



UNIVERSIDADE FEDERAL DO PARÁ
INSTITUTO DE TECNOLOGIA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA QUÍMICA

ELIZEU MELO DA SILVA

**SOLUÇÃO HÍBRIDA DA EQUAÇÃO DE ADVECÇÃO-DISPERSÃO EM MEIOS
POROSOS**

BELEM
2013

ELIZEU MELO DA SILVA

**SOLUÇÃO HÍBRIDA DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DISPERSÃO EM MEIOS
POROSOS**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPGEQ), da Universidade Federal do Pará, como parte integrante dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Linha de pesquisa: Processos inorgânicos

ORIENTADOR: PROF. DR. JOÃO NAZARENO NONATO QUARESMA

**BELÉM
2013**

Dados Internacionais de Catalogação-na-Publicação (CIP)
Sistema de Bibliotecas da UFPA

Silva, Elizeu Melo da, 1980-
Solução híbrida da equação de
advecção-dispersão em meios porosos / Elizeu
Melo da Silva. - 2013.

Orientadora: João Nazareno Nonato Quaresma.
Dissertação (Mestrado) - Universidade Federal
do Pará, Instituto de Tecnologia, Programa de
Pós-Graduação em Engenharia Química, Belém,
2013.

1. Transformadas integrais. 2. Teoria do
transporte- modelos matemáticos. 3. Material
poroso. I. Título.

CDD 22. ed. 515.35

ELIZEU MELO DA SILVA

SOLUÇÃO HÍBRIDA DA EQUAÇÃO DE ADVECCÃO-DISPERSÃO EM MEIOS POROSOS

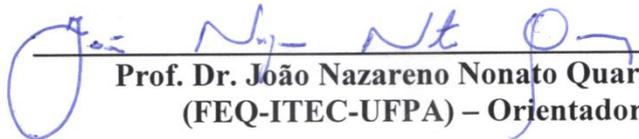
Dissertação apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Química (PPGEQ) da Universidade Federal do Pará, como parte integrante dos requisitos necessários para obtenção do grau de Mestre em Engenharia Química.

Linha de pesquisa: Processos inorgânicos

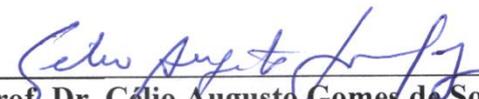
Data da avaliação: 21/03/2013.

Conceito: Aprovado

BANCA EXAMINADORA


Prof. Dr. João Nazareno Nonato Quaresma
(FEQ-ITEC-UFPA) – Orientador


Prof. Dr. Emanuel Negrão Macêdo
(FEQ-ITEC-UFPA) - Membro


Prof. Dr. Célio Augusto Gomes de Souza
(FEQ-ITEC-UFPA) – Membro


Dr. Jesús Salvador Pérez Guerrero
CNEN-DIREJ – Membro

Dedico este trabalho em memória do meu irmão Eliézio Melo da Silva, que em vida foi meu primeiro e melhor amigo e de sua esposa, Patrícia Grama Araújo, que a todos nós deixam muita saudade.

AGRADECIMENTOS

Antes de todos a Deus, que certamente me deu forças e sabedoria pra levar a termo este projeto, que era dele desde o início.

Gostaria de também de agradecer a algumas pessoas, dentre as muitas que me ajudaram a realizar este trabalho.

Em especial a minha família: à minha maravilhosa esposa Suelem Melo, à minha doce e linda filha Joanna Melo, aos meus Pais: José Pereira da Silva e Maria Melo da Silva e todas as minhas irmãs: Elisângela Melo, Eloíde Melo, Edna Melo e Eline Melo sempre presentes na minha vida, amo todos vocês.

Ao meu orientador, João Nazareno Nonato Quaresma, pelo apoio e companheirismo dedicados nestes últimos dias e por ser grande incentivador na busca pelo conhecimento, demonstrando sempre muito respeito e até mesmo admiração pelos seus orientados.

Ao professor Emanuel Negrão Macêdo, que além de competente, com alegria soube dosar as dificuldades convertendo-as em uma salutar descontração nos momentos de tensão.

Ao meu amigo Evaldiney Ribeiro. Monteiro, pela grande contribuição no início e no desenrolar dessa pesquisa.

Ao meu grande irmão e amigo Jean Jorge Gomes da Silva, pela amizade e companheirismo, sempre presente e com efetiva participação, contribuindo para o sucesso deste trabalho.

Aos meus irmãos de comunidade, da Paróquia N. Sra. de Nazaré- Diocese de Marabá- pelas muitas oras dedicadas às orações em minha intenção.

“Se a algum de vós falta sabedoria, peça a Deus, que a concede generosamente a todos, sem impor condições. Mas peça com fé, sem duvidar.”

Tg. 1: 5-6.

“O esforço do trabalho é sempre minimizado pelo efeito do seu resultado;”

Elizeu Melo.

RESUMO

Este trabalho consiste na solução híbrida da Equação de Advecção-dispersão de solutos unidimensional em meios porosos homogêneos ou heterogêneos, para um único componente, com coeficientes de retardo, dispersão, velocidade média, decaimento e produção dependentes da distância percorrida pelo soluto. Serão estudados os casos de dispersão-advecção em que o retardamento, dispersão, velocidade do fluxo, decaimento e produção variem de forma linear enquanto a dispersividade assuma os modelos linear, parabólico ou exponencial. Para a solução da equação foi aplicada a Técnica da Transformada Integral Generalizada. Os resultados obtidos nesta dissertação demonstram boa concordância entre os problemas-exemplo e suas soluções numéricas ou analíticas contidas na literatura e apontam uma melhor adequação no uso de modelos parabólico no estudo da advecção-dispersão em curto intervalo de tempo, enquanto que o modelo linear converge mais rapidamente em tempos prolongados de simulação. A convergência da série mostrou-se ter dependência direta quanto ao comprimento do domínio, ao modelo de dispersão e da dispersividade adotada, convergindo com até 60 termos, podendo chegar a $NT = 170$, para os casos heterogêneos, utilizando o modelo de dispersão exponencial, respeitando o critério adotado de 10^{-4} .

Palavras-chave: Advecção-dispersão; GITT; Heterogêneos; Meios porosos; Solutos.

ABSTRACT

This work consists of the hybrid solution of one-dimensional Advection-dispersion Equation for solute in porous media heterogeneous or homogeneous, single component, with coefficients of retardation, dispersion, average speed, production and decay depend on distance traveled by the solute. We will study the cases where dispersion-advection retardation, dispersion, flow rate, production and decay vary linearly as dispersivity assume linear, parabolic or exponential. For the solution of the equation was applied to Generalized Integral Transform Technique. The results obtained in this work show good agreement between the sample problems and their analytical or numerical solutions in the literature and indicate a better match in the use of models in the study of parabolic advection-dispersion in short time, while the linear model converges faster in times of prolonged simulation. The convergence of the series proved to have direct dependence on the length of the field, the dispersion model and dispersivity adopted, converging with terms up to 60, reaching $NT = 170$, for the heterogeneous cases, using the model of exponential dispersion respecting the criterion adopted 10^{-4} .

Keywords: Advection-dispersion; GITT, Heterogeneous, porous media; Solute.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO.....	9
1.1	MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS	11
1.2	ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO	13
2	FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO DA LITERATURA.....	14
2.1	FUNDAMENTOS TEÓRICOS.....	14
2.1.1	Equações da conservação.....	15
2.1.2	Processos de transporte.....	16
2.1.2.1	Advecção	17
2.1.2.2	Dispersão	18
2.1.2.2.1	Difusão molecular	18
2.1.2.2.2	Dispersão hidrodinâmica.....	20
2.1.3	Equação de Advecção-Dispersão.....	22
2.1.3.1	Equação de transporte.....	22
2.1.3.2	Condições de contorno e inicial.....	27
2.1.4	Técnica da Transformada Integral Generalizada	29
2.1.4.1	Metodologia.....	30
2.1.5	Método das linhas	34
2.2	REVISÃO DA LITERATURA	34
3	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO.....	40
3.1	FORMULAÇÃO MATEMÁTICA.....	40
3.2	METODOLOGIA DE SOLUÇÃO	41
3.2.1	Solução híbrida	41
3.2.1.1	Solução das equações filtro	43
3.2.1.2	Solução da EDP homogênea	47
3.2.2	Solução numérica.....	52
3.2.2.1	Equação governante	52
3.2.2.2	Discretização das derivadas espaciais.....	52
4	RESULTADOS E DISCUSSÃO	55
5	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	68
	REFERÊNCIAS	70
	APÊNDICES	77

CAPÍTULO 1

1 INTRODUÇÃO

Determinar o comportamento do escoamento de solutos em meios porosos tem sido um problema que vem despertando o interesse de diversos pesquisadores da hidrodinâmica, em todo o mundo. A escassez de recursos hídricos é uma das principais motivações na busca em melhorar a utilização, preservação e aproveitamento destes. Enquanto muitos produtos químicos agrícolas são geralmente benéficos em solos superficiais, sua lixiviação para as profundezas da zona não saturada e para águas subterrâneas pode causar problemas graves. Assim, os processos de gestão estão sendo procurados para manter fertilizantes e pesticidas na zona de raiz e evitar o seu transporte para recursos hídricos subjacentes ou para baixo-gradiente (ŠIMŮNEK e van GENUCHTEN, 2006). A zona não saturada é conhecida como a zona vadosa, definida como uma camada entre a superfície do solo e o lençol freático permanente. Enquanto que os poros entre os grãos sólidos são totalmente cheio com água na zona saturada (águas subterrâneas), os poros na zona vadosa são apenas parcialmente cheio de água, com a parte restante do espaço ocupado pelos poros da fase gasosa.

Tipicamente a água entra na zona vadosa, sob a forma de chuva ou irrigação, despejados pelas indústrias ou núcleos urbanos. As águas das chuvas ou de irrigação podem ser interceptadas pelas folhas da vegetação. Se a precipitação ou a intensidade de irrigação é maior do que a capacidade de infiltração do solo, a água será removida pelo escoamento superficial, ou se acumulam na superfície do solo até que se evapore para a atmosfera ou infiltre no solo. Uma parte desta água é retornada para a atmosfera por evaporação, a outra parte infiltra-se no perfil do solo, que pode ser absorvida pelas raízes das plantas e eventualmente retornar para a atmosfera pela transpiração das plantas. Os processos de evaporação e transpiração são muitas vezes combinados num único processo chamado de evapotranspiração. A água que não é devolvida à atmosfera por evapotranspiração, possivelmente irá atingir o lençol freático. Se o nível da água é suficientemente perto da superfície do solo, num processo de ascensão capilar ela pode mover-se a partir de água do lençol freático através da franja capilar em direção à zona da raiz e da superfície do solo, conforme mostra a Figura (1).

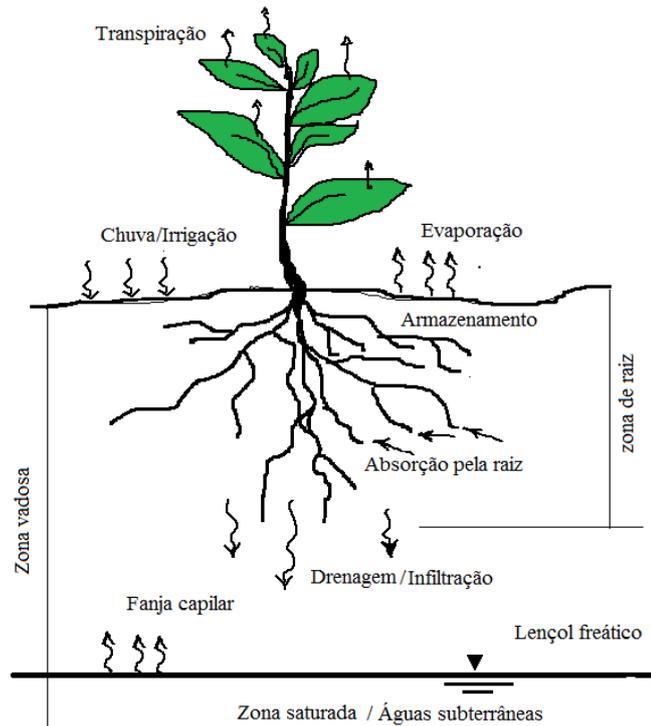


Figura 1-Esquema dos fluxos da água e componentes hidrológicos na zona vadosa

Os modelos matemáticos devem ser componentes essenciais de qualquer esforço para entender e quantificar de forma otimizada o fluxo de água subterrânea e processos de transporte de soluto. Por exemplo, os modelos podem ser ferramentas úteis para projetar, testar e implementar solo, água e práticas de manejo que minimizem a poluição do solo e da água. São também necessários para a concepção ou remediar lixões e aterros industriais, eliminação ou a administração de depósitos de resíduos nucleares, a longo prazo.

Grande parte dos trabalhos hoje desenvolvidos está focada no estudo da zona de vadosa, onde a maioria dos contaminantes do subsolo é originada, ultrapassa ou é eliminada antes de atingir os recursos hídricos superficiais e subterrâneos. Fontes de contaminação, muitas vezes podem ser mais facilmente remediadas na zona vadosa, antes de alcançar as águas subterrâneas.

Trabalhos como o de Richards (1931), Brenner (1962), Gardner (1965), Kay e Elrick (1967), McLaren (1969), Cho (1971), Reddy et al. (1976), Misra e Mishra (1977), van Genuchten e Wiereng (1974), Pickens e Grisak (1981), van Genuchten e Alves (1982) e Yates (1990) estão entre os pioneiros neste ramo de pesquisa, servindo de base para o que se daria nas décadas seguintes. Por este motivo os grupos de pesquisa multiplicam-se continuamente na busca por soluções que viabilizem, acompanhem e entendam como se dá estes fenômenos de forma mais realística possível. Soluções analíticas que reflitam a realidade ainda são

escassas na literatura, mas o avanço das técnicas numéricas e de abordagens híbridas ou semi-analíticas, bem como dos recursos computacionais, mais acentuado a partir da década de 90, possibilitou a obtenção de resultados que puderam fornecer uma referência para o que seria o desafio de pesquisadores emergentes no século seguinte.

Simular matematicamente o transporte de solutos em meios porosos inclui a necessidade de modelar a advecção, dispersão, sorção e reações no solo. Muitas soluções analíticas e semi-analíticas são desenvolvidas para simular o transporte de soluto em meios porosos, no intuito de aferir a precisão das abordagens numéricas. As abordagens analíticas e híbridas ainda são limitadas a meios porosos com condições simplificadas e bastante específicas, o que limita os resultados à soluções aquém daquilo que seria a realidade afirmada experimentalmente.

Os meios porosos raramente são homogêneos e suas propriedades são espacialmente e/ou temporalmente variáveis. Na hidrologia do subsolo, problemas de transporte de solutos com propriedades mais complexas, não são admitidos pelos métodos tradicionalmente usados na determinação de soluções analíticas ou semi-analíticas, tais como transformadas de Laplace ou Fourier, para os quais as dificuldades podem ser associadas com o processo de inversão desta transformada.

