1 INTRODUÇÃO.....	27
1.1 Objetivo Geral.....	30
1.1.1 Objetivos Específicos.....	30
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA.....	33
2.1 Grau de Saturação – Solo Saturado e Solo Não-Saturado.....	33
2.2 O Movimento da Água no Solo.....	34
2.2.1 Lei de Darcy.....	34
2.2.1.1 Validade da Lei de Darcy.....	36
2.2.2 Condutividade Hidráulica.....	37
2.2.3 Gradiente Hidráulico.....	38
2.3 Potencial Total.....	38
2.4 Processos que controlam o Transporte de Solutos.....	40
2.4.1 Processos Físicos de Transferência de Massa.....	40
2.4.1.1 Advecção.....	40
2.4.1.2 Difusão.....	41
2.4.1.3 Dispersão.....	42
2.4.2 Processos Químicos de Transferência de Massa.....	44
2.4.2.1 Sorção e Fator de Retardamento.....	44
2.4.2.2 Meia – Vida ($T_{1/2}$).....	46
2.4.2.3 Coeficiente de Decaimento de 1ª. Ordem $-\lambda$	46
2.5 Fundamentos da Modelação.....	46
2.5.1 Modelos.....	46
2.5.2 Pontos de partida para a Modelação.....	47
2.5.3 Processos Importantes na Modelação.....	48
2.6 Problemas Transientes e Estacionários.....	49
2.7 Classificação das Equações Diferenciais Parciais.....	50
2.7.1 Equações Elípticas.....	50
2.7.2 Equações Parabólicas.....	51
2.7.3 Equações Hiperbólicas.....	51

2.8 Problemas de Valor de Contorno.....	52
2.9 Problemas de Valor Inicial.....	54
2.10 Métodos Numéricos.....	54
2.10.1 O Método de Diferenças Finitas.....	55
2.10.1.1 Solução Aproximada da Derivada Temporal.....	56
2.10.1.2 Consistência, Convergência e Estabilidade.....	58
2.10.1.2.1 Consistência.....	59
2.10.1.2.2 Estabilidade.....	59
2.10.1.2.3 Convergência.....	61
2.10.2 O Método de Elementos Finitos.....	61
2.10.2.1 Método dos Resíduos Ponderados e Método de Galerkin.....	63
2.10.2.2 Adaptatividade.....	69
3 EQUAÇÕES DE RICHARDS E DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO.....	71
3.1 Lei de Darcy e Equação de Richards.....	71
3.1.1 Relação entre a Velocidade de Darcy e a Velocidade da Água nos Poros.....	74
3.2 Equação de Advecção-Dispersão.....	75
4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	79
4.1 Breve Histórico sobre o Fluxo de Água e o Transporte de Solutos.....	79
4.2 Fluxo de Água nos Resíduos Sólidos Domiciliares ou na Zona Não-Saturada do Solo.....	82
4.3 Transporte de Solutos em Solos Não-Saturados.....	87
4.3.1 Transporte de Chorume de Aterros Sanitários.....	90
5 METODOLOGIA.....	93
5.1 Movimento da Água no Solo: Equação de Richards.....	93
5.1.1 Método dos Resíduos Ponderados.....	96
5.1.2 Aproximação de Elementos Finitos.....	98
5.2 Transporte de Solutos: Equação de Advecção-Dispersão.....	99
5.2.1 Método dos Resíduos Ponderados.....	101
5.2.2 Aproximação de Elementos Finitos.....	103
5.3 Implementação Computacional.....	105
5.3.1 Geometria, Espaços de Interpolação e Material.....	106

5.3.2 Algébrico.....	106
5.4 Solução Numérica.....	107
5.4.1 Sequência de Simulações.....	108
5.4.2 Refinamento do Domínio.....	109
5.4.3 Numeração das Equações.....	110
5.4.4 Adaptação da Malha.....	110
5.4.4.1 Refinamento h	113
5.4.4.2 Projeção da solução.....	114
5.4.5 Passos de Execução do Programa.....	116
6 VALIDAÇÃO, APLICAÇÕES NUMÉRICAS E ESTUDO ESTATÍSTICO.....	119
6.1 Problema de Infiltração de Água.....	120
6.1.1 Malha Uniforme – Comparação com Resultados Publicados.....	121
6.1.2 Adaptatividade.....	123
6.1.3 Utilizando Ordem de Aproximação Polinomial $p = 2$	129
6.1.4 Discussões entre os Resultados Obtidos.....	135
6.1.5 Comparação com Celia, Bouloutas e Zarba (1990)	136
6.1.6 Comparação com Prasad, Kumar e Sekhar (2001).....	136
6.2 Problema de Transporte de Solute.....	138
6.2.1 Movimento de Água no Solo (Equação de Richards).....	138
6.2.2 Transporte de Solute (Equação de Advecção-Dispersão).....	147
6.2.3 Tempo de Execução e Consumo de Memória.....	155
6.3 Estudo Estatístico comparativo do Modelo Proposto com dados da Literatura.....	156
6.3.1 Regressão Linear dos potenciais matriciais na Malha Uniforme Fina e no Método de Celia, Bouloutas e Zarba.....	156
6.3.2 Estudo Comparativo da solução de Richards pelo Modelo Proposto e soluções da Literatura.....	158
6.3.2.1 Regressão Linear dos potenciais matriciais do Modelo Proposto e do Método de Celia, Bouloutas e Zarba.....	158
6.3.2.2 Regressão Linear dos potenciais matriciais do Modelo Proposto e do Método de Prasad, Kumar e Sekhar.....	159
6.3.3 Estudo Comparativo da solução da Equação de Richards usando o Método de Miranda et al. e o Modelo Proposto.....	160

6.3.3.1 Regressão Linear das umidades do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (experimental).....	161
6.3.3.2 Regressão Linear das umidades do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (MIDI).....	161
6.3.4 Estudo Comparativo das Concentrações de Potássio dadas pelo Modelo Proposto e pelo Método de Miranda et al.....	162
6.3.4.1 Regressão Linear com as concentrações do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (experimental).....	163
6.3.4.2 Regressão Linear das concentrações do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (MIDI).....	163
7 CONCLUSÕES.....	165
7.1 Sugestões para pesquisas futuras.....	167
8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	169

1 INTRODUÇÃO

Com o crescente avanço e desenvolvimento das indústrias e com a constante geração de resíduos sólidos nas cidades, o problema de poluição do meio ambiente vem cada vez mais ganhando espaço e exigindo novas alternativas de controle e de prevenção de impacto ambiental. Os resíduos gerados pela atividade humana constituem um sério problema ambiental e de saúde pública, causando poluição e degradação do meio ambiente, com a contaminação do solo e dos corpos hídricos, gerando odores desagradáveis e proliferando vetores causadores de várias doenças.

A grande preocupação com a qualidade do solo e do meio ambiente em compreender os processos de degradação e possíveis impactos ambientais torna interessante o estudo de problemas envolvendo fluxo e transporte de solutos em solo não-saturado.

Com o estudo do transporte de solutos no solo, é possível prever os riscos de poluição e contaminação e os impactos que determinado soluto pode causar no sistema solo-água, a partir do conhecimento de suas propriedades, da sua interação com o meio, de sua movimentação e persistência no solo.

Agências Governamentais e Instituições de Pesquisa têm realizado estudos de impacto ambiental e investigações de campo, com o objetivo de determinar as concentrações de resíduos em vários ecossistemas, mas devido ao alto custo, ao tempo e ao esforço humano nestes trabalhos, há necessidade de uma alternativa economicamente viável.

Frente a estes aspectos e aos avanços computacionais, os modelos matemáticos, aliados às técnicas numéricas, constituem uma ferramenta importante na prevenção de impactos ambientais, permitindo de maneira rápida e precisa a previsão do deslocamento de solutos.

Na simulação computacional do transporte de solutos, há necessidade da identificação das leis que regem os mecanismos de transporte, da seleção do modelo teórico, da determinação dos parâmetros de transporte e da resolução das equações que regem o problema. Não deve ser desprezada a importância das observações de campo, para rever o modelo e fazer previsões cada vez mais eficientes (QUEIROZ, 1999).

O transporte de solutos na zona não-saturada é um processo muito complexo, principalmente quando envolve além do transporte advectivo-dispersivo, outros fenômenos como sorção e decaimento.

A modelagem constitui-se numa tentativa aproximada de representar um fenômeno da natureza (WENDLAND, 2004). Portanto, antes que um modelo seja aplicado a um sistema real, necessita de ser validado, para que seja assegurado que ele, realmente, represente o processo físico que supostamente está sendo simulado (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006). Esta tarefa é feita comparando-se o resultado do modelo com observações de campo ou de laboratório, sendo que esta comparação não precisa ser exata, mas é preciso que tenha evidências de que os processos físicos, químicos e bioquímicos estejam adequadamente representados e incorporados no modelo.

Desde a década de 60, com os primeiros trabalhos realizados na área de transporte de solutos no solo (NIELSEN; BIGGAR, 1961; BIGGAR; NIELSEN, 1962 a; BIGGAR; NIELSEN, 1962 b), o número de pesquisas nesta área tem crescido, bem como o número de situações experimentais aplicando a Equação de Advecção-Dispersão. Porém, estudos em campo são ainda bastante escassos e com deficiências nos métodos experimentais disponíveis, e o que se observa é que existe grande dificuldade em envolver todos os parâmetros pertinentes ao ambiente, necessários à simulação do problema que se está desenvolvendo. No Brasil, a modelação de fluxo e transporte de solutos na zona não-saturada é voltada, quase que exclusivamente, aos problemas relacionados às atividades agrícolas (MIRANDA; DUARTE; LIBARDI, 2004). Isto se justifica devido à agricultura intensiva estar sempre em busca de aumento de produtividade, tendo à disposição uma grande variedade de produtos químicos. Entretanto, tão importante quanto a problemática dos produtos químicos nas atividades agrícolas é a questão de poluição e contaminação do solo e da água por chorume, gerado pelos resíduos sólidos domiciliares.

A partir de meados da década de 90, houve um crescimento na quantidade de resíduos sólidos gerados, devido ao crescimento da população, ao aumento da capacidade de consumo, adicionado ao desenvolvimento das embalagens e dos produtos descartáveis (BIDONE; POVINELLI, 1999; IBGE, 2006).

Difícilmente a geração de resíduos será eliminada ou reduzida à zero, pois estes são gerados pela maioria das atividades humanas, porém a busca pela sua minimização, obedecendo a limites legais permissíveis, é de suma importância para a sustentabilidade das cidades (NAIME, 2001).

A solução para a disposição final dos resíduos sólidos domiciliares é a utilização de aterros sanitários que, com base em normas operacionais específicas (CETESB, 2004) e fundamentos de engenharia, vão permitir a confinação dos resíduos, procurando controlar a poluição e proteger o meio ambiente. Atualmente é uma das formas mais econômicas e adequadas de disposição de resíduos sólidos, em vários países do mundo. Para a grande maioria dos municípios brasileiros, não será diferente, o aterro sanitário constitui a forma mais viável de disposição final de resíduo domiciliar.

A grande quantidade de matéria orgânica presente nos resíduos sólidos domiciliares, a umidade própria dos resíduos, a infiltração de águas de chuvas e as atividades microbiológicas faz com que se gerem, no interior dos aterros, os líquidos percolados denominados chorume (SCHALCH, 1984). Os aterros devem prever a coleta e o tratamento desse efluente líquido, normalmente de cor escura, odor desagradável e elevada DBO (Demanda Bioquímica de Oxigênio). Portanto, chorume é um líquido produzido durante a decomposição anaeróbica dos resíduos sólidos que tem potencial impacto ao ambiente devido a larga variedade de substâncias orgânicas e inorgânicas contidas nesta matriz.

Geralmente, o chorume pode ser caracterizado como uma solução aquosa contendo fósforo, cloretos, sulfatos, bicarbonatos, sódio, potássio, nitrogênio amoniacal, cálcio, magnésio, ferro, manganês e sílica. Encontram-se presentes traços de arsênio, de cádmio, de cromo, de cobalto, de cobre, de chumbo, de mercúrio, de níquel e de zinco (SILVA, 2002; LIMA, 2008).

O potencial poluidor do chorume depende basicamente da sua composição, que é consequência das características do resíduo depositado, depende da capacidade de atenuação do solo e das técnicas e procedimentos de disposição adotados em cada aterro (HEIDMAN; BRUNNER, 1973).

Diante do potencial poluidor do chorume (SCHALCH, 1984; SILVA, 2002; LIMA, 2008), o modelo computacional de fluxo de água e transporte de solutos, na zona não-saturada do solo, pode ser aplicado à simulação de chorume, num trabalho de prevenção de contaminação de solo e de águas subterrâneas e, em particular, na construção de aterros sanitários, auxiliando na definição do grau de impermeabilização no fundo do aterro, que se faz necessário.

Daí a importância deste trabalho em apresentar um modelo computacional, no ambiente de programação PZ (DEVLOO, 1997), usado como uma biblioteca, para simular o fluxo (RICHARDS, 1931; ANDERSON; WOESSNER, 1992; BEAR; VERRUIJT, 1993) e o transporte (BEAR, 1979; HINDMARSH; GRESHO; GRIFFITHS, 1984) de solutos, na zona

não-saturada do solo, através das soluções numéricas das equações diferenciais que regem estes processos. As soluções aproximadas são obtidas através do Método de Elementos Finitos (BREBBIA; CONNOR, 1976; ZIENKIEWICZ, 1977; ZIENKIEWICZ; MORGAN, 1983; CHEN, 2002; PORTELA; CHARAFI, 2002), por se tratar de um método mais recente, e as derivadas temporais são aproximadas pelo Método de Diferenças Finitas (WANG; ANDERSON, 1982; MCDONALD; HARBAUGH, 1988; SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006), aplicando-se Euler Explícito (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006) na Equação de Richards e Euler Implícito, na Equação de Transporte. As referidas equações são resolvidas utilizando-se malhas uniformes inicialmente e, com a finalidade de obter simulações mais eficientes, a um custo computacional reduzido, é empregada a adaptatividade com refinamento h na malha de elementos finitos.

Os resultados obtidos com o desenvolvimento deste trabalho, simulação do fluxo e transporte de solutos na zona não-saturada do solo, estarão disponíveis às equipes multidisciplinares, em áreas afins do conhecimento humano, buscando a preservação do solo e dos recursos hídricos em relação à poluição e contaminação.

1.1 Objetivo Geral

O objetivo geral deste projeto é o desenvolvimento e validação de um modelo computacional aplicado para simulação de fluxo e transporte de solutos, na zona não-saturada do solo, por meio de soluções numéricas das equações diferenciais que descrevem esses fenômenos.

1.1.1 Objetivos específicos

Os objetivos específicos são:

- descrever o fluxo e o transporte de solutos na zona não-saturada do solo através da Equação de Richards e da Equação de Advecção-Dispersão, respectivamente;
- desenvolver o código computacional no ambiente de programação PZ, em linguagem de programação C⁺⁺ e com a filosofia de orientação a objetos;

- validar as soluções das Equações de Richards e de Transporte de Solutos dadas pelo código computacional, utilizando-se dados disponíveis na literatura; e
- fornecer subsídios para a prevenção de poluição e contaminação de águas subterrâneas e do solo, e, em particular, em projetos de aterros sanitários, caso disponha dos parâmetros de transporte do chorume.

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo, são lembrados alguns conceitos teóricos relacionados aos processos de fluxo de água (seções 2.1, 2.2, e 2.3) e transporte de solutos (seção 2.4) na zona não-saturada do solo, que serviram de base para o desenvolvimento desse trabalho.

Como no trabalho é desenvolvido um modelo computacional (seção 2.5), formado por duas equações diferenciais parciais, é importante tratar sobre problemas transientes e estacionários (seção 2.6), classificação de equações diferenciais parciais (seção 2.7) e problemas de valor de contorno (seção 2.8) e de valor inicial (seção 2.9).

Devido à natureza das equações envolvidas nestes modelos de movimento de fluido, os métodos numéricos surgem como alternativas para a solução deste tipo de problemas, sendo o Método de Diferenças Finitas e o Método de Elementos Finitos muito utilizados. São abordados também os conceitos de convergência, consistência e estabilidade de solução (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006) (seção 2.10).

2.1 Grau de Saturação – Solo Saturado e Solo Não-Saturado

O termo solo refere-se à camada externa e agriculturável da superfície terrestre (REICHARDT, 1996).

Além de propriedades físicas do solo como porosidade η e umidade θ , o grau de saturação S do solo (REICHARDT; TIMM, 2004) é definido como

$$S = \theta / \eta = V_a / V_v \quad (2.1)$$

em que

V_a - volume de água do solo [L^3]; e

V_v - volume de vazios ou volume de poros do solo [L^3].

S indica, portanto, a fração do espaço poroso que é ocupado pela água, sendo expresso através de um número adimensional ou em porcentagem (FREDLUND; RAHARDJO, 1993).

O grau de saturação será 100% quando $\theta = \eta$, indicando que todo espaço poroso V_v está cheio de água. Um solo nestas condições é denominado solo saturado.

O solo não-saturado é um sistema multifásico, em que o grau de saturação é inferior a um. De acordo com Fredlund e Morgenstern (1977), este sistema é constituído de quatro fases: partículas de solo, água, ar e película contráctil (interface ar-água), conforme a Figura 1. Afirmaram ainda que, sob o ponto de vista comportamental, um solo não-saturado pode ser definido como uma mistura de duas fases em equilíbrio (partículas de solo e película contráctil) e duas fases que fluem (ar e água).

Nielsen, Genuchten e Biggar (1986) definem zona não-saturada do solo ou zona vadosa como a região da terra limitada em seu topo pela superfície do solo e na parte inferior pelo lençol freático.

Figura 1 – Elemento de solo não-saturado (adaptado – Fredlund e Rahardjo, 1993).

2.2 O Movimento da Água no Solo

2.2.1 Lei de Darcy

O marco inicial dos estudos sobre as águas subterrâneas veio à tona com o estudo experimental do engenheiro Henry Darcy, em Dijon, na França, em 1856. Através de um conduto preenchido de material granular, Darcy simulou o transporte da água no meio poroso,

realizando medições do volume de água transportado neste conduto. Ele realizava, ao mesmo tempo, medições de pressão entre dois pontos. O esquema apresentado na Figura 2 mostra como o experimento foi montado.

Figura 2 – Esquema do experimento montado por Darcy

Através deste experimento, Darcy concluiu que a vazão por este conduto é diretamente proporcional à área de sua seção transversal, à diferença de pressão entre dois pontos e inversamente proporcional ao comprimento da coluna do meio poroso que a mesma percorria (REICHARDT; TIMM, 2004), ou seja,

$$Q = K.A.(h_2 - h_1)/L \quad (2.2)$$

em que

Q – vazão [L^3/T];

K – constante de proporcionalidade ou condutividade hidráulica [L/T];

A – área da seção transversal [L^2];

$(h_1 - h_2)$ – diferença de pressão entre os pontos 1 e 2 [L]; e

L – comprimento [L].

O fluxo de água q é o volume de água V_a que passa por unidade de tempo t e pela unidade de área da seção transversal (REICHARDT; TIMM, 2004), ou seja,

$$q = \frac{V_a}{A.t} = \frac{Q}{A} \quad [\text{L/T}] \quad (2.3)$$

em que

$$Q = \frac{V_a}{t} \text{ é a vazão } [\text{L}^3/\text{T}].$$

Comparando (2.2) e (2.3), obtém-se a quantificação do movimento de água em materiais porosos saturados (REICHARDT; TIMM, 2004) dada por

$$q = -K.\text{grad}H \quad [\text{L/T}] \quad (2.4)$$

em que

$\text{grad} H$ - gradiente do potencial hidráulico $[\text{L/L}]$; e

K - condutividade hidráulica do solo saturado $[\text{L/T}]$.

O sinal negativo da equação (2.4) é devido ao sentido do fluxo ser inverso ao do gradiente (REICHARDT; TIMM, 2004).

2.2.1.1 Validade da Lei de Darcy

O escoamento laminar ocorre quando as partículas do fluido movem-se em camadas ou lâminas segundo uma trajetória paralela. Quando as partículas movem-se em direções diversas e aleatórias, diz-se que o escoamento é turbulento.

A Lei de Darcy é bem entendida e aceita como válida nos casos de fluxo laminar, observado em meios microporosos. Nos casos de poros maiores, o fluxo torna-se turbulento e a velocidade não tem uma relação linear com o gradiente hidráulico, e ainda, há uma perda de carga adicional com o aumento da velocidade e o coeficiente de proporcionalidade diminui quando o gradiente aumenta. O limite entre o fluxo laminar e o turbulento pode ser determinado aproximadamente através do número de Reynolds R_e (GILES, 1976) (seção 4.2). O fluxo laminar ocorre quando $R_e < 1$ e, o turbulento é observado quando $R_e > 10$ (BOUWER,

1978). O fluxo é definido como turbulento transitório quando o Re está entre estes dois valores citados anteriormente. Estes valores limites apresentados são estipulados por meio de considerações empíricas e dependem também do tipo de arranjo das partículas e da direção do fluxo.

2.2.2 Condutividade Hidráulica

A condutividade hidráulica K definida inicialmente na Lei de Darcy como o coeficiente de proporcionalidade é um parâmetro hidrogeológico, com dimensão $[L/T]$, que combina as propriedades do fluido com as propriedades do meio (solo). A condutividade hidráulica é a medida da habilidade de um meio poroso de conduzir um líquido (KUTILEK; NIELSEN, 1994).

Vários fatores influenciam a condutividade hidráulica no solo, como por exemplo, o tamanho e a forma das partículas, espaços vazios, composição, textura, grau de saturação, geometria dos poros e propriedades do fluido (viscosidade e massa específica) (HILLEL, 1980).

Para um solo não-saturado, K é função da umidade volumétrica θ ou da pressão da água nos meniscos dos poros (PREVEDELLO, 1996). Os poros ocupados pelo ar reduzem a área efetiva do fluxo, aumentando a tortuosidade do fluxo remanescente. Assim, a condutividade hidráulica é maior quanto maior for a umidade do solo, atingindo seu valor máximo na saturação.

Na Tabela 1 (WENDLAND, 2004), há alguns valores de condutividade hidráulica.

Tabela 1 – Condutividade hidráulica em meio saturado de alguns materiais

Material	Condutividade (cm/s)
Argila	10^{-9} - 10^{-6}
Silte, silte argiloso	10^{-6} - 10^{-4}
Areia argilosa	10^{-6} - 10^{-4}
Areia siltosa, areia fina	10^{-5} - 10^{-3}
Areia bem distribuída	10^{-3} - 10^{-1}
Cascalho bem distribuído	10^{-2} - 10^{-1}

Em Wendland (2004), a condutividade hidráulica pode ser expressa em função dos dois meios que a influenciam:

$$K = k \cdot \rho \cdot g / \mu \quad (2.5)$$

em que

K – condutividade hidráulica [L/T];

k – permeabilidade intrínseca do meio poroso [L²];

ρ – massa específica da água [M/L³];

μ – viscosidade dinâmica do fluido [M/LT]; e

g – gravidade [L/T²].

2.2.3 Gradiente Hidráulico

O gradiente hidráulico $grad H = \partial H / \partial z$ representa a inclinação da superfície potenciométrica, sendo H , o potencial hidráulico (seção 2.3) e z , o comprimento na direção vertical. Os valores típicos do gradiente hidráulico variam de 0,0001 a 0,05 m/m (NEWELL et al., 1996).

2.3 Potencial Total

A água do solo, como qualquer sistema ou ponto material, contém duas formas principais de energia, a cinética e a potencial. Como o movimento da água no solo é muito lento, a sua energia cinética é geralmente desprezível.

O fato da água do solo estar sujeita a certo número de campos de forças, faz com que o seu potencial seja diferente do da água pura livre.

O conceito de potencial da água do solo expressa a energia potencial específica da água do solo em relação à da água num estado de referência padrão. Para determinar essa

diferença, uma unidade de massa, de volume ou de peso de água deve ser levada do estado padrão para o estado no solo.

Este estado padrão é geralmente considerado como sendo o de um reservatório de água pura, sujeito à pressão atmosférica, à mesma temperatura que a água do solo e a uma dada altura constante.

Como a tendência espontânea da água no solo é assumir estados de menor potencial, conhecendo-se os potenciais da água, em diferentes pontos do solo, pode-se determinar sua tendência de movimento.

O potencial da água é composto por cinco componentes, ou seja, térmica, de pressão, gravitacional, osmótica e matricial, mas como os processos que ocorrem no solo são aproximadamente isotérmicos, a componente térmica é considerada desprezível. Portanto, o potencial total da água, no solo, ou carga hidráulica, ou potencial hidráulico H (PADOIN et al., 2006) é dado por

$$H = \psi_p + \psi_g + \psi_{os} + \psi_m \quad (2.6)$$

em que

ψ_p - componente de pressão, que surge quando a pressão que age sobre a água do solo é diferente e maior que a pressão P_0 , que atua sobre a água padrão. Essa pressão é positiva;

ψ_g - componente gravitacional, que ocorre devido à presença do campo gravitacional terrestre;

ψ_{os} - componente osmótica, que surge porque a água no solo é uma solução de sais minerais e outros solutos e a água padrão é pura; e

ψ_m - componente matricial, que é a soma de todos os outros trabalhos que abrangem a interação entre a água e a matriz sólida do solo, como por exemplo, o trabalho contra forças de adsorção e elétricas, o trabalho capilar etc. Esses fenômenos levam a água a pressões menores que P_0 , que age sobre a água padrão. Portanto, são pressões negativas denominadas tensões ou sucções.

2.4 Processos que controlam o Transporte de Solutos

A interação solo/soluto é extremamente complexa, pois muitos fenômenos físicos, químicos e biológicos podem ocorrer simultaneamente.

O movimento de solutos não depende somente do fluxo do fluido no qual estas substâncias estão dissolvidas, mas recebe influências de muitos mecanismos aos quais estas substâncias estão sujeitas. Os processos físicos que controlam o transporte de solutos no solo não-saturado são advecção, difusão e dispersão. Por outro lado, os solutos nem sempre são inertes, ou seja, os mesmos estão submetidos a outros processos como sorção, decaimento e biodegradação. Como consequência dos processos de sorção, alguns solutos se movem muito mais devagar do que a água que os está transportando, ocorrendo, portanto, o chamado retardamento. Ao passo que a biodegradação, o decaimento radioativo e a precipitação não reduzem necessariamente a velocidade de movimento da pluma, mas são os responsáveis por uma diminuição da concentração do soluto na pluma (FETTER, 1992).

2.4.1 Processos Físicos de Transferência de Massa

2.4.1.1 Advecção

A advecção é o mecanismo de transporte causado pelo fluxo de água, pois com o deslocamento da água, os solutos presentes na mesma se deslocam na direção das linhas de fluxo com a velocidade, em princípio, igual à velocidade média linear da água e sem alterar sua concentração na solução. Em outras palavras, se a água se move, o soluto vai ser arrastado pelo processo de transporte físico chamado de advecção de fluxo de massa ou fluxo convectivo.

A equação diferencial do transporte por advecção (POLYANIN; ZAITSEV, 2004; PINCHOVER; RUBINSTEIN, 2005), no caso unidimensional, é dada por

$$\frac{\partial C}{\partial t} = -v_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.7)$$

em que

- C - concentração do soluto $[M/L^3]$;
- v_z - velocidade da água nos poros na direção z $[L/T]$ (seção 3.1);
- t - tempo $[T]$; e
- z - coordenada vertical $[L]$.

2.4.1.2 Difusão

O transporte de soluto por difusão molecular, ou simplesmente chamado de difusão, ocorre devido ao gradiente de concentração existente em um fluido, isto é, o soluto dissolvido em água desloca-se de uma área de maior concentração para uma área de menor concentração, com o objetivo de igualar a concentração em toda a massa de fluido. Isto ocorre independentemente da velocidade do fluido, mas é acentuado pela turbulência resultante dos mecanismos de mistura mecânica (ELBACHÁ, 1989). A difusão é proporcional ao gradiente de concentração e, em analogia com a Primeira Lei de Fick (WENDLAND, 2004), é dada por

$$J_d = -D_d \frac{\partial C}{\partial z} \quad (2.8)$$

em que

- J_d - fluxo de difusão do soluto $[M/L^2 T]$;
- D_d - coeficiente de difusão $[L^2/T]$; e
- $\frac{\partial C}{\partial z}$ - gradiente de concentração $[M/L^4]$.

O sinal negativo exprime que o movimento se dá em sentido contrário ao do gradiente. Os coeficientes de difusão geralmente variam de 1×10^{-9} a $2 \times 10^{-9} \text{ m}^2/\text{s}$ numa temperatura de 25°C (SCHNOOR, 1992). Esses valores não variam muito com a concentração, mas, sim, com a temperatura, ou seja, chegam a reduzir-se em 50% para uma variação de 5°C (ROBINSON; STOKES, 1965).

No caso em que a concentração varia com o tempo, toma-se a Segunda Lei de Fick (FREEZE; CHERRY, 1979; FETTER, 1993), ou seja,

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D_d \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \quad (2.9)$$

Há dados que mostram que em solos, a difusão é consideravelmente menor que em uma solução livre, principalmente quando se trata de solos com granulometria fina, devido à tortuosidade das trajetórias de fluxo (MITCHELL, 1991). Neste caso, usa-se um coeficiente de difusão efetiva D^* dado por

$$D^* = \varpi D_d \quad (2.10)$$

em que

ϖ - o coeficiente de tortuosidade do solo [] (BEAR, 1972).

ϖ é sempre menor que 1,0 e é determinado por meio de ensaios de laboratório.