A maioria dos trabalhos existentes na literatura aborda domínios semi-infinito ou infinito, dos quais destacamos van Genuchten (1985) para a Equação de Advecção-Dispersão (EAD) com coeficientes constantes e van Genuchten e Wiereng (1986) no estudo dos coeficientes de dispersão e do fator de retardo. Contudo, estes podem não ser adequados para o transporte em meios heterogêneos, em que os coeficientes de transporte podem variar no espaço e/ou com o tempo. Na verdade, poucos resultados analíticos estão disponíveis para o caso de coeficientes variáveis, principalmente para meios finitos. Por esse motivo, as abordagens numéricas têm sido mais amplamente aplicadas para simular estes casos, embora sua aplicação esteja limitada a problemas com limites de fronteiras finitos.

1.1 MOTIVAÇÃO E OBJETIVOS

Primeiramente, o principal interesse neste tipo de pesquisa está em preservar a qualidade da água existente em nossos vastos e abundantes lençóis freáticos, que vem sofrendo desde a década de 1960 com o avanço das técnicas de controle de pragas, insetos e fungos. O problema é que a prática do uso discriminado destes produtos acarretou numa série de impactos ambientais em todos os países que faziam uso destas técnicas e seus efeitos foram

rapidamente percebidos no reflexo da sociedade. No que diz respeito ao avanço da agricultura, entre os processos degenerativos profundos da natureza destacam-se a erosão e a perda da fertilidade dos solos; a destruição florestal e do patrimônio genético da biodiversidade; a contaminação dos solos, da água, dos animais silvestres, do homem do campo e dos alimentos (BALSAN, apud EHLERS 2006).

O objetivo deste trabalho é obter soluções para problemas unidimensionais de transporte de soluto em meios heterogêneos finitos, na zona saturada, com sorção de equilíbrio linear, decaimento, produção e com condições que permitam o fluxo variando espacialmente com a profundidade, bem como condições de contorno variando em função do tempo e da velocidade de entrada. Neste trabalho, assumimos que a velocidade de fluxo, retardamento e decaimento são funções lineares arbitrárias do espaço. No entanto, na dispersão mecânica serão assumidos três modelos de dispersividade: linear, parabólico ou exponencial, conforme sugere Pickens e Grisak (1981), Yates (1990) e Pérez Guerrero e Skaggs (2010).

A solução aqui apresentada será obtida através da Técnica de Transformada Integral Generalizada (GITT-Generalized Integral Transform Technique), que é uma técnica híbrida numérica-analítica, conforme estabelecida por Cotta (1993). O sistema de EDOs resultante da transformação será resolvido através da sub-rotina DIVPAG da biblioteca IMSL (1994).

A GITT pode ser utilizada na obtenção de soluções analíticas para os problemas de transporte de soluto em meios porosos com fluxo espacialmente e temporalmente variável e coeficiente de dispersão com sorção e decaimento lineares e semi-analítica quando a sorção e/ou decaimento é não linear, conforme já demonstrado por Almeida e Cotta (1995). Como objetivo específico do trabalho, estudaremos o comportamento deste processo variando os parâmetros que regem o fenômeno e verificando em que faixa eles podem interferir diretamente nos resultados obtidos, especificamente quanto a convergência, tais como faixa de dispersividade e coeficientes de difusão e dispersividades aceitáveis, no intuito de ampliar o campo de aplicação da técnica e de verificar sua viabilidade para cada situação problema no campo de pesquisa proposto.

1.2 ORGANIZAÇÃO DO TRABALHO

O seguinte trabalho está organizado a partir do Capítulo 1, com uma introdução que descreve a área de estudo e sua importância na preservação do meio ambiente e sustento do ecossistema, como motivação, citando os objetivos específicos e gerais.

O Capítulo 2 contempla os fundamentos teóricos para a formulação matemática da equação governante e faz uma revisão da literatura, citando os principais trabalhos existentes na área de estudo. Na fundamentação teórica, que embasa este trabalho, são descritas as técnicas empregadas para o desenvolvimento do trabalho, tais como, GITT e MOL, o que servirá no decorrer do trabalho como fonte para os passos a serem adotados no capítulo imediatamente posterior.

O Capítulo 3 consta da formulação matemática descrita de maneira geral, sendo posteriormente estendida a uma forma mais restrita aos propósitos do trabalho. Quanto à solução, serão abordadas cinco situações-problema diferentes e ainda suas soluções numéricas obtidas pelo Método das Linhas.

No Capítulo 4 será feita a análise dos resultados obtidos após a implementação computacional. Será exposta a análise de convergência e as saídas, descritas através das figuras e gráficos, indicando os resultados e uma breve análise destes.

Por fim, teremos no Capítulo 5 a conclusão de todo o estudo, fazendo as observações pertinentes, destacando as vantagens e desvantagens de cada abordagem e as propostas para trabalhos posteriores.

CAPÍTULO 2

2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA E REVISÃO DA LITERATURA

2.1 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

Os fenômenos de transporte em solos podem ser definidos como sendo o movimento de determinado soluto (poluente) que se move com o solvente (água) nos interstícios de um meio poroso (solo), tanto na zona de vadosa quanto na zona saturada. A migração destes compostos é influenciada por uma série de fatores, os quais determinam uma maior, menor ou nenhuma movimentação do composto no solo.

Segundo Radcliffe e Šimůnek (2010), o transporte de solutos talvez seja um dos mais complexos estudos da física dos solos, envolvendo o movimento de águas, as reações químicas que envolvem este processo e a transformação microbiana. Na Figura (2) abaixo podemos ver o esquema que descreve os principais mecanismos associados ao transporte de contaminantes no solo.

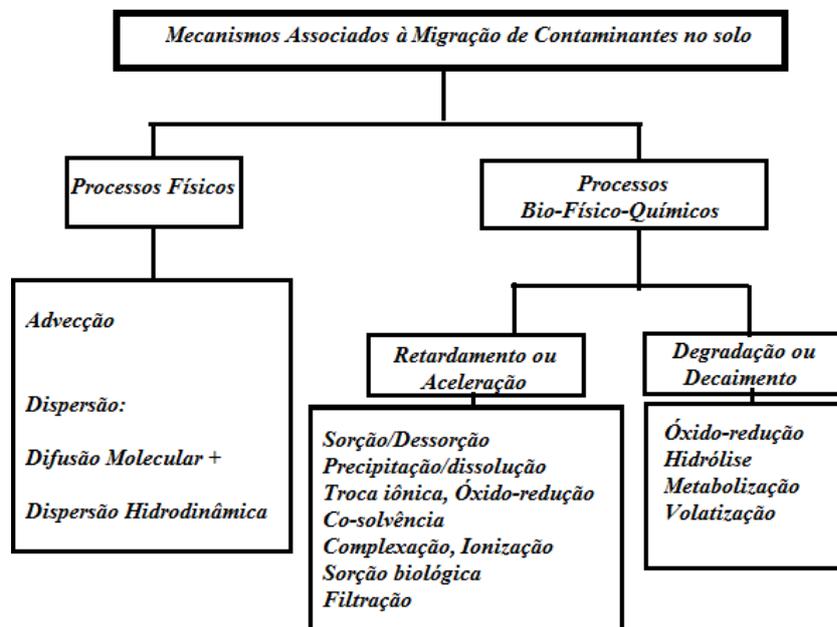


Figura 2– Esquema do mecanismo de migração de contaminantes no solo.
Fonte: Adaptado de Moncada (2004)

O objetivo em determinar as concentrações dos compostos químicos transportados pela água tais como nitrato, pesticidas ou metais pesados, está na determinação da sua concentração em unidade de massa do soluto por volume de água no solo.

2.1.1 Equações da conservação

A equação da concentração de solutos é obtida a partir dos princípios de conservação da massa numa direção vertical x_i , positiva para cima, para um fluxo descendente. A equação geral da continuidade que descreve a conservação de massa de um soluto, submetido a uma degradação com cinética de primeira ordem em um perfil isotrópico de solo é dada por:

$$\frac{\partial C_T}{\partial t} = -\frac{\partial J_{T_i}}{\partial x_i} - \phi \quad (2.1)$$

em que:

C_T é a concentração de massa total de produtos químicos ou do soluto [ML^{-3}],

J_{T_i} a densidade química total do fluxo de massa [$\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}$],

ϕ a taxa de variação da massa por unidade de volume por reações ou outras fontes [$\text{ML}^{-3}\text{T}^{-1}$].

A densidade química total do fluxo J_{T_i} pode também ser compreendida pelo fluxo de massa por unidade de área por unidade de tempo. A taxa de variação da massa ϕ , ou termo de reação é negativo quando referir-se a um termo fonte ou produção e positivo no caso de sumidouros, como por exemplo, a absorção pelas plantas. Na sua interpretação mais geral, a Eq. (2.1) permite que o produto químico a residir em todas as três fases do solo, isto é, gasoso, líquido e sólido, permita uma ampla gama de mecanismos de transporte (incluindo o transporte advectivo, difusivo e dispersão hidrodinâmica em ambas as fases líquida e gasosa), e facilita qualquer tipo de reação química que conduz à perda ou ganho da concentração total (ŠIMŮNEK e VAN GENUCHTEN, 2006).

Na zona vadosa são transportados, principalmente por água, a maioria dos produtos químicos que está presente apenas nas fases líquida e sólida, e, como tal, alguns produtos químicos tais como muitos contaminantes orgânicos e de todos os fumigantes, podem ter uma porção significativa da sua massa em fase gasosa e são, portanto, sujeitos a transporte também na fase gasosa. A concentração química total pode ser então definida como segue:

$$C_T = \rho C_s + \theta C_l + \delta C_g \quad (2.2)$$

em que:

ρ é a massa específica [ML^{-3}],

θ é o conteúdo volumétrico de água do solo [L^3L^{-3}],

δ é o conteúdo volumétrico de ar [L^3L^{-3}],

C_s é a concentração da fase sólida [MM^{-1}],

C_l é a concentração da fase líquida [ML^{-3}],

C_g é a concentração da fase gasosa [ML^{-3}].

O termo de reação da Equação (2.1) ϕ pode representar diversas reações químicas ou biológicas que conduzem a uma perda ou ganho químico no sistema de solo, tais como decaimento de radionuclídeo, a degradação biológica ou a dissolução. As reações de oxidação e redução consistem em processos de degradação ou decaimento, que resultam na mudança da valência dos elementos envolvidos através de ganho (redução) ou perda de elétrons (oxidação) que acontece de forma concomitante. Essas reações são catalisadas pela presença de microorganismos (MONCADA, 2002). Abaixo são apresentadas as equações que determinam os termos ρ , θ e δ .

$$\rho = \frac{m_s}{v}, \quad \theta = \frac{v_l}{v} \quad \text{e} \quad \delta = \frac{v_g}{v} \quad (2.3-5)$$

sendo m_s é a massa de sólidos, v_l o volume de líquidos e v_g é o volume de gás e v é o volume total.

2.1.2 Processos de transporte

Iremos agora determinar os tipos de transporte que compreendem a densidade química total do fluxo de massa J_T da Equação (2.1). Os três principais processos que podem estar ativos tanto na fase líquida quanto gasosa são: fluxo advectivos, também chamado fluxo convectivo, fluxo difusivo e o fluxo dispersivo hidrodinâmico. Desta forma fica então definido o fluxo total do soluto unidimensional J_{T_i} , através do meio.

$$J_T = J_l + J_g \quad (2.6)$$

Sendo:

J_l o fluxo de soluto na fase líquida [$ML^{-2}T^{-1}$],

J_g o fluxo de soluto na fase gasosa [$ML^{-2}T^{-1}$].

Os fluxos de soluto nas duas fases são, então, a soma dos fluxos devido aos três processos diferentes:

$$J_l = J_{lc} + J_{ld} + J_{lh} \quad (2.6.a)$$

$$J_g = J_{gc} + J_{gd} + J_{gh} \quad (2.6.b)$$

O fluxo de soluto na fase líquida e gasosa consiste de três componentes que representam as três fases do processo de transporte, sendo cada um conforme a seguir:

J_{lc} e J_{gc} são os fluxos advectivos na fase líquida e gasosa $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$,

J_{ld} e J_{gd} são a difusão molecular na fase líquida e gasosa $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$, e

J_{lh} e J_{gh} os fluxos dispersivo hidrodinâmico na fase líquida e gasosa $[\text{ML}^{-2}\text{T}^{-1}]$.

2.1.2.1 Advecção

Advecção é o processo pelo qual o soluto é carregado pela água em movimento, mantendo-se constante a concentração da solução. Na advecção ou convecção, o transporte da substância se dá através do fluxo do fluido no qual a mesma está dissolvida. Se esta substância for inerte, ou seja, não reage, o transporte dar-se-á à velocidade média do solvente e na direção das linhas de fluxo. O primeiro termo da Eq. (2.6) é o fluxo convectivo, que representa o fluxo de massa do soluto a uma taxa média, causada pela densidade do fluxo de água q_w , da lei de Darcy,

$$q_w = -k_s \frac{\Delta H}{L} \cong -k_s \frac{dH}{dz} \quad (2.7)$$

em que ΔH é a diferença entre as cargas hidráulicas e k_s é a condutividade hidráulica saturada. O transporte advectivo refere-se ao soluto a ser transportado com o fluido em movimento, na fase líquida J_{lc} ou gasosa J_{gc} , isto é,

$$J_{lc} = q_w C_l \quad (2.8.a)$$

$$J_{gc} = q_g C_g \quad (2.8.b)$$

Em que:

q_w é a densidade do fluxo de água $[\text{LT}^{-1}]$;

q_g é a densidade do fluxo de gás $[\text{LT}^{-1}]$.

O transporte advectivo na fase gasosa é muitas vezes negligenciado, pois na prática e para fins de simplificação é insignificante em comparação com a difusão gasosa.

O fluxo de Darcy é uma velocidade macroscópica, ou seja, um volume d'água atravessando uma seção transversal num dado tempo. A área de seção transversal é de solo granular e inclui, além de água, a área que é ocupada pelas partículas sólidas e ar. Desde que a água flua somente na área de seção transversal mais úmida, a velocidade média da água nos poros, v , em escala microscópica é dada pela função da área de seção transversal úmida que é maior ou igual à velocidade de Darcy:

$$v = \frac{q_w}{\theta} \quad (2.9)$$

pois o conteúdo de água no solo varia no intervalo $0 \leq \theta \leq 1$.

2.1.2.2 Dispersão

A dispersão mecânica ou simplesmente dispersão é formada por dois processos distintos de transporte: a difusão molecular e a dispersão hidrodinâmica. A combinação destes dois processos pode ser representada pela Figura (3), a seguir.

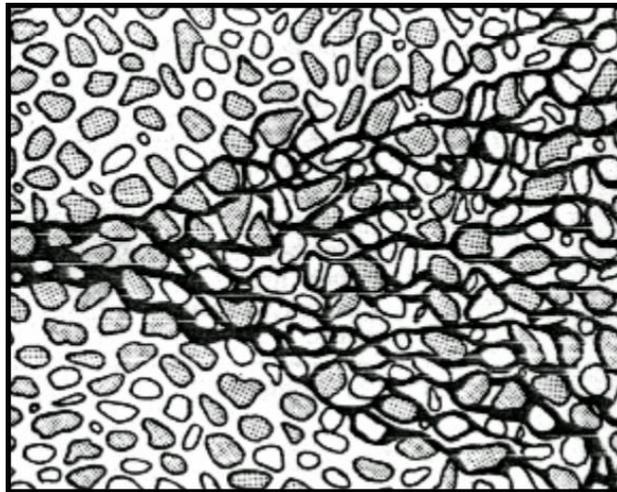


Figura 3 – Representação gráfica do processo de dispersão.
Fonte: Dyminski (2006).