2.4.1.3 Dispersão

Dispersão ou transporte por mistura mecânica é o processo de diluição e redução de concentração de soluto quando o mesmo é carregado por advecção através do meio poroso (BEAR, 1972). É decorrente da dispersão em canais individuais, do desenvolvimento de velocidades médias diferentes em canais diferentes devido à variação das dimensões dos poros ao longo das linhas de fluxo e do desvio da trajetória das partículas em decorrência da tortuosidade, reentrâncias e interligações entre os canais (BEAR, 1972; HILLEL, 1980).

O coeficiente de dispersão mecânica é definido como o produto entre a velocidade da água nos poros na direção z , v_z , e o coeficiente de dispersividade dinâmica α , que é a propriedade de um meio poroso provocar a dispersão de um traçador que nele se desloca (BEAR, 1972).

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

O processo de difusão molecular não pode ser separado da dispersão mecânica no fluxo de água pelo solo. Esses dois processos são combinados para definir um parâmetro denominado coeficiente de dispersão hidrodinâmica D . Portanto, o coeficiente de dispersão

hidrodinâmica D é a soma do coeficiente de difusão D_d com o coeficiente de dispersão mecânica D_{zz} . Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica longitudinal D_l [L^2/T] e de dispersão hidrodinâmica transversal D_t [L^2/T] (SAFFMAN, 1959; BEAR, 1972; BUNSRI; SIVAKUMAR; HAGARE, 2008 b), quando se considera o coeficiente de difusão efetiva, são, respectivamente,

$$D_l = \alpha_l v_z + D^* \quad (2.11)$$

$$D_t = \alpha_t v_z + D^* \quad (2.12)$$

em que

$\alpha_l v_z$ e $\alpha_t v_z$ - coeficientes de dispersão mecânica longitudinal e transversal, respectivamente, [L^2/T];

α_l e α_t - coeficientes de dispersividade longitudinal e transversal [L], respectivamente;

v_z - velocidade da água nos poros na direção z [L/T]; e

D^* - coeficiente de difusão efetiva ($D^* = \tau D_d$), e τ , o coeficiente de tortuosidade do solo [].

As expressões para as dispersividades (SCHEIDEGGER, 1963) são

$$\alpha_l = \beta_l d \quad (2.13)$$

$$\alpha_t = \beta_t d \quad (2.14)$$

em que

d - o diâmetro médio do poro [L]; e

β_l e β_t tem valores da ordem de 1,75 e 0,055, respectivamente, e que, naturalmente, não podem ser considerados universais.

As equações (2.11) e (2.12) se tornam (SCHEIDEGGER, 1963), portanto,

$$D_l = 1,75.d.v_z + D^* \quad (2.15)$$

$$D_t = 0,055.d.v_z + D^* \quad (2.16)$$

O coeficiente de difusão efetiva D^* está na faixa de 0,005 a 0,05 m²/ano.

Os ensaios de laboratório mostram que para velocidades baixas de fluxo, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica é igual ao coeficiente de difusão efetivo, enquanto que, para velocidades altas, o coeficiente de dispersão hidrodinâmica aumenta linearmente em função da velocidade (PERKINS; JOHNSTON, 1963).

Quando se trata de transporte através de um solo argiloso, a difusão irá normalmente controlar o mecanismo de transporte, e a dispersão mecânica será desprezível (GILLHAM; CHERRY, 1982; ROWE, 1987).

2.4.2 Processos Químicos de Transferência de Massa

Dependendo do solo e da solução contaminada, muitos processos químicos poderão ocorrer. Geralmente essas reações causam um retardamento do fenômeno de transporte dos solutos.

Não é o objetivo a análise de todos os processos químicos e biológicos que poderiam ocorrer no mecanismo de transporte de solutos. Serão analisados, a seguir, somente os processos que fizeram parte da equação diferencial que rege o transporte de solutos deste trabalho.

2.4.2.1 Sorção e Fator de Retardamento

O retardamento que ocorre durante a migração de solutos é totalmente atribuído aos processos de sorção (adsorção-desorção).

A sorção é determinada experimentalmente pela medida da distribuição do soluto em um sedimento particular, solo ou rochas.

Há diversos modelos que relatam a quantidade de soluto S_C e são conhecidos como isotermas de sorção. A isoterma linear (VALOCCHI, 1984) é dada por

$$S_C = K_d C \quad (2.17)$$

em que

K_d - coeficiente de distribuição [L^3/M]; e

C - concentração do soluto [M/L^3].

Comumente a sorção é quantificada geoquimicamente pelo coeficiente de distribuição K_d (FREEZE; CHERRY, 1979).

A isoterma linear é apropriada quando a sorção aumenta uniformemente com o aumento da concentração. Este modelo tem sido considerado em casos de concentrações baixas de soluto e para sólidos com baixo potencial de sorção (WEBER Jr.; MCGINLEY; LYNN, 1991).

Campos e Elbachá (1991) definem fator de retardamento como a capacidade de retenção ou efeito tampão do solo, para um elemento ou composto existente em um resíduo. Para Valocchi (1984), o fator de retardamento representa a defasagem entre a velocidade de avanço do soluto e a velocidade de avanço da frente de molhamento da solução percolante. Desta forma, sendo o fator de retardamento um parâmetro que, indiretamente, expressa a capacidade do solo em reter íons, fica clara sua dependência em relação às interações entre a fase líquida e a fase sólida, durante a percolação da solução no solo.

O fator de retardamento R é a razão entre a velocidade do fluido percolante e a velocidade da frente de contaminação. Seu valor poderá ser obtido da curva característica de transporte, obtida a partir de ensaios de coluna realizados em laboratório.

O fator de retardamento R (TSAI et al., 2000) é dado por

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{\theta} \quad (2.18)$$

em que

ρ_b - densidade aparente do solo [M/L^3];

θ - umidade volumétrica [L^3/L^3]; e

K_d - coeficiente de distribuição [L^3/M].

A habilidade do solo em reter substâncias é limitada. Se a fonte de contaminação tiver alimentação contínua, a taxa de retenção tende a diminuir com o tempo, podendo zerar

(YONG et al., 1992). Diz-se que o solo atingiu sua capacidade de retenção (*ponto de equilíbrio*). A quantidade da substância que permanece dissolvida na água percolante aumenta à medida que a quantidade acumulada no solo se aproxima da sua capacidade de retenção (YONG et al., 1992).

2.4.2.2 Meia – Vida ($T_{1/2}$)

A meia-vida de uma reação é o tempo necessário para que a concentração chegue à metade da concentração inicial (CHAPRA, 1997).

2.4.2.3 Coeficiente de Decaimento de 1ª. Ordem – λ

As reações podem ser definidas como reações de ordem zero, reações de 1ª. ordem e reações de 2ª. ordem. Uma reação de 1ª. ordem especifica o decaimento exponencial da concentração no tempo, onde a curva de concentração aproxima-se de forma assíntota do zero no tempo (CHAPRA, 1997).

2.5 Fundamentos da Modelação

2.5.1 Modelos

Modelo é um sistema que consegue reproduzir, pelo menos em parte, o comportamento de um processo natural (WENDLAND; RÜBER, 1998).

O objetivo da modelagem é o de prever ou predizer cenários onde estão envolvidas variáveis desconhecidas, como, por exemplo, a variação da carga hidráulica ou a distribuição de concentrações de solutos no solo, tanto no tempo quanto no espaço (BEDIENT; RIFAI; NEWELL, 1994).

Os modelos podem ser físicos, analógicos ou matemáticos.

O modelo físico é a representação através de um protótipo, em escala menor, na maioria dos casos, de um sistema. Na Hidráulica, usa-se a teoria da semelhança para estabelecer os modelos reduzidos (TUCCI, 1998).

No modelo analógico, o processo estudado é modelado no sistema mais conveniente através da analogia entre os diferentes fenômenos. Por exemplo, representa-se o sistema hidráulico por um circuito elétrico, que tem menor custo, baseado na analogia entre as equações do escoamento hidráulico e as de um circuito elétrico.

Os modelos matemáticos são ferramentas matemáticas para representar uma versão simplificada de um problema real, ou seja, através de termos matemáticos, tenta-se compreender os processos físicos, químicos e biológicos.

2.5.2 Pontos de partida para a Modelação

No momento de planejar o modelo, algumas questões importantes devem ser respondidas:

1. Qual é o problema a ser modelado?
2. Qual é o objetivo? Quais respostas deverão ser obtidas?
3. É necessário um modelo para se resolver o problema?
4. Quais são os dados disponíveis (dados de entrada)?
5. Os resultados do modelo podem ser verificados através de medições?
6. Quais processos serão considerados no desenvolvimento do modelo?
 - fluxo de água;
 - transporte de soluto;
 - transporte de chorume.

Com estas questões resolvidas, realizar a construção do modelo (WENDLAND, 2004).

2.5.3 Processos Importantes na Modelação

As várias etapas para a elaboração de um modelo para reproduzir o comportamento de um processo natural são apresentadas na Figura 3.

Figura 3 – Etapas da modelação (WENDLAND, 2004).

As definições das etapas (WENDLAND, 2004) são dadas a seguir:

Problema Físico → Suposições: Definição de questões importantes e suposição do processo natural;

Modelo Conceitual → Simplificações: Descrição dos processos envolvidos e descrição qualitativa do comportamento do sistema natural, para que simplificações possam ser realizadas;

Modelo Matemático → Simplificações: Tradução do modelo teórico em termos matemáticos. Descrição do processo físico usando-se as relações matemáticas, levando-se em conta a conservação de massa e de energia. Alguns fenômenos físicos podem ser simplificados. Nessa etapa, definem-se as condições iniciais e de

contorno. Portanto, tem-se o conjunto de equações diferenciais associadas às condições iniciais e de contorno e pode-se resolver o problema analiticamente, caso seja possível;

Modelo numérico → Aproximações: Descrição aproximada da equação matemática diferencial. A formulação algébrica é uma aproximação da equação diferencial, com o objetivo de determinar as variáveis (carga hidráulica, concentração, por exemplo) em pontos discretos do modelo;

Modelo computacional → Erros de arredondamento: Tradução para a linguagem computacional do modelo numérico. Nesta fase, ocorre a resolução do sistema com diferentes técnicas numéricas, obtendo-se resultados;

Interpretação → Conhecimentos físicos: As grandezas calculadas são interpretadas baseando-se nos conhecimentos físicos específicos. Ocorre a comparação dos resultados numéricos com valores medidos, verificando-se a necessidade ou não de calibração ou ajuste. Nesta etapa, é feita também a validação do modelo, por meio de dados da literatura ou experimentais. Retornar à primeira etapa, caso a solução não seja satisfatória; e

Prognóstico → Decisões: Aplicação do modelo a questões específicas (por exemplo: transporte de chorume). Após a análise de sensibilidade e com os resultados obtidos, tomar as decisões econômicas.

2.6 Problemas Transientes e Estacionários

Na natureza, podem-se distinguir dois tipos básicos de fenômenos físicos, os estacionários e os transientes.

Os problemas estacionários são aqueles que estão em um estado de equilíbrio, nos quais a propriedade de interesse não se altera com o passar do tempo.

Os problemas transientes envolvem a variável temporal das grandezas físicas de interesse, ou seja, aqueles que evoluem no tempo. A partir dos valores iniciais dessas grandezas em certo instante t_0 , calculam-se, pela solução numérica da equação diferencial parcial, quando não se dispõe da solução analítica, seus novos valores em sucessivos intervalos de tempo Δt , até alcançar o instante final t_f .

Os problemas transientes são regidos por equações que descrevem a variação de uma grandeza física no tempo e no espaço e os problemas estacionários são descritos por equações que relacionam somente a distribuição espacial da grandeza.

Estes dois processos, estacionário e transiente, geralmente aparecem juntos. Os fenômenos estacionários são representados por equações diferenciais parciais elípticas, enquanto que os fenômenos transientes são modelados por equações diferenciais parabólicas ou hiperbólicas. Quando apresentam mecanismos de dissipação de energia, como, por exemplo, na difusão de calor e no escoamento de fluidos viscosos, os fenômenos ditos dissipativos são descritos por equações parabólicas. Quando não dissipativos, são representados por equações hiperbólicas (seção 2.7).

2.7 Classificação das Equações Diferenciais Parciais

As equações diferenciais parciais que descrevem os fenômenos de interesse da dinâmica de fluidos computacional podem ser classificadas em três categorias básicas, ou seja, equações elípticas, parabólicas e hiperbólicas (POLYANIN; ZAITSEV, 2004; PINCHOVER; RUBINSTEIN, 2005).

2.7.1 Equações Elípticas

As equações elípticas, em geral, representam os problemas de equilíbrio (estacionários), cuja equação modelo é dada pela Equação de Laplace (POLYANIN; ZAITSEV, 2004; PINCHOVER; RUBINSTEIN, 2005). Esta equação pode ser escrita em coordenadas cartesianas tridimensionais como

$$\nabla^2 \phi = \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 \phi}{\partial z^2} = 0 \quad (2.19)$$

em que

ϕ - variável dependente; e

∇^2 - operador laplaciano.

2.7.2 Equações Parabólicas

A equação modelo para problemas parabólicos é a equação transiente de difusão de calor (POLYANIN; ZAITSEV, 2004; PINCHOVER; RUBINSTEIN, 2005), ou seja,

$$\frac{\partial T}{\partial t} = \alpha_T \frac{\partial^2 T}{\partial x^2} \quad (2.20)$$

em que

T - temperatura; e

α_T - coeficiente de difusividade térmica do material.

É importante lembrar que os mecanismos dissipativos são expressos, matematicamente, pelo termo difusivo $\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}$.

Os problemas transientes necessitam de valores para a variável dependente T em $t = 0$ (condições iniciais) e condições de contorno para $t > 0$, ou seja, são problemas de valor inicial (seção 2.9).

2.7.3 Equações Hiperbólicas

Equações Hiperbólicas estão relacionadas a problemas de vibração ou de convecção, em que os fenômenos dissipativos são mínimos ou podem ser desprezados. As situações descritas por equações hiperbólicas necessitam tanto de condições iniciais, como, em geral, de condições de contorno. Portanto, são também problemas de valor inicial.

A equação modelo para problemas hiperbólicos é a equação de convecção (POLYANIN; ZAITSEV, 2004; PINCHOVER; RUBINSTEIN, 2005) que, na forma unidimensional, é escrita como

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v_x \frac{\partial \phi}{\partial x} \quad (2.21)$$

em que

ϕ - variável dependente; e

v_x - velocidade positiva.

O produto $v_x \frac{\partial \phi}{\partial x}$ é chamado de termo advectivo.

A falta de mecanismos dissipativos faz com que quaisquer discontinuidades presentes nas condições iniciais se propaguem para a solução em $t > 0$. Isso implica que as equações hiperbólicas admitem soluções descontínuas, e que o método numérico utilizado deve ser capaz de lidar com elas.

O processo de advecção que possua mecanismos dissipativos obedece à Equação Parabólica de Advecção-Dispersão, que é também chamada de Equação de Transporte (POLYANIN; ZAITSEV, 2004; PINCHOVER; RUBINSTEIN, 2005), ou seja,

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -v_y \frac{\partial \phi}{\partial y} + \tau \frac{\partial^2 \phi}{\partial y^2} \quad (2.22)$$

em que

v_y - a velocidade de propagação de ϕ ; e

τ - o coeficiente de dispersão de ϕ .

2.8 Problemas de Valor de Contorno

Geralmente, as Equações Diferenciais Parciais (EDP) representam problemas físicos e apresentam uma família de soluções possíveis. Porém, é necessário definir condições

auxiliares, de modo a caracterizar unicamente a situação modelada. Estas condições são denominadas, dependendo do problema, de condições *iniciais* e de *contorno*. Essas condições auxiliares deverão se apresentar somente na medida certa para se obter o que se chama de problema *bem posto*, pois se forem prescritas em excesso, poderá haver incompatibilidade entre elas e o problema não terá solução e se forem insuficientes, o problema será indefinido, podendo ter infinitas soluções (CUMINATO; MENEGUETE JR., 1999).

Modelos matemáticos de fluxo em solo saturado ou não-saturado, mas estacionários, são classificados como problemas de valor de contorno. Em problemas de valor de contorno, o analista pode especificar o valor da quantidade desconhecida ou variável de campo, como o potencial hidráulico ou potencial matricial, ao longo das fronteiras do domínio.

Estes valores referidos como condições de contorno quando são combinados com as equações de fluxo ou transporte resultam em modelos matemáticos que podem ser resolvidos para valores da variável de campo em qualquer ponto do domínio. Existem três tipos de condições de contorno. O primeiro tipo, denominado de condição de *Dirichlet* (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006), ocorre quando os valores da grandeza, que se está procurando, são conhecidos na fronteira e podem ser usados para o cálculo dos pontos internos:

$$\psi = \psi_0 \text{ em } \Gamma_1 \quad (2.23)$$

No segundo tipo de condição, denominado de *Neumann* (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006), apenas o gradiente (normal ou tangencial) é conhecido na fronteira,

$$q = q_0 \text{ em } \Gamma_2 \quad (2.24)$$

logo, a variável de interesse na fronteira também é uma incógnita e deve ser determinada como parte do processo de solução. Se o gradiente normal na fronteira for nulo, diz-se que a condição de fronteira utilizada é natural ou homogênea.

Um terceiro tipo de condição (equação 2.25), chamada de *Robin* (ou Cauchy), é uma combinação linear dos tipos anteriores (WENDLAND, 2004).

$$aq + b\psi = c \text{ em } \Gamma_3 \quad (2.25)$$

2.9 Problemas de Valor Inicial

Modelos matemáticos de fluxo de água subterrânea ou transporte de soluto em solos saturados ou não-saturados e transientes são classificados como problemas de valor inicial. Em problemas de valor inicial, condições de contorno, isto é, valores especificados da variável de campo (potencial hidráulico ou potencial matricial ou concentração de soluto) e suas derivadas (fluxo de água subterrânea ou fluxo de soluto) são especificados da mesma maneira que os problemas de valor de contorno. Além disso, valores das variáveis de campo precisam ser especificados para todos os pontos do domínio em algum tempo inicial t_0 e estes valores especificados se referem às condições iniciais. Quando as condições de contorno e as condições iniciais são combinadas com as equações de fluxo ou transporte, resultam em um modelo matemático que pode ser resolvido para valores da variável de campo em qualquer ponto do domínio em qualquer tempo $t > t_0$.

2.10 Métodos Numéricos

Problemas envolvendo o movimento de fluidos não possuem soluções analíticas, a não ser que se façam algumas simplificações, daí a extrema importância dos métodos numéricos como alternativa para a solução de problemas matematicamente complexos. O objetivo dos modelos numéricos é dar sustentação às decisões no gerenciamento dos recursos hídricos, conhecendo a distribuição de carga hidráulica e a concentração de solutos em função do espaço e do tempo. Diante da grande diversidade de possíveis aplicações, esforços têm sido realizados no desenvolvimento de métodos numéricos de solução, pretendendo a eficiência e a flexibilidade. Neste trabalho, são apresentados o Método de Diferenças Finitas e o Método de Elementos Finitos.

2.10.1 O Método de Diferenças Finitas

O Método de Diferenças Finitas é o método mais antigo (é o método numérico dos anos 60) e o mais divulgado, devido à simplicidade na compreensão, aprendizado e implementação da técnica. Foi o primeiro método a ser utilizado para a solução sistemática de problemas de água subterrânea. Os fundamentos matemáticos foram estabelecidos por Taylor e Lagrange, matemáticos do século XVIII (GOMES, 2000).

No Método de Diferenças Finitas, as soluções de problemas de condição inicial e de contorno são expandidas por Séries de Taylor e por meio de truncamento adequado dessas séries, as derivadas parciais, tanto a espacial quanto a temporal, das equações diferenciais são aproximadas por quocientes de diferenças.

Discretiza-se a região simulada em uma malha regular e para cada nó da malha é construída uma equação algébrica. Portanto, no Método de Diferenças Finitas, uma equação diferencial, de natureza contínua, é substituída por uma série de equações algébricas em pontos discretos e essas equações lineares algébricas deverão ser resolvidas (McDONALD; HARBAUGH, 1988).

Se o domínio possuir mais de uma variável, o conceito citado acima é realizado para cada uma das variáveis separadamente (CUMINATO; MENEGUETE JR., 1999). Geralmente, este método de aproximação apresenta-se suficientemente robusto e representa a equação diferencial governante de forma adequada.

A vantagem desse método está na velocidade em preparar o sistema linear de equações algébricas e na simplicidade das operações que aparecem no decorrer do processo.

As desvantagens do Método de Diferenças Finitas são a malha de discretização precisa ser regular, a aproximação numérica do fluxo na fronteira, ou seja, a condição de contorno do segundo tipo não é a trivial e uma determinada singularidade não pode ser refinada localmente, sem causar influências no domínio. Maiores detalhes sobre o Método de Diferenças Finitas poderão ser encontrados em Morton e Mayers (2005), Rübenkönig (2006) e Kaw e Kalu (2008).

2.10.1.1 Solução Aproximada da Derivada Temporal

Seja o sistema de equações diferenciais ordinárias cuja solução fornece valores de ψ e $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ em cada nó na malha de elementos finitos (seção 2.10.2):

$$[C] \left\{ \dot{\psi} \right\} + [K] \{ \psi \} = \{ F \} \quad (2.26)$$

$$\text{com } \left\{ \dot{\psi} \right\} = \begin{Bmatrix} \frac{\partial \psi_1}{\partial t} \\ \vdots \\ \frac{\partial \psi_p}{\partial t} \end{Bmatrix} \text{ e } \{ \psi \} = \begin{Bmatrix} \psi_1 \\ \vdots \\ \psi_p \end{Bmatrix}$$

Muitos métodos existem para resolver este sistema de equações, mas o Método das Diferenças Finitas tem sido o escolhido para o fluxo das águas subterrâneas e transporte de solutos.

Pelo Teorema do Valor Médio do Cálculo Diferencial e Integral (Figura 4), pode-se calcular a derivada em relação ao tempo da função ψ , em algum ponto ε , do intervalo t a $t + \Delta t$, ou seja,

Figura 4 – Aproximação por diferenças finitas para a derivada em relação ao tempo do potencial hidráulico.

$$\frac{\partial \psi}{\partial t}(\varepsilon) = \frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{\Delta t} \quad (2.27)$$

$$\psi(t + \Delta t) = \psi(t) + \frac{\partial \psi}{\partial t}(\varepsilon) \cdot \Delta t \quad (2.28)$$

Fazendo $t + \Delta t = \varepsilon$,

$$\psi(\varepsilon) = \psi(t) + \frac{\partial \psi}{\partial t}(\varepsilon) \cdot (\varepsilon - t) \quad (2.29)$$

$$\text{Definindo-se a variável } \omega \text{ como } \omega = \frac{\varepsilon - t}{\Delta t} \quad (2.30)$$

pode-se escrever

$$\psi(\varepsilon) = \psi(t) + \omega \cdot \Delta t \left(\frac{\partial \psi}{\partial t}(\varepsilon) \right)$$

$$\psi(\varepsilon) = \psi(t) + \omega \cdot \cancel{\Delta t} \frac{\psi(t + \Delta t) - \psi(t)}{\cancel{\Delta t}}$$

$$\psi(\varepsilon) = \psi(t) + \omega \cdot \psi(t + \Delta t) - \omega \cdot \psi(t)$$

$$\psi(\varepsilon) = (1 - \omega) \psi(t) + \omega \cdot \psi(t + \Delta t) \quad (2.31)$$

que poderá ser estendido para o vetor potencial $\{\psi\}$ e o vetor $\{F\}$, ou seja,

$$\{\psi\} = (1 - \omega) \{\psi\}_t + \omega \cdot \{\psi\}_{t + \Delta t} \quad (2.32)$$

$$\{F\} = (1 - \omega) \{F\}_t + \omega \cdot \{F\}_{t + \Delta t} \quad (2.33)$$

Substituindo-se as equações (2.32) e (2.33) na equação (2.26) tem-se

$$\begin{aligned} & ([C] + \omega \Delta t [K]) \{\psi\}_{t + \Delta t} = \\ & ([C] - (1 - \omega) \Delta t [K]) \{\psi\}_t + \Delta t \left((1 - \omega) \{F\}_t + \omega \{F\}_{t + \Delta t} \right) \end{aligned} \quad (2.34)$$

A solução inicia especificando-se o valor inicial de $\{\psi\}$, isto é, os valores do potencial no tempo $t = t_0 = 0$, $\{\psi\}_{t_0}$ = valores especificados.

O sistema de equações lineares (equação (2.34)) é resolvido para obter valores de $\{\psi\}$ em $\{\psi\}_{t+\Delta t}$. Tem-se, portanto, $\{\psi\}_t = \{\psi\}_{t_0+\Delta t}$ e repete-se o processo de solução para o próximo tempo. Dependendo da escolha de ω , pode-se definir:

$\omega = 0 \rightarrow$ *Forward Difference Method* (EULER EXPLÍCITO)

$$[C]\{\psi\}_{t+\Delta t} = ([C] - \Delta t [K])\{\psi\}_t + \Delta t \{F\}_t \quad (2.35)$$

$\omega = \frac{1}{2} \rightarrow$ *Central Difference or Crank – Nicholson Method*

$$\left([C] + \frac{\Delta t}{2} [K]\right)\{\psi\}_{t+\Delta t} = \left([C] - \frac{\Delta t}{2} [K]\right)\{\psi\}_t + \frac{\Delta t}{2} (\{F\}_t + \{F\}_{t+\Delta t}) \quad (2.36)$$

$\omega = 1 \rightarrow$ *Backward Difference Method* (EULER IMPLÍCITO)

$$([C] + \Delta t [K])\{\psi\}_{t+\Delta t} = [C]\{\psi\}_t + \Delta t \{F\}_{t+\Delta t} \quad (2.37)$$

2.10.1.2 Consistência, Convergência e Estabilidade

Quando se resolve uma equação diferencial parcial numericamente, a preocupação é garantir que a solução, obtida com o esquema numérico de aproximação, represente uma aproximação razoável da solução exata do problema matemático. Para que isso ocorra, exige-se que a solução numérica convirja para a solução exata, quando os incrementos espacial e temporal tendem a zero ($\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$). É preciso que o sistema de equações algébricas, resultante do processo de aproximação numérica, seja consistente com a equação diferencial parcial do problema e o método utilizado para a solução do sistema de equações seja estável (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006).

2.10.1.2.1 Consistência

A Consistência está relacionada com a aproximação do sistema contínuo de equações por um sistema discreto. Um esquema numérico é consistente quando, no limite, as aproximações numéricas se tornarem equivalentes matematicamente às equações originais, ao se refinar as aproximações por elementos finitos ou diferenças finitas (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006).

Para se testar a consistência, substitui-se a solução exata na equação algébrica que resultou da aproximação e expande todos os valores nodais em Séries de Taylor, em torno de um mesmo ponto. Para que haja consistência, é necessário que a expressão resultante seja composta da equação diferencial parcial original acrescida de um resto que tende a zero quando a malha é refinada. Maiores detalhes poderão ser encontrados em Rolnik (1998).

2.10.1.2.2 Estabilidade

A Estabilidade é uma propriedade relacionada, basicamente, com o esquema de integração no tempo. Um método numérico é instável quando uma pequena perturbação, como, por exemplo, um erro de truncamento, tende a crescer quando o processo de cálculo avança no tempo. Esse crescimento, na maioria das vezes, é de ordem exponencial e o erro gerado cresce acima de limites razoáveis, depois de um número pequeno de passos no processo computacional (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006).

No caso de equação de transporte, a instabilidade pode se apresentar como concentrações negativas, concentrações que ultrapassem o valor da condição de contorno ou um avanço da frente de concentração.

É preciso encontrar métodos de estabilização adequados para eliminar as oscilações numéricas e, também, métodos de solução de sistemas de equações eficientes para que se possa minimizar o tempo de simulação desse tipo de problema.

O problema de instabilidade na solução da equação de transporte é devido à presença do termo advectivo da equação, ou seja, é devido à dispersão numérica, que está relacionada com a propagação de erros devido a problemas de instabilidade do sistema de equações após a discretização espacial que representa o problema de transporte de massa, podendo causar o

aparecimento de concentrações negativas ou a determinação de valores maiores que os observados.

Para que as soluções do problema de transporte de solutos não apresentem instabilidade devido à dispersão numérica é importante observar duas condições:

(i) na discretização espacial, define-se o número de Péclet (Pe) que é um parâmetro adimensional usado para verificar qual mecanismo, convecção-dispersão ou difusão, domina o processo de transferência de solutos (ROTH, 2006).

O número de Péclet é dado por:

$$Pe = \frac{v_z L}{D} \quad (2.38)$$

em que

L - comprimento na direção z [L];

D - coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2/T]; e

v_z - velocidade da água nos poros, na direção z [L/T].

Quando o número de Péclet é alto (por exemplo, $Pe = 200$), tem-se um regime de advecção dominante, e, quando for baixo (por exemplo, $Pe = 2$), tem-se um regime de dispersão dominante (PINDER; GRAY, 1977).

(ii) na discretização temporal, define-se o número de Courant, que é o quociente entre magnitude da velocidade v_z e o tamanho do intervalo de tempo Δt pelo tamanho da discretização espacial Δz , ou seja,

$$Cr = \frac{v_z \Delta t}{\Delta z} \quad (2.39)$$

Daus, Frind e Sudicky (1985) apresentaram um estudo utilizando o Método de Elementos Finitos para a solução da Equação de Transporte de Solutos, determinando os valores limites para o número de Péclet e o número de Courant. Para que na solução da Equação da Convecção-Dispersão não ocorra instabilidade é necessário que o número de Péclet seja menor ou igual a 2 ($Pe \leq 2$).

$Pe \leq 2$ e $Cr \approx 1$ (número de Courant próximo de 1) é critério para atingir a máxima estabilidade numérica (PINDER; GRAY, 1977).

2.10.1.2.3 Convergência

Um método numérico aplicado a uma equação diferencial é convergente se a solução do esquema aproximado (solução numérica) tende para a solução exata da equação diferencial, à medida que se diminuem os incrementos espacial e temporal, desde que não haja nenhum erro de contorno.

Como as técnicas numéricas comuns são convergentes quando aplicadas às equações diferenciais, não significa que, na prática, quando $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$, a solução numérica sempre atinja a solução exata da equação diferencial, porque erros de modelagem e de arredondamento poderão ocorrer em qualquer problema computacional (HORNBECK, 1975).

Para equações que descrevem o escoamento de fluidos, geralmente, é impossível demonstrar teoricamente a convergência. Em problemas que apresentam solução analítica, o erro da solução numérica, em relação à solução exata, deve ser computado em malhas cada vez mais refinadas. Há necessidade, portanto, de o erro da solução numérica se reduzir a zero, à medida que $\Delta t \rightarrow 0$ e $\Delta z \rightarrow 0$. Como as malhas devem ser extremamente refinadas, o processo se torna caro.

2.10.2 O Método de Elementos Finitos

O Método de Elementos Finitos é o método numérico mais usado atualmente nos diversos ramos da Engenharia, inicialmente utilizado em problemas relacionados à Aeronáutica, Engenharia Estrutural e Mecânica dos Solos e será utilizado neste trabalho. Foi desenvolvido com o objetivo de resolver problemas físicos com geometria complexa e eliminar algumas das dificuldades do Método de Diferenças Finitas. A aplicação do Método de Elementos Finitos a problemas de água subterrânea é relativamente recente comparada com o Método de Diferenças Finitas e foi descrita detalhadamente por Pinder e Gray (1977),

Huyakorn e Pinder (1983) e Istok (1989). A flexibilidade do método é útil na solução de transporte de contaminantes (WANG; ANDERSON, 1982).

O Método de Elementos Finitos troca a equação diferencial do problema por uma formulação integral (REDDY, 1986), que é resolvida, de forma aproximada, pelo Método de Galerkin, o mais comumente usado para resolver fluxo de água e problemas de transporte de solutos (ZIENKIEWICZ, 1977). No Método de Diferenças Finitas, as equações diferenciais parciais são aproximadas por quocientes de diferenças, enquanto que no Método de Elementos Finitos, as formulações integrais são aproximadas por somatórios.

O domínio do problema é dividido em subdomínios, com o objetivo de representar domínios complexos como um conjunto de subdomínios mais simples, chamados de Elementos Finitos. Cada elemento finito é ligado aos elementos vizinhos por meio de nós. Ao conjunto dos elementos e dos nós dá-se o nome de malha.

É importante lembrar que no Método de Elementos Finitos a discretização pode ocorrer com malhas não-estruturadas, nas quais a posição dos nós na malha pode ser escolhida aleatoriamente.

A partir dos anos 70, o Método de Elementos Finitos está sendo utilizado devido à, (às, ao):

- possibilidade da utilização de elementos irregulares (triângulos e retângulos) na geometria da região estudada descrevendo-a melhor;
- condições de contorno poder ser facilmente agregadas ao sistema de equações;
- facilidade de implementação em regiões onde foi feito refinamento local;
- simplicidade de um programa desenvolvido ser aplicado a diferentes geometrias e processo físicos, sem necessidade de adequação do código a cada problema.

Uma desvantagem do Método de Elementos Finitos foi apresentada por Liggett e Liu, (1983) que é a necessidade de escolha pelo usuário de elementos de dimensão adequada, de forma a atender critérios de estabilidade e convergência. Outra desvantagem do método é a dificuldade em modelar meios infinitos e a exigência pelo método de grande número de dados necessários à discretização do domínio do problema.

Em uma simulação pelo Método de Elementos Finitos, devem-se considerar os seguintes passos básicos (HUYAKORN; PINDER, 1983; WENDLAND; RÜBER, 1998):

(1) **Discretização:** O domínio do problema é discretizado em elementos finitos, juntando-se um número finito de nós;

- (2) **Aproximação:** Encontrar a formulação integral, sendo o Método de Resíduos Ponderados (BEAR, 2007), o mais usado. A forma para a função teste também deverá ser especificada, sendo o Método de Galerkin (BEAR, 2007), (seção 2.10.2.1), o mais utilizado.
- (3) **Construção das matrizes por elemento:** Uma equação matricial é formada, relacionando as variáveis nodais do elemento entre si, com base na equação diferencial parcial que descreve o processo físico;
- (4) **Construção da matriz de coeficientes global (*assembling*):** As matrizes dos elementos são agrupadas em uma matriz de coeficientes global, estabelecendo, assim, o sistema de equações algébricas válido para todo o domínio;
- (5) **Condições de contorno:** são agregadas ao sistema de equações;
- (6) **Solução do sistema de equações:** O sistema de equações algébricas é resolvido pela Eliminação de Gauss ou pelo algoritmo de Choleski ou pelo Método CG e PCG ou pelos métodos multigrid, obtendo-se os valores das incógnitas procuradas nos nós. No caso deste trabalho, potencial matricial ψ e concentração C ; e
- (7) **Pós-processamento:** Nesta fase, há condições de determinar grandezas derivadas das incógnitas primárias, por exemplo, a velocidade da água nos poros.

Outras considerações sobre o Método de Elementos Finitos poderão ser encontradas em Pinder e Gray (1977), Huyakorn e Pinder (1983), Giralt e Raviat (1986), Olsson e Heyden (2001), Morton e Mayers (2005), Javadi, Al- Najjar e Evans (2008) e Kaw e Kalu (2008).

2.10.2.1 Método dos Resíduos Ponderados e Método de Galerkin

Considere a equação diferencial

$$\mathfrak{I}(\phi(x, y, z)) - F(x, y, z) = 0 \quad (2.40)$$

em que

$\mathfrak{I}$ - operador diferencial;

ϕ - variável; e

F - função conhecida.

O primeiro passo para a solução do fluxo de água subterrânea ou problema de transporte de soluto pelo Método de Elementos Finitos é discretizar o domínio do problema, substituindo-se este domínio por uma coleção de nós e elementos conhecida de malha de elementos finitos. Os elementos consistem de dois ou mais pontos unidos por segmentos de reta ou arco. Há diferentes tipos de elementos para problemas de uma, duas ou três dimensões (Figura 5).

Figura 5 – Discretização de domínios: A, uma dimensão; B, duas dimensões; C, três dimensões.

Os elementos podem ser de qualquer tamanho. O tamanho e a forma de cada elemento na malha podem ser diferentes e, tipos diferentes de elementos podem ser usados numa malha.

A malha de elementos finitos é construída através de programas computacionais, como, por exemplo, o PZ.

Quando preparada a malha de elementos finitos, é importante lembrar que a precisão da solução obtida e o nível de esforço computacional requerido para obter a solução serão determinados em grande parte pelo número de nós da malha. Para determinar a precisão da solução obtida pelo Método de Elementos Finitos, basta repetirem os cálculos com a malha refinada para ver se a troca de resultados é significativa. Por esta razão, é melhor iniciar com uma malha constituída de poucos nós e refiná-la depois.

O segundo passo no Método de Elementos Finitos é encontrar a formulação integral para o fluxo de água subterrânea ou equação de transporte de soluto.

O Método de Resíduos Ponderados é, em geral, o mais usado nestes casos.

No Método de Resíduos Ponderados, uma solução aproximada $\hat{\phi}$ para o problema de valor inicial ou de contorno é definida, ou seja,

$$\hat{\phi}(x, y, z) = \sum_{i=1}^m \varphi_i(x, y, z) \alpha_i \quad (2.41)$$

em que

φ_i - funções interpolação;

α_i - valores das variáveis nos nós; e

m - número de nós da malha.

Quando a solução aproximada é substituída na equação diferencial (2.38), a equação diferencial não é satisfeita exatamente,

$$\mathfrak{L}(\hat{\phi}(x, y, z)) - F(x, y, z) = R(x, y, z) \neq 0 \quad (2.42)$$

em que

$R(x, y, z)$ - erro ou resíduo da solução aproximada.

O erro varia ponto-a-ponto no domínio.

No Método de Resíduos Ponderados, exige-se que

$$\int_{\Omega} v(x, y, z) R(x, y, z) d\Omega = 0 \quad (2.43)$$

em que

$v(x, y, z)$ - função teste; e

Ω - o domínio do problema.

Ω poderá ser um comprimento em um problema unidimensional, uma área em problemas bi-dimensionais e um volume em problemas tri-dimensionais.

Para resolver a equação

$$\int_{\Omega} v(x, y, z) \left[\mathfrak{I}(\hat{\phi}(x, y, z) - F(x, y, z)) \right] d\Omega = 0 \quad (2.44)$$

é preciso especificar a forma matemática da solução aproximada $\hat{\phi}$ e a função teste v .

O valor de $\hat{\phi}$, para todo elemento $\underline{e}$, $\hat{\phi}^{(e)}$, é dado por

$$\hat{\phi}^{(e)}(x, y, z) = \sum_{i=1}^n \varphi_i^{(e)} \alpha_i \quad (2.45)$$

em que

$\varphi_i^{(e)}$ - funções interpolação nos elementos (uma função interpolação por nó);

α_i - valores das variáveis em cada nó; e

n - número de nós do elemento.

Por exemplo, a solução aproximada de um elemento unidimensional com dois nós $\underline{i}$ e $\underline{j}$ pode ser escrita por

$$\hat{\phi}^{(e)}(z) = \varphi_i^{(e)}(z) \alpha_i + \varphi_j^{(e)}(z) \alpha_j \quad (2.46)$$

ou, na forma de matriz,

$$\hat{\phi}^{(e)}(z) = [\varphi^{(e)}] \{ \alpha \} \quad (2.47)$$

em que

$$\begin{bmatrix} \phi^{(e)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \phi_i^{(e)}(z) & \phi_j^{(e)}(z) \end{bmatrix} \quad (2.48)$$

$$\{\alpha\} = \begin{Bmatrix} \alpha_i \\ \alpha_j \end{Bmatrix} \quad (2.49)$$

Figura 6 – Solução aproximada para elemento unidimensional com dois nós.

Para o elemento da Figura 6, as funções interpolação (Figura 7) são funções lineares de z :

$$\phi_i^{(e)}(z) = \frac{z_j^{(e)} - z}{L^{(e)}} \quad \phi_j^{(e)}(z) = \frac{z - z_i^{(e)}}{L^{(e)}} \quad (2.50)$$

em que

$z_i^{(e)}$ e $z_j^{(e)}$ - coordenadas dos nós;

$L^{(e)}$ - comprimento do elemento ($L^{(e)} = z_j^{(e)} - z_i^{(e)}$).

O valor de $\phi_i^{(e)}$ é um no nó i e decresce linearmente para zero no nó j , enquanto o valor de $\phi_j^{(e)}$ é um no nó j e decresce linearmente para zero no nó i .

No nó i ($z = z_i^{(e)}$), tem-se que

$$\hat{\phi}^{(e)}(z_i) = \cancel{\varphi_i^{(e)}(z_i)} \alpha_i + \cancel{\varphi_j^{(e)}(z_i)} \alpha_j = \alpha_i \quad (2.51)$$

No nó j ($z = z_j^{(e)}$), tem-se que

$$\hat{\phi}^{(e)}(z_j) = \cancel{\varphi_i^{(e)}(z_j)} \alpha_i + \cancel{\varphi_j^{(e)}(z_j)} \alpha_j = \alpha_j \quad (2.52)$$

e no ponto médio do elemento $\left(z = \frac{z_j^{(e)} + z_i^{(e)}}{2} \right)$,

$$\hat{\phi}^{(e)}(z) = \cancel{\varphi_i^{(e)}(z)} \alpha_i + \cancel{\varphi_j^{(e)}(z)} \alpha_j = \frac{\alpha_i + \alpha_j}{2} \quad (2.53)$$

Figura 7 – Funções interpolação linear para elemento unidimensional com dois nós.

A forma para a função teste v da equação (2.44) também precisa ser especificada. Para isso será usado o Método de Galerkin, que é o mais usado em fluxo de águas subterrâneas e problemas de transporte de soluto. Neste método, a função teste para um nó será idêntica à função interpolação usada para definir a solução aproximada $\hat{\phi}$. Portanto, para o elemento unidimensional com dois nós,

$$v_i(z) = \frac{z_j - z}{L} \text{ para } z \geq z_i \quad (2.54)$$

$$v_j(z) = \frac{z - z_i}{L} \text{ para } z \geq z_i \quad (2.55)$$

como aparece na Figura 8.

Figura 8 - Função teste para o nó i no Método de Galerkin.

Com as formas da solução aproximada e da função teste já especificadas, pode-se calcular a integral da equação (2.44) para obter o sistema de equações lineares

$$[K] \{\alpha\} = \{F\} \quad (2.56)$$

que poderá ser resolvido em cada nó da malha.

2.10.2.2 Adaptatividade

A aproximação de elementos finitos é definida sobre um espaço de funções aproximadas. No capítulo 5, são definidos os espaços de funções $H^1(\Omega)$ e $V(\Omega)$ e os subespaços de funções de elementos finitos $\Pi^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ e $\Pi_0^1(\Omega)$. Os subespaços de funções de elementos finitos Π^1 e Π_0^1 são construídos por funções polinomiais por partes

com suporte compacto. As variáveis de estado e teste são aproximadas, respectivamente, por:

$$u \approx \sum_{j=1}^{nf} \alpha_j \varphi_j \text{ e } v \approx \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i, \text{ sendo } \varphi_i \text{ e } \varphi_j \text{ funções polinomiais.}$$

Pela definição do Método de Elementos Finitos, os parâmetros que podem ser alterados para modificar os espaços $\Pi^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ e $\Pi_0^1(\Omega)$ de funções de aproximação são:

- h : parâmetro relacionado à discretização da malha, normalmente associado ao "tamanho" do elemento;
- p : parâmetro relacionado à ordem dos polinômios, de cada elemento, utilizados como base para o espaço V .

Portanto, os espaços $\Pi^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ e $\Pi_0^1(\Omega)$ podem ser alterados aumentando-se o número de elementos ou aumentando a ordem de polinômios da base φ_i e φ_j .

A adaptatividade consiste no enriquecimento/melhoria do espaço de funções $\Pi^1(\Omega) \subset H^1(\Omega)$ e $\Pi_0^1(\Omega)$, onde este enriquecimento pode ser feito através do refinamento dos parâmetros h , p ou ainda a combinação desses. O refinamento h consiste na redução ou aumento do tamanho dos elementos da malha. Nesse método, graus de liberdade são adicionados através da divisão de elementos existentes, onde a malha necessita ser refinada, ou eliminam-se graus de liberdade, através do agrupamento de elementos, onde a malha pode ser desrefinada. O refinamento p consiste na elevação da ordem dos polinômios da base de funções teste.

Nesse trabalho, utiliza-se o refinamento h que consiste no refinamento do parâmetro h .

3 EQUAÇÕES DE RICHARDS E DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO

Devido à importância das Equações de Richards e de Advecção-Dispersão no modelo desenvolvido neste trabalho, são abordadas, neste capítulo, a demonstração da Equação de Richards, nas três formas de apresentação, a partir da adaptação da Lei de Darcy para solos não-saturados e do Princípio da Conservação da Massa (seção 3.1), a relação da velocidade de Darcy com a velocidade da água nos poros (seção 3.1.1), bem como a demonstração da Equação de Advecção-Dispersão (seção 3.2).

3.1 Lei de Darcy e Equação de Richards

No caso de movimento na fase líquida, para efeito de quantificação do movimento, o potencial total da água não inclui a componente osmótica, porque o potencial osmótico não causa movimento significativo de água, apenas os sais se movem até o equilíbrio ser atingido.

Define-se, então, o potencial hidráulico H ou potencial total, sem a componente osmótica, ou seja,

$$H = \psi_p + \psi_g + \psi_m \quad (3.1)$$

Como ψ_p e ψ_m se referem a pressões, o primeiro, às positivas e o segundo, às negativas, podem ser agrupadas em uma única componente $\psi = \psi_p + \psi_m$. A componente gravitacional ψ_g pode ser expressa em termos da altura z , sendo a coordenada z orientada positivamente para cima. Portanto, o potencial hidráulico (STONE et al., 2006) se apresenta como

$$H = \psi + z \quad (3.2)$$

A água no estado líquido se move quando diferenças de potencial hidráulico H existem nos diferentes pontos do sistema, no sentido do decréscimo do potencial H .

Em Reichardt e Timm (2004), Buckingham adaptou a Lei de Darcy para solos não-saturados, introduzindo a dependência da umidade nessa equação, formulando a Lei de Darcy-Buckingham,

$$q = -K(\theta).gradH \quad (3.3)$$

em que

$K(\theta)$ - condutividade hidráulica do solo não-saturado [LT^{-1}].

Como as equações de fluxo e de transporte deste trabalho serão tratadas unidimensionalmente e em solos não-saturados, é interessante considerar a Lei de Darcy-Buckingham do fluxo vertical não-saturado, q_z , obtida substituindo-se a equação (3.2) na (3.3),

$$\begin{aligned} q_z &= -K(\theta) \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \\ q_z &= -K(\theta) \left(\frac{\partial(\psi)}{\partial z} + 1 \right) \\ q_z &= -K(\theta) - K(\theta) \frac{\partial\psi}{\partial z} \end{aligned} \quad (3.4)$$

Combinando-se a equação (3.4) com a Equação da Continuidade (WENDLAND, 2004) dada por

$$-\frac{\partial q_z}{\partial z} = \frac{\partial \theta}{\partial t} \quad (3.5)$$

obtém-se

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] \quad (3.6)$$

que é a forma mista da Equação de Richards, unidimensional (HE; REN, 2009).

$$\text{Sabe-se que } \frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial \theta}{\partial \psi} \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = C_s(\psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} \quad (3.7)$$

em que

$C_s(\psi)$ - capacidade hídrica específica [1/L].

Substituindo-se (3.7) em (3.6), obtém-se a Equação de Richards, formulada em termos de potencial ψ , unidimensional,

$$C_s(\psi) \cdot \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[K \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] \quad (3.8)$$

Tem-se que

$$\frac{\partial \psi}{\partial z} = \frac{\partial \psi}{\partial \theta} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} = \frac{1}{C_s(\psi)} \cdot \frac{\partial \theta}{\partial z} \quad (3.9)$$

Substituindo-se (3.9) em (3.6), obtém-se a Equação de Richards, formulada em termos de umidade θ , unidimensional,

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial K}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z} \left[D(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right] \quad (3.10)$$

em que

$$D(\theta) = \frac{K(\theta)}{C_s(\theta)} \text{ - difusividade hidráulica não-saturada [L.L/T].}$$

Portanto, o fluxo de água em meio poroso não-saturado é dado pela Equação de Richards, que expressa o Princípio da Conservação da Massa e a Lei de Darcy-Buckingham e pode ser escrita, unidimensionalmente, nas três formas equivalentes, equações (3.6), (3.8) e (3.10).

Os termos do membro esquerdo das equações (3.6), (3.8) e (3.10) descrevem os efeitos da drenagem e preenchimento dos poros. Com relação aos membros direitos, a derivada espacial da carga hidráulica descreve a difusão da água em meio poroso.

3.1.1 Relação entre a Velocidade de Darcy e a Velocidade da Água nos Poros

O fluxo de água dado pela Lei de Darcy, embora tenha as dimensões de uma velocidade, não representa exatamente a velocidade com que a água se move no solo.

A velocidade real v da água no solo, também chamada de velocidade da água nos poros, é dada pelo volume de água V_a que passa por unidade de tempo pela área da seção transversal de poro A' ocupados pela água, ou seja,

$$v = \frac{V_a}{A' \cdot t} \quad (3.11)$$

Considerando-se um solo saturado, a velocidade real v da água no solo será

$$v = \frac{q}{n} \quad (3.12)$$

Quando o solo é não-saturado, a área disponível para o fluxo será menor ainda, porque a água só vai se mover pelos poros que estão cheios de água e, portanto,

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (3.13)$$

Como a Lei de Darcy-Buckingham na direção z é dada pela equação (3.4), a velocidade da água nos poros, na direção z , é dada por

$$v_z = -K(\theta) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \frac{1}{\theta} \quad (3.14)$$

3.2 Equação de Advecção-Dispersão

Nesta seção, é derivada a Equação de Transporte de Solute na zona não-saturada do solo, na forma unidimensional, utilizada neste trabalho. O transporte de solutos ocorre por três processos, ou seja, advecção, difusão e dispersão mecânica (seção 2.4).

O fluxo do transporte de soluto por advecção é dado por

$$J_m = q_z C \quad (3.15)$$

em que

J_m - fluxo de massa do soluto no solo [$M/L^2 T$];

q_z - fluxo de água na direção vertical [L/T]; e

C - concentração do soluto [M/L^3].

O fluxo do transporte de soluto por difusão é dado por

$$J_d = -D_d \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \quad (3.16)$$

em que

J_d - fluxo de difusão do soluto no solo [$M/L^2 T$];

D_d - coeficiente de difusão [L^2/T];

C - concentração do soluto [M/L^3];

θ - umidade volumétrica [L^3/L^3]; e

z - distância [L].

O fluxo do transporte de soluto por dispersão mecânica é dado por

$$J_{zz} = -D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \quad (3.17)$$

em que

J_{zz} - fluxo de dispersão mecânica do soluto no solo $[M/L^2 T]$;

D_{zz} - coeficiente de dispersão mecânica $[L^2/T]$;

C - concentração do soluto $[M/L^3]$;

θ - umidade volumétrica $[L^3/L^3]$; e

z - distância $[L]$.

Pela seção 2.4.1.3,

$$D = D_d + D_{zz} \quad (3.18)$$

em que

D - coeficiente de dispersão hidrodinâmica $[L^2/T]$;

D_d - coeficiente de difusão $[L^2/T]$; e

D_{zz} - coeficiente de dispersão mecânica $[L^2/T]$.

A Lei da Conservação da Massa para transporte de solutos requer que a taxa de variação de massa no volume de controle seja igual à taxa de soluto entrando mais a taxa de produção desse soluto no volume de controle por vários processos físicos e químicos.

Considerando a taxa de soluto que entra no volume de controle, na direção z , como J_z e a taxa de soluto que sai, na direção z , do volume de controle como $J_z + \frac{\partial}{\partial z}(J_z)$, obtém-se, na direção z ,

$$-\frac{\partial}{\partial z}(J_z) = -\frac{\partial}{\partial z}(q_z C) + D \frac{\partial^2}{\partial z^2}(\theta C) \quad (3.19)$$

em que

$$J_z = J_m + J_d + J_{zz} \quad (3.20)$$

J_z - fluxo de soluto no solo $[M/L^2 T]$;

J_m - fluxo de massa do soluto no solo $[M/L^2 T]$;

J_d - fluxo de difusão do soluto no solo $[M/L^2 T]$; e

J_{zz} - fluxo de dispersão mecânica do soluto no solo $[M/L^2 T]$.

A taxa da produção de soluto devido à sorção/desorção entre um soluto e o meio poroso no volume de controle é dada por (ISTOK, 1989)

$$\left(\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}\right)_{\text{sorção}} = -\rho_b K_d \frac{\partial C}{\partial t} \quad (3.21)$$

em que

ρ_b – densidade aparente do solo $[ML^{-3}]$; e

K_d – coeficiente de distribuição $[L^3 M^{-1}]$.

A taxa da produção de soluto devido à decaimento radioativo é dada por (ISTOK, 1989)

$$\left(\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}\right)_{\text{decaimento}} = -\lambda(\theta C + \rho_b K_d C) \quad (3.22)$$

em que

λ – coeficiente de decaimento de primeira ordem $[T^{-1}]$;

ρ_b – densidade aparente do solo $[ML^{-3}]$; e

K_d – coeficiente de distribuição $[L^3 M^{-1}]$.

Considerando-se a taxa de variação de massa como $\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}$, a Lei da Conservação da Massa e as equações (3.19), (3.21) e (3.22), obtém-se a Equação de Advecção-Dispersão dada por

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z \theta C) = \frac{\partial}{\partial z}\left(D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z}\right) - \frac{\partial}{\partial t}(K_d \rho_b C) - \lambda(\theta C + K_d \rho_b C) \quad (3.23)$$

C – concentração do soluto na solução do solo $[ML^{-3}]$;

v_z – velocidade da água nos poros, na direção z $[LT^{-1}]$;

D_{zz} – coeficiente de dispersão mecânica desde que a contribuição da difusão molecular para a dispersão seja desprezada [L^2T^{-1}];

λ – coeficiente de decaimento de primeira ordem [T^{-1}];

K_d – coeficiente de distribuição [L^3M^{-1}];

ρ_b – densidade aparente do solo [ML^{-3}]; e

θ – umidade volumétrica [L^3L^{-3}].

Como o fator retardo R devido à sorção do solo é dado por

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{\theta} \quad (3.24)$$

obtem-se a Equação de Advecção- Dispersão considerada neste trabalho:

$$\frac{\partial}{\partial t}(R\theta C) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z \theta C) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \right) - \lambda R \theta C \quad (3.25)$$

4 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Neste capítulo, estão descritos estudos relacionados à simulação de fluxo e transporte de solutos, que contribuíram para o desenvolvimento deste trabalho, fornecendo fundamentação e alicerce, daí a importância deste. Na seção 4.1, é apresentado um breve histórico sobre o fluxo de água e o transporte de solutos. Na seção 4.2, são mostrados estudos sobre a modelagem do fluxo de água nos resíduos sólidos domiciliares ou na zona não-saturada do solo. Na seção 4.3, é abordado o transporte de solutos em aterros sanitários ou em solos não-saturados e na seção 4.4, o transporte de chorume em aterros sanitários ou na zona não-saturada do solo.

4.1 Breve Histórico sobre o Fluxo de Água e o Transporte de Solutos

A primeira experiência que quantificou o fluxo num meio poroso saturado foi publicada por Darcy (1856). A Lei de Darcy constitui a base dos métodos de avaliação quantitativa de recursos hídricos subterrâneos (MANOEL FILHO, 2000).

A Lei de Darcy foi adaptada mais tarde para solos não-saturados, com a denominação de Lei de Buckingham-Darcy ou Lei de Darcy-Buckingham (RICHARDS, 1931).

Richards formulou as bases teóricas para descrever a percolação da água em um meio poroso não-saturado, em 1928, expondo o Princípio de Buckingham. A equação geral do movimento da água em um meio poroso não-saturado, utilizando o Princípio da Conservação da Massa foi apresentada em 1931 (RICHARDS, 1931).

Na década de 30, a teoria do fluxo em meios porosos foi muito usada na área de engenharia de petróleo (MUSKAT, 1937). O transporte de solutos era aplicado principalmente em estudos de intrusão de água marinha, em aquíferos terrestres. Geralmente, o método de análise se resumia num cálculo advectivo, no qual se supunha que o soluto se

movia com a velocidade média da água subterrânea e não recebia influências de processos de adsorção, reação cinética, etc.

Na década de 50, o problema de transporte foi tema de pesquisa no campo da engenharia química, principalmente transporte em meios porosos. Ficou reconhecido que o transporte advectivo puro não descrevia completamente a dinâmica dos solutos. Foram desenvolvidas teorias de dispersão hidrodinâmica (DE JOSSELIN DE JONG, 1958; SAFFMAN, 1959; SCHEIDEGGER, 1963). Expressões descrevendo o processo de adsorção, a partir de estudos em colunas de intercâmbio iônico, foram obtidas (VERMEULEN; HIESTER, 1952). Nesta época, também, iniciou-se o estudo sobre o destino de materiais nucleares no subsolo, considerando o regime do fluxo subterrâneo como um sistema hidrodinâmico e físico-químico em conjunto, onde a qualidade da água depende de uma seqüência de processos que ocorrem na trajetória do fluxo. Nas décadas seguintes, este conceito foi aplicado ao estudo da evolução da qualidade da água subterrânea natural e à problemas de poluição devido a materiais não-radioativos.

Também na década de 50, surgiram as primeiras aplicações da simulação, avaliando a circulação das águas, usando analogias com modelos elétricos, em forma de circuitos, onde o fluxo da água era representado por correntes elétricas. Definiram-se, portanto, as bases para o início da simulação do transporte nas décadas futuras. Algumas considerações essenciais foram identificadas, ou seja, (1) o desenvolvimento de uma teoria de transporte de solutos; (2) a importância da simulação como uma ferramenta analítico-preditiva; e (3) o surgimento de um ponto de vista hidroquímico onde a qualidade da água depende de uma seqüência de reações que ocorrem na trajetória do fluido.

Durante os anos 60, ocorreram contribuições sobre a teoria de advecção-dispersão (BEAR, 1961). A introdução dos avanços computacionais, na década seguinte, ajudou na solução de problemas de campo cada vez mais complexos. O desenvolvimento do Método de Elementos Finitos e a utilização de códigos de cálculo tridimensionais tiveram grande influência neste processo.

Na década de 70, foi proposto o primeiro modelo numérico que solucionava a Equação de Richards, usando a técnica “Line Sucessive Over-Relaxation” (LSOR), apesar das instabilidades numéricas e dificuldades de convergência do modelo (FREEZE, 1971).

Após esta solução, uma variedade de técnicas, utilizando o Método de Diferenças Finitas e o Método de Elementos Finitos, tem sido usada para resolver a Equação de Richards, formulada tanto em termos de umidade volumétrica θ , quanto em termos de potencial matricial ψ . Vários trabalhos foram apresentados por Neuman (1973), Narasimhan e

Witherspoon (1976), Haverkamp *et al.* (1977), Hayhoe (1978), Haverkamp e Vauclin (1979), Cooley (1983), Hornung e Messing (1983), Huyakorn, Lester e Mercer (1983), entre outros, mas apresentavam significativos erros no balanço de massa.