2.1.2.2.1 Difusão molecular

O fluxo difusivo é o movimento das moléculas do soluto em função da diferença na concentração. A substância tende a migrar das regiões de maior concentração para as de

menor concentração, independentemente da velocidade do fluido, porém pode ser influenciado pela turbulência (mistura mecânica), podendo ser representada pela primeira lei de Fick da difusão, nas duas fases distintas, conforme abaixo:

$$J_{ld} = -D_l^* \frac{\partial C_l}{\partial z} \quad (2.10.a)$$

$$J_{gd} = -D_g^* \frac{\partial C_g}{\partial z} \quad (2.10.b)$$

em que:

D_l^* é o coeficiente de difusão do soluto na água [L^2T^{-1}],

D_g^* é o coeficiente de difusão do soluto no gás [L^2T^{-1}].

Observemos que a primeira lei de Fick da difusão toma a mesma forma da lei de Darcy para o fluxo de fluidos ou de Fourier para o fluxo de calor. No solo, a área de seção transversal reduzida e comprimentos de caminhos mais tortuosos, devido à presença das fases sólida e ar devem ser considerados, em comparação com a difusão de uma solução granular. Isto irá retardar a difusão no solo e o coeficiente de difusão também deverá ser reduzido. Para representar esta tortuosidade, nas duas fases, o coeficiente de difusão molecular na fase líquida D_l^* é multiplicado pelo fator de tortuosidade na fase líquida $\xi_l(\theta)$ e D_g^* pelo coeficiente de tortuosidade na fase gasosa $\xi_g(\delta)$.

O coeficiente de tortuosidade $\xi_l(\theta)$ é um parâmetro empírico menor que a unidade, para expressar a razão do comprimento de uma linha reta em uma amostra de solo aproximado ao comprimento do caminho de poros cheios de água para um íon ou molécula difusível (JANKOSZ, 2008). Pode também ser entendido como a relação entre o coeficiente de difusão do poluente no solo e o coeficiente de difusão do poluente na água. Esse fator foi idealizado para depender tanto do volume da fração sólida, como de sua configuração geométrica da fase líquida, portanto a tortuosidade aumenta com o aumento de θ . Muitos modelos empíricos têm sido sugeridos na literatura para a tortuosidade, por exemplo, (MOLDRUP et al., 1998). Entre estes, o modelo mais utilizado para o fator de tortuosidade é, provavelmente, a equação proposta por Millington e Quirk, (1961):

$$\xi_l(\theta) = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \quad (2.11.a)$$

$$\xi_g(\delta) = \frac{\delta^{7/3}}{\theta_s^2} \quad (2.11.b)$$

Para que as equações (2.10) levem em conta a tortuosidade na área de seção transversal, D_l^* é multiplicado por $\theta\xi_l(\theta)$ e D_g^* por $\delta\xi_g(\delta)$ resultando o fluxo difusivo no solo nas duas fases:

$$J_{ld} = -\theta\xi(\theta)D_l^* \frac{\partial C_l}{\partial z} = -\theta D_l \frac{\partial C_l}{\partial z} \quad (2.12.a)$$

$$J_{gd} = -\delta\xi(\delta)D_g^* \frac{\partial C_g}{\partial z} = -\delta D_g \frac{\partial C_g}{\partial z} \quad (2.12.b)$$

sendo

D_l é o coeficiente de difusividade efetiva no solo, na fase líquida [L^2T^{-1}] e

D_g é o coeficiente difusividade efetiva no solo, na fase gasosa [L^2T^{-1}].

2.1.2.2.2 Dispersão hidrodinâmica

O transporte dispersivo de solutos resulta da distribuição desigual da velocidade do fluxo de água dentro e entre os poros diferentes do solo. A diferença de velocidade do fluxo nos canais (vazios) do solo faz com que a solução se disperse. Nem todos os poros têm o mesmo tamanho, Fig. (4.a), e nem todas as linhas de corrente são paralelas à direção do fluxo médio de água e as causas desta diferença estão no comprimento do caminho e na velocidade do fluxo nestes, conforme mostra as Fig. (4.b) e Fig. (4.c). Os solutos no meio de um poro irão fluir mais rapidamente do que os solutos que estão mais distantes do centro podendo ser obtida da lei de Newton da viscosidade, que afirma que as velocidades dentro de um único tubo capilar seguem uma distribuição parabólica, com a maior velocidade no meio dos poros e velocidades nula nas paredes (ŠIMŮNEK e VAN GENUCHTEN, 2006). Como solos consistem de poros de diferentes raios, os fluxos de soluto em diferentes raios de poros serão significativamente diferentes, com alguns solutos fluindo mais rapidamente do que outros, por conta de suas propriedades, conforme mostra a Figura (4) abaixo.

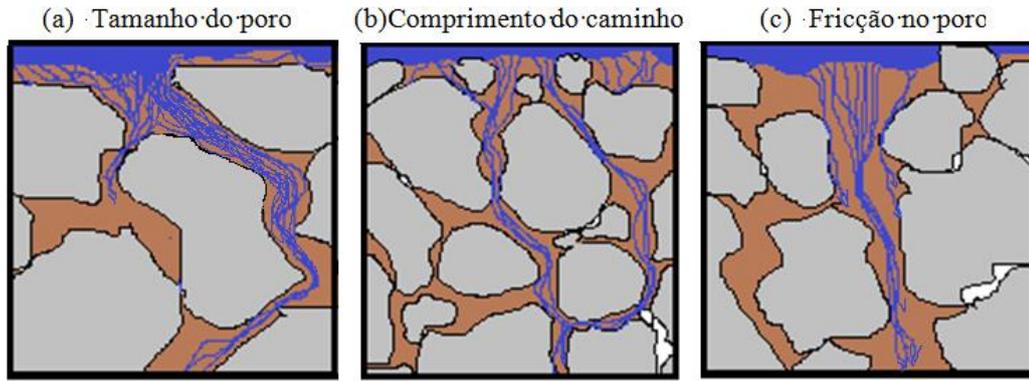


Figura 4 – Fontes de dispersão hidrodinâmicas: (a) Diferença no tamanho do poro; (b) Diferença no comprimento do caminho do fluxo e mistura entre poros; (c) Diferença na velocidade dentro dos poros.

Os processos de dispersão acima descritos conduzem ao conceito geral de dispersão hidrodinâmica nos poros (macroscópico), que diferente da difusão, ocorre somente durante o movimento da água, processo que pode ser descrito matematicamente usando a primeira lei de Fick da difusão da mesma maneira como na difusão molecular, isto é,

$$J_{th} = -\theta D_{th} \frac{\partial C_l}{\partial z} \quad (2.13)$$

em que D_{th} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica [L^2T^{-1}]. O coeficiente de dispersão em sistemas unidimensionais deve ser aproximadamente proporcional à velocidade média da água no poro, com a constante de proporcionalidade, geralmente referida como a dispersividade (longitudinal), (BIGGAR e NIELSEN, 1967). A discussão anterior é válida apenas para transporte unidimensional, aplicações multidimensionais requerem um tensor dispersão mais complexo, envolvendo dispersividades longitudinais e transversais, como descrito por Bear (1972 e 2007).

Segundo Šimůnek e van Genuchten (2006) a dispersividade é uma propriedade de transporte, que é relativamente difícil de medir experimentalmente. As estimativas são normalmente obtidas pelo ajuste de curvas de ruptura medido com a solução da equação de advecção-dispersão. A dispersão frequentemente varia com a distância sobre a qual viaja o soluto, sendo a dispersividade longitudinal significativamente maior.

A densidade de fluxo total de soluto em ambas as fases líquida e gasosa é obtida incorporando as contribuições a partir dos diferentes processos de transporte nas Eqs. (2.6) para obter

$$J_l = q_w C_l - \theta D_l \frac{\partial C_l}{\partial z} - \theta D_{th} \frac{\partial C_l}{\partial z} = q_w C_l - \theta D_e \frac{\partial C_l}{\partial z} \quad (2.14.a)$$

$$J_g = -\delta D_g \frac{\partial C_g}{\partial z} \quad (2.14.b)$$

em que $D_e = D_{lh} + D_l$ é o coeficiente de dispersão efetivo [L^2T^{-1}], que é a soma dos coeficientes de dispersão hidrodinâmica e a difusão efetiva no solo, nesta ordem. No processo de dispersão em problemas de transporte mais subsuperficiais predomina a difusão molecular na fase líquida, exceto quando a velocidade do fluido torna-se relativamente pequena ou insignificante. Em fluxos a altas velocidades de percolação, o processo predominante de transporte de contaminantes é a dispersão hidrodinâmica. Segundo Dyminski (2006), em baixas velocidades ($v \ll 1$), o contaminante migra através da difusão molecular e que a substância se espalha por difusão mesmo em condições hidrostáticas ($v = 0$). Note que a Equação (2.14.b) negligencia o transporte advectivo e dispersivo na fase gasosa.

2.1.3 Equação de Advecção-Dispersão

2.1.3.1 Equação de transporte

A equação geral que regula o transporte de solutos dissolvidos na zona de vadosa é obtida combinando as equações (2.1), (2.2) e (2.14), o que resulta em

$$\frac{\partial(\rho C_s + \theta C_l + \delta C_g)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij}^e \frac{\partial C_l}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\delta D_{ij}^g \frac{\partial C_g}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(q_i C_l)}{\partial x_i} - \phi \quad (2.15)$$

A Equação (2.15) é descrita aqui na sua forma multidimensional, na qual D_{ij}^e são os componentes dos tensores da dispersão efetiva na fase líquida e D_{ij}^g os componentes dos tensores da difusão na fase gasosa.

O termo de reação ϕ da Eq. (2.15) pode representar diversas reações químicas ou biológicas que conduzem a uma perda ou ganho no sistema do solo, tais como decaimento de radionuclídeo, a degradação biológica e/ou dissolução. Em modelos analíticos e numéricos destas reações são mais comumente expressas utilizando as taxas de reação de ordem zero e de primeira ordem (ŠIMŮNEK e VAN GENUCHTEN, 2006), como segue:

$$\phi = \rho \mu_s C_s + \theta \mu_l C_l + \delta \mu_g C_g - \rho \gamma_s - \theta \gamma_l - \delta \gamma_g \quad (2.16)$$

Sendo:

μ_s a constante de degradação de primeira ordem, na fase sólida [T^{-1}],

μ_l constante de degradação de primeira ordem, na fase líquida [T⁻¹] e

μ_g constante de degradação de primeira ordem, na fase gasosa [T⁻¹].

γ_s a constante de produção de ordem zero, na fase sólida [T⁻¹],

γ_l constante de produção de ordem zero, na fase líquida [ML⁻³T⁻¹] e

γ_g constante de produção de ordem zero, na fase gasosa [ML⁻³T⁻¹].

Para que a solução da Equação (2.15) seja possível, é necessário definir as relações de recorrência da concentração do soluto na fase líquida C_l com as demais concentrações C_s e C_g . Šimůnek e van Genuchten (2006) apresentam algumas fórmulas de recorrências para as concentrações C_l e C_s , conforme podemos observar na Tabela 1. A mais simples delas é baseada nas isotermas de adsorção linear, fundamentada na hipótese de sorção imediata usando as isotermas de adsorção para relacionar as concentrações de líquido e adsorvido.

$$C_s = k_d C_l \quad (2.17.a)$$

em que k_d é o coeficiente de distribuição [L³M⁻¹].

Para relacionarem-se as concentrações na fase líquida C_l e a concentração na fase gasosa C_g utilizamos a lei de Henry

$$C_g = k_H C_l \quad (2.17.b)$$

em que k_H é a constante de Henry (adimensional).

A equação geral de transporte dada pela Eq. (2.15) pode ser simplificada consideravelmente quando assumida a adsorção de equilíbrio linear e a volatilização, de tal modo que as concentrações adsorvida (C_s) e gasosa (C_g) estão relacionadas linearmente com a concentração da solução (C_l) por meio dos coeficientes de distribuição k_d e pela constante de Henry k_H . Se, além de adsorção de equilíbrio linearizada é assumido que ρ , δ e θ são constantes no tempo e no espaço, substituindo as equações (2.17.a) e (2.17.b) na Equação (2.15) temos que,

$$\frac{\partial(\rho k_d C_l + \delta k_H C_l + \theta C_l)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\theta D_{ij}^e \frac{\partial C_l}{\partial x_j} \right) + \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\delta D_{ij}^g k_H \frac{\partial C_l}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(q_i C_l)}{\partial x_i} - \phi \quad (2.18)$$

rearranjando a equação (2.18), obteremos

$$R^* \frac{\partial C_l}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_i} \left(D^* \frac{\partial C_l}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} \left(\frac{q_i}{\theta} C_l \right) - \varphi(C_l) \quad (2.19)$$

sendo:

$$R^* = 1 + \frac{\rho k_d + \delta k_H}{\theta} \quad \text{Fator de retardamento [Adimensional]} \quad (2.19.a)$$

$$D^* = D_{ij}^e + \frac{\delta D_{ij}^s k_H}{\theta} \quad \text{Coeficiente de dispersão efetiva [L}^2\text{T}^{-1}] \quad (2.19.b)$$

$$\varphi = \frac{\phi}{\theta} \quad \text{Termo de reação [ML}^{-3}\text{T}^{-1}] \quad (2.19.c)$$

No lado direito da Equação (2.19), o primeiro termo é o termo de dispersão, o segundo é o termo de advecção, que varia em função dos tipos de fluxo: uniforme ou preferencial. O terceiro termo representa os processos tais como a degradação de primeira ordem e/ou produção de ordem zero. Pelo fato de assumir-se ρ , δ e θ constantes, a Eq. (2.19) é uma equação de transporte genérico de solutos com coeficientes constantes.

A Tabela 1 a seguir, mostra os principais modelos de sorção de equilíbrio disponíveis na literatura. Não se tem ainda soluções analíticas que contemplem todos os casos e dependendo do nível de não linearidade do modelo, sua solução estará sempre condicionada a uma solução numérica. O termo de retardamento é quem representa maior complexidade ao ser considerado variável na equação de advecção-dispersão, sendo de difícil transformação pelas técnicas tradicionais. Geralmente, soluções que envolvam modelos de sorção não lineares exigem inversões por métodos numéricos.

Tabela 1 – Equação de adsorção de equilíbrio. Adaptado por van Genuchten e Šimůnek (1996).