Na década de 80, foi realizado o estudo da trajetória percorrida por uma substância orgânica e foram determinados os correspondentes parâmetros de transporte e de biodegradação (RUBIN, 1983). Modelos geoquímicos, considerando o equilíbrio entre a água subterrânea e seu entorno, foram desenvolvidos (PARKHURST; THORSTENSON; PLUMMER, 1990), bem como a introdução de reações de equilíbrio inorgânicas na simulação do transporte de solutos (GILLHAM; CHERRY, 1982). Os trabalhos de Nielsen, van Genuchten e Biggar (1986) e Milly (1988) contêm uma revisão geral da literatura abordando estes assuntos.

Allen e Murphy (1986) e Celia, Ahuja e Pinder (1987) apresentaram a nova formulação da Equação de Richards, a mista, que é matematicamente equivalente às anteriores, ou seja, a formulada em termos de umidade volumétrica θ e em termos de potencial matricial ψ . Allen e Murphy (1986) chamaram sua aproximação de Método Quasi-Newton, enquanto Celia, Ahuja e Pinder (1987) referiram-se ao método como Método de Picard Modificado, sendo que foi apresentado um excelente balanço de massa nas soluções numéricas dos dois casos. Zarba (1988) usou o método iterativo de Picard Modificado, com aproximações com diferenças finitas no tempo e elementos finitos no espaço e também demonstraram um perfeito balanço de massa.

Na década de 90, Celia, Bouloutas e Zarba (1990) chegaram a conclusões importantes, em que aproximações com elementos finitos podem produzir soluções oscilatórias, apesar da conservação da massa, para problemas de infiltração, em solos inicialmente muito secos.

Ross e Bristow (1990) linearizaram a Equação de Richards, usando a transformação de Kirchhoff. A técnica apresentou bons resultados apenas para solos homogêneos, além de aumentar os esforços computacionais. Srivastava e Yeh (1991) propuseram uma solução analítica simplificada da Equação de Richards, sendo que as funções não-lineares presentes na equação foram aproximadas por funções exponenciais.

Pode-se ressaltar a grande quantidade de códigos de cálculo de transporte, para o caso de fluxo saturado (PADOIN *et al.*, 2006).

Nos últimos dez anos, os temas de pesquisa concentram-se nas áreas de transporte de solutos em meios fraturados (WENDLAND, 2004), de fluxo em sistemas multifásicos (WENDLAND; FLENSBERG, 2002) e de transporte de solutos em meios não-saturados

(HANCOCK et al., 2008). Alguns dos trabalhos referentes a fluxo de água e transporte de solutos na zona não-saturada do solo serão citados nas seções 4.2, 4.3 e 4.4. O crescimento da potência dos computadores, realizando elevado número de operações em curto tempo, e o aumento de técnicas de processamento permitirão a resolução de problemas de grande porte, representados por modelos sofisticados.

4.2 Fluxo de Água nos Resíduos Sólidos Domiciliares ou na Zona Não-Saturada do Solo

Philip (1957) propôs uma solução semi-analítica da Equação de Richards no estudo da infiltração de água em um meio poroso homogêneo, de profundidade infinita, com umidade volumétrica uniforme θ_i e com a superfície do solo (condição de contorno) mantida com umidade volumétrica $\theta_0 > \theta_i$.

Straub e Lynch (1982) aplicaram a teoria do fluxo não-saturado em aterros sanitários de resíduos sólidos domiciliares. Para modelar as características não-saturadas dos resíduos sólidos domiciliares, usaram a equação (4.1) do potencial matricial $\psi(\theta)$ e a equação (4.2) da condutividade hidráulica $K(\theta)$ dadas por

$$\psi(\theta) = \psi_s [\theta / \theta_s]^{-b} \quad (4.1)$$

em que

ψ_s - potencial matricial na saturação [L];

b - parâmetro de ajuste [];

θ_s - umidade volumétrica no ponto de saturação [$L^3 L^{-3}$]; e

θ - umidade volumétrica [$L^3 L^{-3}$].

$$K(\theta) = K_s [\theta / \theta_s]^B \quad (4.2)$$

em que

$K(\theta)$ - condutividade hidráulica do solo não-saturado [LT^{-1}];

B - parâmetro de ajuste []; e

K_s - condutividade hidráulica do solo saturado [LT^{-1}].

Os valores de $\psi_s = 100$ cm, $b = 7$ e $B = 8$ ou $B = 9$ mostraram um bom ajuste aos resultados experimentais realizados.

Korfiatis et al. (1984) formularam e calibraram o modelo matemático para simular o movimento vertical unidimensional da água, em resíduos sólidos domiciliares, constituído pela Equação de Richards e pelas equações (4.1) e (4.2), propostas por Straub e Lynch (1982).

Análises de sensibilidade mostraram que uma grande variação no parâmetro de ajuste b do potencial matricial teve pouco efeito na simulação, enquanto que uma pequena variação no parâmetro de ajuste B da condutividade afetava significativamente os resultados da simulação.

Foram as definições dadas à θ_s e K_s que constituíram a diferença básica entre os estudos de Korfiatis et al. (1984) e de Straub e Lynch (1982). Korfiatis et al. definiram θ_s como a umidade volumétrica na saturação, ao passo que Straub e Lynch definiram θ_s igual à capacidade de campo dos resíduos. Analogamente, Korfiatis et al. definiram K_s como a condutividade hidráulica na saturação, enquanto que Straub e Lynch a definiram igual à taxa de aplicação diária de água.

Demetracopoulos et al. (1986) desenvolveram análise de sensibilidade no modelo de Korfiatis et al. (1984). O trabalho avaliou os resultados do modelo para solos saturados e não-saturados. As simulações com superfícies não-saturadas foram mais sensíveis às mudanças na condutividade hidráulica e no parâmetro de ajuste B . As variações do tamanho da malha e de tempo na solução numérica pouco influenciaram nos resultados do trabalho.

Celia, Bouloutas e Zarba (1990) resolveram a Equação de Richards, formulada em termos de potencial ψ , pelo Método de Elementos Finitos. Na aproximação espacial, os autores consideram as funções-base lineares por partes e na derivada temporal, é aplicado o esquema de Euler Implícito.

Noble e Arnold (1991) simularam o fluxo de água em um aterro sanitário, utilizando a Equação de Richards, formulada em termos de umidade volumétrica, e em um experimento em escala de laboratório, usando o modelo unidimensional FULFILL, elaborado por eles. O modelo desenvolvido calcula, portanto, a variação da umidade e a variação do fluxo no tempo, com condições iniciais e de contorno, através do Método de Diferenças Finitas, incluindo o efeito da força gravitacional.

Noble e Arnold (1991) estudaram as equações de $K(\theta)$ e $\psi(\theta)$ usadas por Straub e Lynch (1982) e Korfiatis et al. (1984) e formularam uma relação exponencial para $K(\theta)$ e $\psi(\theta)$ (equações (4.3), (4.4)):

$$K(\theta) = K_s e^{\gamma(\theta^*-1)} \quad (4.3)$$

$$\psi(\theta) = \psi_s e^{-a\theta^*} \quad (4.4)$$

Considerando

$$\theta^* = (\theta - \theta_r) / (\theta_s - \theta_r) \quad (4.5)$$

$K(\theta)$ - condutividade hidráulica do solo não-saturado [LT^{-1}];

$\psi(\theta)$ - potencial matricial do solo não-saturado [L];

a - parâmetro de ajuste [];

γ - parâmetro de ajuste [];

θ^* - umidade volumétrica normalizada [$L^3 L^{-3}$];

θ_s - umidade volumétrica do solo no ponto de saturação [$L^3 L^{-3}$]; e

θ_r - umidade volumétrica residual do solo [$L^3 L^{-3}$].

Uma diferença importante entre a formulação exponencial e a de potência para $K(\theta)$ e $\psi(\theta)$ é que a primeira assume um valor máximo finito para ψ quando a umidade é zero ($\theta = 0$), ao passo que a equação de potência prevê um ψ infinito, quando $\theta = 0$.

Ahmed *et al.* (1992) desenvolveram o modelo *Flow Investigation for Landfill* (FILL) aperfeiçoado mais tarde por Khanbivardi, Ahmed e Gleason (1995). Na modelagem do movimento de água, o modelo usa uma combinação de teorias de fluxo em meio saturado e não-saturado. Para simular o fluxo de água no sistema de drenagem, usa-se a teoria do fluxo em meio saturado e a teoria de fluxo em meio não-saturado para simular o fluxo de água através dos resíduos sólidos domiciliares.

Al-Yousfi, Pohland e Vasuki (1992) formularam a equação da condutividade hidráulica em função da umidade volumétrica (equações (4.6) e (4.7)). Para isto, desenvolveram uma análise estatística de acordo com a teoria da entropia probabilística, que usa o conceito de que o sistema tem uma tendência natural de se aproximar e de se manter em

seu estado mais provável, juntamente com as técnicas de maximização e minimização (teoria dos jogos) e de observações aleatórias (teoria da informação).

Para $\theta > \theta_r$

$$K(\theta) = -K_s (\theta - \theta_r) \ln \left\{ 1 + \left[\exp\left(\frac{-1}{\theta - \theta_r}\right) - 1 \right] \frac{\theta}{\theta_s} \right\} \quad (4.6)$$

Para $\theta \leq \theta_r$

$$K(\theta) = 0 \quad (4.7)$$

$K(\theta)$ - condutividade hidráulica do solo não-saturado [LT^{-1}].

A equação (4.6) ajustou-se muito bem às equações de Noble e Arnold (1991) e às de Korfiatis et al. (1984).

Zeiss e Major (1993) estudaram os padrões de fluxo de umidade nos resíduos sólidos domiciliares e determinaram as variáveis que eram influenciadas pela variação da compactação desses resíduos, usando colunas experimentais. Essas colunas foram preenchidas com resíduos sólidos domiciliares e foram estudados, em função da compactação, a densidade, a porosidade, a capacidade de campo, a condutividade hidráulica e o fluxo através de caminhos preferenciais (*channeling*).

Os resultados do experimento mostraram que o fluxo por caminhos preferenciais não era influenciado significativamente pelo aumento da densidade e conseqüente diminuição da porosidade. Houve, também, mudanças muito pequenas no tempo de percolação da água, na capacidade de campo e na condutividade hidráulica não-saturada, em função da variação da compactação.

Zeiss e Uguccioni (1997) tentaram caracterizar o regime de fluxo nos canais ou macroporos, determinando o número de Reynolds do escoamento (equação (4.8)), ou seja,

$$R_e = \frac{\rho q d}{\mu} \quad (4.8)$$

em que

R_e - número de Reynolds [];

ρ - densidade ou massa específica da água [M/L^3];

q - taxa específica de descarga [L/T];

d - diâmetro médio do poro [L]; e

μ - viscosidade [M/LT].

Em cinco dos oito contêineres estudados, o número de Reynolds encontrado foi maior que dez, indicando que o fluxo estava acima do limite do fluxo laminar ou Darciano.

Bordier, Rathle e Zimmer (1997) realizaram experimentos que consistiram em recircular água em materiais porosos grosseiros como, por exemplo, brita e geosintéticos, com diferentes vazões e diferentes gradientes hidráulicos entre a entrada e a saída. Mostraram que as equações de fluxo em materiais porosos grosseiros não apresentavam uma relação linear entre o gradiente hidráulico e a velocidade macroscópica prevista por Darcy, até mesmo nos experimentos com gradiente hidráulico baixo. O número de Reynolds para todos os experimentos foi acima de 10.

Venkataramani e Rao (1998) investigaram os limites entre o fluxo laminar, o fluxo turbulento transitório e o fluxo turbulento completo e mostraram que o fluxo turbulento transitório foi o encontrado geralmente nas velocidades pesquisadas (10^{-2} a 10^{-4} m/s).

Prasad, Kumar e Sekhar (2001) simularam o fluxo unidimensional de água em zona não-saturada. A solução da Equação de Richards, formulada em termos de potencial ψ , foi obtida pelo Método de Elementos Finitos. Na aproximação espacial, são consideradas as funções-base lineares lagrangeanas (FARTHING et al., 2007) e, na derivada temporal, é aplicado o esquema de Euler Implícito. Os resultados obtidos foram validados com os dados de Celia, Bouloutas e Zarba (1990). Foram mostrados os efeitos da variação dos parâmetros do solo não-saturado α e n (equações (5.4) e (5.5), seção 5.1) em relação ao potencial matricial e a condutividade hidráulica.

Vasconcellos e Amorim (2001) realizaram a simulação numérica da infiltração de água em meios porosos não-saturados homogêneos. Utilizaram o Método de Diferenças Central no espaço, o esquema de Euler Explícito no tempo, o Método Iterativo de Picard para resolver o sistema de equações algébricas e as médias aritmética, harmônica e geométrica para o cálculo da condutividade hidráulica.

Prevedello et al. (2002) desenvolveram um modelo numérico na linguagem *Beginner's All-purpose Symbolic Instructional Code* (BASIC), que simula o processo de infiltração vertical da água no solo homogêneo ou estratificado, com uma dada umidade volumétrica inicial. Este modelo foi desenvolvido linearizando a Equação de Richards no espaço e usando o Método de Newton-Raphson para resolver a equação no tempo.

Miller, Abhishek e Farthing (2006) resolveram a Equação de Richards, em uma dimensão, usando método adaptativo, tanto no tempo quanto no espaço. A solução dessa equação é obtida pelo Método de Diferenças Finitas. A discretização espacial h-adaptativa é implementada no Método de Linhas Estruturadas. A adaptatividade temporal usa ordem variável, a aproximação com passo de tempo variável é baseada no esquema de Euler Implícito.

Caputo e Stepanyants (2008) estudaram o fluxo de água para três modelos de retenção de água no solo, o de Brooks-Coley, Mualen-van Genuchten e Storm-Fujita. Os resultados foram comparados. Todos os modelos mostraram estabilidade no movimento das frentes de molhamento. A Equação de Richards foi integrada numericamente pelo Método de Volumes Finitos.

4.3 Transporte de Solutos em Solos Não-Saturados

Multimedia Exposure Assessment Model (MULTIMED) foi desenvolvido pela U.S. Environmental Protection Agency (EPA) para simular o movimento de contaminantes no aterro (SALHOTRA et al., 1990; SHARP-HANSEN et al., 1990). O modelo consiste de módulos que estimam liberação de contaminantes de um aterro para o ar, o solo, o lençol freático e a água da superfície.

Ritterling e Stansbury (1998) usaram o MULTIMED, que utiliza métodos de solução analítica e semi-analítica, para resolver equações matemáticas que descrevem o fluxo e o transporte de contaminantes.

Klein et al. (1997) executaram modelo de simulação para predizer o fluxo de água, a concentração de pesticida no solo e a concentração de pesticida no chorume avaliado em 39 lisímetros. Foram utilizados três modelos computacionais diferentes, *Pesticide Root Zone Model - I* (PRZM-1) (CARSEL et al., 1984), *Pesticide Leaching Model 1.5* (PELMO 1.5) (KLEIN, 1994) e *Pesticide Leaching Model 2.0* (PELMO 2.0) (KLEIN, 1995). Para calcular a

evapotranspiração, o modelo PRZM-1 usa a Equação de Hamon (HAMON, 1961), enquanto que o PELMO 1.5 e o PELMO 2.0 utilizam a Equação de Haude (SEILER; GAT, 2007). Para calcular a sorção, usam a Equação de Freundlich. PELMO 2.0 prediz o chorume acumulado do lisímetro com boa aproximação, enquanto que PRZM-1 e PELMO 1.5 são menos precisos. É apropriado para medir volumes de chorume e concentrações de pesticidas no chorume. PELMO inclui advecção e dispersão.

O modelo matemático *Simulação de Movimento de Água e Solutos no Solo* (SIMASS) (COSTA et al., 1999) simulou o transporte unidimensional de água e soluto no solo, sob condições de escoamento não-permanente. As equações são resolvidas numericamente pelo Método de Diferenças Finitas. O modelo permite, entre outras características, obter as distribuições de umidade volumétrica e de concentração de nitrato no solo, utilizando-se condições de contorno do tipo potencial constante e do tipo fluxo constante e, ainda, estimar a condutividade hidráulica do solo não-saturado. O desempenho do SIMASS foi comparado com o modelo CXTFIT, versão 1.0 (COSTA, 1998; ROSSI; MIRANDA; DUARTE, 2007).

Tsai et al. (2000) empregaram o Método Analítico Finito para resolver as equações de fluxo e transporte de soluto (BEAR, 1979), em duas dimensões, na zona não-saturada. As soluções numéricas analíticas finitas obtidas foram verificadas com as soluções de elementos finitos do código *Finite Element Model of Water* (FEMWATER) (YEH; WARD, 1980; YEH, 1987).

O modelo computacional *Miscible Displacement* (MIDI) (MIRANDA, 2001) foi desenvolvido em linguagem de programação Visual Basic 5.0 para simulação da dinâmica de solutos no solo. As equações foram resolvidas numericamente em um sistema de volumes finitos. O modelo apresentou bom ajuste para os perfis de concentração de nitrato e de umidade simulados em relação aos medidos, em condições de laboratório, em coluna vertical de solo não-saturado.

Carey, Bidwell e McLaren (2002) mostraram que alta concentração de cromo foi encontrada no chorume dos lisímetros que receberam a aplicação de CCA, ou seja, soluções de cobre, cromo e arsênio, na Nova Zelândia. Foi feita uma simulação da chuva sobre os lisímetros, por um período de 102 dias, depois da aplicação de CCA. Em média, 26% do cromo aplicado foram coletados no chorume após os 102 dias e 74% do cromo ficaram retidos no perfil do solo após a lixiviação. Nem o cobre, nem o arsênio foram detectados no chorume, indicando que estes elementos ficaram retidos no perfil do solo. Foi utilizado o modelo *State-Space Mixing Cell* (SSMC) (BIDWEL, 1999) para simular os processos do transporte

advectivo-dispersivo e as curvas breakthrough (BTCs), operando dentro de *Matrix Laboratory* (MATLAB) desenvolvido por Moler (1970).

Abdou e Flury (2004) fizeram uma simulação numérica bi-dimensional num solo arenoso, em condições de fluxo de água não-saturado. Usou-se o Método de Elementos Finitos e o código CHAIN-2D (SIMUNEK; van GENUCHTEN, 1994). As funções $\theta(\psi)$ e $K(\psi)$, consideradas neste trabalho, foram dadas por van Genuchten (1980). Foram feitas comparações de fluxo e transporte com três diferentes estruturas de solo (isotrópico, horizontal e vertical). Os resultados mostraram que a formação de empoçamento ocorre na base do lisímetro para as três estruturas do solo e que ele ocorre mais rapidamente e foi mais pronunciado com a estrutura vertical (efeito do fluxo preferencial). Curvas breakthrough de um soluto conservativo (brometo) mostraram que solutos se movem mais rapidamente em campo do que no lisímetro. Menos diferenças entre lisímetros e campo foram encontradas com a estrutura horizontal do que com as estruturas isotrópica e vertical.

Buczko et al. (2004) simularam o transporte de cromo na zona não-saturada para prever a chegada do contaminante no lençol freático. O trabalho consistiu de três partes:

- a) estimativa das características emitidas dos metais pesados na zona contaminada perto da superfície do solo;
- b) simulações de transporte baseadas em experimentos com lisímetro monolítico; e
- c) simulação a longo-prazo da emissão do contaminante, transporte e inibição para o lençol freático.

Para simular o fluxo da água e o transporte do cromo, foi usado o modelo de elementos finitos HYDRUS-1D (SIMUNEK; SEJNA; VAN GENUCHTEN, 1998).

Miranda et al. (2005), utilizando o modelo MIDI (MIRANDA, 2001), apresentaram a simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não-saturado. Os parâmetros de transporte do íon potássio foram determinados no Latossolo Vermelho-Amarelo, fase arenosa, através do modelo CXTFIT (TORIDE; LEIJ; van GENUCHTEN, 1999), desenvolvido pelo U. S. Salinity Laboratory-USDA-Riverside-CA, versão 2.1.

Concluiu-se que o modelo foi capaz de simular, com bom ajuste, a umidade volumétrica e o deslocamento do potássio, mostrando inclusive o seu retardamento, em relação à frente de molhamento.

Costa e Castro (2007) propuseram um método numérico-analítico, ou seja, numérico em relação ao espaço e analítico em relação ao tempo, para problemas transientes de

transporte de contaminantes em uma dimensão. A equação unidimensional de transporte de contaminante usada neste trabalho foi dada por Istok (1989).

Rocha et al. (2008) simularam as concentrações de nitrato e de amônio no solo, considerando-se as transformações biológicas e o efeito da temperatura e do teor de umidade volumétrica do solo, através de modificações no modelo de transporte de soluto no solo denominado *Simulação de Movimento de Água e Solutos no Solo, considerando a presença de Cultura* (SIMASS-C) (COSTA, 1998), aprimorado por Corrêa (2001). A elaboração da rotina computacional, na linguagem Delphi 7.0, resultou no SIMASS-C modificado (ROCHA et al., 2008). Foram considerados os processos de mineralização e nitrificação no modelo, resultando numa melhoria na estimativa da concentração de nitrato e de amônio.

4.3.1 Transporte de Chorume de Aterros Sanitários

Lu (1996) apresentou um modelo matemático para prever a quantidade e qualidade de chorume do incinerador de resíduo do aterro. O modelo foi baseado na equação de fluxo na zona não-saturada (STRAUB; LYNCH, 1982), na equação de transporte de soluto (STRAUB; LYNCH, 1982) e na equação de balanço hídrico do sistema de coleta do chorume (DEMETRACOULOS, 1988). Usando um esquema de Diferenças Finitas Explícitas no aterro, as equações diferenciais parciais foram discretizadas na direção vertical e transformadas nas equações diferenciais ordinárias, que foram resolvidas usando o integrador Adams-Moulton do IMSL (International Mathematical and Statistical Libraries) de 1987.

Chen e Wang (1997) estudaram o fenômeno de transporte de chorume no aterro sanitário de Taichung (Taiwan). Para identificar os parâmetros e simular o modelo matemático do transporte das matérias orgânicas do chorume foi utilizado o SEFTRAN (NAGRA, 1994). O modelo é de transporte tri-dimensional e foi simplificado para uma dimensão, usa o Método de Elementos Finitos e o Método de Galerkin (ISTOK, 1989) e seu mecanismo inclui convecção, dispersão, retardamento e decaimento biológico.

Kim *et al.* (1999) utilizaram o Método de Diferenças Finitas para reduzir a contaminação das águas subterrâneas próximas ao Aterro de Kimpo na Coreia. O potencial matricial e a concentração de poluentes foram modelados usando-se *Flow Model* (MODFLOW) (McDONALD; HARBAUGH, 1988) e *Modular Mass transport 3-Dimensions*

(MT3D) (ZHENG, 1990). O primeiro é um modelo de fluxo tridimensional e MT3D, um modelo de transporte.

McCreanor e Reinhart (2000) usaram o modelo *The United States Geological Survey's Saturated-Unsaturated Flow and Transport* (SUTRA) (VOSS, 1984) para modelar chorume em massas de resíduo homogêneas anisotrópicas e heterogêneas. SUTRA é bi-dimensional e utiliza os Métodos de Diferenças Finitas e de Elementos Finitos.

Fatta, Naoum e Loizidou (2002) estudaram a caracterização do chorume originário do aterro Ano Liosia, em Atenas, Grécia, e a qualidade do aquífero local, com os mesmos modelos usados por Kim et al. (1999). O problema foi resolvido pelo Método de Diferenças Finitas.

Bou-Zeid e El-Fadel (2004) usaram o modelo *Hydrologic Evaluation of Landfill Performance* (HELP) (SCHROEDER et al., 1994) para estimar a quantidade de chorume e a percolação na subsuperfície. Usaram também o modelo tri-dimensional PORFLOW (RUNCHAL; SAGAR, 1998) para simular o fluxo unidimensional de água no solo e o transporte de contaminante, em sistema de coordenadas cartesianas e cilíndricas. Foi feita uma análise sensitiva com os parâmetros que controlam o transporte do chorume.

Haydar e khire (2005) fizeram um estudo numérico do sistema de recirculação de chorume (LRS) consistindo de valas horizontais. Utilizou o modelo com elementos finitos HYDRUS-2D (SIMUNEK; SEJNA; VAN GENUCHTEN, 1999), que simula a água e o transporte de solutos na zona não-saturada.

Bunsri, Sivakumar e Hagare (2008 a) mostraram que o traçador cloreto de sódio pode ser usado para avaliar o movimento de água em solo não-saturado. O transporte do traçador em zona não-saturada do solo é dado pela Equação de Advecção- Dispersão. Os parâmetros não-lineares da Equação de Richards foram obtidos pelas Equações de van Genuchten (1980). O modelo foi resolvido usando Elementos Finitos de Galerkin.

5 METODOLOGIA

Neste capítulo, é apresentado o modelo matemático que descreve a simulação do fluxo, o transporte de solutos e os principais métodos aplicados na solução das equações desse modelo.

O modelo matemático para descrever o fluxo e o transporte de solutos, na zona não-saturada do solo, consiste na solução de equações diferenciais parciais de segunda ordem, isto é, a Equação Diferencial Parcial (equação 5.1) conhecida como Equação de Richards (RICHARDS, 1931), que rege o movimento da água no solo, com a Equação de Advecção-Dispersão (BEAR, 1979; HINDMARSH; GRESHO; GRIFFITHS, 1984) (equação 5.22), do transporte de soluto (MUALEM, 1976; GENUCHTEN, 1980; SINGH; KANWAR, 1995; OLIVEIRA, 1999), que busca a evolução temporal da concentração de solutos na zona não-saturada do solo acompanhadas das condições iniciais e de contorno (RICHTMYER; MORTON, 1967; SOD, 1987).

Na seção 5.1, são apresentados a Equação de Richards, com os parâmetros físico-hídricos do solo, descritos pelas Equações de van Genuchten (1980), as condições iniciais e de contorno, o princípio do Método dos Resíduos Ponderados e a aproximação de elementos finitos, enquanto que na seção 5.2, a Equação de Advecção-Dispersão, com apresentação de suas parcelas, as condições iniciais e de contorno, o princípio do Método dos Resíduos Ponderados e a aproximação de elementos finitos. Na seção 5.3, é apresentada a implementação computacional das Equações de Richards e de Advecção-Dispersão.

5.1 Movimento da Água no Solo: Equação de Richards

O processo do movimento de água no solo é descrito pela Equação de Richards, uma equação de advecção-difusão, não-linear, que pode ser escrita como uma lei de conservação para o conteúdo de água, a quantidade de água contida num dado volume de solo. O termo

advectivo é devido à gravidade, enquanto o termo difusivo vem da Lei de Darcy. A Equação de Richards, estimando os valores do potencial matricial de água, e considerando o escoamento unidimensional não-saturado e a coordenada vertical orientada positivamente para cima, é dada por

$$C_s(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \right] \quad (5.1)$$

em que

$$C_s(\psi) = \frac{d\theta}{d\psi} - \text{capacidade hídrica específica do solo } [L^{-1}];$$

$$\theta - \text{umidade volumétrica } [L^3 L^{-3}];$$

$$\psi - \text{potencial matricial } [L];$$

$$K(\psi) - \text{condutividade hidráulica do solo não - saturado } [LT^{-1}];$$

$$z - \text{coordenada vertical } [L]; \text{ e}$$

$$t - \text{tempo } [T].$$

As condições iniciais e de contorno utilizadas na resolução da equação 5.1 são:

- $\psi(z,0) = \psi^{inicial}(z), 0 \leq z \leq L$
- $\psi(0,t) = \psi_0, t > 0$
- $\psi(L,t) = \psi_L, t > 0$

Para resolver a Equação de Richards, algumas relações constitutivas precisam ser especificadas.

Considere

$$S_e = \left[1 / (1 + |\alpha \psi|^n) \right]^m \quad (5.2)$$

com $m = 1 - \frac{1}{n}$ e S_e , a saturação efetiva, dada por

$$S_e = \frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \quad (5.3)$$

em que

θ_s – umidade volumétrica do solo saturado [$L^3 L^{-3}$];

θ_r – umidade volumétrica residual do solo [$L^3 L^{-3}$];

α – parâmetro que depende do solo [L^{-1}]; e

m e n – parâmetros que dependem do solo, [].

Das equações (5.2) e (5.3), obtém-se a relação entre θ e ψ dada pela Equação de van Genuchten (1980):

$$\psi = \frac{\left(\frac{1}{S_e^{1/m}} - 1 \right)^{1/n}}{\alpha} \quad (5.4)$$

A relação entre K e θ é dada pela Equação de Mualem (1976) (REICHARDT, 1996):

$$K(\theta) = K_s \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{2}} \left[1 - \left(1 - \left(\frac{\theta - \theta_r}{\theta_s - \theta_r} \right)^{\frac{1}{m}} \right)^m \right]^2 \quad (5.5)$$

em que

$K(\theta)$ - condutividade hidráulica do solo não-saturado [LT^{-1}]; e

K_s - a condutividade hidráulica saturada [LT^{-1}].

A capacidade hídrica específica do solo é dada por

$$C_s(\psi) = \frac{m.n.\alpha^n(\theta_r - \theta_s)\psi^{n-1}}{[1 + (\alpha.\psi)^n]^{m+1}} \quad (5.6)$$

Para a solução numérica da Equação de Richards (equação 5.1), é aplicado o Método de Elementos Finitos, cuja fundamentação matemática é descrita na sequência.

5.1.1 Método dos Resíduos Ponderados

Sejam o domínio $\Omega = (0, L)$, o espaço funcional

$$H^1(\Omega) = \left\{ \vartheta \in L^2(\Omega); \partial^\alpha \vartheta \in L^2(\Omega), |\alpha| \leq 1 \right\} \quad (5.7)$$

e o sub-espaço de funções teste dado por

$$V = \left\{ \vartheta \in H^1(\Omega); \vartheta(0) = 0, \vartheta(L) = 0 \right\} \quad (5.8)$$

em que

$L^2(\Omega)$ - espaço de funções de quadrado integrável.