Equações	Modelo	Referência
$C_s = k_1 C_l + k_2$	Linear	Lapidus e Amundson (1952)
$C_s = \frac{k_1 C_l^{k_3}}{1 + k_2 C_l^{k_3}}$	Freundlich–Langmuir	Sips (1950)
$C_s = \frac{k_1 C_l}{1 + k_2 C_l} + \frac{k_3 C_l}{1 + k_4 C_l}$	Langmuir Duplo	Shapiro e Fried (1959)
$C_s = k_1 C_l^{C_l^{k_2/k_3}}$	Freundlich Estendido	Sibbesen (1981)
$C_s = \frac{k_1 C_l}{1 + k_2 C_l + k_3 \sqrt{C_l}}$	Gunary	Gunary (1970)
$C_s = k_1 C_l^{k_2} - k_3$	Fitter–Sutton	Fitter e Sutton (1975)
$C_s = k_1 \{1 - [1 + k_2 C_l^{k_3} - k_3]^{k_4}\}$	Barry	Barry (1992)
$C_s = \frac{RT}{k_1} \ln(k_2 C_l)$	Temkin	Bache e Williams (1971)
$C_s = k_1 C_l \text{Exp}(-2k_2 C_l)$		Lindstrom et al. (1971)
$C_s = \frac{C_{sr} C_l}{C_l + k_1 (C_{er} - C_l) \text{Exp}\{k_2 (C_{er} - 2C_l)\}}$	Kielland Modificado	Lai e Jurinak (1971)

Fonte: Šimůnek e van Genuchten (2006).

O retardamento é maior em solos mais ativos e diminui com o aumento da velocidade de percolação (tempo disponível para reações é menor). Embora existam muitos modelos de sorção de equilíbrio disponíveis na literatura, o processo de advecção-dispersão de solutos em meios porosos tem seus coeficientes de retardamento, dispersão efetiva e velocidade do fluxo variando em função da profundidade em que está ocorrendo a lixiviação do soluto, por conta da não homogeneidade do solo. Os modelos convencionais, conforme visto acima, não levam em conta esta variação. Buscando incluir tais considerações, pesquisadores como Pickens e Grisak (1981), Yates (1990); Chrysikopoulos, Kitanidis e Roberts (1990); Yates (1992); Huang, van Genuchten e Zhang (1996); Logan (1996); Zoppou e Knight (1997); Hunt (1998; 1999 e 2002); Pang e Hunt (2001); Al-Humoud e Chamkha (2007); Liu e Si (2008); Chen et al. (2008a, b), Kumar et al. (2010) e Pérez Guerrero e Skaggs (2010) incluíram considerar o fato de que os coeficientes de dispersão, retardo e velocidade sejam dependentes da distância percorrida pelo soluto na solução da EAD.

Conforme é a proposta desta dissertação, também serão estudados os casos em que a dispersividade varie de forma linear, parabólica e exponencial, de acordo com os modelos

propostos por Pickens e Grisak (1981), Kumar et al. (2009) e Pérez Guerrero e Skaggs (2010) o coeficiente de dispersão hidrodinâmica pode variar em função da profundidade conforme a Tabela 2.

Tabela 2 – Formas funcionais de dispersividade dimensional $\bar{\alpha}(X)$ e adimensional $\alpha(x)$.

Tipo	$\bar{\alpha}(X)$	$\alpha(x)$	Coeficiente
Linear	$\bar{\alpha}X$	αx	
Parabólico	$\bar{\beta}X^n$	βx^n	$\beta = \bar{\beta}L^{n-1}$
Exponencial	$\bar{\delta}[1 - \text{Exp}(-\bar{k}X)]$	$\delta[1 - \text{Exp}(-kX)]$	$\delta = \bar{\delta}L^{-1}$ $k = \bar{k}L$
Assintótico	$\bar{A}\left(1 - \frac{\bar{B}}{X + \bar{B}}\right)$	$A\left(1 - \frac{B}{x + B}\right)$	$A = \bar{A}L^{-1}$ $B = \bar{B}L^{-1}$

B e k são constantes adimensionais. α , β , δ e A são as dispersividades adimensionais para cada modelo considerado, sendo L o comprimento dimensional do domínio.
Fonte: Pérez Guerrero e Skaggs (2010)

Na zona saturada é desprezada a existência do ar, ou seja, os poros estão todos ocupados por água, não existindo a fase gasosa, então a equação que descreve os processos de dispersão-advecção, com sorção de equilíbrio linear, com reação, fator de retardamento variando em função da profundidade, para um fluxo volumétrico de soluto uniforme, de acordo com Pérez Guerrero e Skaggs (2010), pode ser traduzido na forma a seguir:

$$R^*(x^*) \frac{\partial C^*}{\partial t^*} = \frac{\partial}{\partial x^*} \left(D^*(x^*) \frac{\partial C^*}{\partial x^*} \right) - v^*(x^*) \frac{\partial C^*}{\partial x^*} - \gamma_1^*(x^*) C^* + \gamma_0^*(x^*), \quad 0 \leq x^* \leq L, t^* > 0 \quad (2.20)$$

Os coeficientes da Equação (2.20) serão adotados conforme o modelo utilizado por Liu et al. (2000):

$$R^*(x^*) = r_0^* + r_1^* x^* \quad \text{Fator de retardamento [Adimensional]} \quad (2.20.a)$$

$$v^*(x^*) = v_0^* - v_1^* x^* \quad \text{Velocidade linear da água [LT}^{-1}] \quad (2.20.b)$$

$$\gamma_1^*(x^*) = \gamma_{10}^* + \gamma_{11}^* x^* \quad \text{Taxa de decaimento de 1ª ordem [T}^{-1}] \quad (2.20.c)$$

$$\gamma_0^*(x^*) = \gamma_{00}^* + \gamma_{01}^* x^* \quad \text{Taxa de produção de ordem zero [ML}^{-3}\text{T}^{-1}] \quad (2.20.d)$$

$$D_L^*(x^*) = d_0^* + d_1^* x^* \quad \text{Dispersão efetiva Linear [L}^2\text{T}^{-1}] \quad (2.20.e)$$

$$D_P^*(x^*) = d_0^* + \alpha^* x^{*2} \quad \text{Dispersão efetiva Parabólica [L}^2\text{T}^{-1}] \quad (2.20.f)$$

$$D_E^*(x^*) = d_0^* + \beta^* (1 - \text{Exp}[-k^* x^*]) \quad \text{Dispersão efetiva Exponencial [L}^2\text{T}^{-1}] \quad (2.20.g)$$

em que d_1^* , α^* e β^* são as dispersividades linear, parabólica e exponencial respectivamente.

2.1.3.2 Condições de contorno e inicial

Para a solução das equações (2.18) e (2.20) é necessário estabelecer uma condição inicial para o problema, bem como suas condições de fronteira. De maneira geral, a condição inicial é estabelecida como segue:

$$C^*(x^*, 0) = F^*(x^*), \quad 0 \leq x^* \leq L, \quad (2.20.a)$$

sendo $F^*(x^*)$ uma função que pode variar em função do espaço x , tendo um valor constante ou na forma de uma função exponencialmente crescente ou decrescente com a distância, ou ainda uma distribuição estacionária para a produção ou decomposição. Na maioria dos casos esta função é considerada nula, especificando que não há uma concentração inicial.

Na entrada, em $x=0$ podem ser aplicadas duas condições de contorno: de primeiro tipo ou terceiro tipo, sendo a concentração na entrada do primeiro e terceiro tipo, dadas respectivamente na forma a seguir.

$$\begin{cases} C^*(0, t) = f^*(t^*), \\ v^*(0)C^*(0, t^*) - D^*(0) \frac{\partial C^*(0, t^*)}{\partial x^*} = v^*(0)f^*(t^*), \end{cases} \quad t^* > 0 \quad (2.20.b, c)$$

A função $f^*(t^*)$ [ML⁻³] também pode assumir várias distribuições, tendo valor constante no tempo, que representa uma solução de alimentação contínua, uma distribuição do tipo impulso ou uma função exponencialmente crescente ou decrescente com o tempo (CHEN e LIU, 2011).

De acordo com van Genuchten e Alves (1982), a equação (2.20.b) conduz a conservação da massa no interior de uma coluna de solo, enquanto que (2.20.c) pode conduzir a erros de balanço de massa, quando aplicada a experiências de deslocamento em que a solução seja injetada a uma velocidade prescrita, sendo estes erros acentuados para valores relativamente grandes quanto à relação $D(x)/v(x)$, ou seja, para uma velocidade do fluxo muito menor que sua dispersão $D(x) \gg v(x)$. No limite inferior, temos as condições como segue:

$$\begin{cases} \frac{\partial C^*(\infty, t^*)}{\partial x^*} = 0, \\ \frac{\partial C^*(L, t^*)}{\partial x^*} = 0, \end{cases} \quad t^* > 0 \quad (2.20.d, e)$$

A condição expressa pela Equação (2.20.d) considera a presença de uma coluna de solo semi-infinita. Quando soluções analíticas são baseadas nesta condição de contorno são utilizados para calcular curvas de efluentes a partir de colunas finitas e por isso alguns erros podem ser introduzidos. Uma condição de fronteira alternativa é utilizada frequentemente para estudos de deslocamento, que representa o gradiente de concentração nulo na extremidade inferior da coluna, conforme expresso pela equação (2.20.e), onde L é o comprimento da coluna. Nesta condição, que leva a uma distribuição da concentração contínua em $x = L$, tem sido amplamente discutido na literatura por Wehner e Wilhelm (1956), Pearson (1959), van Genuchten, Davidson e Wiereng (1974) e Bear (1979).

Van Genuchten e Alves (1982) estabelecem uma tabela que relaciona as condições de contorno e inicial para cada situação problema, variando-a de acordo com a inserção do termo de reação de primeira ordem e de ordem zero, divididas em categorias, para uma condição inicial do tipo exponencial. Como o estudo decorrente é baseado no transporte de solutos em meio finito, fica então definida as condições de contorno e inicial do problema, de acordo com as equações (2.20.a), (2.20.c) e (2.20.e).

$$C^*(x^*, 0) = F^*(x^*), \quad 0 \leq x^* \leq L, \quad (2.20.f)$$

$$v^*(0)C^*(0, t^*) - D^*(0) \frac{\partial C^*(0, t^*)}{\partial x^*} = v^*(0)f^*(t^*), \quad t^* > 0 \quad (2.20.g)$$

$$\frac{\partial C^*(L, t^*)}{\partial x^*} = 0, \quad t^* > 0 \quad (2.20.h)$$

em que:

$$F^*(x) = F_0^* + F_1^* x = 0 \quad 0 \leq x^* \leq L, \quad (2.20.i)$$

$$f^*(t^*) = C_a + C_b e^{-\lambda^* t^*}, \quad 0 < t^* \quad (2.20.j)$$

Para a condição de entrada, a função $f^*(t^*)$ pode ser considerada constante ou variando de forma exponencial. As constantes C_a e C_b são os coeficientes da função que determina se esta concentração é constante ou varia exponencialmente com o tempo.

2.1.4 Técnica da Transformada Integral Generalizada

A Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) é um método híbrido ou semi-analítico, com base na Técnica da Transformada Integral Clássica (CITT), que é uma extensão do método da separação de variáveis. A CITT possui relativa flexibilidade no sentido de facilitar a construção de um par de transformada integral e como este pode ser matematicamente invertido. Esta técnica foi desenvolvida e descrita visando obter soluções analíticas unificadas para a transferência de calor e problemas de difusão linear de massa (MIKHAILOV e ÖZISIK, 1984), e sido posteriormente estendida para incluir problemas não-lineares de transferência de calor e escoamento de fluidos, o que deu origem a Técnica da Transformada Integral Generalizada (COTTA, 1993).

A Técnica da Transformada Integral Generalizada consiste na transformação da equação diferencial parcial que modela a situação-problema em um sistema infinito de equações diferenciais acopladas, que para ter solução deve ser truncado em uma ordem suficientemente grande, dependendo do erro requerido e do grau de não-linearidade da equação. Feito isto, utiliza-se uma fórmula de inversão apropriada para obter-se o potencial original.

Além do controle e estimativa de erro bem simples, outro aspecto notável desse método é a extensão direta para situações multidimensionais, com apenas um moderado aumento do esforço computacional. Sua natureza híbrida é responsável por esse comportamento, uma vez que a parte analítica do procedimento de solução é empregada sobre todas, exceto uma variável independente, e a tarefa numérica fica sempre reduzida à integração de um sistema diferencial ordinário nessa única variável independente restante.

ÖZISIK e MURRAY (1974) foram pioneiros na utilização da GITT, que consistia em tratar coeficientes de contorno variáveis. Muitas ideias foram surgindo com o objetivo de estender esse procedimento para problemas mais complexos. Segundo (COTTA, 1993) a GITT já inclui problemas das seguintes classes:

- Problemas envolvendo equações com coeficientes variáveis;
- Problemas envolvendo condições de contorno com coeficientes variáveis;
- Problemas com fronteiras móveis;
- Problemas em que a complexidade esta associada ao problema auxiliar;
- Problemas não lineares.

Em síntese, a aplicação da GITT envolve uma sequência de procedimentos que pode ser sistematizada nas seguintes etapas:

- 1- Escolher um problema auxiliar de autovalor, que detém o máximo de informações do problema original relativo à geometria e aos operadores;
- 2- Desenvolver a fórmula de transformada e sua fórmula de inversão;
- 3- Transformar a equação diferencial parcial original, através do uso de operadores apropriados, em um sistema de EDOs infinito e não linear, que pode ou não ser acoplado;
- 4- Truncar e resolver o sistema de EDOs, segundo a precisão preestabelecida;
- 5- Construir os potenciais originais, através do uso das fórmulas de inversão.

A seguir, apresentam-se os fundamentos teóricos relativos à GITT.

2.1.4.1 Metodologia

Segundo Cotta (1993), de maneira geral, a metodologia de aplicação da GITT é descrita sobre um problema difusivo-convectivo linear, unidimensional, transiente e com termo fonte linear, e condição de contorno não homogênea, definido em uma região V da superfície de contorno Γ :

$$w(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial t} = \nabla \cdot [K(x) \nabla T(x,t)] - u(x) \nabla T(x,t) - d(x)T(x,t) + P(x,t), \quad \{x \in V, t > 0\} \quad (2.21)$$

com $w(x) > 0$ e condições inicial e de contorno dadas por:

$$T(x,0) = f(x), \quad \{x \in V\} \quad (2.21.a)$$

$$a(x)T(x,t) + b(x)K(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} = \zeta(x,t), \quad \{x \in \Gamma, t > 0\} \quad (2.21.b)$$

em que η é a componente normal à superfície Γ e $K(x) > 0$.