O princípio do Método dos Resíduos Ponderados consiste em minimizar o resíduo no domínio de estudo. Para obtenção da solução da Equação de Richards, basta multiplicar a equação (5.1) por uma função teste $v \in V$ e integrá-la sobre o domínio Ω :

$$\int_0^L C_s(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} v \, dz - \int_0^L \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} + K(\psi) \right] v \, dz = 0 \quad (5.9)$$

ou

$$\int_0^L C_s(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} v \, dz - \int_0^L \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] v \, dz - \int_0^L \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} v \, dz = 0 \quad (5.10)$$

Assumindo que $K(\psi)$ é suave e aplicando o Método de Integração por partes em

$$\int_0^L \frac{\partial}{\partial z} \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \right] v \, dz$$

obtém-se

$$\begin{aligned}
& \int_0^L C_s(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} v \, dz + \int_0^L K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{dv}{dz} \, dz - \int_0^L \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} v \, dz = \\
& = - \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} v \right]_{z=0} + \left[K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} v \right]_{z=L} \quad (5.11)
\end{aligned}$$

Como as funções teste v pertencem ao espaço V , $v(0) = v(L) = 0$,

$$\int_0^L C_s(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial t} v \, dz + \int_0^L K(\psi) \frac{\partial \psi}{\partial z} \frac{dv}{dz} \, dz - \int_0^L \frac{\partial K(\psi)}{\partial z} v \, dz = 0 \quad (5.12)$$

A derivada temporal $\frac{\partial \psi}{\partial t}$ é aproximada por um quociente de diferença finita (SPERANDIO; MENDES; SILVA, 2006):

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} \cong \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} \quad (5.13)$$

e, aplicando-se Euler Explícito (BEAR, 2007) (seção 2.10.1.1), obtém-se

$$\int_0^L C_s(\psi^n) \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\Delta t} v \, dz + \int_0^L K(\psi^n) \frac{\partial \psi^n}{\partial z} \frac{dv}{dz} \, dz - \int_0^L \frac{\partial K(\psi^n)}{\partial z} v \, dz = 0 \quad (5.14)$$

Assim, resolver a equação (5.1) consiste em encontrar $\psi^{n+1}(z, t) \in H^1(\Omega)$ que atenda as condições iniciais $\psi^0(z, 0) = \psi^{inicial}(z)$ e de contorno $\psi(0, t) = \psi_0$ e $\psi(L, t) = \psi_L$, e que satisfaça:

$$\begin{aligned}
& \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s(\psi^n) \psi^{n+1} v \, dz = \\
& = \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s(\psi^n) \psi^n v \, dz - \int_0^L K(\psi^n) \frac{\partial \psi^n}{\partial z} \frac{dv}{dz} \, dz + \int_0^L \frac{\partial K(\psi^n)}{\partial z} v \, dz \quad (5.15)
\end{aligned}$$

para qualquer $v \in V$. A única incógnita do problema é ψ^{n+1} que deve ser calculada iterativamente até que se obtenha o tempo total de simulação desejado.

5.1.2 Aproximação de Elementos Finitos

É necessário especificar a forma da solução aproximada e da função teste. O Método de Galerkin é o mais usado em fluxo de água e transporte de solutos. A aproximação de elementos finitos ou aproximação de Galerkin (BUNSRI; SIVAKUMAR; HAGARE, 2008 a) consiste em aproximar as funções variável de estado $\psi \in H^1(\Omega)$ e teste $v \in V$ por funções aproximadas $\bar{\psi} \in \Pi^1 \subset H^1(\Omega)$ e $\bar{v} \in \Pi_0^1 \subset V$, com Π^1 um subespaço finito de H^1 e $\Pi_0^1 = \{ \vartheta \in \Pi^1(\Omega); \vartheta(0) = 0, \vartheta(L) = 0 \}$. Neste trabalho, o subespaço Π^1 será construído por funções polinomiais por partes com suporte compacto, com grau p, que é a ordem polinomial de aproximação. Assim, tem-se que: $\bar{\psi} = \sum_{j=1}^{nf} \alpha_j \varphi_j$ e $\bar{v} = \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i$. Substituindo-se em 5.15, obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s^n \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz = \\ & = \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s^n \psi^n \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz - \int_0^L K^n \frac{\partial \psi^n}{\partial z} \sum_{i=1}^{nf} \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \int_0^L \frac{\partial K^n}{\partial z} \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz \end{aligned} \quad (5.16)$$

em que

$$\psi^n = \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^n \varphi_j), \quad \frac{\partial \psi^n}{\partial z} = \sum_{j=1}^{nf} \left(\alpha_j^n \frac{d\varphi_j}{dz} \right), \quad C_s^n = C_s(\psi^n) \text{ e } K^n = K(\psi^n) \quad (5.17)$$

Agrupando-se os termos:

$$\begin{aligned} & \sum_{i=1}^{nf} \sum_{j=1}^{nf} \left\{ \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s^n (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \varphi_i dz \right\} = \\ & = \sum_{i=1}^{nf} \left\{ \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s^n \psi^n \varphi_i dz - \int_0^L K^n \frac{\partial \psi^n}{\partial z} \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \int_0^L \frac{\partial K^n}{\partial z} \varphi_i dz \right\} \end{aligned} \quad (5.18)$$

A equação (5.18) deve ser satisfeita para qualquer $\bar{v} \in \Pi_0^1$. Logo, tomando-se uma função φ_i por vez, pode-se escrevê-la em forma matricial:

$$[K]\{\alpha\}^{n+1} = \{F\} \quad (5.19)$$

em que

$$K_{ij} = \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s^n \varphi_j \varphi_i dz \quad (5.20)$$

$$F_i = \int_0^L \frac{1}{\Delta t} C_s^n \psi^n \varphi_i dz - \int_0^L K^n \frac{\partial \psi^n}{\partial z} \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \int_0^L \frac{\partial K^n}{\partial z} \varphi_i dz \quad (5.21)$$

Assim, o Método de Elementos Finitos é aplicado para encontrar os coeficientes multiplicadores $\{\alpha\}^{n+1}$ que satisfazem o problema algébrico definido pela equação (5.19).

5.2 Transporte de Solutos: Equação de Advecção-Dispersão

Para simular o transporte de solutos, em uma dimensão, na zona não-saturada do solo, será utilizada a Equação Linear de Advecção-Dispersão (BEAR, 1979):

$$\frac{\partial}{\partial t}(R\theta C) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z \theta C) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \right) - \lambda R \theta C + s \quad (5.22)$$

Como o fator retardo R é dado por

$$R = 1 + \frac{K_d \rho_b}{\theta} \quad (5.23)$$

tem-se

$$\frac{\partial}{\partial t}(\theta C) + \frac{\partial}{\partial z}(v_z \theta C) = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial t}(K_d \rho_b C) - \lambda(\theta C + K_d \rho_b C) + s \quad (5.24)$$

em que

- C – concentração do soluto na solução do solo [ML^{-3}];
- R – fator retardo devido à sorção do solo [];
- v_z – velocidade da água no poro, na direção z [LT^{-1}];
- D_{zz} – coeficiente de dispersão mecânica desde que a contribuição da difusão molecular para a dispersão seja desprezada [L^2T^{-1}];
- λ – coeficiente de decaimento de primeira ordem [T^{-1}];
- s – fonte ou sumidouro;
- K_d – coeficiente de distribuição [L^3M^{-1}];
- ρ_b – densidade aparente do solo [ML^{-3}]; e
- θ – umidade volumétrica [L^3L^{-3}].

A velocidade da água nos poros é obtida a partir da Equação de Darcy-Buckingham (REICHARDT; TIMM, 2004)

$$q = -K(\theta)\text{grad}(\psi + z) \quad (5.25)$$

Portanto, o fluxo de água em solo não-saturado, na direção z , é dado por

$$q_z = -K(\theta) - K(\theta) \frac{\partial \psi}{\partial z} \quad (5.26)$$

Como a velocidade da água nos poros em solo não-saturado (BEAR, 1979) é dada por

$$v = \frac{q}{\theta} \quad (5.27)$$

conclui-se que a velocidade da água nos poros em solo não-saturado, na direção z , é dada por

$$v_z = -K(\theta) \left(\frac{\partial \psi}{\partial z} + 1 \right) \frac{1}{\theta} \quad (5.28)$$

O coeficiente de dispersão mecânica pode ser expresso por (ANDERSON, 1979)

$$D_{zz} = \alpha_l v_z \quad (5.29)$$

em que

α_l – coeficiente de dispersividade longitudinal [L].

O coeficiente de decaimento de primeira ordem pode ser relacionado com o tempo de meia vida, $T_{1/2}$, (BEAR, 2007) dado por

$$\lambda = \frac{\ln 2}{T_{1/2}} \quad (5.30)$$

Na resolução da equação (5.22), serão utilizadas as condições iniciais e de contorno:

- $C(z,0) = C^{inicial}(z), 0 \leq z \leq L$
- $C(0,t) = C_0, t > 0$
- $C(L,t) = C_L, t > 0$

Observe que K_d, ρ_b, α_l e $T_{1/2}$ são dados de entrada, enquanto que $\psi, \frac{\partial \psi}{\partial z}, \theta$ e $K(\theta)$

são obtidos da Equação de Richards (equação (5.1)). Definido o modelo matemático, o interesse situa-se na solução, ou seja, na resolução simultânea das Equações de Richards e de Advecção-Dispersão. A solução numérica da Equação de Advecção-Dispersão (equação (5.22)) é obtida através do Método de Elementos Finitos, da mesma forma que a Equação de Richards, cuja fundamentação matemática é descrita na seqüência.

5.2.1 Método dos Resíduos Ponderados

São utilizados os mesmos espaços de aproximação utilizados no problema de Richards. Considerem-se o domínio $\Omega = (0, L)$, o espaço funcional

$$H^1(\Omega) = \left\{ \vartheta \in L^2(\Omega); \partial^\alpha \vartheta \in L^2(\Omega), |\alpha| \leq 1 \right\} \quad (5.31)$$

e o sub-espaço de funções teste dado por

$$V = \left\{ \vartheta \in H^1(\Omega); \vartheta(0) = 0, \vartheta(L) = 0 \right\} \quad (5.32)$$

em que

$L^2(\Omega)$ - espaço de funções de quadrado integrável.

Como o princípio do Método dos Resíduos Ponderados consiste em minimizar o resíduo no domínio de estudo, para a obtenção da solução, basta multiplicar a equação (5.22) por uma função teste $v \in V$ e integrá-la sobre o domínio Ω .

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{\partial(R\theta C)}{\partial t} v dz + \int_0^L \frac{\partial(v_z \theta C)}{\partial z} v dz &= \int_0^L \frac{\partial}{\partial z} \left[D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \right] v dz - \\ &- \int_0^L \lambda R \theta C v dz + \int_0^L s v dz \end{aligned} \quad (5.33)$$

Fazendo-se integrações por partes, obtém-se

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{\partial(R\theta C)}{\partial t} v dz + [v_z \theta C v]_{z=0}^{z=L} - \int_0^L v_z \theta C \frac{dv}{dz} dz &= \left[D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} v \right]_{z=0}^{z=L} - \\ - \int_0^L D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \frac{dv}{dz} dz - \int_0^L \lambda R \theta C v dz + \int_0^L s v dz \end{aligned} \quad (5.34)$$

Como as funções teste v pertencem ao espaço V , $v(0) = v(L) = 0$,

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{\partial(R\theta C)}{\partial t} v dz - \int_0^L v_z \theta C \frac{dv}{dz} dz &= - \int_0^L D_{zz} \frac{\partial(\theta C)}{\partial z} \frac{dv}{dz} dz - \\ &- \int_0^L \lambda R \theta C v dz + \int_0^L s v dz \end{aligned} \quad (5.35)$$

A derivada temporal será aproximada por um esquema de Euler Implícito (BEAR, 2007) (seção 2.10.1.1):

$$\begin{aligned}
& \int_0^L \frac{R\theta C^{n+1} - R\theta C^n}{\Delta t} v \, dz - \int_0^L v_z \theta C^{n+1} \frac{dv}{dz} \, dz = - \int_0^L D_{zz} \frac{\partial(\theta C^{n+1})}{\partial z} \frac{dv}{dz} \, dz - \\
& - \int_0^L \lambda R \theta C^{n+1} v \, dz + \int_0^L s v \, dz \quad (5.36)
\end{aligned}$$

e a solução consiste em encontrar $\theta C^{n+1} \in H^1(\Omega)$ que atenda as condições iniciais e de contorno $\theta C^0(z, 0) = \theta C^{inicial}(z)$, $\theta C(0, t) = \theta C_0$ e $\theta C(L, t) = \theta C_L$, e que satisfaça:

$$\begin{aligned}
& \int_0^L \frac{R\theta C^{n+1}}{\Delta t} v \, dz = \int_0^L \frac{R\theta C^n}{\Delta t} v \, dz + \int_0^L v_z \theta C^{n+1} \frac{dv}{dz} \, dz - \int_0^L D_{zz} \frac{\partial(\theta C^{n+1})}{\partial z} \frac{dv}{dz} \, dz - \\
& - \int_0^L \lambda R \theta C^{n+1} v \, dz + \int_0^L s v \, dz \quad (5.37)
\end{aligned}$$

para qualquer $v \in V$. Ressalta-se que $\frac{\partial \psi}{\partial z}$ e demais variáveis que dependem de ψ são obtidas da solução da Equação de Richards.

A variável de estado da formulação integral apresentada é o produto θC entre a umidade volumétrica e a concentração. Para se obter a concentração do soluto C , divide-se θC pela umidade volumétrica θ calculada na solução do problema de Richards. Optou-se por utilizar θC como variável de estado em virtude de sua solução ser bastante suave, enquanto que θ e C apresentam uma frente de propagação que pode conter fortes gradientes, o que pode induzir oscilações na solução de elementos finitos.

As condições iniciais e de contorno de θC devem ser obtidas pelo produto de θ e C . O valor de θ é obtido da simulação de Richards e C é dado de entrada do problema.

5.2.2 Aproximação de Elementos Finitos

A aproximação de elementos finitos ou aproximação de Galerkin consiste em aproximar as funções variável de estado $\theta C \in H^1(\Omega)$ e teste $v \in V$ por funções aproximadas $\bar{\theta C} \in \Pi^1 \subset H^1(\Omega)$ e $\bar{v} \in \Pi_0^1 \subset V$, com Π^1 um subespaço finito de H^1 e

$\Pi_0^1 = \{ \vartheta \in \Pi^1(\Omega); \vartheta(0) = 0, \vartheta(L) = 0 \}$. Neste trabalho, o subespaço Π^1 será construído por funções polinomiais por partes com suporte compacto, com grau p , que é ordem polinomial de aproximação. Assim, tem-se que: $\overline{\theta C} = \sum_{j=1}^{nf} \alpha_j \varphi_j$ e $\bar{v} = \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i$. Substituindo-se em 5.37:

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz &= \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^n \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz + \int_0^L v_z \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \frac{d\varphi_i}{dz} dz - \\ - \int_0^L D_{zz} \sum_{j=1}^{nf} \left(\alpha_j^{n+1} \frac{d\varphi_j}{dz} \right) \sum_{i=1}^{nf} \frac{d\varphi_i}{dz} dz &- \int_0^L \lambda R \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz + \int_0^L s \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz \end{aligned} \quad (5.38)$$

Agrupando os termos:

$$\begin{aligned} \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz - \int_0^L v_z \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \frac{d\varphi_i}{dz} dz &+ \int_0^L D_{zz} \sum_{j=1}^{nf} \left(\alpha_j^{n+1} \frac{d\varphi_j}{dz} \right) \sum_{i=1}^{nf} \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \\ + \int_0^L \lambda R \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz &= \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^n \varphi_j) \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz + \int_0^L s \sum_{i=1}^{nf} \varphi_i dz \end{aligned} \quad (5.39)$$

ou ainda:

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{nf} \sum_{j=1}^{nf} \left\{ \int_0^L \frac{R}{\Delta t} (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \varphi_i dz - \int_0^L v_z (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \int_0^L D_{zz} \left(\alpha_j^{n+1} \frac{d\varphi_j}{dz} \right) \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \right. \\ \left. + \int_0^L \lambda R (\alpha_j^{n+1} \varphi_j) \varphi_i dz \right\} = \sum_{i=1}^{nf} \left\{ \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^n \varphi_j) \varphi_i dz + \int_0^L s \varphi_i dz \right\} \end{aligned} \quad (5.40)$$

A equação (5.40) deve ser satisfeita para qualquer $\bar{v} \in \Pi_0^1$. Logo, tomando-se uma função φ_i por vez, pode-se escrevê-la em forma matricial:

$$[K]\{\alpha\}^{n+1} = \{F\} \quad (5.41)$$

em que

$$K_{ij} = \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \varphi_j \varphi_i dz - \int_0^L v_z \varphi_j \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \int_0^L D_{zz} \frac{d\varphi_j}{dz} \frac{d\varphi_i}{dz} dz + \int_0^L \lambda R \varphi_j \varphi_i dz \quad (5.42)$$

$$F_i = \int_0^L \frac{R}{\Delta t} \sum_{j=1}^{nf} (\alpha_j^n \varphi_j) \varphi_i dz + \int_0^L s \varphi_i dz \quad (5.43)$$

Assim, o Método de Elementos Finitos é aplicado para encontrar os coeficientes multiplicadores $\{\alpha\}^{n+1}$ que satisfazem o problema algébrico definido pela equação (5.41). Resta explicar como foi realizada a implementação computacional neste trabalho (seções 5.3 e 5.4).

5.3 Implementação Computacional

A implementação computacional das formulações de elementos finitos apresentadas foi realizada utilizando-se um pacote de elementos finitos de domínio público denominado PZ (DEVLOO, 1997). Esse pacote é escrito em linguagem de programação C++ e seguindo a filosofia de orientação a objetos (LIPPMAN; LAJOIE, 1998).

O pacote ou ambiente PZ é um conjunto de classes que, interagindo, oferecem uma determinada funcionalidade. O objetivo do ambiente PZ é implementar algoritmos avançados de elementos finitos escondendo sua complexidade atrás de uma interface de usuário simplificada. O ambiente PZ possui um grande tempo de desenvolvimento e uma série de funcionalidades, tais como:

- adaptatividade hp;
- simulações unidimensionais, bidimensionais e tridimensionais;
- padrões de refinamento;
- estimativa de erros;
- métodos de resolução de sistemas lineares diretos e iterativos;
- esquemas de multigrid;

- elementos contínuos (Método de Elementos Finitos) e descontínuos (Galerkin descontínuo);

- grande flexibilidade para implementação de novas formulações variacionais.

O ambiente PZ é constituído de módulos bastante separados, os quais combinados originam as funcionalidades necessárias a um código de elementos finitos. Alguns módulos podem ser destacados, devido a sua importância neste trabalho:

- geometria e espaços de interpolação;
- material; e
- algébrico.

5.3.1 Geometria, Espaços de Interpolação e Material

O ambiente PZ apresenta uma distinção muito forte entre geometria e interpolação. Para a definição da topologia da malha, existem elementos geométricos (*TPZGeoEL*) associados a malhas geométricas (*TPZGeoMesh*).

O espaço de interpolação é implementado pelos elementos computacionais, derivados da classe base *TPZCompEL*.

As classes de material implementam formulações variacionais. Sua função é calcular a contribuição de um elemento para a matriz $[K]$ e o vetor $[F]$ do problema em um ponto de integração. A interface é definida pela classe *TPZMaterial*.

5.3.2 Algébrico

O ambiente PZ possui um módulo algébrico, onde são implementados as matrizes e métodos de resolução de sistemas lineares. Vários modos de armazenamento de matrizes estão disponíveis no ambiente PZ:

- matriz cheia;
- matriz em banda;
- matriz simétrica em banda;
- matriz simétrica Sky-line; e

- matriz esparsa.

Os métodos diretos de resolução de sistemas lineares disponíveis são:

- Decomposição de Cholesky;
- Decomposição de LU;
- Decomposição de LDL^t ; e
- Método frontal.

Os métodos iterativos de resolução de sistemas lineares disponíveis são:

- Jacobi;
- SOR e SSOR;
- Métodos de Krilov: gradiente conjugado;
- GMRes: gradiente bi-conjugado.

5.4 Solução Numérica

Em problemas transientes, a escolha do passo de tempo Δt é uma decisão importante. Um passo de tempo muito grande pode comprometer a exatidão da solução transiente procurada, enquanto que um passo de tempo muito pequeno eleva o custo computacional. Em esquemas temporais explícitos, deve-se ainda atentar que passos de tempo elevados podem comprometer a estabilidade do método, deteriorando-se completamente a qualidade da solução. O ideal é obter uma solução de boa qualidade com o maior passo de tempo possível, determinando o valor do passo de tempo mais conveniente para o problema.

Em seguida, deve-se discretizar o domínio do problema, isto é, representar o domínio em uma malha de elementos finitos.

A precisão da solução obtida e o esforço computacional requeridos são determinados pelo grau de refinamento da malha de elementos finitos. Uma malha não-refinada tem um número menor de nós e de graus de liberdade e dará uma precisão pior que uma malha refinada. Entretanto, um maior número de nós na malha requer um maior esforço computacional. Como alternativa, utilizam-se malhas adaptativas. Neste trabalho, as malhas adaptadas adotam um maior nível de refinamento nas regiões onde a solução varia mais

fortemente e um menor refinamento nas regiões em que a solução é suave. Com isso, obtêm-se soluções de melhor qualidade a um custo computacional reduzido.

A resolução do problema é feita iterativamente no tempo. A cada passo de tempo, faz-se a construção do problema de elementos finitos, ou seja, $[K]\{\alpha\} = \{F\}$ e a solução do problema $\{\alpha\} = [K]^{-1}\{F\}$. A malha é adaptada (seção 5.4.4) a cada n passos de tempo.

A solução do problema algébrico $\{\alpha\} = [K]^{-1}\{F\}$ é feita através da decomposição de Cholesky (PRESS, 2007) para o problema de Richards. A decomposição de Cholesky pode ser aplicada em matrizes simétricas definidas positivas, sendo o método direto de inversão de sistemas mais eficiente. O método de armazenamento de matriz utilizado é o *Sky-line* (PRESS, 2007). Para o problema do soluto, utilizou-se decomposição LU (PRESS, 2007), em virtude da matriz K não ser simétrica. O método de armazenamento é de matriz em banda.

5.4.1 Seqüência de Simulações

Para a simulação da Equação de Richards, pelo Método dos Elementos Finitos, a informação dos dados do problema é necessária, ou seja, os parâmetros do solo α , n , K_s , θ_s e θ_r , o comprimento L do solo e as condições iniciais e de contorno.

A simulação do transporte de soluto requer, além dos coeficientes elencados na equação (5.22), a solução da Equação de Richards, no passo de tempo avaliado.

O problema de transporte requer resultados obtidos na simulação da Equação de Richards para o cálculo da velocidade da água nos poros, que é função de θ , $K(\theta)$ e $\frac{\partial \psi}{\partial z}$. Por isso, a simulação do soluto requer o cálculo anterior da simulação do problema de Richards.

As simulações da Equação de Richards e do Transporte de Solute são realizadas no mesmo processo. A solução de um passo de tempo do problema de Richards deve ser seguida da solução de um passo de tempo do Transporte de Solute. Com isso, é necessário o armazenamento de apenas a solução do passo anterior de cada problema na memória do computador, minimizando o uso de recursos computacionais. Os passos de tempo utilizados podem ser diferentes para os dois problemas. O problema do transporte pode ter um passo de tempo maior por utilizar um esquema implícito de derivada temporal. De modo a simplificar a implementação, os passos de tempo serão adotados múltiplos um do outro, ou seja, o passo de

tempo do problema de Transporte de Solute será n vezes o passo de tempo do problema da Equação de Richards. Assim, são realizados n passos de tempo do problema de Richards e em seguida, um passo de tempo do problema de Transporte. Repete-se o processo até o número final de iterações, atingindo-se o tempo final de simulação.

As variáveis de estado das simulações são o potencial matricial ψ e o produto umidade-concentração θC . A partir do potencial matricial ψ , obtido no problema de Richards e dos dados do solo, é possível calcular a umidade θ (equação (5.4)). Dividindo-se a solução do Transporte de Solute θC pela umidade θ , obtém-se a concentração C em cada tempo de simulação.

5.4.2 Refinamento do Domínio

Neste trabalho, a malha é criada utilizando-se os recursos de refinamento do PZ. Ao ser refinado, o elemento cria os novos nós necessários e, como consequência, os seus elementos filhos. Por exemplo, considere o intervalo de $z=0$ a $z=L$ como um elemento da malha de elementos finitos. Para criar a malha de elementos finitos, divide-se esse elemento inicial $ndiv$ vezes, obtendo-se uma malha com 2^{ndiv} elementos, de mesmo tamanho, $\Delta z = \frac{L}{2^{ndiv}}$. Essa forma de construção da malha não é necessária, mas mostrou-se uma forma bastante simples de geração de malha. Poder-se-ia também gerar a malha, construindo-se todos os seus nós e elementos. A forma adotada para geração de malha, será bastante útil no processo de adaptação de malha.

Todo elemento na malha PZ está associado a um nível. Os elementos inicialmente possuem nível zero e quando um elemento é refinado, os novos elementos gerados (seus filhos) possuem níveis com uma unidade a mais que seus pais (Figura 9).

Figura 9 – Níveis de refinamento da malha

5.4.3 Numeração das Equações

A numeração dos nós não precisa seguir nenhum padrão. Os nós têm seus índices dados pela ordem em que são criados e inseridos na malha. O mesmo ocorre para os elementos. As equações do problema são associadas aos graus de liberdade dos elementos. Elementos lineares (ordem $p=1$) têm dois graus de liberdade, correspondentes a suas duas funções de base lineares, e que são compartilhados com seus vizinhos. Elementos quadráticos (ordem $p=2$) possuem ainda um terceiro grau de liberdade, este não compartilhado com nenhum vizinho.

A numeração das equações é importante, pois se reflete no tamanho da banda da matriz $[K]$. Quanto menor a banda, menor o custo de armazenamento e da decomposição da matriz.

O ambiente PZ dispõe de rotinas de renumeração de equações visando a minimização de banda. Esse recurso foi utilizado neste trabalho.

5.4.4 Adaptação da Malha

Neste trabalho, a malha inicial da simulação é a malha uniformemente refinada, na qual é aplicada a solução inicial ψ^0 . Após a solução do primeiro passo de tempo (ψ^1), procede-se à adaptação da malha. Como critério, utilizou-se o valor do gradiente da solução

($\frac{d\psi}{dz}$ para o problema de Richards e $\frac{d\theta C}{dz}$ para o problema do soluto). Se o gradiente no interior de um elemento for inferior a um limite pré-estabelecido ε_{grad} , diz-se que a solução é suave no elemento e este elemento é marcado como passível de desrefinamento. Os demais elementos devem ser refinados.

Essa estratégia de adaptação é baseada no comportamento da solução de Richards, a qual apresenta uma frente de propagação que pode ser mais ou menos acentuada em função dos parâmetros do solo. Soluções que apresentam frentes de propagação acentuada requerem um grau de refino da malha maior na região da frente de propagação, visando evitar oscilações na solução de elementos finitos. Na frente de propagação, encontram-se os maiores gradientes da solução.

Elementos pai unidimensionais são refinados em dois filhos unidimensionais com um novo nó, no ponto médio do elemento pai.

No processo de refinamento, a solução dos elementos filhos é obtida por interpolação da solução de seu elemento pai.

Os elementos marcados para refinamento são refinados até um nível limite estabelecido, dado pela variável *ndiv* na geração da malha. Elementos que já estão refinados até o limite não são alterados. Como a solução se propaga no domínio, os elementos vizinhos à frente de propagação também devem ser refinados, para serem adequados à solução do próximo passo de tempo.

Observa-se que para o problema de Richards, o refinamento apenas dos elementos vizinhos é suficiente para capturar a frente de propagação no próximo passo de tempo devido ao esquema explícito utilizado na discretização temporal. O esquema de Euler Explícito permite que a frente se propague apenas um elemento a cada passo de tempo. Isso é consequência das restrições de estabilidade do esquema de Euler Explícito.

Já o problema de transporte de soluto foi discretizado no tempo, utilizando-se um esquema implícito. No esquema implícito, não há limite de passo de tempo com respeito a estabilidade do método. O limite do passo de tempo deve ser observado apenas quanto ao erro de truncamento da derivada temporal discretizada. Dessa forma, pode ocorrer de a frente da solução do soluto se propagar mais de um elemento por vez. Isso não foi observado nos testes realizados neste trabalho, mas se o fosse seria necessária a adequação da estratégia de adaptação ou a limitação do passo de tempo.

O desrefinamento só pode ocorrer, no ambiente PZ, com filhos do mesmo pai. Dois elementos vizinhos de mesmo pai marcados para desrefinamento são convertidos em um

único elemento maior (seu pai). Um elemento marcado para desrefinamento só é eliminado e convertido em um único elemento maior (o pai), se o elemento vizinho for do mesmo pai e se for também marcado para ser desrefinado (Figura 9).

Se o elemento resultante do desrefinamento (elemento grosso) possui ordem de interpolação linear ($p=1$), a solução no nó intermediário é desprezada, mantendo-se apenas as soluções dos nós de extremidade. Isso pode acarretar em perda da conservação de massa, o que pode afetar a qualidade da solução. Para minimizar a perda de massa, pode-se utilizar um valor muito pequeno de ε_{grad} . Desse modo, apenas regiões extremamente suaves seriam desrefinadas. O impacto dessa estratégia é uma menor capacidade de desrefinamento da malha, o que implica em maior número de graus de liberdade e maior esforço computacional. Uma segunda estratégia seria utilizar ordem de interpolação quadrática ($p=2$) ou maior. A função de base quadrática permite a interpolação da solução dos elementos filhos para o pai garantindo a conservação de massa. (Figura 10).

Figura 10 – Processo de desrefinamento

- a) Dois elementos finos lineares
- b) Elemento grosso linear
- c) Elemento grosso quadrático

5.4.4.1 Refinamento h

Com objetivo de diminuir os graus de liberdade do problema e com isso diminuir o seu tempo de execução, a malha uniforme fina é adaptada, através do refinamento h , resultando em uma malha adaptada, da seguinte maneira:

- a) Calcula-se o valor da derivada da solução aproximada de u em cada elemento, isto é, $|du_{E_n}|$;
- b) Os elementos são divididos em dois grupos: elementos com solução com forte gradiente e elementos com solução suave. Os que têm forte gradiente são marcados para refinamento e os de solução suave são candidatos para desrefinamento. A divisão dos grupos é baseada no gradiente da solução no elemento $|du_{E_n}|$ comparado ao gradiente limite $\mathcal{E}_{grad}$. O valor de $\mathcal{E}_{grad}$ adotado é uma porcentagem do gradiente máximo da solução aproximada, isso é $\mathcal{E}_{grad} = \varepsilon \max |du|$. Assim, quando $|du_{E_n}| < \varepsilon \max |du|$, $0 < \varepsilon < 1$, diz-se que a solução u é suave nesta região;
- c) Desrefinam-se, segundo as possibilidades, os elementos candidatos;
- d) Os elementos marcados para refinamento são refinados até que tenham o nível máximo $ndiv$ definido;
- e) Os elementos vizinhos aos elementos refinados (onde deve estar a frente de propagação) são refinados para serem adequados à solução do próximo passo de tempo.

A escolha adequada do parâmetro de adaptação ε é fundamental na solução do problema.

A ordem de aproximação p dos elementos não é modificada em todo o processo. Todos os elementos da malha apresentam a mesma ordem de aproximação.

5.4.4.2 Projeção da solução

No processo de refinamento e desrefinamento de elementos é necessária a transferência da solução entre a malha original e a malha adaptada.

O refinamento de elementos é implementado pelo PZ através do método Divide do elemento computacional. O método Divide oferece, como opção, a transferência da solução do elemento pai para seus elementos filhos. A transferência é feita por projeção L^2 .

No desrefinamento de elementos, adotou-se o mesmo procedimento. Para a transferência da solução dos elementos filhos para o elemento pai utilizou-se também projeção L^2 . O desrefinamento de elementos é implementado pelo PZ através do método Coarsen do elemento computacional. O método Coarsen não implementa a transferência de solução dos elementos filhos para o pai. A transferência foi implementada neste trabalho. Para isso, o método Coarsen foi reimplementado com a opção de transferência de solução.

As Equações de Richards e de Transporte de Solutos foram implementadas neste trabalho. O PZ permite a implementação de novas formulações externamente a seu código, isto é, o PZ é utilizado como uma biblioteca que é instalada no computador. As equações devem ser implementadas em classes derivadas da classe TPZMaterial. Foram implementadas as classes TPZRichardsEquation e TPZSoluteTransport. O material do soluto aponta para a malha de Richards para permitir a transferência de solução da malha de Richards para as Equações de Transporte de Solutos.

O processo de refinamento e desrefinamento pode ser feito para toda a malha ou elemento a elemento. Neste trabalho, a transferência da solução é feita elemento a elemento, isto é, quando um elemento é refinado, seus filhos interpolam sua solução. Quando dois elementos são agrupados, o elemento novo projeta a solução de seus filhos sobre si.

Tanto o processo de interpolação quanto o de projeção adotados garantem que a solução dos elementos vizinhos não é modificada. Por isso, observa-se na figura 10b que a projeção da solução para elementos com $p=1$ implica em perda da conservação de massa, uma desvantagem da transferência de solução adotada. A transferência de solução entre elementos é realizada através de projeção L^2 . A solução no elemento recém criado u^{novo} definido no subdomínio $\Omega_e^{novo} = (z_1, z_2)$ é dada em função da solução no elemento original $u^{original}$.

Em caso de refinamento, a solução em cada um dos filhos é dada por: encontrar

$$u^{novo} = \sum_{j=1}^{n_{fel}} \alpha_j^{novo} \varphi_j^{novo} \text{ que satisfaça}$$

$$\sum_{i=1}^{n_{fel}} \sum_{j=1}^{n_{fel}} \int_{z_1}^{z_2} (\alpha_j^{novo} \varphi_j^{novo}) \varphi_i^{novo} = \sum_{i=1}^{n_{fel}} \int_{z_1}^{z_2} u^{original} \varphi_i^{novo} \quad (5.44)$$

em que n_{fel} é o número de funções φ do elemento.

Para o desrefinamento, impõe-se ainda que a solução nos limites do elemento novo não se altere. Se o elemento novo tem limites em $z = z_1$ e $z = z_2$, os elementos filhos estão no domínio $\Omega_1^{orig} = \left(z_1, \frac{z_1 + z_2}{2} \right)$ e $\Omega_2^{orig} = \left(\frac{z_1 + z_2}{2}, z_2 \right)$. Denominando-se $u_1^{original}$ a solução original em Ω_1^{orig} e $u_2^{original}$ a solução original em Ω_2^{orig} , a projeção L^2 da solução consiste em encontrar $u^{novo} = \sum_{j=1}^{n_{fel}} \alpha_j^{novo} \varphi_j^{novo}$ tal que $u^{novo}(z_1) = u_1^{original}(z_1)$ e $u^{novo}(z_2) = u_2^{original}(z_2)$ que satisfaça:

$$\sum_{i=1}^{n_{fel}} \sum_{j=1}^{n_{fel}} \int_{z_1}^{z_2} (\alpha_j^{novo} \varphi_j^{novo}) \varphi_i^{novo} = \sum_{i=1}^{n_{fel}} \int_{z_1}^{z_2} u^{original} \varphi_i^{novo} \quad (5.45)$$

com $u^{original} = \begin{cases} u_1^{original}, & z \in \Omega_1^{orig} \\ u_2^{original}, & z \in \Omega_2^{orig} \end{cases}$ e n_{fel} , o número de funções φ do elemento novo.

No refinamento, a solução nos elementos filhos é idêntica a do pai. Os dois filhos compõem um espaço de funções mais rico que o do pai. De fato, o espaço de funções do pai está contido no espaço dos filhos, por isso a transferência é exata.

Na transferência de solução dos filhos para o pai no processo de desrefinamento, não existe a interpolação da solução. O espaço de funções do pai não contém o espaço de funções dos filhos e por isso, a solução transferida é diferente da original. Logo, diz-se que é feita uma projeção.

5.4.5 Passos de Execução do Programa

Os passos de execução do programa podem ser descritos como a seguir.

1. A malha inicial da simulação de Richards é criada a partir de um único elemento. O elemento é refinado uniformemente $ndiv$ vezes até que a malha tenha 2^{ndiv} elementos. Aplica-se a solução inicial ψ^0 na malha.
2. A malha da simulação do transporte de soluto é criada refinando-se um elemento $ndiv_solute$ vezes. Aplica-se a solução inicial θC^0 na malha.
3. Para cada passo de tempo Δt deve-se:
 - (a) calcular a solução no próximo passo de tempo para a simulação de Richards;
 - (b) Se o passo de tempo deve ser adaptado, adapta-se a malha da simulação de Richards;
 - (c) O passo de tempo da simulação de transporte do soluto é $n\Delta t$. Se o passo de tempo for múltiplo de n :
 - i. calcula-se a solução de transporte de soluto.
 - A. adapta-se a malha.

A adaptação de malha tem os seguintes passos. A variável do problema u pode ser tanto o ψ da simulação de Richards quando o θC da simulação de transporte de soluto.

1. Calcula-se a máxima derivada de cada elemento $|du_{E_n}|$. A derivada é calculada em 5 pontos do elemento, tomando-se o maior valor encontrado.
2. A maior derivada encontrada entre todos os elementos da malha define a variável $\max|du|$.
3. Elementos com máxima derivada $|du_{E_n}| < \varepsilon \max|du|$, $0 < \varepsilon < 1$, são marcados para desrefinamento. Caso contrário, são marcados para refinamento.
4. Elementos marcados para desrefinamento são desrefinados.
5. Elementos marcados para refinamento são refinados.
6. Os elementos imediatamente à esquerda e à direita dos elementos marcados para refinamento, também são refinados.

Desrefinamento de elementos:

1. Para que um elemento seja desrefinado, seu irmão (elemento filho do mesmo pai) também deve estar marcado para desrefinamento. Quando isso ocorre, os elementos são desrefinados.
2. Após o desrefinamento, deve-se transferir a solução dos dois elementos mais finos (filhos) para o elemento desrefinado. A transferência é feita por projeção L^2 da solução dos elementos finos (filhos) para o desrefinado (pai). A projeção é feita respeitando-se o valor da solução dos elementos vizinhos. Como o espaço de funções do elemento desrefinado é menor que o espaço dos dois elementos finos, pode ocorrer perda de informação da solução na projeção. Entretanto, a projeção L^2 para elementos com $p > 1$ garante a conservação de massa. Isto é, há perda de informação, mas não há perda de conservação.

Refinamento de elementos:

1. Os elementos são refinados até um nível máximo $ndiv$. Com isso, o tamanho do menor elemento da malha é constante ao longo de toda a simulação, valendo $\frac{L}{2^{ndiv}}$.
2. No refinamento, um elemento é dividido em dois elementos menores.
3. A solução do elemento maior (pai) é transferida para os dois elementos refinados. A transferência é feita por projeção L^2 . Como o espaço de funções dos dois elementos finos (filhos) contém o espaço de funções do elemento maior, a projeção é feita de forma exata, sem nenhuma perda de informação.

6 VALIDAÇÃO, APLICAÇÕES NUMÉRICAS E ESTUDO ESTATÍSTICO

Neste capítulo, são apresentadas aplicações numéricas do modelo proposto, com o objetivo de validar o código computacional e um estudo estatístico comparativo do Modelo Proposto com soluções disponíveis na Literatura. As simulações utilizam os recursos de adaptatividade de malha descritos no Capítulo 5.

Na seção 6.1, são obtidas as soluções aproximadas da Equação de Richards, utilizando-se, primeiramente, malhas uniformes e, posteriormente, malhas com refinamento h e, para resolver o problema da conservação da massa, observadas no processo de refino ou desrefino da malha, utilizam-se funções de interpolação polinomial de grau 2. Na derivada temporal, é aplicado o esquema de Euler Explícito. São elaborados os gráficos com os resultados obtidos e comparados com os trabalhos de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e Prasad, Kumar e Sekhar (2001).

As malhas utilizadas nos trabalhos de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e Prasad, Kumar e Sekhar (2001) são uniformes e com funções-base lineares, enquanto que neste trabalho, além de considerar as malhas uniformes, é empregada a adaptatividade com refinamento h , na aproximação espacial, e as funções-base são de grau polinomial 2.

Na seção 6.2, apresenta-se o problema de Transporte de Solute, com os parâmetros e condições iniciais e de contorno do trabalho de Miranda et al. (2005), para validar a Equação de Advecção-Dispersão. Como para resolver a Equação de Advecção-Dispersão há necessidade da solução da Equação de Richards, também foram apresentados os resultados dessa equação através da metodologia empregada neste trabalho (seção 6.2.1). Miranda et al. (2005) estima a concentração do soluto no solo, resolvendo numericamente em um sistema de volumes finitos, a cada incremento de tempo Δt de simulação. O problema de transporte é resolvido, neste trabalho, com malhas uniformes e considerando refinamento h , com funções de interpolação de grau $p = 2$, na solução da Equação de Richards e grau $p = 3$, no problema de Transporte de Solutos. Na derivada temporal, é aplicado o esquema de Euler Implícito. São

elaborados os gráficos com os resultados obtidos e comparados com o trabalho de Miranda et al. (2005) (seção 6.2.2).

Na seção 6.3, usando ferramentas da Estatística, foram realizadas comparações entre os resultados obtidos no Modelo Proposto e soluções disponíveis na Literatura.

6.1 Problema de Infiltração de Água

O modelo de elementos finitos deste trabalho que resolve a Equação de Richards, formulada em termos do potencial ψ , é, portanto, aplicado ao problema escolhido na Literatura (CELIA; BOULOUTAS; ZARBA, 1990). O problema considera a infiltração da água em uma coluna de solo homogêneo inicialmente seco. Os parâmetros do solo considerados são

- $\alpha = 3,35m^{-1}$;
- $n = 2$;
- $K_s = 9,92 \times 10^{-5} m/s$;
- $\theta_s = 0,368$; e
- $\theta_r = 0,102$.

O comprimento da amostra de solo é de 1 m e as condições iniciais e de contorno são

- $\psi(z,0) = -10 m, -1 \leq z \leq 0 m$
- $\psi(0,t) = -0,75 m, t > 0$
- $\psi(-1,t) = -10 m, t > 0$

Na resolução numérica do problema, foi feito um estudo de adaptatividade da malha. Foram realizados vários testes, utilizando-se, primeiramente, malhas uniformes e malhas adaptativas.

Considerou-se primeiramente uma malha uniforme bastante refinada (chamada malha fina), na qual é aplicada a solução inicial ψ^0 . Após a solução do primeiro passo de tempo (ψ^1), procedeu-se à adaptação da malha. Na comparação da precisão dos resultados

obtidos, considera-se a solução aproximada obtida a partir da malha uniforme fina como sendo a solução de referência.

6.1.1 Malha Uniforme – Comparação com Resultados Publicados

O domínio $\Omega = [-1, 0]$ foi subdividido uniformemente em $2^6 = 64$ elementos e cada elemento Ω_e possui tamanho $\Delta z = 1/64$. O tempo de simulação é de 1 dia. O passo de tempo utilizado é $\Delta t = 1$ segundo. Foram utilizadas funções polinomiais por partes de grau $p = 1$, inicialmente, devido à simplicidade em se trabalhar com funções lineares e por se tratar de malha uniforme (Figura 11). O tempo de processamento para obtenção da solução é de 1min 23,169s. Essa malha fina possui 65 nós.

A Figura 11a apresenta o gráfico da solução aproximada do problema, considerando-se a malha uniforme fina, com $p = 1$. O gráfico da Figura 11b representa os 65 nós da malha uniforme de elementos finitos, considerando-se $p = 1$.

Figura 11 - a) Solução aproximada em uma malha uniforme refinada com 2^6 elementos e $p = 1$.
b) ilustração dos nós da malha uniforme refinada com 2^6 elementos e $p = 1$.

A solução obtida, considerando-se a malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$, mostra-se equivalente ao modelo de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) que resolveram a Equação de Richards, formulada em termos de potencial ψ , também pelo Método de Elementos Finitos. Na aproximação espacial, os autores consideram as malhas uniformes, funções-base lineares por partes e na derivada temporal, é aplicado o esquema de Euler Implícito (Figura 12).

Figura 12 - Comparação da solução obtida com a malha uniforme fina (2^6 elementos e $p = 1$) e a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).

6.1.2 Adaptatividade

A malha uniforme fina é adaptada com o objetivo de diminuir a quantidade de graus de liberdade do problema, reduzindo o tempo de execução do programa. Entretanto, isso deve ser feito sem que haja perda substancial da qualidade da solução.

Após a solução do primeiro passo de tempo (ψ^1), procedeu-se à adaptação da malha. Os parâmetros de adaptação ε (seção 5.4.4.1) utilizados foram $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$. Os resultados considerando $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$ são apresentados nas Figuras 13 e 14, respectivamente.

Figura 13 - a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p=1$ e $\epsilon = 0,01$.
b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.

Figura 14 - a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p=1$ e $\epsilon = 0,001$.
b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.

As Figuras 15 e 16 comparam as soluções considerando os parâmetros de adaptação $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$ com as soluções obtidas com a malha uniforme fina (2^6 elementos e $p = 1$), respectivamente.

Pode-se observar na Figura 15, que os resultados da simulação considerando-se funções polinomiais com $p = 1$ e $\varepsilon = 0,01$ não correspondem aos resultados obtidos com a malha uniforme fina. Observa-se que a frente de umedecimento da malha adaptada está “atrasada” em relação à da malha uniforme. Isso se deve à perda de massa da estratégia de adaptação adotada quando $p = 1$, conforme mencionado na seção 5. 4. 4.

Já a solução com a malha adaptada e $\varepsilon = 0,001$ mostrou-se bastante adequada, embora o número de nós da malha seja muito próximo do número de nós da malha uniforme, ou seja, 62 nós (Figura 16).

Figura 15 - a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\epsilon = 0,01$.
b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\epsilon = 0,01$.

Figura 16 - a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\epsilon = 0,001$.
 b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 1$ e $\epsilon = 0,001$

Como a solução com a malha adaptada e $\varepsilon = 0,001$ mostrou-se bastante adequada, embora o número de nós da malha seja muito próximo do número de nós da malha uniforme, a Figura 17 mostra a comparação com a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).

Figura 17 - Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 1$ e $\varepsilon = 0,001$) e a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).

6.1.3 Utilizando Ordem de Aproximação Polinomial $p = 2$

Como mencionado na seção 5.4.4, uma abordagem para minimizar a perda da conservação de massa é a utilização de ordem de interpolação maior do que 1. Utilizando-se ordem quadrática ($p = 2$), foram obtidos os resultados das Figuras 18, 19 e 20. Nelas, o parâmetro de adaptação ε assume os valores $\varepsilon = 0,1$, $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$, respectivamente. Observa-se que a solução com $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$ são bastante satisfatórias (Figuras 19 e 20), sem o problema de perda de massa da estratégia de adaptação, já que a frente de propagação é “igual” à da malha uniforme. A malha uniforme é a referência sempre e qualquer adaptação que seja feita, com o objetivo de tornar a simulação mais rápida, não deve piorar a qualidade da aproximação. Já a simulação com $\varepsilon = 0,1$ mostrou-se inadequada, possivelmente por ser uma malha demasiadamente “grosseira” (Figura 18).

Figura 18 - a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,1$.
b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.

Figura 19 - a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,01$.
b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.

Figura 20 - a) Solução aproximada em uma malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,001$.
b) ilustração dos nós da malha no último passo de tempo da simulação.

As Figuras 21 e 22 comparam os resultados das malhas adaptadas com ordem de interpolação $p = 2$ e $\epsilon = 0,01$ e $\epsilon = 0,001$, respectivamente, com os resultados da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$.

Figura 21 - a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,01$.
b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,01$.

Figura 22 – a) Malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,001$.
 b) ilustração dos nós da malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ versus malha adaptada com $p = 2$ e $\epsilon = 0,001$

6.1.4 Discussões entre os Resultados Obtidos

Dentre os resultados obtidos, as soluções aproximadas em uma malha adaptada (refinamento h) com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$ apresentaram melhor aproximação em relação à malha uniforme fina (Figuras 21 e 22), embora, a malha adaptada (refinamento h) com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$ apresentou melhor aproximação em relação à malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ (Figura 22).

O número de nós para a obtenção da solução considerando-se a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ e a adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$, no último passo de tempo, é, respectivamente, 23 e 39 nós, e, o tempo de processamento é, respectivamente, 1 min 28,390s e 1 min 42,474s. (Figuras 19 e 20). A solução obtida considerando-se a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ é uma boa aproximação em relação à malha uniforme fina devido à quantidade bem menor de nós em relação à malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$ (redução de 41%, aproximadamente, na quantidade de nós) (Figura 21).

O tamanho do menor elemento da adaptada é igual ao da uniforme, por isso é usado o mesmo passo de tempo para essas duas malhas e a distância máxima entre os nós varia a cada passo de tempo. Se na malha adaptada, o tamanho do elemento fosse menor, o passo de tempo teria que diminuir, devido à condição de CFL. Na malha adaptada, são removidos os nós desnecessários, diminuindo o custo computacional. Portanto, a qualidade das aproximações é igual nas malhas uniforme e adaptada. Poder-se-ia ter uma outra abordagem, ou seja, manter o número de nós constante na malha, o que implicaria na malha adaptada elementos de tamanho menor que na malha uniforme, melhorando a qualidade da aproximação com o mesmo custo computacional. Não é o que foi feito, mas nas duas abordagens, obter-se-ia o mesmo resultado. No modelo proposto, como o custo computacional diminui, pode-se aumentar o $ndiv$ e ter malhas mais finas, com um tempo pequeno para processamento da simulação.

6.1.5 Comparação com Celia, Bouloutas e Zarba (1990)

Como a solução obtida considerando-se a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ é uma boa aproximação em relação à malha uniforme fina, é interessante comparar com o modelo de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) (Figura 23).

Figura 23 - Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$) e a solução de Celia, Bouloutas e Zarba (1990).

6.1.6 Comparação com Prasad, Kumar e Sekhar (2001)

Na figura 24 é feita a comparação da solução obtida considerando-se a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ com o modelo de Prasad, Kumar e Sekhar (2001) que valida seu modelo com os parâmetros do solo, condições iniciais e de contorno do trabalho de Celia, Bouloutas e Zarba (1990), utilizando malhas uniformes com funções-base lineares lagrangeanas.

Figura 24 - Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$) e a solução de Prasad, Kumar e Sekhar (2001).

A Figura 25 faz uma comparação de resultados da metodologia empregada neste trabalho, usando refinamento h e polinômio de interpolação quadrático, evitando a perda de massa, diminuindo os graus de liberdade e o custo computacional, com os dois modelos escolhidos na Literatura.

Figura 25 - Comparação da solução obtida com a malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$) e as soluções de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e de Prasad, Kumar e Sekhar (2001).

6.2 Problema de Transporte de Solute

Nesta seção, é apresentada uma aplicação numérica do modelo proposto no Capítulo 5, que descreve o movimento de água no solo e o transporte de solutos, na simulação do deslocamento do íon potássio em colunas de solo não-saturado. Os dados das análises físico-hídricas do Latossolo Vermelho-Amarelo, fase arenosa, os parâmetros da curva de retenção, ajustada segundo o modelo de van Genuchten (1980), bem como os parâmetros de transporte do potássio, necessários para resolução do problema, foram obtidos do trabalho de Miranda et al. (2005).

A simulação do transporte de soluto (seção 6.2.2) requer a solução da Equação de Richards, no passo de tempo avaliado, para o cálculo da velocidade da água nos poros, além dos coeficientes elencados na equação (5.22). Por isso, a simulação do soluto requer o cálculo anterior da simulação do problema de Richards (seção 6.2.1).

6.2.1 Movimento de Água no Solo (Equação de Richards)

Para a simulação da Equação de Richards, pelo Método dos Elementos Finitos, a informação dos dados do problema é necessária, ou seja, os parâmetros do solo α , n , K_s , θ_s e θ_r , o comprimento L do solo e as condições iniciais e de contorno.

Os parâmetros de simulação (MIRANDA et al., 2005) utilizados são

$$\theta_0 = 0,0216 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3;$$

$$\theta_i = 0,0216 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3;$$

$$\theta_r = 0;$$

$$\theta_s = 0,443 \text{ cm}^3 / \text{cm}^3;$$

$$K_s = 5,457 \text{ cm h}^{-1};$$

$$\alpha = 0,0449 \text{ cm}^{-1};$$

$$n = 3,6732; \text{ e}$$

$$m = 0,727758.$$

As condições iniciais e de contorno são dadas por

- $\psi(z,0) = -68,6524\text{cm}, -70 \leq z \leq 0$
- $\psi(0,t) = -6,2476\text{cm}, t > 0$
- $\psi(-70,t) = -68,6524\text{cm}, t > 0$

Na resolução numérica do problema de movimento de água no solo, utiliza-se o esquema de Euler Explícito (BEAR, 2007) (seção 2.10.1). O domínio $\Omega = [-70, 0]$ foi particionado, na malha uniforme, em 128 elementos de igual tamanho. O tempo total de simulação é $t = 1,75$ h, em 450000 passos de tempo com $\Delta t = 1,75/450000$ horas = 0,014 segundos.

Foram realizadas duas simulações, uma com a malha uniforme de 128 elementos e outra com malha adaptada. O tamanho do menor elemento da malha adaptada é o mesmo dos elementos da malha uniforme, ou seja, 70/128 cm, e, o do maior varia a cada passo de tempo. O parâmetro de adaptação ε (seção 5.4.4.1) foi de $\varepsilon = 0,01$. O processo de adaptação da malha é realizado a cada 1000 passos de tempo. Para as duas simulações, adotou-se ordem de aproximação $p = 2$ constante para todos os elementos da malha.

As Figuras 27 e 28 mostram as soluções obtidas para o potencial matricial ψ com a malha uniforme com 2^7 elementos, $p = 2$ e a malha adaptada, com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ no instante final de simulação (Figura 27) e em vários instantes de simulação (Figura 28). Os resultados indicam a equivalência de solução para as duas malhas utilizadas, ou seja, a malha uniforme com 2^7 elementos, $p = 2$, e a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$, observando que a malha adaptada tem um número menor de graus de liberdade, o que acarreta na redução do tempo de execução computacional. O número de elementos da malha adaptada, nas diversas iterações, varia de 9 a 26 elementos, portanto, de 10 a 27 nós. O tempo de processamento para encontrar a solução utilizando-se a malha uniforme é de 21 min 38s e o da malha adaptada, de 3 min e 5 s, redução de 86 %, aproximadamente. O consumo de memória é 6 Mb quando se utiliza a malha uniforme e 5,800 Mb, quando é adaptada (Tabela 2).

Tabela 2 – Tempo de processamento e consumo de memória na solução da Equação de Richards

Malhas	Tempo de Processamento	Memória
Uniforme	22 min 38 s	6 Mb
Adaptada	3 min 5 s	5,8 Mb

O número de elementos da malha adaptada na iteração 1000, 2000, 3000,..., até 450000 é apresentado na Figura 26.

Figura 26 – Número de elementos da malha adaptada da Equação de Richards na iteração 1000, 2000, 3000,...,450000.

Figura 27 - Potencial Matricial ψ no instante final de simulação: passo de tempo 450000; 1,75 h.

a) malha uniforme com 2^7 elementos, com $p = 2$. b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$.

Figura 28 - Potencial Matricial ψ em vários instantes de simulação. a) malha uniforme com 2^7 elementos e $p=2$. b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$.

As Figuras 29 e 30 mostram as soluções obtidas para a umidade θ com a malha uniforme com 2^7 elementos, $p = 2$ e a malha adaptada, com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ no instante final da simulação (Figura 29) e em vários instantes de simulação (Figura 30). Os resultados indicam a equivalência de solução para as duas malhas utilizadas, ou seja, a malha uniforme com 2^7 elementos, $p = 2$, e a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$.

Foram realizados vários testes, utilizando-se malhas uniformes e malhas adaptadas, com refinamento h .

Os resultados da umidade θ (Figuras 29 e 30) mostram que o umedecimento se deu até cerca de 35 cm de profundidade após 1 hora e 45 minutos.

Figura 29 - Umidade θ no instante final de simulação (passo de tempo 450000; 1,75 h). a) malha uniforme com 2^7 elementos, com $p = 2$. b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$.

Figura 30 - Umidade θ em vários instantes simulados. a) malha uniforme com 2^7 elementos e $p = 2$.
b) malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$.

O gráfico da umidade x profundidade (Figura 29) é equivalente aos resultados apresentados em Miranda et al. (2005) (Figuras 31 e 32), que resolveu a Equação de Richards, formulada em termos de umidade θ .

Figura 31 - Comparação do perfil de umidade obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha uniforme (2^7 elementos e $p = 2$).

Figura 32 - Comparação do perfil de umidade obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha adaptada ($p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$).

6.2.2 Transporte de Solute (Equação de Advecção-Dispersão)

No problema de transporte de soluto, busca-se a evolução temporal da concentração C do soluto no solo, nesse caso, o potássio. A equação depende de variáveis obtidas na simulação da Equação de Richards, apresentada na seção 6.2.1. Como variável de estado do problema de transporte de soluto, adotou-se θC (seção 5.2.1). A utilização de θC como variável do problema ao invés de C justifica-se devido à suavidade da solução nesta variável, como será possível observar nos resultados do problema (Figuras 34 e 35).

Os parâmetros utilizados foram os mesmos da seção 6.2.1 acrescidos de

$$R = 4,687$$

$$\alpha_l = 1,61662 \text{ cm};$$

$$\lambda = 0;$$

$$s = 0; \text{ e}$$

$$D_{zz} = 2,7303 \text{ cm}^2 \text{ min}^{-1}.$$

conforme definidos na seção 5.2.

As condições iniciais e de contorno para a concentração C são

- $C(z,0) = 5 \times 10^{-5} \text{ kg/cm}^3 = 50 \text{ kg/m}^3$ para $-70 \leq z \leq 0$
- $C(-70,t) = 5 \times 10^{-5} \text{ kg/cm}^3 = 50 \text{ kg/m}^3$ para $t > 0$
- $C(0,t) = 5 \times 10^{-4} \text{ kg/cm}^3 = 500 \text{ kg/m}^3$ para $t > 0$

As condições iniciais e de contorno para a variável de estado concentração x umidade θC são

- $\theta C(z,0) = 0,0216 \times 5 \times 10^{-5} = 1,08 \times 10^{-6} \text{ kg/cm}^3 = 1,08 \text{ kg/m}^3$ para $-70 \leq z \leq 0$
- $\theta C(-70,t) = 0,0216 \times 5 \times 10^{-5} = 1,08 \times 10^{-6} \text{ kg/cm}^3 = 1,08 \text{ kg/m}^3$ para $t > 0$
- $\theta C(0,t) = 0,443 \times 5 \times 10^{-4} = 221,5 \times 10^{-6} \text{ kg/cm}^3 = 221,5 \text{ kg/m}^3$ para $t > 0$

Para o problema do transporte de soluto, foi possível utilizar o esquema de Euler Implícito (BEAR, 2007) (seção 2.10.1.1), sem maiores dificuldades, devido à linearidade da

equação. O uso do esquema implícito é muito vantajoso, pois não implica em restrição ao tamanho do passo de tempo. Desta maneira, foi utilizado um passo de tempo para o transporte do soluto 1000 vezes maior do que para a Equação de Richards, isto é, $\Delta t = 14$ segundos. O número de passos de tempo executado é de 450 com um instante final de simulação de 1,75 horas.