Quando o coeficiente do termo convectivo $u(x)$ é nulo a Equação (2.21) é puramente difusiva, diferente disso este termo não pode ser transformado utilizando a técnica de transformação integral clássica (CITT). Para estabelecer o par transformada-inversa, o potencial $T(x, t)$ é escrito em termos de uma base ortogonal de autofunções obtidas a partir do seguinte problema auxiliar de autovalor:

$$\nabla \cdot K(x) \nabla \Psi_i(x) + [\mu_i^2 w(x) - d(x)] \Psi_i(x) = 0, \quad \{x \in V\} \quad (2.22)$$

$$a(x) \Psi_i(x) + b(x) K(x) \frac{d \Psi_i(x)}{d \eta} = 0, \quad \{x \in \Gamma\} \quad (2.22.a)$$

Problemas representados pela Equação (2.22) são conhecidos como problemas de Sturm-Liouville, onde as autofunções $\Psi_i(x)$ e os autovalores μ_i^2 correspondentes podem ser conhecidos através de soluções puramente analíticas ou contagem de sinal, conforme descrito na seção anterior. Com isso, a partir da solução do problema (2.22) define-se o seguinte par transformada-inversa:

$$\bar{T}_i(t) = \int_{\Omega} w(x) \tilde{\Psi}_i(x) T(x,t) d\Omega, \quad \text{Transformada} \quad (2.23)$$

$$T(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_i(x) \bar{T}_i(t) \quad \text{Inversa} \quad (2.24)$$

sendo que

$$\tilde{\Psi}_i(x) = \frac{\Psi_i(x)}{\sqrt{N_i}} \quad (2.24.1)$$

Com sua fórmula de normalização

$$N_i = \int_V w(x) \tilde{\Psi}_i^2(x) dV, \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (2.25)$$

Agora, operando a equação (2.21) com $\int_V \tilde{\Psi}_i(x) dV$, obtém-se

$$\frac{d\bar{T}_i(t)}{dt} + \int_V \tilde{\Psi}_i(x) [u(x) \cdot \nabla T(x,t)] dV + \mu_i^2 \bar{T}_i(t) = \bar{g}_i(t), \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (2.26)$$

em que

$$\bar{g}_i(t) = \int_V \tilde{\Psi}_i(x) P(x,t) dV + \int_{\Gamma} K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] d\Gamma \quad (2.26.1)$$

Para o cálculo da integral

$$\int_{\Gamma} K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] d\Gamma$$

é suficiente multiplicar a equação (2.22a) por $\tilde{\Psi}_i(x)$ e (2.21b) por $T(x,t)$. Após isso, subtraindo uma da outra, temos

$$K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] = \frac{\zeta(x,t) \tilde{\Psi}_i(x)}{b(x)} \quad (2.26.2)$$

Para condições de contorno de primeiro tipo, ou seja, $b(x) = 0$, basta fazer uso da fórmula (2.22a), o que leva a

$$K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] = - \frac{\zeta(x,t) K(x)}{a(x)} \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \quad (2.26.3)$$

Ou a sua combinação

$$K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] = \zeta(x,t) \frac{\tilde{\Psi}_i(x) - K(x) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta}}{a(x) + b(x)} \quad (2.26.4)$$

portanto

$$\int_{\Gamma} K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] d\Gamma = \int_{\Gamma} \zeta(x,t) \frac{[\tilde{\Psi}_i(x) - K(x) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta}]}{a(x) + b(x)} d\Gamma$$

o que significa que para problemas com condições de contorno homogêneas, ou seja $\zeta(x,t) = 0$,

$$K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{d\tilde{\Psi}_i(x)}{d\eta} \right] = 0 \quad (2.26.5.a)$$

$$\int_{\Gamma} K(x) \left[\tilde{\Psi}_i(x) \frac{\partial T(x,t)}{\partial \eta} - T(x,t) \frac{\partial \tilde{\Psi}_i(x)}{\partial \eta} \right] d\Gamma = 0 \quad (2.26.5.b)$$

e o termos $\bar{g}_i(t)$ fica reduzido a

$$\bar{g}_i(t) = \int_V \tilde{\Psi}_i(x) P(x,t) dV, \quad (2.26.6)$$

Fazendo uso da fórmula de inversão, Equação (2.24), o termo não transformável da Equação (2.26) é reduzido a,

$$\int_V \tilde{\Psi}_i(x) [u(x) \cdot \nabla T(x,t)] dV = \sum_{j=1}^{\infty} a_{ij}^* \bar{T}_j(t) \quad (2.26.7)$$

sendo

$$a_{ij}^* = \int_V \tilde{\Psi}_i(x) [u(x) \cdot \nabla \tilde{\Psi}_j(x)] dV \quad (2.26.8)$$

e a Eq. (2.26) fica reduzida ao seguinte sistema de EDOs

$$\frac{d\bar{T}_i(t)}{dt} + \sum_{j=1}^{\infty} b_{ij} \bar{T}_j(t) = \bar{g}_i(t), \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (2.27)$$

enquanto

$$b_{ij} = a_{ij}^* + \delta_{ij} \mu_i^2 = \begin{bmatrix} a_{11}^* + \mu_1^2 & a_{12}^* & a_{13}^* & \cdots & a_{1N}^* \\ a_{21}^* & a_{22}^* + \mu_2^2 & a_{23}^* & & a_{2N}^* \\ a_{31}^* & a_{32}^* & a_{33}^* + \mu_3^2 & & a_{3N}^* \\ \vdots & & \vdots & & \vdots \\ a_{N1}^* & a_{N2}^* & a_{N3}^* & \cdots & a_{NN}^* + \mu_N^2 \end{bmatrix} \quad (2.27.a)$$

$$\delta_{ij} = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ 1, & i = j \end{cases} \quad (2.27.b)$$

A solução da Equação (2.27) depende de sua condição inicial para cada termo i do somatório. Para isso é suficiente transformar também sua condição inicial original, Equação (2.21a), com o uso do operador $\int_V w(x) \tilde{\Psi}_i(x) dV$, conforme a seguir

$$\bar{T}_i(0) = \bar{f}_i = \int_V w(x) \tilde{\Psi}_i(x) f(x) dV \quad (2.27.c)$$

A Equação (2.27) representa um sistema infinito de equações diferenciais ordinárias, acoplado e linear para os potenciais transformados $\bar{T}_i(t)$. Para obtenção de solução numérica, a expansão do potencial $T(x,t)$ é truncada para uma dada ordem N suficientemente alta a fim de garantir uma acurácia desejada. Após o cálculo dos potenciais transformados $\bar{T}_i(t)$, aplica-se a fórmula de inversão para a reconstrução do potencial $T(x,t)$ que é a base de cálculo dos diversos parâmetros físicos de interesse do problema original. Na sua forma matricial, o sistema truncado de ordem N pode ser reescrito:

$$y'(t) + A(t)y(t) = g(t), \quad \{t > 0\} \quad (2.28)$$

$$y(0) = f, \quad \{t = 0\} \quad (2.28.a)$$

para

$$y'(t) = \{\bar{T}_1(t), \bar{T}_2(t), \bar{T}_3(t), \dots, \bar{T}_N(t)\}^T \quad (2.28.b)$$

$$A(t) = \{b_{ij}(t)\}^T \quad (2.28.c)$$

$$g(t) = \{\bar{g}_1(t), \bar{g}_2(t), \bar{g}_3(t), \dots, \bar{g}_N(t)\}^T \quad (2.28.d)$$

$$f = \{\bar{f}_1, \bar{f}_2, \bar{f}_3, \dots, \bar{f}_N\}^T \quad (2.28.e)$$

Na literatura existem vários métodos de solução para problemas de valor inicial conforme descritos pela Equação (2.28). Em particular, o integrador numérico DIVPAG da

Biblioteca IMSL (1994), desenvolvido a partir do método de Gear e/ou Adams-Moulton, tem demonstrado ser uma ferramenta computacional poderosa para a obtenção de resultados numéricos de sistemas stiff com esta estrutura.

2.1.5 Método das linhas

O Método das Linhas (MOL - Method of Lines) é um procedimento geral para a solução de equações diferenciais parciais (EDP's). Segundo Hamdi (2009) a ideia básica do MOL é substituir na EDP a derivada espacial por aproximações algébricas. Uma vez que isto é feito, as derivadas espaciais não são mais explicitamente declaradas em termos das variáveis independentes. Deste modo, só uma variável, normalmente a temporal, em um problema físico, permanece. Em outras palavras, restando somente uma variável independente, temos um sistema de EDOs aproximado da EDP original. O desafio, então, é formular esse sistema aproximado de EDOs. Feito isto, podemos aplicar qualquer algoritmo de integração para o PVI (problema de valor inicial) e computar uma solução numérica aproximada para a EDP.

Na eliminação da variável espacial, podemos utilizar vários métodos de diferenciação, tais como diferenças finitas, volumes finitos ou elementos finitos, para transformar as derivadas espaciais numa equação algébrica. Para solução do sistema de EDOs que resultante pode ser utilizado qualquer método de integração numérico. Neste trabalho, será utilizada a rotina DIVPAG da biblioteca IMSL, para a solução destas EDOs.

Quanto a uma descrição mais apurada da técnica, aconselha-se os trabalhos de Schiesser e Griffiths (2008) e Hamdi (2009), que demonstram sua aplicação a Equações diferenciais parciais implementados em pacotes computacionais.

2.2 REVISÃO DA LITERATURA

As abordagens analíticas, semi-analíticas e numéricas são frequentemente usadas em hidrologia subterrânea para resolver problemas de advecção-dispersão. Muitas soluções analíticas e semi-analíticas têm sido desenvolvidos para simular o transporte de soluto em meios porosos, conforme apresentados por Bear (1972) e van Genuchten e Alves (1982), no intuito de verificar a precisão e testar as abordagens numéricas, conforme adotadas por van Genuchten, Davidson e Wiereng (1974), para condições simplificadas, dentre as quais

elegemos as condições que incluem meios porosos homogêneos ou especificamente definidos como camadas médias, fluxo em estado estacionário e coeficientes de dispersão constante.

As primeiras abordagens no intuito de solucionar este tipo de problema foram através das transformadas integrais, tais como de transformada de Laplace e Fourier adotadas por Brenner (1962), Cho (1971), van Genuchten e Wiereng (1976), van Genuchten e Alves (1982), Jury, Spencer e Farne (1983), Mohsen e Baluch (1983), van Genuchten (1985) e Bear (2007), por exemplo. Com o advento da tecnologia, problemas mais complexos puderam se resolvidos por conta dos recursos computacionais disponíveis, o que dá maior viabilidade às pesquisas através de métodos numéricos computacionais, destacando Šimůnek et al. (2005) e Radcliffe e Šimůnek (2010). Estes últimos aplicaram métodos de elementos finitos a problemas de advecção-dispersão, implementados no HYDRUS. A maioria dos trabalhos citados até o momento é baseada em geometrias onde o domínio é semi-infinito ou infinito, exceto, por exemplo, Mohsen e Baluch (1983).

Cho (1971) utilizou transformadas de Laplace para obter uma solução analítica para a convecção dispersiva de transporte de azoto envolvendo uma cadeia de três espécies de nitrificação. Van Genuchten (1985), também utilizando transformada de Laplace, obteve solução para uma cadeia de decaimento estendida para quatro espécies, implementando no CHAIN problemas relacionados com nitrificação-desnitrificação e cadeias de desintegração de radionuclídeos. Leij, Skaggs e van Genuchten (1991) obtiveram a solução para o problema tridimensional de transporte de soluto em meios semi-infinito, com condições de contorno variável de primeiro e segundo tipo e decaimento de primeira ordem utilizando transformadas de Laplace e Fourier para coordenadas retangulares e Hankel para coordenadas cilíndricas.

Almeida e Cotta (1995) usaram transformadas integrais generalizadas (GITT) sobre problemas de transporte em meios porosos bidimensionais, de domínio finito, aplicados a estudo de reservatórios de petróleo com condições de contorno homogêneas do segundo tipo, para diferentes números de Peclet. Lunn et al (1996) apresentaram soluções analíticas obtidas por transformadas de Fourier, utilizando uma metodologia que permitiu uma maior flexibilidade no que diz respeito às condições iniciais, obtendo resultados similares àqueles obtidos por Cho (1971), para três espécies de contaminantes com decaimento.

Yates (1990) incluiu aos problemas de advecção-dispersão os coeficientes variáveis em função da profundidade do solo e Huang, van Genuchten e Zhang (1996) obtiveram resultados por transformadas de Laplace, com coeficiente de dispersão variando com a distância, em função da velocidade média do fluxo, condições de contorno de Dirichlet e

Cauchy, aplicados a domínio semi-infinitos e finitos, assumindo a dispersividade tanto constante quanto variando com a profundidade, conforme adotado por Yates (1990).

Liu, Ball e Ellis (1998), aos moldes de Almeida e Cotta (1995), aplicaram GITT para obter uma solução analítica para o transporte de solutos em meios porosos heterogêneos unidimensionais em multicamadas. Na solução das autofunções, os autores calcularam os autovalores aplicados aos limites de cada camada do solo heterogêneo, utilizando o método da contagem de sinal, fazendo das interfaces das camadas internas do solo os limites inferior e superior do domínio das autofunções. Embora tenham aplicado apenas para três camadas, esta abordagem permite que o domínio seja fracionado em n-camadas distintas, possibilitando maior aplicabilidade.

Sun, Petersen e Clement (1999) e Sun e Clement (1999), transformaram o problema de decaimento multidimensional de primeira ordem sequencial com qualquer número de espécies, dentro de um conjunto de equações de transporte dissociado para espécies individuais. Eles resolveram as equações dissociadas utilizando soluções analíticas existentes para uma única espécie de transporte e decaimento de primeira ordem. No entanto, esta substituição somente pode ser usada quando os coeficientes de retardo são comuns a todas as espécies.

Posteriormente Liu et al. (2000) aplicou a GITT a um problema de advecção-dispersão de solutos para um domínio finito, com condições de contorno variável, coeficiente de dispersão efetiva, velocidade do fluxo e coeficientes de retardo variável em função da distância e da própria concentração, variando no espaço e no tempo. Esta abordagem reflete a capacidade desta técnica híbrida em lidar com problemas não lineares e não homogêneos, permitindo muita flexibilidade na escolha dos parâmetros de entrada e nos coeficientes reguladores do transporte.

Bauer, Attinger e Kinzelbach (2001) apresentaram um método para a resolução do problema de transportes reativos uni, bi e tridimensionais sequencialmente acoplados com coeficientes de retardo distintos. Sua solução foi expressa em termos de uma combinação linear das soluções fundamentais no domínio de Laplace, com coeficientes definidos por uma fórmula recursiva. Em alguns casos, foi possível transformar a solução para o domínio do tempo analiticamente. No entanto, a maioria dos problemas de transporte necessita de uma abordagem numérica para a obtenção da transformada inversa.

Clement (2001) escreveu as equações para transporte acoplado de espécies usando a notação de matriz e depois usou um procedimento de diagonalização da matriz para desacoplar as equações. Para este método de solução é necessário que se tenham coeficientes

de retardo idênticos, para as diferentes espécies, do mesmo modo que a estratégia utilizada por Sun, Petersen e Clement (1999). Posteriormente, Quezada et al. (2004) ampliaram o procedimento de Clemente (2001), generalizando um método que resolveria as equações de transporte acoplados multidimensionais, multiespécies reativas e com diferentes fatores de retardamento. O método consiste em três etapas que envolvem transformadas de Laplace e diagonalização da matriz no domínio de Laplace, apresentando ainda dificuldades no processo de inversão das transformadas, necessitando de inversão numérica para os casos mais gerais.

Šimůnek et al. (2005) modelaram e resolveram problemas de advecção-dispersão com transporte bifásicos de solutos nas fases líquida e gasosa, utilizando diferenças finitas para os caso de sorção não linear aplicadas ao HYDRUS. Šimůnek e van Genuchten (2006), resolveram problemas de sorção de equilíbrio linear por transformadas de Laplace e Fourier e diferenças finitas para os casos de sorção não linear e problemas multidimensionais implementados em STANMOD.

Srinivasan e Clement (2008a, b) desenvolveram soluções analíticas fechadas para problemas de decaimento sequenciais que envolvam um número arbitrário de espécies, sujeitas a condições iniciais espacialmente diferentes e um termo fonte com decaindo, exponencialmente genérico do tipo-Bateman, condição de contorno conforme utilizado anteriormente por van Genuchten (1985). O sistema de equações unidimensional acoplado foi resolvido por condições de contorno tanto Dirichlet quanto Cauchy usando uma combinação de transformada de Laplace com a técnica de matriz de diagonalização de Clement (2001).

Kumar et al. (2009) resolveram problemas de EAD para meios finitos heterogêneos com dispersão linear dependendo do tempo ou quadrática dependendo da velocidade do fluxo variando em função do espaço, utilizando transformadas de Laplace. Os autores neste trabalho desconsideraram a existência de reação.

Cassol et al. (2009) combinaram as técnicas GITT e CITT com transformada de Laplace e métodos de diagonalização de matrizes para desenvolver uma solução analítica para dispersão de poluente atmosférico transiente, bidimensional em um domínio espacial semi-infinito.

Pérez Guerrero et al. (2009), utilizaram GITT na obtenção da solução da equação advecção-dispersão linear de modo geral, para uma única espécie de transporte de contaminantes, no intuito de desenvolver a solução analítica para a equação de transporte multiespécies de advecção-dispersão, compreendendo reações de decaimento sequenciais de primeira ordem, fator de retardamento distintos para cada espécie, um domínio espacial finito e as condições de contorno em estado estacionário. Posteriormente, Pérez Guerrero et al.

(2010) estenderam a solução do problema de multiespécies para condições de contorno variável.

Pérez Guerrero e Skaggs (2010) resolveram a EAD com decaimento de primeira ordem para uma única espécie em meio heterogêneo e finito, utilizando um fator integrante para reduzir a equação de advecção-dispersão à uma equação puramente difusiva, eliminando o termo advectivo e resolvendo-a através da GITT. Eles demonstraram que para um determinado número de formulações para transporte de importância prática existe sempre uma expressão analítica para o fator integrante. O caso particular de um coeficiente de dispersividade linearmente crescente foi desenvolvido em detalhes e sua solução comparada aos resultados obtidos por Yates (1990).

Chen e Liu (2011) apresentaram uma solução analítica para o transporte unidimensional de soluto num domínio espacial finito para condição de contorno arbitrária dependentes do tempo. Eles obtiveram resultados que simulassem problemas que incluíssem condições de entrada que pudessem ser constantes, que variassem de forma exponencial ou senoidal. A equação governante do problema incluiu os termos de advecção, dispersão hidrodinâmica, a sorção de equilíbrio linear e processos de decaimento de primeira ordem. A solução analítica generalizada foi obtida utilizando a transformada de Laplace para a variável temporal e a técnica de transformada integral generalizada no que diz respeito à coordenada espacial. Os autores obtiveram uma excelente concordância entre as soluções analítica e numérica. Esta solução generalizada oferece uma ferramenta conveniente para o desenvolvimento da solução analítica para condições de contorno dependente do tempo especificado ou para a avaliação numérica do campo de concentração em problemas que a fronteira dependa arbitrariamente do tempo de entrada. Da mesma forma que os demais trabalhos, o processo de inversão das transformadas teve de ser obtido de maneira numérica.

Recentemente, Chen et al. (2012) resolveram o problema transiente de dispersão-advecção sequencialmente acopladas para múltiplas espécies, com condições de contorno do terceiro tipo não-homogênea e decaimento de primeira ordem, utilizando transformada de Laplace no domínio do tempo e transformada integral generalizada no domínio espacial. Na homogeneização das condições de contorno, para a solução do sistema de EDOs, eles utilizaram uma fórmula de substituição, conforme utilizada por Chen e Liu (2011), no intuito de homogeneizar o sistema de EDOs, resultante da transformação via GITT. Esta abordagem permitiu a transformação da equação governante num sistema algébrico de autofunções, que após ser resolvido é feita a transformação inversa de Laplace e em seguida utilizando a

fórmula de inversão da transformação integral generalizada para a obtenção das concentrações. Este procedimento foi adotado separadamente para cada espécie, o que aumenta seu grau de dificuldade na transformação inversa de Laplace, dependendo do número de espécies a serem consideradas. Os autores estudaram o comportamento da solução na saída do sistema para um domínio finito, comparando-as a solução em domínio semi-infinito, obtida por van Genuchten (1985). Eles notaram que este tipo de abordagem requer, para a convergência da série, dependendo do número de Peclet e do comprimento adotado, um maior número de termos no somatório, impactando diretamente na solução próxima à fronteira.

CAPÍTULO 3

3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA E METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

3.1 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA

A formulação matemática para o problema de Advecção-dispersão em meios porosos heterogêneos, consiste na adimensionalização da Equação (2.20) conforme descrita no Capítulo 2 e para tal serão utilizados os seguintes grupos adimensionais, conforme abaixo:

$$\begin{aligned}
 x &= \frac{x^*}{L}, & t &= \frac{v_0^* t^*}{r_0^* L}, & R(x) &= \frac{R^*(x^*)}{r_0^*}, & D(x) &= \frac{D^*(x^*)}{Lv_0^*}, & v(x) &= \frac{v^*(x^*)}{v_0^*}, \\
 \gamma_0(x) &= \frac{\gamma_0^*(x^*)L}{C_n v_0^*}, & \gamma_1(x) &= \frac{\gamma_1^*(x^*)L}{v_0^*}, & f(t) &= \frac{f^*(t^*)}{C_n}, & \lambda &= \frac{\lambda^* r_0^* L}{v_0^*}, \\
 F(x) &= \frac{F^*(x^*)}{F_0^*} = \frac{F^*(x^*)}{C_n}, & C(x,t) &= \frac{C^*(x^*, t^*)}{C_n}, & k &= \frac{k^*}{L}.
 \end{aligned} \tag{3.1-11}$$

em que $C_n = C_a + C_b$.

Substituindo os grupos adimensionais (3.1-11) na Equação (2.20), obteremos a equação adimensional, bem como sua condição inicial e de contorno:

$$R(x) \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C}{\partial x} \right) - v(x) \frac{\partial C}{\partial x} - \gamma_1(x)C + \gamma_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0 \tag{3.12}$$

$$C(x,0) = F_x(x) \quad 0 \leq x \leq 1 \tag{3.12.a}$$

$$C(0,t) - D(0) \frac{\partial C(0,t)}{\partial x} = f(t), \quad t > 0 \tag{3.12.b}$$

$$\frac{\partial C(1,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \tag{3.12.c}$$

Os coeficientes adimensionalizados da Equação (3.12) podem ser dados na forma:

$$R(x) = \frac{r_0^*}{r_0^*} + \frac{r_1^* L}{r_0^*} x = r_0 + r_1 x \quad \text{Fator de retardamento} \tag{3.12.d}$$

$$D_L(x) = \frac{d_0^*}{Lv_0^*} + \frac{d_1^*}{v_0^*} x = d_0 + d_1 x \quad \text{Dispersão Linear} \tag{3.12.e}$$

$$D_p(x) = \frac{d_0^*}{Lv_0^*} + \frac{\alpha^* L}{v_0^*} x^2 = d_0 + \alpha x^2 \quad \text{Dispersão Parabólica} \tag{3.12.f}$$

$$D_E(x) = \frac{d_0^*}{Lv_0} + \frac{\beta^*}{Lv_0}(1 - e^{-x}) = d_0 + \beta(1 - e^{-x}) \quad \text{Dispersão Exponencial} \quad (3.12.g)$$

$$v(x) = \frac{v_0^*}{v_0} - \frac{v_1^* L}{v_0^*} x = v_0 - v_1 x \quad \text{Velocidade linear nos poros} \quad (3.12.h)$$

$$\gamma_1(x) = \frac{\gamma_{10}^* L}{v_0^*} + \frac{\gamma_{11}^* L^2}{v_0^*} x = \gamma_{10} + \gamma_{11} x \quad \text{Taxa de decaimento de 1ª ordem} \quad (3.12.i)$$

$$\gamma_0(x) = \frac{\gamma_{00}^* L}{C_n v_0^*} + \frac{\gamma_{01}^* L^2}{C_n v_0^*} x = \gamma_{00} + \gamma_{01} x \quad \text{Taxa de produção de ordem zero} \quad (3.12.j)$$

$$f(t) = \frac{C_a}{C_n} + \frac{C_b}{C_n} \text{Exp}(-\lambda^* \frac{r_0^* L}{v_0^*} t) = ft_0 + ft_1 e^{-\lambda t} \quad \text{Concentração na entrada} \quad (3.12.l)$$

$$F(x) = \frac{F_0^*}{C_n} + \frac{F_1^* L}{C_n} x = F_0 + F_1 x \quad \text{Concentração inicial} \quad (3.12.m)$$

Note que, para todos os casos, $v(0) = R(0) = v_0 = r_0 = 1$.

3.2 METODOLOGIA DE SOLUÇÃO

3.2.1 Solução híbrida

Para a solução da equação de advecção-dispersão EAD, Eq. (3.12), sujeita as condições (3.12a)-(3.12c), o primeiro passo consiste na escolha de um filtro que seja capaz de simplificar e homogeneizar a condição de entrada da EDP, Eq.(3.12b), (COTTA, 1993, ALMEIDA e COTTA, 1995). Aqui o filtro proposto será do tipo:

$$C(x,t) = C_0(x) + C_\lambda(x)e^{-\lambda t} + C_h(x,t) \quad (3.13)$$

Introduzindo a Equação (3.13) nas equações (3.12) e (3.12.a) - (3.12.b), teremos

$$\begin{aligned} R \left[-\lambda C_\lambda e^{-\lambda t} + \frac{\partial C_h}{\partial t} \right] &= \frac{d}{dx} \left(D \frac{dC_0}{dx} \right) + \frac{d}{dx} \left(D \frac{dC_\lambda}{dx} \right) e^{-\lambda t} + \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_h}{\partial x} \right) - \\ &v(x) \left(\frac{dC_0}{dx} + e^{-\lambda t} \frac{dC_\lambda}{dx} + \frac{\partial C_h}{\partial x} \right) - \\ &\gamma_1(x) [C_0 + C_\lambda e^{-\lambda t} + C_h] + \gamma_0(x), \end{aligned} \quad (3.14)$$

$$C_0(x) + C_\lambda(x) + C_h(x,0) = F(x), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.14.a)$$

$$C_0(0) + C_\lambda(0)e^{-\lambda t} + C_h(0,t) - D(0) \left(\frac{dC_0}{dx} + \frac{dC_\lambda}{dx} e^{-\lambda t} + \frac{\partial C_h}{\partial x} \right) \Big|_{x=0} = ft_0 + ft_1 e^{-\lambda t}, \quad (3.14.b)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} + \frac{dC_\lambda(1)}{dx} e^{-\lambda t} + \frac{\partial C_h(1,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \quad (3.14.c)$$

Das Equações (3.14) e (3.14.a)-(3.14.b) obtemos três equações distintas com suas respectivas condições de contorno e inicial:

1-Problema auxiliar para $C_0(x)$:

$$\frac{d}{dx} \left(D(x) \frac{dC_0(x)}{dx} \right) - v(x) \frac{dC_0(x)}{dx} - \gamma_1(x) C_0(x) = -\gamma_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.15)$$

$$C_0(0) - D(0) \frac{dC_0(0)}{dx} = ft_0, \quad (3.15.a)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = 0, \quad (3.15.b)$$

2-Problema auxiliar para $C_\lambda(x)$:

$$\frac{d}{dx} \left(D(x) \frac{dC_\lambda(x)}{dx} \right) - v(x) \frac{dC_\lambda(x)}{dx} - [\gamma_1(x) - \lambda R(x)] C_\lambda(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.16)$$

$$C_\lambda(0) - D(0) \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.16.a)$$

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.16.b)$$

3-Problema homogêneo para $C_h(x,t)$:

$$R(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} \right) - v(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} - \gamma_1(x) C_h(x,t), \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0 \quad (3.17)$$

$$C_h(x,0) = F(x) - C_0(x) - C_\lambda(x) \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.17.a)$$

$$C_h(0,t) - D(0) \frac{\partial C_h(0,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \quad (3.17.b)$$

$$\frac{\partial C_h(1,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \quad (3.17.c)$$

Para que seja possível a solução do sistema de EDOs resultante da transformação da Equação (3.17) será necessário, antes de tudo, obtermos a solução das equações-filtro: $C_0(x)$, Eq. (3.15) e $C_\lambda(x)$, Eq. (3.16), para cinco casos distintos.

3.2.1.1 Solução das equações filtro

3.2.1.1.1 Primeiro caso

O primeiro caso proposto neste trabalho consiste em desprezar o coeficiente de dispersão hidrodinâmica do coeficiente de dispersão efetivo, ou seja, $D(x) = d_0$; com velocidade linear constante ou $v(x) = v_0$; concentração na entrada constante, ou seja, $\lambda = 0$ ou $f(t) = ft_0 + ft_1 = C_0$, fator de retardamento constante $R(x) = r_0$, sem concentração inicial, ou $C(x, 0) = 0$ e finalmente, sem termo de reação, ou $\gamma_0(x) = \gamma_1(x) = 0$. Com isso ficam então as Equações (3.15) e (3.16) definidas para $C_0(x)$ e $C_\lambda(x)$ respectivamente como segue:

$$d_0 \frac{d^2 C_0(x)}{dx^2} - \frac{dC_0(x)}{dx} = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.18)$$

$$C_0(0) - d_0 \frac{dC_0(0)}{dx} = ft_0, \quad (3.18.a)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = 0, \quad (3.18.b)$$

$$d_0 \frac{d^2 C_\lambda(x)}{dx^2} - \frac{dC_\lambda(x)}{dx} = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.19)$$

$$C_\lambda(0) - d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.19.a)$$

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.19.b)$$

Cujas soluções são dadas por Boyce e DiPrima (2000) conforme a seguir, (Ver apêndice B)

$$C_0(x) = ft_0 \quad (3.18.1)$$

$$C_\lambda(x) = ft_1 \quad (3.19.1)$$

3.2.1.1.2 Segundo caso

No caso 2, atendemos as considerações feitas no Caso 1. Contudo agora se leva em conta a ocorrência de uma reação constante, cuja taxa de decaimento é $\gamma_1(x) = \gamma_{10}$, com taxa de produção de ordem zero $\gamma_0(x) = \gamma_{00}$. Na entrada, considera-se a concentração variando com o tempo $f(t) = ft_0 + ft_1 e^{-\lambda t}$. Com isso a Equação (3.15) assume a forma:

$$d_0 \frac{d^2 C_0(x)}{dx^2} - \frac{dC_0(x)}{dx} - \gamma_{10} C_0(x) = -\gamma_{00}, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.20)$$

$$C_0(0) - d_0 \frac{dC_0(0)}{dx} = ft_0, \quad (3.20.a)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = 0, \quad (3.20.b)$$

A solução da Equação (3.20) é dada por Bronson e Costa (2008), conforme a seguir, (Ver apêndice B)

$$C_0(x) = \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} + 2 \left(ft_0 - \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} \right) \frac{\left\{ 2d_0 \Phi \cosh[\Phi(1-x)] + \sinh[\Phi(1-x)] \right\} e^{\frac{x}{2d_0}}}{\left\{ (1 + (2d_0 \Phi)^2) \sinh(\Phi) + 4d_0 \Phi \cosh(\Phi) \right\}} \quad (3.20.1)$$

em que

$$\Phi = \frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} \text{ e } \Delta = 1 + 4d_0 \gamma_{10} > 0$$