O domínio $\Omega = [-70, 0]$ foi particionado, na malha uniforme, em 64 elementos de mesmo tamanho.

Foram realizadas duas simulações: uma com a malha uniforme de 64 elementos e outra com malha adaptada. O tamanho do menor elemento da malha adaptada é o mesmo dos elementos da malha uniforme, ou seja, 70/64 cm, e, o maior varia a cada passo de tempo. O número de elementos nos passos de tempo do transporte de soluto é apresentado na Figura 33.

Figura 33 – Número de elemento da malha adaptada do transporte de solutos nos passo de tempo 1,2,3,...,450.

O parâmetro de adaptação ε foi de 0,01. O processo de adaptação da malha é realizado em todo passo de tempo. Devido à suavidade da solução θC , adotou-se, para as duas simulações, ordem de aproximação $p = 3$, constante para todos os elementos da malha. A suavidade da solução permite o emprego de maior ordem de aproximação sem receio das oscilações numéricas presentes na solução da Equação de Richards.

As Figuras 34 e 35 mostram as soluções obtidas para variável de estado concentração x umidade θC com a malha uniforme com 2^6 elementos, $p = 3$ e a malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$ no instante final de simulação (Figura 34) e em vários instantes de simulação (Figura 35). Os resultados indicam também que a escolha de θC como variável de estado é acertada (Figuras 34 e 35), devido à suavidade da solução.

Figura 34 - θC no instante final de simulação (passo de tempo 450; 1,75 h). a) malha uniforme com 2^6 elementos, com $p = 3$. b) malha adaptada, com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$.

Figura 35 - $\theta.C$ em vários instantes de simulação. a) malha uniforme com 2^6 elementos e $p = 3$.
b) malha adaptada, com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$.

As Figuras 36 e 37 mostram as soluções obtidas para variável concentração C com a malha uniforme com 2^6 elementos, $p = 3$ e a malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$ no instante final de simulação (Figura 36) e em vários instantes de simulação (Figura 37).

O umedecimento, que se deu até cerca de 35 cm de profundidade, após 1 hora e 45 minutos, também pode ser observado nos resultados da concentração do soluto C (Figura 36). Pode-se observar que a concentração em profundidade superior a 35 cm mantém-se inalterada, com valor igual a 50 kg/m^3 . É interessante observar que para profundidades menores, entre 20 e 30 cm de profundidade, no instante final de simulação, a concentração assume valores inferiores à concentração inicial (Figuras 36 e 37) e as maiores concentrações de potássio estão nas camadas superiores. Esse resultado deve-se ao fato do potássio em solução ter sido adsorvido pelo solo, mostrando que a frente de molhamento que avançou para profundidades maiores, provavelmente, apresentava concentração menor desse soluto.

Figura 36 - Concentração C no instante final de simulação (passo de tempo 450; 1,75 h). a) malha uniforme com 2^6 elementos com $p = 3$. b) malha adaptada, com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$.

Figura 37 - Concentração C em vários instantes de simulação. a) malha uniforme com 2^6 elementos e $p = 3$.
b) malha adaptada com $p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$.

A solução da concentração C no instante final de simulação (passo de tempo 450; 1,75 h), tanto com a malha uniforme (2^6 elementos com $p = 3$) quanto com a malha adaptada ($p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$), observada nas Figuras 36 e 37, é equivalente aos resultados numéricos e experimentais de Miranda et al. (2005) (Figuras 38 e 39).

Figura 38 - Comparação do perfil de concentração do íon potássio obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha uniforme (2^6 elementos e $p = 3$).

Figura 39 - Comparação do perfil de concentração do íon potássio obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado) e a solução obtida, no presente trabalho, com malha adaptada ($p = 3$ e $\varepsilon = 0,01$).

A solução do problema de transporte torna-se mais simples do que a solução da Equação de Richards devido:

- a) a equação ser linear e permitir o uso do esquema implícito sem a necessidade de resolver sistemas de equações não-lineares.
- b) o esquema implícito permitir refinar a malha tanto quanto se queira sem a preocupação de perda de estabilidade do método.
- c) a solução θC ser suave e não induzir nenhuma oscilação numérica (Figuras 34 e 35). Devido a isso, nesse teste, optou-se por utilizar ordem de aproximação maior do que para a Equação de Richards ($p = 3$).

As oscilações presentes na solução da concentração C são devidas exclusivamente à solução da Equação de Richards. Observa-se, portanto, que especial cuidado deve ser dado ao problema da Equação de Richards.

6.2.3 Tempo de Execução e Consumo de Memória

O tempo de execução e o consumo de memória referem-se ao processo que executa as simulações do problema de Richards e do Transporte de Solute, em seqüência. Foram realizadas duas simulações, uma com malhas uniformes e outra com malhas adaptadas.

Usando as malhas uniformes para o problema de Richards e o Transporte de Solute, o tempo de execução total foi de 22 minutos e a memória utilizada de 6164 Kb. Com as malhas adaptadas, o tempo de execução total foi de 3 minutos e 27 segundos consumindo 5876 Kb de memória, redução de, aproximadamente, 84 % no tempo de execução (Tabela 3).

As simulações foram executadas em um computador com processador Intel® Core™2 Duo T8300 de 2.40 GHz com 3 Gb de memória RAM, em sistema operacional Linux Ubuntu 32 bits.

No consumo de memória, não estão incluídos os resultados de todos os passos de tempo, uma vez que estes são escritos em disco. Apenas os vetores solução do passo de tempo corrente e do passo de tempo anterior de cada um dos problemas (Equação de Richards e Transporte de Solute) são mantidos em memória.

Tabela 3 – Tempo de processamento e consumo de memória na solução das Equações de Richards e de Transporte de Solutos

Malhas	Tempo de Processamento	Memória
Uniforme	22 min	6,164 Mb
Adaptada	3 min 27 s	5,876 Mb

6.3 Estudo Estatístico comparativo do Modelo Proposto com dados da Literatura

Na seção 6.3 é apresentado um estudo estatístico comparativo da solução numérica da Equação de Richards e da Equação de Transporte de Solutos obtidas pela adaptatividade com refinamento h na malha de elementos finitos com as soluções de Celia, Bouloutas e Zarba (1990), de Prasad, Kumar e Sekhar (2001) e de Miranda et al. (2005).

No estudo da Regressão, a finalidade é determinar a dependência de uma variável chamada variável dependente em relação a uma outra variável chamada variável independente.

Usando aplicativos Statistica e Bioestat de Estatística, foram feitas as regressões lineares das variáveis em questão, apresentando as curvas e equações de regressão linear, verificando-se, pelo coeficiente de determinação, a medida da proporção da variabilidade em uma variável que é explicada pela variabilidade da outra (MORETTIN; BUSSAB, 2004).

6.3.1 Regressão Linear dos potenciais matriciais na Malha Uniforme Fina e no Método de Celia, Bouloutas e Zarba

O objetivo desta seção é apresentar um estudo comparativo da solução numérica da Equação de Richards pelo Método Proposto neste trabalho usando a Malha Uniforme Fina (2^6 elementos e $p = 1$) com a solução obtida pelo Método de Celia, Bouloutas e Zarba (1990). A partir da Figura 12 é elaborada a Tabela 4, usada na construção da Curva de Regressão Linear.

Tabela 4 – Potenciais Matriciais versus Profundidade dos Métodos a serem comparados

<i>Profund.</i>	-0,05	-0,10	-0,15	-0,2	-0,3	-0,4	-0,5	-0,55	-0,55	-0,56	-0,57	-0,6	-0,65	-0,95
<i>Celia</i> ψ_1	-0,75	-0,75	-0,80	-0,80	-0,76	-1	-1,3	-2,5	-3	-5,5	-7,5	-10	-10	-10
<i>Uniforme</i> ψ_u	-0,75	-0,75	-0,75	-0,75	-0,75	-1	-1,5	-2,5	-3	-5,5	-7,5	-10	-10	-10

A Curva de Regressão Linear, tendo como variável dependente, o potencial matricial ψ_u na Malha Uniforme Fina (2^6 elementos e $p = 1$) e como variável independente, o potencial matricial ψ_1 obtido pelo Método de Celia, Bouloutas e Zarba (1990), é dada pela Figura 40. O Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,9998$ e a equação de Regressão Linear é

$$\psi_u = - 0,0087 + 0,9993 \psi_1 \qquad (6.1)$$

Figura 40 - Curva de Regressão Linear considerando o potencial matricial na Malha Uniforme Fina e no Método de Celia, Bouloutas e Zarba

O Coeficiente de Determinação, com valor $R^2 = 0,9998$, bem próximo de 1, implica que o potencial matricial obtido pelo Método de Celia, Boulotas e Zarba (1990) é explicativo para o potencial matricial do Modelo Proposto usando a Malha Uniforme Fina.

6.3.2 Estudo Comparativo da solução de Richards pelo Modelo Proposto e soluções da Literatura

O objetivo desta seção é apresentar um estudo comparativo da solução numérica da Equação de Richards, em termos do potencial matricial, pelo Modelo Proposto, usando a Malha Adaptada ($\varepsilon = 0,01$ e $p = 2$), com as soluções obtidas pelos Métodos de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e de Prasad, Kumar e Sekhar (2001) em determinados valores da profundidade.

A partir da Figura 25 é elaborada a Tabela 5, usada na construção das Curvas de Regressão Linear.

Tabela 5 – Potenciais Matriciais versus Profundidade dos Métodos a serem comparados

<i>Profund</i>	-0,15	-0,30	-0,50	-0,53	-0,55	-0,56	-0,575	-0,58	-0,6	-0,65	-0,85	-0,90
<i>Celia: ψ_1</i>	-1	-1	-1,25	-1,6	-3	-4	-8,5	-9,25	-10	-10	-9,9	-10
<i>Prasad: ψ_2</i>	-1	-1,1	-1,25	-1,65	-1,75	-1,8	-6,5	-8	-9,8	-9,8	-9,8	-9,9
<i>Adapt: ψ_3</i>	-0,8	-0,9	-1,5	-1,75	-3	-5	-9,5	-9,5	-9,75	-9,8	-10	-10

6.3.2.1 Regressão Linear dos potenciais matriciais do Modelo Proposto e do Método de Celia, Bouloutas e Zarba

A Curva de Regressão Linear, tendo como variável dependente, o potencial matricial ψ_3 , do Modelo Proposto (Malha Adaptada ($\varepsilon = 0,01$ e $p = 2$)) e como variável independente, o potencial matricial ψ_1 obtido pelo Método de Celia, Bouloutas e Zarba (1990), é dada pela Figura 41.

O Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,9902$ e a equação da Curva de Regressão Linear é

$$\psi_3 = -0,132 + 1,0040\psi_1 \quad (6.2)$$

Como $R^2 = 0,9902$, muito próximo de 1, significa que o potencial matricial ψ_1 explica muito bem o potencial matricial ψ_3 (Figura 41).

Figura 41 - Curva de Regressão Linear com os potenciais matriciais obtidos pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) e pelo Método de Celia, Boulotas e Zarba

6.3.2.2 Regressão Linear dos potenciais matriciais do Modelo Proposto e do Método de Prasad, Kumar e Sekhar

A Curva de Regressão Linear, tendo como variável dependente, o potencial matricial ψ_3 do Modelo Proposto (Malha Adaptada ($\epsilon = 0,01$ e $p = 2$)) e como variável independente, o potencial matricial ψ_2 obtido pelo Método de Prasad, Kumar e Sekhar (2001), é dada pela Figura 42. O Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,9233$ e a equação da Curva de Regressão Linear é

$$\psi_3 = -0,7485 + 0,9907\psi_2 \quad (6.3)$$

Como $R^2 = 0,9233$, muito próximo de 1, significa que o potencial matricial ψ_2 explica muito bem o potencial matricial ψ_3 (Figura 42).

Figura 42 - Curva de Regressão Linear com os potenciais matriciais obtidos pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) e Método de Prasad, Kumar e Sekhar

6.3.3 Estudo Comparativo da solução da Equação de Richards usando o Método de Miranda et al. e o Modelo Proposto

O objetivo desta seção é apresentar um estudo comparativo da solução numérica da Equação de Richards, formulada em termos da umidade, considerando o Modelo Proposto, usando a Malha Adaptada ($\varepsilon = 0,01$ e $p = 2$) e o perfil de umidade obtido por Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado - MIDI).

A partir da Figura 32 é elaborada a Tabela 6 usada na construção da Curva de Regressão Linear.

Tabela 6 – Umidade versus Profundidade para a Malha Adaptada e Miranda et al. (2005) (Observada experimentalmente e MIDI)

<i>Profundidade</i>	-70	-50	-44	-40	-34	-30	-26	-20	-10	-8
<i>Adaptada</i> θ_{adapt}	2	2	2	1	42	36	41	43	44	44
<i>Observada</i> θ_{Obs}	2	2	1	6	18	30	38	40	39	41
<i>MIDI</i> θ_{MIDI}	2	2	8	16	2	42	44	44	44	44

6.3.3.1 Regressão Linear das umidades do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (experimental)

O Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,8452$ e a Curva de Regressão Linear, tendo como variável dependente, a umidade do Modelo Proposto usando a Malha Adaptada ($\varepsilon = 0,01$ e $p = 2$) e como variável independente, a umidade obtida pelo Método de Miranda et al. (2005) (Observada experimentalmente), é dada pela Figura 43. A Equação de Regressão Linear é dada por

$$\theta_{adapt} = 2,5904 + 1,0773 \theta_{Obs} \quad (6.4)$$

Figura 43 - Curva de Regressão Linear considerando a umidade obtida pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a umidade obtida experimentalmente por Miranda et al.

6.3.3.2 Regressão Linear das umidades do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (MIDI)

O Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,8005$ e a Equação de Regressão Linear, tendo como variável dependente, a umidade do Modelo Proposto considerando a Malha Adaptada ($\varepsilon = 0,01$ e $p = 2$) e como variável independente, a umidade obtida pelo Método de Miranda et al. (2005) (MIDI), é

$$\theta_{adapt} = 0,5706 + 0,9649 \theta_{MIDI} \quad (6.5)$$

A curva de Regressão Linear é dada pela Figura 44.

Figura 44 - Curva de Regressão Linear considerando a umidade obtida pelo Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a umidade obtida por Miranda et al. (MIDI)

6.3.4 Estudo Comparativo das Concentrações de Potássio dadas pelo Modelo Proposto e pelo Método de Miranda et al.

São apresentadas a concentração de potássio e a Curva de Regressão, tendo como variável dependente, a concentração de potássio obtida pelo Modelo Proposto considerando a Malha Adaptada ($\epsilon = 0,01$ e $p = 3$), e como variáveis independentes, os perfis de concentração de potássio obtidos pelo Método de Miranda et al. (2005) (Observado experimentalmente e simulado (MIDI)) (Figura 39).

A partir da Figura 39, é elaborada a Tabela 7 usada na construção das Curvas de Regressão Linear, considerando a Concentração de Potássio.

Tabela 7 – Profundidade versus Concentração do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (Observada experimentalmente e MIDI)

<i>Profundidade</i>	-2	-4	-8	-10	-12	-14	-18	-20	-24	-30-	-40	-60	-70
<i>Miranda Obs: C_{Obs}</i>	460	400	280	260	240	180	100	40	40	20	20	30	50
<i>Miranda MIDI: C_{MIDI}</i>	480	400	320	260	200	122	80	40	40	20	50	50	50
<i>Adapt: C_{adapt}</i>	480	400	300	140	80	20	10	5	5	2	50	50	50

6.3.4.1 Regressão Linear com as concentrações do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (experimental)

A Curva de Regressão Linear, tendo a Concentração de Potássio do Modelo Proposto, considerando a Malha Adaptada ($\varepsilon=0,01$ e $p = 3$), como variável dependente e a Concentração de Potássio obtida pelo Método de Miranda et al. (2005) (Observada experimentalmente), como variável independente, é dada pela Figura 45. Como o Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,8220$, próximo de 1, significa que a concentração de potássio da Malha Adaptada é bem explicada pela Concentração de Potássio de Miranda et al. (2005) (experimental). A equação da Curva de Regressão Linear é

$$C_{adapt} = -3,6781 + 0,9697 C_{Obs} \quad (6.6)$$

Figura 45 – Curva de Regressão Linear da concentração de potássio do Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a concentração de potássio obtida pelo Método de Miranda et al. (Observada experimentalmente)

6.3.4.2 Regressão Linear das concentrações do Modelo Proposto e do Método de Miranda et al. (MIDI)

A Curva de Regressão Linear, tendo a Concentração de Potássio do Modelo Proposto, considerando a Malha Adaptada ($\varepsilon=0,01$ e $p = 3$) como variável dependente e a Concentração de Potássio obtida pelo Método de Miranda et al. (2005) (MIDI), como variável

independente, é dada pela Figura 46. O Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,9172$ e a equação da Curva de Regressão Linear é

$$C_{adapt} = - 40,9400 + 1,0058 C_{MIDI} \quad (6.7)$$

Como o Coeficiente de Determinação é $R^2 = 0,9172$, próximo de 1, significa que a concentração de potássio da Malha Adaptada é bem explicada pela Concentração de Potássio de Miranda et al. (2005) (MIDI).

Figura 46 – Curva de Regressão Linear da concentração de potássio do Modelo Proposto (Malha Adaptada) com a concentração de potássio obtida pelo Método de Miranda et al. (MIDI)

7 CONCLUSÕES

A simulação realizada pelo modelo proposto neste trabalho é capaz de prever, o perfil de potencial matricial ψ , e, conseqüentemente, a partir da equação (5.4), o perfil de umidade volumétrica θ , bem como a evolução temporal da concentração C do soluto no solo, em que se constata um bom desempenho do modelo na zona não-saturada do solo, comparando-se com resultados de Celia, Bouloutas e Zarba (1990), Prasad, Kumar e Sekhar (2001) e Miranda et al. (2005).

A estratégia de se usar malha adaptada, através do refinamento h , onde é adotado um maior nível de refinamento nas regiões onde a solução varia mais fortemente e um menor refinamento nas regiões em que a solução é suave, fez com que se obtivessem soluções tão eficientes quanto às com malhas uniformes, diminuindo os graus de liberdade, com um custo computacional reduzido.

A solução da Equação de Richards, com os dados de Celia, Bouloutas e Zarba (1990), considerando-se a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$ apresentou menor erro em relação à solução com a malha uniforme fina com 2^6 elementos e $p = 1$ (Figura 22). A solução obtida considerando-se a malha adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,01$ é uma boa aproximação em relação à malha fina (Figura 21), devido à quantidade menor de nós em relação à adaptada com $p = 2$ e $\varepsilon = 0,001$. A simulação do potencial matricial, com ordem de interpolação $p = 2$ e $\varepsilon = 0,1$ comprovou ser inadequada, possivelmente por ser uma malha demasiadamente “grosseira”, em comparação com as simulações com ordem de interpolação $p = 2$ e parâmetros de adaptação $\varepsilon = 0,01$ e $\varepsilon = 0,001$. Portanto, a escolha do parâmetro de adaptação ε é fundamental na solução do problema.

A solução da Equação de Richards, obtida pelo Método de Elementos Finitos na aproximação espacial, com função de interpolação quadrática, evitando a perda de massa do processo de adaptação de malha implementado, mostrou-se equivalente aos modelos de Celia, Bouloutas e Zarba (1990) e Prasad, Kumar e Sekhar (2001) (Figura 25), que usam malhas uniformes e funções-base lineares lagrangeanas. Uma outra estratégia para minimizar a perda

de massa seria utilizar um valor muito pequeno de ε_{grad} . Desse modo, apenas regiões extremamente suaves seriam desrefinadas. O impacto dessa estratégia seria uma menor capacidade de desrefinamento da malha, o que implicaria em maior número de graus de liberdade e maior esforço computacional.

A solução da Equação de Richards, obtida neste trabalho, mostrou-se também equivalente ao modelo de Miranda et al. (2005), que a resolve numericamente em um sistema de volumes finitos, formulada em termos de umidade θ . No problema de transporte de potássio, adotou-se a ordem de interpolação $p = 3$, sem receio de oscilações numéricas, como mostram os resultados nas Figuras 34 e 35, devido à suavidade da solução da variável de estado θC , adotada no problema.

O modelo computacional deste trabalho aplicado à solução da Equação de Richards e na simulação de fluxo e transporte de potássio, com os dados do trabalho de Miranda et al. (2005), mostrou a redução, de aproximadamente, 84 % no tempo de processamento, usando-se malhas adaptadas em relação ao tempo de processamento em malhas uniformes. Já a diferença de consumo de memória não foi tão significativa em relação às duas malhas empregadas.

Através do deslocamento do potássio, observa-se que os locais de maiores concentrações de potássio coincidem com os locais de maiores valores de umidade, demonstrando seu deslocamento por fluxo de massa, podendo-se ter controle da localização do potássio no solo em função da irrigação realizada (Figuras 30 e 37).

Para previsão de deslocamento de solutos no solo, os resultados obtidos mostram a importância da determinação dos parâmetros do solo e de transporte exigidos pelas Equações de Richards e de Advecção-Dispersão, respectivamente, e das condições iniciais e de contorno.

Com a solução da Equação de Richards, obtém-se a velocidade da água nos poros que é necessária para a resolução da Equação de Transporte de Solutos que prevê o deslocamento destes no solo, contribuindo para a prevenção e realização de previsões de poluição e contaminação do meio ambiente. Em particular, fornece subsídios para projetos de aterros sanitários, caso disponha de parâmetros de transporte de chorume.

Com as ferramentas da Estatística, usando-se critérios comparativos, foram apresentados os resultados obtidos no Modelo Proposto, tanto considerando a Malha Uniforme Fina quanto a Malha Adaptada, em relação às soluções da Literatura. Os coeficientes de determinação próximos de 1 (um), calculados nesta seção, indicam uma boa

explicação entre essas variáveis. As equações de regressão e gráficos fornecem uma boa estimativa na comparação desses dados.

7.1 Sugestões para pesquisas futuras

Outras aplicações da metodologia estudada neste trabalho poderão ser efetuadas usando-se as duas outras formulações da Equação de Richards, a formulação em função de umidade e a mista, efetuando-se comparações entre as soluções e estudando a influência de cada solução na Equação de Transporte de Solutos. Todos esses aspectos poderão ser ainda estudados, considerando-se a adaptatividade hp . Poderá ser feita também a implementação do código PZ, considerando-se as Equações de Richards e de Advecção-Dispersão nas dimensões 2 e 3.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABDOU, H. M.; FLURY, M. Simulation of water flow and solute transport in free-drainage lysimeters and field soils with heterogeneous structures. **European Journal of Soil Science**, Pullman, n. 55, p. 229–241, June 2004.

AHMED, S. et al. Two dimensional leachate estimation through landfills. **Journal of Hydraulic Engineering**, Reston, v. 118, n. 2, p. 306-322, Fevereiro 1992.

ALLEN, M. B.; MURPHY, C. L. A finite element collocation method for variably saturated flow in two space dimensions. **Water Resources Research**, v. 22, p. 1537-1542, 1986.

AL-YOUSFI, B. A.; POHLAND, F. G.; VASUKI, N.C. Design of landfill leachate recirculation systems based on flow characteristic. In: PURDUE UNIVERSITY INDUSTRIAL WASTE CONFERENCE, 47.; 1992, Indiana. **Proceedings...** Indiana: Purdue University, West Lafayette, Maio 1992. p. 91-100.

ANDERSON, M. P. Using models in simulate the movement of contaminants through groundwater systems. **Critical Rev. in Envir. Control**, New Jersey, v. 9, n. 2, p. 97-156, 1979.

ANDERSON, M. P.; WOESSNER, W. W. **Applied groundwater modeling**: Simulation of flow and advective transport. San Diego: Academic Press, 1992. 381 p.

BEAR, J. Some experiments on dispersion. **Journal of Geophysical Research**, v. 66, n. 8, p. 2455-2467, 1961.

_____. **Dynamics of fluids in porous media**. New York: Elsevier, 1972. 764 p.

_____. **Hydraulics of groundwater**. New York: Dover Publications, INC. Mineola, 2007. 569 p.

BEAR, J.; VERRUIJT, A. **Modeling groundwater flow and pollution**. Holland: D. Reidel Dordrecht, 1993. 414 p.

BEDIENT, P. B.; RIFAI, H. S.; NEWELL, C. J. **Ground Water Contamination: Transport and Remediation**. New Jersey: Prentice-Hall, 1994. 560 p.

BIDONE, F. R. A.; POVINELLI, J. **Conceitos Básicos de Resíduos Sólidos**. São Carlos: Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, 1999. 109 p.

BIDWELL, V. J. State-space mixing cell model of unsteady solute transport in unsaturated soil. **Environmental Modelling and Software**, Amsterdam, v. 14, n. 2, p. 161-169. 1999.

BIGGAR, J. W.; NIELSEN, D. R. Miscible displacement in soils: II Behavior of tracers. **Soil Science Society of America Proceedings**, Pittsburg, v. 26, p. 125-128, 1962 a.

BIGGAR, J. W.; NIELSEN, D. R. A some comments on molecular diffusion and hydrodynamic dispersion in porous media. **Journal of Geophysical Research**, Columbia, v. 67, p. 3636-3637, 1962 b.

BORDIER, C.; RATHLE, J.; ZIMMER, D. Hydraulic functioning and clogging diagnosis of leachate collection system. In: International Landfill Symposium, 6.; 1997, Cagliari. **Proceedings Sardinia 97...** Cagliari: CISA publisher, 1997. v. 3. p. 361-372.

BOUWER, H. **Groundwater Hydrology**. New York: MacGraw-Hill, 1978. 480 p.

BOU-ZEID, E.; EL-FADEL, M. Parametric sensitivity analysis of leachate transport simulations at landfills. **Waste Management**, New York, n. 24, p. 681-689, 2004.

BREBBIA, C. A.; CONNOR, J. J. **Finite Elements for Fluid Flow**. London: Butterworths, 1976. 124 p.

BUCZKO, U.; HOPP, L.; BERGER, W.; DURNER, W.; PEIFFER, S.; SCHEITHAUER, M. Simulation of chromium transport in the unsaturated zone for predicting contaminant entries into the groundwater. **J. Plant Nutr. Soil Sci**, Weinheim, n. 167, p. 284-292, 2004.

BUNSRI, T.; SIVAKUMAR, M.; HAGARE, D. Numerical Modelling of Tracer Transport in Unsaturated Porous Media. **Journal of Applied Fluid Mechanics**, v. 1, n. 1, p. 62-70, 2008 a.

BUNSRI, T.; SIVAKUMAR, M.; HAGARE, D. Influence of Dispersion on Transport of Tracer through Unsaturated Porous Media. **Journal of Applied Fluid Mechanics**, v. 1, n. 2, p. 37-44, 2008 b.

CAMPOS, T. M.; ELBACHÁ, A. T. Avaliação do fator de retardamento por adsorção no transporte de zinco em solos argilosos. In: SIMPÓSIO SOBRE BARRAGENS DE REJEITOS E DISPOSIÇÃO DE RESÍDUOS, 1991, Rio de Janeiro. **Anais...** Rio de Janeiro: REGEO, 1991. p. 271-282.

CAPUTO, J. G.; STEPANYANTS, Y. A. Front Solutions of Richards' Equation. **Transport in porous media**, Netherlands, v. 74, n. 1, p. 1-20, 2008.

CAREY, P. L.; BIDWELL, V. J.; MCLAREN, R. G. Chromium(VI) leaching from large undisturbed soil lysimeters following application of a simulated copper-chromium-arsenic (CCA) timber preservative. **Australian Journal of Soil Research**, Australia, v. 40, n. 2, p. 351-365, 2002.

CARSEL, R. F.; SMITH, C. N.; MULKEY, L. A.; DEAN, L. A.; JOWISE, D. User's manual for the pesticide root zone model (PRZM) release1. **U. S. Environmental Agency**, EPA, Athens, Georgia, USA, v. 600, n. 3, p. 84-109, 1984.

CELIA, M. A.; BOULOUTAS, E. T.; ZARBA, R. L. A general mass conservative numerical solution for the unsaturated flow equation. **Water Resources Research**, v. 26, p. 1483-1496, 1990.

CELIA, M. A.; AHUJA, L. R.; PINDER, G. F. Orthogonal collocation and alternating-direction procedures for unsaturated flow problems. **Adv. Water Resources**, v. 10, p. 178-187, 1987.

CHAPRA, S. C. **Surface Water-Quality Modeling**. Texas: McGraw-Hill, 1997. 844 p.

CHEN, P. H.; WANG, C. Y. Investigation into municipal waste leachate in the unsaturated zone of red soil. **Environment International**, Amsterdam, v. 23, n. 2, p. 237-245, 1997.

CHEN, Y. H. Finite element analysis of contaminant transport in groundwater. **Applied Mathematics and Computation**, California, v. 127, Issue 1, p. 23-43, 25 mar. 2002.

COOLEY, R. L. Some new procedures for numerical solution of variably saturated flow problems. **Water Resources Research**, v. 19, p. 1271-1285, 1983.

CORRÊA, M. M. **Desenvolvimento e teste de modelo de transporte unidimensional de solutos no solo**. 2001. 104 p. Tese (Doutorado em Solos e Nutrição de Plantas) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 2001.

COSTA, C. T.; CASTRO, M. A. H. Uma metodologia numérico-analítica aplicada a problemas transparentes de transporte de contaminante. **Revista Brasileira de Recursos Hídricos**, Porto Alegre, v. 12, n. 4, p. 183-197, 2007.

COSTA, S. N. **Desenvolvimento de um modelo numérico para simulação do transporte de água e solutos no solo, sob condições de escoamento não-permanente na vertical**. 1998. 153 p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 1998.