Do mesmo modo, a Equação (3.16), reduz-se a:

$$d_0 \frac{d^2 C_\lambda(x)}{dx^2} - \frac{dC_\lambda(x)}{dx} - (\gamma_{10} - \lambda) C_\lambda(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.21)$$

$$C_\lambda(0) - d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.21.a)$$

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.21.b)$$

que tem como solução geral

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{(1 + \sqrt{1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda)})}{2d_0} x} + B_2 e^{\frac{(1 - \sqrt{1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda)})}{2d_0} x} \quad (3.21.1)$$

A Eq.(3.21.1) pode ter três soluções que dependem do valor de $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda)$, atendendo a três condições de existência. Segundo Bronson e Costa (2008),

1- Quando $\Delta < 0$:

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{x}{2d_0}} \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} x\right) + B_2 e^{\frac{x}{2d_0}} \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} x\right) \quad (3.21.2)$$

2- Quando $\Delta = 0$:

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{x}{2d_0}} + B_2 x e^{\frac{x}{2d_0}} \quad (3.21.3)$$

3- Quando $\Delta > 0$:

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{x}{2d_0}} \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) + B_2 e^{\frac{x}{2d_0}} \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) \quad (3.21.4)$$

A solução da Equação (3.21) para as três situações é dada conforme a seguir (a descrição detalhada da solução está contida no Apêndice B)

1-Para $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda) < 0$

$$C_\lambda(x) = \frac{2ft_1 \{2d_0\Omega \cos[\Omega(1-x)] + \sin[\Omega(1-x)]\} e^{\frac{x}{2d_0}}}{\left\{ \left[1 - (2d_0\Omega)^2 \right] \sin(\Omega) + 4d_0\Omega \cos(\Omega) \right\}}, \quad \Omega = \frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} \quad (3.21.1.1)$$

2-Para $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda) = 0$

$$C_\lambda(x) = \frac{2ft_1}{4d_0 + 1} \left[(2d_0 + 1)e^{\frac{1}{2d_0}x} - x e^{\frac{1}{2d_0}x} \right] \quad (3.21.1.2)$$

3-Para $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda) > 0$

$$C_\lambda(x) = \frac{2ft_1 \{2d_0\varpi \cosh[(1-x)] + \sinh[\varpi(1-x)]\} e^{\frac{x}{2d_0}}}{\left\{ \left[1 + (2d_0\varpi)^2 \right] \sinh(\varpi) + 4d_0\varpi \cosh(\varpi) \right\}}, \quad \varpi = \frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} \quad (3.21.1.3)$$

3.2.1.1.3 Terceiro caso

O terceiro caso consiste em considerar que todos os coeficientes variem em função da profundidade do soluto num solo heterogêneo num meio finito e para tal serão adotados: velocidade linear $v(x) = v_0 - v_1 x$, concentração na entrada variando com o tempo de forma

exponencial, $f(t) = ft_0 + ft_1 e^{-\lambda t}$, em que $\lambda \neq 0$; fator de retardamento, $R(x) = r_0 + r_1 x$, termo de decaimento de primeira ordem linear, $\gamma_1(x) = \gamma_{10} + \gamma_{11} x$, termo de produção de ordem zero, $\gamma_0(x) = \gamma_{00} + \gamma_{01} x$ e ausência de concentração inicial, $C(x,0) = 0$. Deste modo, as equações (3.15) e (3.16) permanecem dadas na sua forma original:

1-problema auxiliar para $C_0(x)$:

$$\frac{d}{dx} \left(D(x) \frac{dC_0(x)}{dx} \right) - v(x) \frac{dC_0(x)}{dx} - \gamma_1(x) C_0(x) = -\gamma_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.22)$$

$$C_0(0) - D(0) \frac{dC_0(0)}{dx} = ft_0, \quad (3.22.a)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = 0, \quad (3.22.b)$$

2-problema auxiliar para $C_\lambda(x)$:

$$\frac{d}{dx} \left(D(x) \frac{dC_\lambda(x)}{dx} \right) - v(x) \frac{dC_\lambda(x)}{dx} - [\gamma_1(x) - \lambda R(x)] C_\lambda(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.23)$$

$$C_\lambda(0) - D(0) \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.23.a)$$

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.23.b)$$

Quanto aos coeficientes de dispersão efetivo serão considerados três situações-problema em que o coeficiente de dispersão possa ser considerado: linear, parabólico ou exponencial, de acordo com a Tabela 3 abaixo.

Tabela 3 – Modelos de coeficientes de dispersão heterogêneos (Adimensionais)

Caso 3	$D_L(x) = d_0 + d_1 x$	Linear
Caso 3.1	$D_P(x) = d_0 + \alpha x^2$	Parabólica,
Caso 3.2	$D_E(x) = d_0 + \beta(1 - e^{-x})$	Exponencial

As Equações (3.22)-(3.23) são classificadas como EDOs de segunda ordem lineares, não-homogêneas e com coeficientes variáveis. Este tipo de problema não possui solução puramente analítica, por este motivo suas soluções serão obtidas de maneira aproximada, utilizando a subrotina DBVFPD, contida na biblioteca IMSL (1994).

3.2.1.2 Solução da EDP homogênea

Para a solução do problema homogêneo, Eq.(3.17), será adotada a Técnica da Transformada Integral Generalizada, conforme anteriormente descrita. Por conta do formalismo próprio da técnica, para a solução da EDP será tomado um problema de autovalor simplificado, baseado no termo advectivo da EDP. A solução deste problema de autovalor é puramente analítica, contudo do processo de transformação integral resultará numa matriz de coeficientes para o potencial transformado do sistema de EDOs variando no tempo, que deverá ser calculado através da subrotina DIVPAG da biblioteca IMSL (1994), necessitando da inversão dessa matriz de coeficientes na solução do problema rígido, para o qual será utilizado o método de Gear, (GEAR, 1969).

O sistema de EDO resultante da transformação terá sua condição inicial dependente das funções $C_0(x)$ e $C_\lambda(x)$, conforme discutidas na Seção (3.2.2.1).

Adotaremos da Equação (3.17) a escolha de um problema de autovalor simplificado, através da aplicação do método de separação de variáveis (COTTA, 1993), prescrito pelo formalismo próprio da técnica, conforme a seguir:

$$\frac{d^2\psi_i(x)}{dx^2} + \mu_i^2\psi_i(x) = 0, \quad (3.24)$$

$$\psi_i(0) - d_0 \frac{d\psi_i(0)}{dx} = 0, \quad (3.24.a)$$

$$\frac{d\psi_i(1)}{dx} = 0, \quad (3.24.b)$$

A solução do problema de autovalor (3.24) é dada por Cotta (1993) conforme a seguir

$$\psi_i(x) = \cos[\mu_i(1-x)], \quad (3.25)$$

em que os autovalores μ_i correspondentes as autofunções $\psi_i(x)$ são calculados através da equação transcendental (3.26), que de maneira geral serão obtidos pelo método da contagem de sinal, pois desta forma a solução possibilitará maior flexibilidade para o problema de autovalor.

$$\mu_i \sin(\mu_i) = \frac{\cos(\mu_i)}{d_0}, \quad i = 1, 2, 3, \dots \quad (3.26)$$

Pela propriedade de ortogonalidade da Equação (3.25), temos que

$$\int_0^1 \psi_i(x)\psi_j(x)dx = \begin{cases} 0, & i \neq j \\ N_i, & i = j \end{cases}, \quad i = 1, 2, 3, \dots, \quad (3.27)$$

em que N_i é a norma da autofunção, dada como adiante

$$N_i = \int_0^1 \psi_i^2(x)dx = \int_0^1 \cos^2 [\mu_i(1-x)]dx = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{d_0}{d_0^2 \mu_i^2 + 1} \right), \quad (3.28)$$

Para a solução do problema homogêneo resultante da separação, propomos o seguinte par transformada-inversa:

$$\bar{C}_i(t) = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x)C_h(x,t)dx, \quad \text{Transformada} \quad (3.29)$$

$$C_h(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(x)\bar{C}_i(t) \quad \text{Inversa} \quad (3.30)$$

em que $\tilde{\psi}_i(x)$ é a autofunção normalizada, dada conforme a seguir

$$\tilde{\psi}_i(x) = \frac{\psi_i(x)}{\sqrt{N_i}} \quad (3.31)$$

Aplicando o operador $\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x)dx$ sobre a EDP, Eq.(3.17) e sua condição inicial, Eq. (3.17.a).

$$\underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \left(R(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial t} \right) dx}_{T_1} = \underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} \right) dx}_{T_2} - \underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) v(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} dx}_{T_3} - \underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \gamma_1(x) C_h(x,t) dx}_{T_4}, \quad (3.32)$$

$$\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) C_h(x,0) dx = - \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) [C_0(x) + C_2(x)] dx = \bar{f}_i \quad (3.32.b)$$

A solução de cada integral acima é dada conforme a seguir:

$$T_1 = \sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt}$$

$$T_2 = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \left[\frac{d^2 \tilde{\psi}_i}{dx^2} \tilde{\psi}_j(x) D(x) + \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j(x) \frac{dD(x)}{dx} \right] dx \bar{C}_j(t),$$

$$T_3 + T_4 = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) v(x) \sum_{j=1}^{\infty} \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} \bar{C}_j(t) dx + \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \gamma_1(x) \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\psi}_j(x) \bar{C}_j(t) dx,$$

Deste modo, o resultado da transformação é o seguinte sistema infinito de equações diferenciais e sua condição inicial transformada (ver Apêndice A),

$$\sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt} = \sum_{j=1}^{\infty} B_{ij} \bar{C}_j(t), \quad (3.33)$$

$$\bar{C}_j(0) = \bar{f}_j \quad (3.33.a)$$

em que:

$$A_{ij} = \int_0^1 R(x) \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx \quad (3.33.1)$$

$$B_{ij} = -\mu_i^2 \int_0^1 D(x) \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx + \int_0^1 \frac{dD(x)}{dx} \tilde{\psi}_j \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} dx - \int_0^1 \left[v(x) \tilde{\psi}_i \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} + \gamma_1(x) \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j \right] dx \quad (3.33.2)$$

$$\bar{f}_j = - \int_0^1 \tilde{\psi}_j(x) [C_0(x) + C_\lambda(x)] dx \quad (3.33.3)$$

Para o cálculo do potencial transformado $\bar{C}_j(t)$ é necessária a obtenção dos coeficientes A_{ij} e B_{ij} , que podem ser obtidos facilmente utilizando os recursos de integração do Wolfram Mathematica (WOLFRAM, 1991), evitando assim um esforço monótono que é típico deste tipo de manipulação. Abaixo será exposta a solução para o caso generalizado dos coeficientes A_{ij} e B_{ij} , que poderão ser estendidos a todos os casos.

$$A_{ij} = r_0 \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx + r_1 \int_0^1 x \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx$$

Conforme dito anteriormente, a integral acima poder ser obtida analiticamente através do Wolfram Mathematica e expressa na forma:

$$A_{ij} = r_0 A1_{ij} + r_1 A2_{ij} \quad (3.34)$$

em que:

$$A1_{ij} = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx \quad (3.34.1)$$

$$A2_{ij} = \int_0^1 x \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx \quad (3.34.2)$$

Para calcular B_{ij} , teremos de levar em conta as três formas de dispersão, por este motivo serão considerados:

1- Para a dispersão linear:

$$D_L(x) = d_0 + d_1x \quad \therefore \quad \frac{dD_L(x)}{dx} = d_1 \quad (3.35.a-b)$$

Substituindo as equações (3.35.a) e (3.35.b) na equação (3.33.2) teremos

$$B_{ij} = -d_0\mu_i^2 \int_0^1 \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx - d_1 \left(\mu_i^2 \int_0^1 x \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx - \int_0^1 \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j dx \right) - v_0 \int_0^1 \tilde{\psi}_i \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} dx + \\ v_1 \int_0^1 x \tilde{\psi}_i \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} dx - \gamma_{10} \int_0^1 \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx - \gamma_{11} \int_0^1 x \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx$$

$$B_{ij} = -d_0 B1_{ij} - d_1 (B2_{ij} - B3_{ij}) - v_0 B4_{ij} + v_1 B5_{ij} - \gamma_{10} B6_{ij} - \gamma_{11} B7_{ij} \quad (3.35)$$

em que:

$$B1_{ij} = \mu_i^2 A1_{ij} \quad (3.35.1)$$

$$B2_{ij} = \mu_i^2 A2_{ij} \quad (3.35.2)$$

$$B3_{ij} = \int_0^1 \tilde{\psi}_j(x) \frac{d\tilde{\psi}_i(x)}{dx} dx \quad (3.35.3)$$

$$B4_{ij} = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \frac{d\tilde{\psi}_j(x)}{dx} dx \quad (3.35.4)$$

$$B5_{ij} = \int_0^1 x \tilde{\psi}_i(x) \frac{d\tilde{\psi}_j(x)}{dx} dx \quad (3.35.5)$$

$$B6_{ij} = A1_{ij} \quad (3.35.6)$$

$$B7_{ij} = A2_{ij} \quad (3.35.7)$$

Nota-se que para o cálculo dos coeficientes B_{ij} , compreendendo os casos 3.1 e 3.2 seguintes, apenas os coeficientes $B2_{ij}$ e $B3_{ij}$ sofrerão modificações dependendo do modelo adotado:

2- Para uma dispersão parabólica:

$$D_p(x) = d_0 + \alpha x^2 \quad \therefore \quad \frac{dD_p(x)}{dx} = 2\alpha x \quad (3.36.a-b)$$

Da mesma forma podemos aplicar as equações (3.36.a) e (3.36.b) na equação (3.33.2), que resulta em:

$$B_{ij} = -d_0 B1_{ij} - \alpha \left(\mu_i^2 \int_0^1 x^2 \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx + 2 \int_0^1 x \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j dx \right) - v_0 B4_{ij} + v_1 B5_{ij} - \gamma_{10} B6_{ij} - \gamma_{11} B7_{ij}$$

$$B_{ij} = -d_0 B1_{ij} - \alpha (B2_{ij}^* - 2B3_{ij}^*) - v_0 B4_{ij} + v_1 B5_{ij} - \gamma_{10} B6_{ij} - \gamma_{11} B7_{ij} \quad (3.36)$$

em que:

$$B2_{ij}^* = \mu_i^2 \int_0^1 x^2 \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx \quad (3.36.1)$$

$$B3_{ij}^* = \int_0^1 x \frac{d\tilde{\psi}_i(x)}{dx} \tilde{\psi}_j(x) dx \quad (3.36.2)$$

3- Para uma dispersão exponencial:

$$D_E(x) = d_0 + \beta(1 - e^{-x}) \quad \therefore \quad \frac{dD_E(x)}{dx} = \beta e^{-x} \quad (3.37.a-b)$$

Finalmente, aplicando as equações (3.37.a) e (3.37.b) na equação (3.33.2), resultando em:

$$B_{ij} = -(\beta + d_0) B1_{ij} + \beta \left(\mu_i^2 \int_0^1 e^{-x} \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx + \int_0^1 e^{-x} \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j dx \right) - v_0 B4_{ij} + v_1 B5_{ij} - \gamma_{10} B6_{ij} - \gamma_{11} B7_{ij}$$

$$B_{ij} = -(\beta + d_0) B1_{ij} + \beta (B2_{ij}^\circ + B3_{ij}^\circ) - v_0 B4_{ij} + v_1 B5_{ij} - \gamma_{10} B6_{ij} - \gamma_{11} B7_{ij} \quad (3.37)$$

$$B2_{ij}^\circ = \mu_i^2 \int_0^1 e^{-x} \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j dx \quad (3.37.1)$$

$$B3_{ij}^\circ = \int_0^1 e^{-x} \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j dx \quad (3.37.2)$$

Por não se ter solução analítica disponível para todos os casos, a condição inicial transformada \bar{f}_i será obtida analiticamente apenas para o Caso 1e numericamente, utilizando as subrotinas DQDAGS e DCSINT da biblioteca IMSL (1994), para os casos 2 e 3 respectivamente.