COSTA, S. N.; MARTINEZ, M. A.; MARTINS, J. H.; FERREIRA, P. A. SIMASS-Modelo para simular o Transporte de água e solutos no solo I: Desenvolvimento e teste de sensibilidade. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 3, n. 2, p. 183-189, 1999.

CUMINATO, J. A.; MENEGUETE JUNIOR, M. **Discretização de Equações Diferenciais Parciais: Técnicas de Diferenças Finitas**. São Carlos: ICMC/USP, 1999. 203 p.

DARCY, H. **Les Fontaines Publiques de la Ville de Dijon - Appendice D**. Paris: Dalmont, 1856. 647 p.

DAUS, A. D.; FRIND, E. O.; SUDICKY, E. A. Comparative error analysis in finite element formulation of advection-dispersion equation. **Advance in Water Resources**, v. 8, p. 86-95, 1985.

DE JOSSELIN DE JONG, G. Longitudinal and transverse diffusion in granular deposits. **Transactions, American Geophysical Union**, Washington, n. 39, p. 67-74, 1958.

DEMETRACOPOULOS, A. C.; KORFIATIS, G. P.; BOURODIMOS, E. L.; NAWY, E. G. Unsaturated flow through solid waste landfills: model and sensitivity analysis. **Water Resources Bulletin**, California, v. 22, n. 4, p. 601-609, 1986.

DEMETRACOPOULOS, A. C. Overview of landfill bottom liner hydraulics. **Water Resources Bulletin**, California, v. 24, p. 49-56, 1988.

DEVLOO, P. R. B. PZ: An object oriented environment for scientific programming. **Computer Methods in applied mechanics and Engineering**, Amsterdam, v. 150, p. 133 - 153, 1997.

ELBACHÁ, A. T. **Estudo da Influência de Alguns Parâmetros no Transporte de Massa em Solos Argilosos**. 1989. 178 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) - Departamento de Engenharia Civil, PUC-RIO, Rio de Janeiro, 1989.

FARTHING, M. W.; KEES, C. E.; RUSSEL, T. F.; MILLER, C. T. An ELLAM approximation for advective-dispersive transport with nonlinear sorption. **Advances in Water Resources**, v. 29, p. 657-675, 2006.

FATTA, D.; NAOUM, D.; LOIZIDOU, M. Integrated environmental monitoring and simulation system for use as a management decision support tool in urban areas. **Journal of Environmental Management**, Oxford, n. 64, p. 333-343, 2002.

FETTER, C. W. **Contaminant Hydrogeology**. New Jersey: Prentice Hall, 1992. 317 p.

FETTER, C. W. **Contaminant Hydrogeology**. New York: Macmillan Publishing Company, 1993. 458 p.

FREDLUND, D. G.; MORGENSTERN, N. R. Stress state variables for unsaturated soils. **Journal of Geotechnical Engineering Division**, ASCE, New York, v. 103, n. 5, p. 447-466, 1977.

FREDLUND, D. G.; RAHARDJO, H. **Soil Mechanics for Unsaturated Soils**. New York: John Wiley & Sons, 1993. 517 p.

FREEZE, R. A. Three-dimensional transient, saturated-unsaturated flow in a groundwater basin. **Water Resources Research**, v. 7, n. 2, p. 347-366, 1971.

FREEZE, R. A.; CHERRY, J. A. **Groundwater**. New Jersey: Prentice-Hall, 1979. 604 p.

GILES, R. V. **Mecânica dos Fluidos e Hidráulica**. São Paulo: McGraw-Hill, 1976. 412 p.

GILLHAM, R. W.; CHERRY, J. A. Contaminant Migration in Saturated Unconsolidated Geologic Deposits. **Spec. Pap. Geol. Soc. Am.**, Virginia, n. 189, p. 31-62, 1982.

GIRAULT, V.; RAVIAT, P. A. **Finite Element Methods for Navier-Stokes Equations – Theoria and algorithms**, Springer-Verlag, 1986.

GOMES, C. C. **Método de elementos analíticos para modelagem matemática de fluxo hídrico subterrâneo regional**. 2000. Tese (Doutorado em Engenharia Civil) Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental. Universidade Federal do Ceará, Fortaleza, 2000.

HAMON, W. R. Estimating potential evapotranspiration. **J Hydraul Div Proc Am Soc Civil Eng**, Oxford, n. 87, p.107–120, 1961.

HANCOCK, T. C. et al. Pesticide Fate and Transport throughout Unsaturated Zones in Five Agricultural Settings. **J Environ Qual**, Pittsburgh, v. 37, p. 1086-1100, 2008.

HAVERKAMP, R.; VAUCLIN, M.; TOUMA, J.; WIERENGA, P.; VACHAUD, G. Comparison of numerical simulation models for one-dimensional infiltration. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, Pittsburgh, v. 41, p. 285-294, 1977.

HAVERKAMP, R.; VAUCLIN, M. A note on estimating finite difference interblock hydraulic conductivity values for transient unsaturated flow problems. **Water Resources Research**, v. 15, p. 181-187, 1979.

HAYDAR, M. M.; KHIRI, M. V. Leachate recirculation using horizontal trenches in bioreactor landfills. **Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering**, ASCE, New York, p. 837-847, 2005.

HAYHOE, H. N. Study of the relative efficiency of finite difference and Galerkin techniques for modeling soil-water transfer. **Water Resour. Res.**, v. 14, p. 97-102, 1978.

HE, X.; REN, L. An adaptive multiscale finite element method for unsaturated flow problems in heterogeneous porous media. **Journal of Hydrology**, v. 374, p. 56-70, 2009.

HEIDMAN, J. A.; BRUNNER, D. R. Solid waste and water quality. **Water Pollution Control Fed.**, California, v. 45, n. 6, p. 1198-1202, Junho 1973.

HILLEL, D. **Fundamentals of soil physics**. New York: Academic, 1980. 413p.

HINDMARSH, A. C.; GRESHO, P. M.; GRIFFITHS, D. F. The stability of explicit Euler time integration for certain finite difference approximations of the multidimensional

advection-diffusion equation. **Int. Journal for numerical methods in fluids**, Livermore, v. 4, p. 853-897, 1984.

HORNBECK, R. W. **Numerical Methods**. Pittsburgh: Carnegie Mellon Univ, 1975. 326p.

HORNUNG, U.; MESSING, W. Truncation errors in the numerical solution of horizontal diffusion in saturated/unsaturated media. **Adv. Water Resour.**, v. 6, p. 165-168, 1983.

<http://pt.wikipedia.org/wiki/MATLAB>. Acesso em: 13 jun. 2009.

HUYAKORN, P. S.; LESTER, B. H.; MERCER, J. W. An efficient finite element technique for modeling transport in fractured media, 1: Single-species transport. **Water Resour. Res.**, v. 19, n. 3, p. 841-854, 1983.

HUYAKORN, P. S.; PINDER, G. F. **Computational Methods in Subsurface Flow**. New York: Academic Press, 1983. 473p.

INSTITUTO BRASILEIRO DE GEOGRAFIA E ESTATÍSTICA. **Pesquisa Nacional de Saneamento**. Disponível em: <<http://www.ibge.gov.br/home/presidencia/noticias/27032002>>. Acesso em: 17 out. 2006.

ISTOK, J. D. **Groundwater Modeling by the Finite Element Method**. Washington: American Geophysical Union, 1989. 495 p.

JAVADI, A. A.; AL-NAJJAR, M. M.; EVANS, B. Finite element modelling of contaminant transport through soils – Case study. **Journal of Geotechnical and Geoenvironmental Engineering**, ASCE, New York, v. 134, n. 2, p. 214-230, 2008.

KAW, A.; KALU, E. E. **Numerical Methods with Applications**. Florida: University of South Florida, 2008. 728 p.

KHANBIVARDI, R. M.; AHMED, S.; GLEASON, P. J. Flow Investigation for Landfill Leachate (FILL). **Journal of Environmental Engineering**, ASCE, New York, v. 121, n. 1, p. 45-57, Janeiro 1995.

KIM, G.; KOO, J.; SHIN, J.; SHON, J.; LEE, S. A study of methods to reduce groundwater contamination around a landfill in Korea. **Journal of Environmental Hydrology**, Texas, v. 7, n. 10, p. 1-9, 1999.

KLEIN, M. Evaluation and Comparison of Pesticide Leaching models for Registration Purposes, Results of Simulations performed with the Pesticide Leaching Model. **Journal of Environmental Science & Health**, New York, v. 29, n. 6, p.1197-1209, 1994.

KLEIN, M. **PELMO**: Pesticide Leaching Model, User manual version 2.0. Alemanha: Fraunhofer-Institut für Umweltchemie und Ökotoxikologie, 1995. 103 p.

KLEIN, M.; MÜLLER, M.; DUST, M.; GÖRLITZ, G.; GOTTESBFIREN, B.; HASSINK, J.; KLOSKOWSKI, R.; KUBIAK, R.; RESSELER, H.; SCHILLER, H.; STEIN, B.; VEREEKEN, H. Validation of the pesticide leaching model pelmo using lysimeter studies performed for registration. **Cheraosphere**, Great Britain, v. 35, n. 11, p. 2563-2587, 1997.

KORFIATIS, G. P.; DEMETRACOPOULOS, A. C.; BOURODIMOS, E. L.; NAWY, E. Moisture transport in a solid waste column. **Journal of Environmental Engineering**, ASCE, New York, v. 110, n. 4, p. 789-796, Agosto 1984.

KUTILEK, M.; NIELSEN, D. R. **Soil hydrology**. Berlin: Verlag, 1994. 370 p.

LIGGETT, J. A.; LIU, P. L. F. **The Boundary Integral Equation Method for Porous Media Flow**. London: Allen & Unwin, 1983. 225 p.

LIMA, E. N. **Caracterização e estudo do comportamento térmico de chorume, de composto maturado e derivados**. 2008. 149 f. Tese (Doutorado em Química) - Instituto de Química de Araraquara, Universidade Estadual Paulista “Júlio de Mesquita Filho”, Araraquara, 2008.

LIPPMAN, S. B.; LAJOIE, J. C⁺⁺ **Primer**. 3rd ed. Massachusetts: Addison Wesley, 1998.

LU, C. A model of leaching behaviour from msw incinerator residue landfills. **Waste Management & Research**, Northampton, n. 14, p. 51–70, 1996.

MANOEL FILHO, J. Água Subterrânea: Histórico e Importância. In: FEITOSA, F. A. C.; MANOEL FILHO, J. **Hidrogeologia**. Fortaleza: CPRM/REFO-LABHID/UFPE, 2000, 391p.

McCREANOR, P. T.; REINHART, D. R. Mathematical modeling of leachate routing in a leachate recirculating landfill. **Wat. Res. Elsevier Science Ltd.**, Great Britain, v. 34, n. 4, p. 1285-1295, 2000.

McDONALD, M. G.; HARBAUGH, A. W. **MODFLOW**: A modular three-dimensional finite-difference groundwater flow model. Virginia: U. S. Geological Survey, 1988.

MILLER, C. T.; ABHISHEK, C.; FARTHING, M. W. A spatially and temporally adaptive solution of Richards' equation. **Advances in Water Resources**, v. 29, p. 525–545, 2006.

MILLY, P. C. D. Advances in modeling of water in the unsaturated zone. **Transp. Porous media**, Boston, n. 3, p. 491-514, 1988.

MIRANDA, J. H. **Modelo para simulação da dinâmica de nitrato em colunas verticais de solo não-saturado**. 2001. 79 p. Tese (Doutorado em Irrigação e Drenagem) – Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo, Piracicaba, 2001.

MIRANDA, J. H.; DUARTE, S. N.; LIBARDI, P. L. (2004). MIDI: Modelo para simulação do deslocamento de solutos em colunas verticais de solo não-saturado. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE SOLOS NÃO-SATURADOS, 5., 2004, São Carlos. **Anais...** São Carlos: USP, 2004. p. 155-160.

MIRANDA, J. H.; DUARTE, S. N.; LIBARDI, P. L.; FOLEGATTI, M. V. Simulação do deslocamento de potássio em colunas verticais de solo não-saturado. **Eng. Agrícola**, Jaboticabal, v. 25, n. 3, p. 677-685, 2005.

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

MOLER, C. John Murphy meets scientific computing's leading 'celebrity', Cleve Moler, co-founder of The MathWorks. **Scientific Computing World**, Cambridge, 2006.

MORETTIN, Pedro A.; BUSSAB, Wilton O.; Estatística Básica, São Paulo: Editora Atlas, 2004

MORTON, K. W.; MAYERS, D. F. **Numerical Solution of Partial Differential Equations, An Introduction**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. 278 p.

MUALEM, Y. A new model for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated porous media. **Water Resources Research**, v. 12, n. 3, p. 513-522, 1976.

MUSKAT, M. **Flow of homogeneous fluids**. New York: McGraw-Hill Book, 1937. 468 p.

NAGRA (1994). Bericht zur Langzeitsicherheit des Endlagers SMA am Standort Wellenberg. NAGRA Technischer bericht NTB 94-106. NAGRA, Wettingen, Switzerland.

NAIME, J. M. **Um novo método para estudos dinâmicos, in situ, da infiltração da água na região não-saturada do solo.** 2001. 146 p. Tese (Doutorado em Ciências da Engenharia Ambiental) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2001.

NARASIMHAN, T. N.; WITHERSPOON, P. A. An integrated finite difference method for analyzing fluid flow in porous media. **Water Resour. Res.**, v. 12, p. 57–64, 1976.

NEUMAN, S. P. Saturated-unsaturated seepage by finite elements. **J. Hydraul. Div. Am. Soc. Civ. Eng.**, Oxford, n. 99, p. 2233-2250, 1973.

NIELSEN, D. R.; BIGGAR, J. W. Miscible displacement in soils: I. Experimental Information. **Soil Science Society of America**, Pittsburgh, v. 25, n. 1, p. 1-5, 1961.

NIELSEN, D. R.; van GENUCHTEN, M. T.; BIGGAR, J. W. Water flow and solute transport processes in the unsaturated zone. **Water Resour. Res.**, v. 22, p. 89-108, 1986.

NEWELL, C. J.; MCLEOD, R. K.; GONZALEZ, J. R. BIOSCREEN User's Manual. National Attenuation Decision Support System. Version 1.3. **National Risk Management Research Laboratory**, EPA/600/R-96/087, August 1996.

NOBLE, J. J.; ARNOLD, A. E. Experimental and mathematical modeling of moisture transport in landfills. **Chemical Engineering Communication**, London, v. 100, p. 95-111, 1991.

OLIVEIRA, L. F. C. **Modelo para transporte de solutos no solo e no escoamento superficial.** 1999. 171 p. Tese (Doutorado em Engenharia Agrícola) – Universidade Federal de Viçosa, Viçosa, 1999.

OLSSON, K. G.; HEYDEN, S. **Introduction to the finite element method problems.** Byggnadsmekanik, Lund: Ottosen & Petersson, Prentice Hall, 2001. 149 p.

PADOIN, E. L.; BORGES, P. A. P.; DILL, S. L.; BORGES, R. S. (2006). Análise do deslocamento da água em solos saturados e paralelização de seus métodos computacionais. In: CONGRESSO DE INICIAÇÃO CIENTÍFICA E TECNOLÓGICA EM ENGENHARIA, FEIRA DE PROTÓTIPOS, 21., 2006, cidade. **Resumos...** 2006.

PARKHURST, D. I.; THORSTENSON, C. C.; PLUMMER, L. N. **PHREEQE**: A computer program for geochemical calculations. Reston: E. U. Geol. Survey, 1990. 195 p.

PERKINS, T. K.; JOHNSTON, O. C. A Review of Diffusion and Dispersion in Porous Media. **Society of Petroleum Engineering Journal**, London, v. 3, n. 1, p. 70-84, 1963.

PHILIP, J. R. The theory of infiltration. 1. The infiltration equation and its solution. **Soil Science**, Pittsburg, v. 83, p. 345-357, 1957.

PINCHOVER, Y.; RUBINSTEIN, J. **An Introduction to Partial Differential Equations**. Cambridge: Cambridge University Press, 2005. 400 p.

PINDER, G. F.; GRAY, W. G. **Finite Element Simulation in Surface and Subsurface Hydrology**. New York: Academic Press, 1977. 295 p.

POLYANIN, A. D.; ZAITSEV, V. F. **Handbook of Nonlinear Partial Differential Equations**. Boca Raton- London: Chapman & Hall/CRC Press, 2004. 814 p.

PORTELA, A.; CHARAFI, A. **Finite Elements Using Maple: A Symbolic Programming Approach**. Berlin: Springer, 2002. 325 p.

PRASAD, K. S. H.; KUMAR, M. S. M.; SEKHAR, M. Modelling flow through unsaturated zones: Sensitivity to unsaturated soil properties. **Sāndhanā**, v. 26, n. 6, p. 517-528, 2001.

PREVEDELLO, C. L. **Física do solo com problemas resolvidos**. Curitiba: Salesward-Discovery, 1996. 446 p.

PREVEDELLO, C. L.; LOYOLA, J. M. T.; COSTABILE, M. S.; HORODENSKI, J. Solução Numérica para o Processo da Infiltração da Água no Solo. **Scientia Agraria**, Paraná, v. 3, n. 1-2, p. 29-39, 2002.

PRESS, W. H. **Numerical recipes: the art of scientific computing**. Cambridge: Cambridge University Press, 2007. 1235p

QUEIROZ, P. I. B. Sobre a modelagem de transporte de contaminantes no solo. In: CONGRESSO BRASILEIRO E GEOTECNIA AMBIENTAL, 4., 1999, São José dos Campos. **Anais...** São José dos Campos: REGEO'99, 1999. p. 307-314.

REDDY, J. N. **Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering**. New York: McGraw-Hill, 1986. 546 p.

REICHARDT, K. Dinâmica da material e da energia em ecossistemas. **Escola Superior de Agricultura “Luiz de Queiroz”, Universidade de São Paulo**, Piracicaba, p. 21-25, 1996.

REICHARDT, K.; TIMM, L. C. **Solo, Planta e Atmosfera** – Conceitos, Processos e Aplicações. Barueri- SP: Editora Manole Ltda, 2004. 478p.

RICHARDS, L. A. Capillary conduction of liquids through porous medium. **Physics**, New York, v. 1, p. 318-333, 1931.

RICHTMYER, R. D.; MORTON, K. W. **Difference methods for initial value problems**. 2. ed. London: Wiley-Interscience. 1967. 405 p.

RITTERLING, J. M.; STANSBURY, J. S. Alternative use of MULTIMED model for subtitle D landfill applications. **Practice Periodical of Hazardous, Toxic, and Radioactive Waste Management**, Kansas, 1998.

ROBINSON, R. A.; STOKES, R. H. 1965. **Eleetrolyte solutions**. 2nd. ed. London: Butterworths Scientific Publications, 1965. 571 p.

ROCHA, F. A.; MARTINEZ, M. A.; ANTÔNIO T. MATOS, A. T.; REINALDO B. CANTARUTTI, R. B.; SILVA, J. O. DA. Modelo numérico do transporte de nitrogênio no solo. Parte I: Desenvolvimento e teste do modelo. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, Campina Grande, v. 12, n. 1, p. 47–53, 2008.

ROLNIK, V. P. **Obtenção Automatizada da Equação Modificada**.1998. Dissertação (Mestrado em Ciências de Computação) - Departamento de Ciências de Computação e Estatística, Instituto de Ciências Matemáticas e de Computação, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1998.

ROSS, P. J., BRISTOW, K. L. Simulating Water Movement in Layered and Gradational Soils sing the Kirchhoff Transform. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, Pittsburg, v. 54, p. 1519-1524, 1990.

ROSSI, P.; MIRANDA, J. H.; DUARTE, S. N. Curvas de distribuição de efluentes do íon nitrato em amostras de solo deformadas e indeformadas. **Eng. Agríc.**, Jaboticabal, v. 27, n. 3, p. 675-682, set./dez. 2007.

ROWE, R. K. 1987. Pollutant transport through barrier. Geotechnical Practice for waste Disposal. **Special Geotechnical Publication**, ASCE, New York, n. 13, p.159-181, 1987.

ROTH, K. **Lecture notes in soil physics**. Germany: Institute of Environmental Physics, University of Heidelberg, 2006. 21 p.

RÜBENKÖNIG, O. The Finite Difference Method (FDM) - An introduction. **Albert Ludwigs University of Freiburg**, Germany, p.1-5, 2006.

RUBIN, J. Transport of reacting solutes in porous media: Relation between mathematical nature of problem formulation and chemical nature of reactions. **Water Resour. Res.**, v. 19, p. 1231-1252, 1983.

RUNCHAL, A. K.; SAGAR, B. PORFLOW, a Model for Fluid Flow, Heat and Mass Transport in Multifluid, Multiphase Fractured or Porous Media. **Analytic and Computational Research Inc.**, West Los Angeles, CA, 1998

SAFFMAN, P. G. A theory of dispersion in a porous medium. **Journal of Fluid Mechanics**, Cambridge, v. 6, n. 3, p. 321–349, 1959.

SALHOTRA, A. M.; MINEART, P.; SHARP-HANSEN, S; ALLISON, T. Multimedia exposure assessment model (MULTIMED) for evaluating the land disposal of wastes: Model theory. **U. S. Envir. Protection Agency**, Athens, Ga, 1990.

SÃO PAULO (Estado). Secretaria do Meio Ambiente. **Companhia Ambiental do Estado de São Paulo**. Disponível em: <<http://www.cetesb.sp.gov.br/>>. Acesso em: 25 mar. 2004. Acesso em: 11 abr. 2006.

SCHALCH, V. **Produção e características do chorume em processo de decomposição de lixo urbano**. 1984. 103 f. Dissertação (Mestrado em Hidráulica e Saneamento) – Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 1984.

SCHEIDEGGER, A. **Physics of Flow through Porous Media**. Toronto, Canada: University of Toronto Press, 1963. 313 p.

SCHROEDER, P. R; LLOYD, C. M; ZAPPI, P. A; AZIZ, N. M. **Hydrologic evaluation of landfill performance (help) model: user's guide for version 3**. Cincinnati: EPA, 1994. 94 p.

SCHNOOR, J. L. **Environmental Modeling: Fate and Transport of Pollutants in Water, Air and Soil.** New York: John Wiley & Sons, Inc. 1992. 436 p.

SEILER, K. P.; GAT, J. **Groundwater recharge from run-off, infiltration and percolation.** Portland: Water Science & Technology Library S., 2007. 241p.

SHARP-HANSEN, S.; TRAVERS, C.; HUMMEL, P.; ALLISON, T. **A subtitle D landfill application manual for the multimedia exposure assessment model (MULTIMED).** Athens, Ga: U.S. Envir. Protection Agency, 1990. 229 p.

SILVA, A. C. **Tratamento do Percolado de Aterro Sanitário e Avaliação da Toxicidade do Efluente Bruto e Tratado.** 2002. 79 p. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, 2002.

SIMUNEK, J.; van GENUCHTEN, M. T. The CHAIN-2D Code for Simulating Two-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Porous Media, Version 1.1. **Research Report**, U. S. Salinity Laboratory, USDA, ARS, Riverside, California, n. 136, 194 p, 1994.

SIMUNEK, J.; SEJNA, M.; van GENUCHTEN, M. T. **The HYDRUS-1D software package for simulating the one-dimensional movement of water, heat, and multiple solutes in variably-saturated media.** Riverside, California: U.S. Salinity Laboratory, 1998.

SIMUNEK, J.; SEJNA, M.; van GENUCHTEN, M. T. **The HYDRUS-2D software package for simulating the 2D movement of water, heat, and multiple solutes in variably saturated media:** Version 2.0. Riverside, California: U.S. Salinity Laboratory, Agriculture Research Service, USDA, 1999.

SINGH, P.; KANWAR, R. S. Simulating NO₃-N transport to subsurface drain flows as affected by tillage under continuous corn using modified RZWQM. **Transactions of the ASAE**, Cambridge, v. 38, n. 2, p. 499-506, 1995.

SOD, G.A. **Numerical methods in fluid dynamics:** Initial and initial boundary-value problems. Cambridge: Cambridge University Press, 1987.

SPERANDIO, D.; MENDES, J. T.; SILVA, L. H. M. **Cálculo numérico:** Características Matemáticas e Computacionais dos Métodos Numéricos. São Paulo: Pearson Prentice Hall, 2006. 354p.

SRIVASTAVA, R.; YEH, T. J. Analytical Solutions for One-dimensional, Transient Infiltration toward the Water Table in Homogeneous and Layered Soils. **Water Resour. Res.** v. 27, n. 5, p. 753-762, 1991.

STONE, L. F.; SILVEIRA, P. M. de; MOREIRA, H. A. A.; BRAZ, A. J. B. P. Evapotranspiração do feijoeiro irrigado em plantio direto sobre diferentes palhadas de culturas de cobertura. **Pesquisa Agropecuária Brasileira**, Brasília, v. 41, n. 4, 2006.

STRAUB, W. A.; LYNCH, D. R. Models of landfill leaching: moisture movement and inorganic strength. **Journal of Environmental Engineering Division**, ASCE, New York, v. 108, p. 231–250, 1982.

TORIDE, N.; LEIJ, F. J.; van GENUCHTEN, M. T. The CXTFIT Code for Estimating Transport Parameters from Laboratory or Field Tracer Experiments, Version 2.1. **Research Report**, U.S. Salinity Laboratory, Riverside, California, n. 137. 119 p. 1999.

TSAI, W. S.; LEE, T. H.; CHEN, C. J.; LIANG, S. J.; KUO, C. C. Finite analytic model for flow and transport in unsaturated zone. **Journal of Engineering Mechanics**, Reston, v. 126, n. 5, p. 470-479, Maio 2000.

TUCCI, C. E. M. **Modelos Hidrológicos**. Porto Alegre: Editora da Universidade/UFRGS, 1998. 669 p.

VALOCCHI, A. J. Describing the transport of ion-exchanging contaminants using an effective K_d approach. **Water Resource Research**, v. 20, n. 4, p. 499-503, 1984.

van GENUCHTEN, M. T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Sci. Soc. Am. J.**, Pittsburgh, n. 44, p. 892-898, 1980.

VASCONCELLOS, C. A. B.; AMORIM, J. C. C. Simulação Numérica da Infiltração da Água em Meios Porosos Não-saturados Homogêneos. In: SIMPÓSIO BRASILEIRO DE RECURSOS HÍDRICOS, 14., 2001, Aracaju-SE. **Anais...** Aracaju-SE: ABRH, 2001.

VENKATARAMANI, E. S.; RAO, P. R. M. Darcian, Transitional, and Turbulent Flow through Porous Media. **Journal of Hydraulic Engineering**, ASCE, New York, v. 124, n. 8, p. 840-846, 1998.

VERMEULEN, T.; HIESTER, N. K. Ion exchange chromatography of trace elements. **Industrial Engineering Chemistry**, Korea, n. 44, p. 636–651, 1952.

VOSS, C. I. **SUTRA**, Saturated-Unsaturated Transport, A Finite Element Simulation Model for Saturated-Unsaturated, Fluid-Density-Dependent Ground-Water Flow with Energy Transport or Chemically Reactive Single Species Solute Transport. Reston, VA: US Geological Survey, National Center, 1984.

WANG, H. S.; ANDERSON, M. P. Introduction to groundwater modeling, finite differences and finite element methods. New York: Academic Press, Inc, 1982. 237 p.

WEBER JR, W. J.; MCGINLEY, P. M.; LYNN, E. K. Sorption Phenomena in Subsurface Systems: Concepts, Models and Effects on Contaminant Fate and Transport. **Water Resource Res.**, v. 25, n. 5, p. 499-528, 1991.

WENDLAND, E. **Contribuição à simulação de processos em meios porosos**. 2004. 270 p. Tese (Livre Docente) - Escola de Engenharia de São Carlos, Universidade de São Paulo, São Carlos, 2004.

WENDLAND, E.; RÜBER, O. **Hydrogeologische Modelle, Lehrstuhl für Angewandte Hydrogeologie**. Ruhr: Universität Bochum, 1998. 141 p.

WENDLAND, E.; FLENSBERG, D. A hybrid numerical scheme for multi-phase flow in heterogeneous porous media . In: HASSANIZADEH, S. M.; SCHOTTING, R. J.; GRAY, W. G.; PINDER, G. F. **Computational Methods in Water Resources**. 1 ed. Amsterdam: Elsevier, 2002. v. 1, p. 297-304.

YEH, G. T. **FEMWATER**: a finite-element model of water flow through saturated-unsaturated porous media. Oak Ridge, Tenn: Oak Ridge National Laboratory, 1987.

YEH, G. T.; WARD, D. S. **FEMWATER**: a finite-element model of water flow through saturated-unsaturated porous media. Rep. ORNL-5567. Oak Ridge, Tenn: Oak Ridge National Laboratory, 1980.

YONG, R. N. et al. **Principles of contaminant transport in soils. Development in geotechnical Engineering**. Netherlands: Elsevier Science Publishers, 1992. n. 73, 327 p.

ZARBA, R. L. **A numerical investigation of unsaturated flow**. 1988. M. S. Thesis - Dep. of Civ. Eng., Mass. Inst. of Technol., Cambridge, 1988.

ZEISS, C.; MAJOR, W. Moisture flow through municipal solid waste: patterns and characteristics. **Journal of Environmental Systems**, v. 22, n. 3, p. 211-231, 1993.

ZEISS, C.; UGUCCIONI, M. Modified flow parameters for leachate generation. **Water Environment Research**, v. 69, n. 3, p. 276-285, may/june, 1997.

ZHENG, C. **MT3D**, a modular three-dimensional transport model. Rockville, Maryland, USA: S. S. Papadopolus & Assoc, 1990. 173 p.

ZIENKIEWICZ, O. C. **The Finite Element Method**. New York: McGraw-Hill, 1977. 787 p.

ZIENKIEWICZ, O. C.; MORGAN, K. **Finite Elements and Approximation**. New York: John Wiley & So, 1983.