Diante do exposto, fazendo uso da fórmula de inversão (3.19), fica então definida a solução geral da equação de advecção-dispersão de soluto em meios porosos heterogêneos, com sorção de equilíbrio linear, decaimento e compreendendo três modelos de dispersividade, em função da concentração transformada para cada autovalor μ_i .

$$C(x,t) = C_0(x) + C_\lambda(x) e^{-\lambda t} + \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_i(x) \bar{C}_i(t) \quad (3.38)$$

3.2.2 Solução numérica

No intuito de testar as soluções semi-analíticas, será agora discorrida a sua solução numérica através do método das linhas, conforme descrito por Schiesser e Griffiths (2008) e Hamdi (2009).

3.2.2.1 Equação governante

Para proceder com a solução numérica do problema da EAD tomamos a equação geral (3.12) na sua forma estendida

$$R(x)\frac{\partial C}{\partial t} = D(x)\frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D'(x)\frac{\partial C}{\partial x} - v(x)\frac{\partial C}{\partial x} - \gamma_1(x)C + \gamma_0(x), \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0 \quad (3.39)$$

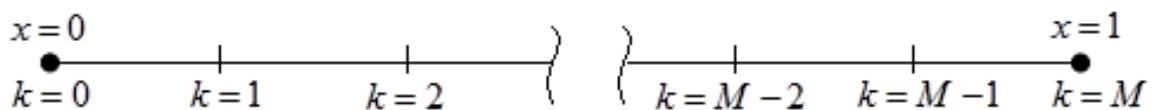
$$C(x,0) = 0 \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.39.a)$$

$$C(0,t) - D(0)\frac{\partial C(0,t)}{\partial x} = f(t), \quad t > 0 \quad (3.39.b)$$

$$\frac{\partial C(L,t)}{\partial x} = 0, \quad t > 0 \quad (3.39.c)$$

Para a discretização das variações espaciais será utilizado o Método das Diferenças Finitas (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995).

3.2.2.2 Discretização das derivadas espaciais



Sendo:

M o número de intervalos

$M + 1$ os pontos nodais

$$\Delta x = x_{k+1} - x_k, \quad k = 0, 1, 2, \dots, M \quad (3.40.a)$$

Como o processo de difusão independe da velocidade e da direção do fluxo, para a discretização dos termos difusivos será utilizado o esquema de diferenças centrais apresentados conforme adiante:

1 – Termo difusivo de segunda ordem

$$D(x) \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} = D(x) \frac{C_{k-1} - 2C_k + C_{k+1}}{\Delta x^2} \quad (3.40.1)$$

2 – Termo difusivo de primeira ordem

$$D'(x) \frac{\partial C}{\partial x} = D'(x) \frac{C_{k+1} - C_{k-1}}{2\Delta x} \quad (3.40.2)$$

Uma das importantes insuficiências do esquema de diferenças centrais é sua incapacidade em identificar a direção de fluxo (VERSTEEG e MALALASEKERA, 1995). Para isso a discretização do termo convectivo será feita utilizando o esquema de discretização *upwind* de primeira ordem. Este esquema faz com que o valor da função na região em questão seja igual ao valor da função na região a montante desta, igualando os valores no interior das células aos valores obtidos nas suas faces. Nesta metodologia, o valor na face é obtido a partir das quantidades armazenadas nos volumes de controle a montante relativamente a direção normal da velocidade $v(x)$ na equação (3.39). O esquema *upwind* busca evitar o aparecimento de coeficientes negativos ocorrentes do esquema de diferenças centrais e é calculado conforme abaixo.

$$v(x) \frac{\partial C}{\partial x} = v(x) \frac{C_k - C_{k-1}}{\Delta x} \quad (3.40.3)$$

Portanto, para os pontos nodais internos ($1 \leq k \leq M-1$) temos que:

$$\begin{aligned} \frac{dC_k}{dt} = & \frac{D(x_k)}{R(x_k)} \left[\frac{C_{k-1} - 2C_k + C_{k+1}}{\Delta x^2} \right] + \frac{D'(x_k)}{R(x_k)} \left[\frac{C_{k+1} - C_{k-1}}{2\Delta x} \right] - \\ & \frac{v(x_k)}{R(x_k)} \left[\frac{C_k - C_{k-1}}{\Delta x} \right] - \frac{\gamma_1(x_k)}{R(x_k)} C_k + \frac{\gamma_0(x_k)}{R(x_k)} \end{aligned} \quad (3.41)$$

$$C_k(0) = 0 \quad (3.41.a)$$

Para o cálculo das variações no ponto x_0 , será aplicada diferença progressiva com três pontos:

$$C_0 + D(x_0) \frac{3C_0 - 4C_1 + C_2}{2\Delta x} = f(t) \quad \rightarrow \quad C_0 = \frac{2f(t)\Delta x + D(x_0)(4C_1 - C_2)}{2\Delta x + 3D(x_0)} \quad (3.42.1)$$

e no ponto x_M , será aplicada diferença regressiva com três pontos, portanto:

$$\frac{3C_M - 4C_{M-1} + C_{M-2}}{2\Delta x} = 0 \quad \rightarrow \quad C_M = \frac{4C_{M-1} - C_{M-2}}{3} \quad (3.42.2)$$

Para obtenção das concentrações nos pontos nodais é necessária a solução do sistema de equações diferenciais ordinárias variando no tempo, em $x_1 \leq x_k \leq x_{M-1}$, descrito pela Equação (3.41), que será resolvido utilizando a DIVPAG da biblioteca IMSL.

CAPÍTULO 4

4 RESULTADOS E DISCUSSÃO

Agora serão mostrados os resultados obtidos nesta dissertação aplicados a cinco problemas-exemplo. Para isto serão utilizados os valores dos coeficientes de retardamento, coeficientes de dispersão, velocidade, concentração na entrada e concentração inicial, conforme adotados por Brenner (1962) e Liu et al. (2000), para o primeiro e terceiro caso. Quanto ao Caso 2, serão utilizados valores segundo especificados na literatura por van Genuchten e Alves (1982).

O primeiro caso descreve a variação da concentração em meios porosos homogêneos, com concentração inicial zero, ou seja, $C^*(x^*, 0) = 0$, condição de entrada constante, $f^*(t^*) = C_a + C_b = C_0$, neste caso será adotado $C_a = 0,4$ e $C_b = 0,6$; sem nenhuma reação, ou $\gamma_1^*(x^*) = \gamma_0^*(x^*) = 0$, em um comprimento médio $L = 30$ cm. Os parâmetros a serem utilizados neste exemplo são: $R^*(x^*) = r_0^* = 4,25$, velocidade $v^*(x^*) = v_0^* = 10$ cm/d, coeficiente de dispersão igual a difusão $D^*(x^*) = d_0^* = 4$ cm²/d.

O segundo caso estudado simula a variação da concentração em um meio poroso homogêneo, onde ocorre uma reação especificada pelo termo fonte $\gamma^*(C^*) = (0,5 - 0,25C^*)$ d⁻¹; sem concentração inicial, $F^*(x^*) = 0$, e condição de entrada variando exponencialmente em função do tempo, $f^*(t^*) = C_a + C_b e^{-0,25t^*}$, em que $C_a = 4$ e $C_b = 6$, ocorrendo num domínio de comprimento médio $L = 100$ cm. Os parâmetros utilizados são: Fator de retardamento $R^*(x^*) = r_0^* = 3$, velocidade $v^*(x^*) = v_0^* = 25$ cm/d e com coeficiente de dispersão efetivo, $D^*(x^*) = d_0^* = 37,5$ cm²/d, (VAN GENUCHTEN e ALVES, 1982).

Para o terceiro caso será considerada a variação da concentração numa única camada, sem concentração inicial $C^*(x^*, 0) = 0$, condição de entrada variando exponencialmente com o tempo, $f^*(t^*) = C_a + C_b e^{-t^*}$, com $C_a = 0,4$ e $C_b = 0,6$. O termo de reação variando com a profundidade $\gamma^*(C^*, x^*) = [0,01 + 0,001x^* - (0,1 + 0,01x^*)C^*]$ d⁻¹; fator de retardamento $R^*(x^*) = 2,4 + 0,04x^*$; velocidade do fluxo $v^*(x^*) = 14 - 0,2x^*$ cm/d e coeficiente de dispersão efetiva com difusão molecular constante e dispersão hidrodinâmica variável $D^*(x^*)$:

- Caso 3: $D_L^*(x^*) = 10 + 0,1x^* \text{ cm}^2/\text{d}$;
- Caso 3.1: $D_p^*(x^*) = 10 + 0,01x^{*2} \text{ e}$
- Caso 3.2: $D_E^*(x^*) = 10 + 0,001(1 - e^{-x^*})$,

num comprimento médio $L=20$ cm. Para maior entendimento, a seguir será disposta uma tabela contendo os parâmetros de entrada adimensionais dos cinco casos discutidos nesta dissertação.

Tabela 4 – Parâmetros de entrada (Adimensionais).

Parâmetro	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 3.1	Caso 3.2
r_0	1	1	1	1	1
r_1	0	0	0,3333	0,3333	0,3333
d_0	$1,3 \cdot 10^{-2}$	$1,5 \cdot 10^{-2}$	$3,57 \cdot 10^{-2}$	-	-
d_1	0	0	d_1^* / v_0^*	-	-
α	-	-	-	$\alpha^* L / v_0^*$	-
β	-	-	-	-	$\beta^* / (v_0^* L)$
v_0	1	1	1	1	1
v_1	0	0	0,2857	0,2857	0,2857
γ_{10}	0	1	0,1428	0,1428	0,1428
γ_{11}	0	0	0,2857	0,2857	0,2857
γ_{00}	0	0,2	0,01428	0,01428	0,01428
γ_{01}	0	0	0,02857	0,02857	0,02857
ft_0	0,4	4	0,4	0,4	0,4
ft_1	0,6	6	0,6	0,6	0,6
λ	0	3	3,4286	3,4286	3,4286
$F_0 = F_1$	0	0	0	0	0
L [cm]	30	100	20	20	20

Quanto à convergência da série, os trabalhos existentes na literatura apontam um valor em torno de 30 termos através das abordagens de Liu et al. (2000) e van Genuchten e Alves (1982). As Tabelas de 5 a 9 e as Figuras (5) a (7) seguintes apresentam as análises de convergência, dos cinco problemas-exemplo e do caso proposto por Liu et al. (2000), discutidos nesta dissertação.

Tabela 5 – Análise de convergência do Caso 1-L=30 cm:

Caso 1									
		C(x,t)				C(x,t)		C(x,t)	
NT	t* [dias]	x=0.35	x=0.95	t* [dias]	x=0.35	x=0.65	t* [dias]	x=0.65	x=0.95
10	2	-0,00080653	-0,00097097	6	0,85874	0,0546443	10	0,826682	0,116824
20	2	0,00113351	-0,00000152	6	0,864914	0,0517546	10	0,827231	0,121081
30	2	0,00108883	-0,00000029	6	0,865696	0,0512767	10	0,827475	0,121639
40	2	0,00107028	-0,00000032	6	0,865904	0,0511412	10	0,827778	0,120947
50	2	0,00106378	0,00000009	6	0,865982	0,0510895	10	0,82784	0,12073
60	2	0,00106062	0,00000015	6	0,866017	0,0510658	10	0,827831	0,120819
70	2	0,00105838	0,00000000	6	0,866035	0,0510535	10	0,827838	0,120858
80	2	0,00105695	-0,00000004	6	0,866045	0,0510465	10	0,827852	0,120821
90	2	0,00105626	0,00000001	6	0,866051	0,0510422	10	0,827857	0,1208
DIFERENÇA Ci - Ci-1									
10	2	0,0E+00	0,0E+00	6	0,0E+00	0,0E+00	10	0,0E+00	0,0E+00
20	2	1,9E-03	9,7E-04	6	6,2E-03	2,9E-03	10	5,5E-04	4,3E-03
30	2	4,5E-05	1,2E-06	6	7,8E-04	4,8E-04	10	2,4E-04	5,6E-04
40	2	1,9E-05	3,6E-08	6	2,1E-04	1,4E-04	10	3,0E-04	6,9E-04
50	2	6,5E-06	4,1E-07	6	7,8E-05	5,2E-05	10	6,2E-05	2,2E-04
60	2	3,2E-06	5,9E-08	6	3,5E-05	2,4E-05	10	9,0E-06	8,9E-05
70	2	2,2E-06	1,5E-07	6	1,8E-05	1,2E-05	10	7,0E-06	3,9E-05
80	2	1,4E-06	4,5E-08	6	1,0E-05	7,0E-06	10	1,4E-05	3,7E-05
90	2	6,9E-07	5,2E-08	6	6,0E-06	4,3E-06	10	5,0E-06	2,1E-05

Tabela 6 – Análise de convergência do Caso 2-L=100 cm:

Caso 2									
		C(x,t)				C(x,t)		C(x,t)	
NT	t* [dias]	x=0.15	x=0.95	t* [dias]	x=0.65	x=0.95	t* [dias]	x=0.75	x=0.95
10	2.5	0,614111	0,048092	7.5	0,3188	0,084491	12.5	0,411304	0,346515
20	2.5	0,626421	0,064835	7.5	0,305607	0,096756	12.5	0,404569	0,346986
30	2.5	0,625792	0,065013	7.5	0,304365	0,097991	12.5	0,403563	0,346912
40	2.5	0,625174	0,064436	7.5	0,304378	0,097347	12.5	0,403209	0,346324
50	2.5	0,624993	0,064243	7.5	0,304338	0,097158	12.5	0,403132	0,346162
60	2.5	0,62502	0,064253	7.5	0,304289	0,097269	12.5	0,403138	0,346225
DIFERENÇA Ci - Ci-1									
NT	t* [dias]	C(x,t)	C(x,t)	t* [dias]	C(x,t)	C(x,t)	t* [dias]	C(x,t)	C(x,t)
10	2.5	0,0E+00	0,0E+00	7.5	0,0E+00	0,0E+00	12.5	0,0E+00	0,0E+00
20	2.5	1,2E-02	1,7E-02	7.5	1,3E-02	1,2E-02	12.5	6,7E-03	4,7E-04
30	2.5	6,3E-04	1,8E-04	7.5	1,2E-03	1,2E-03	12.5	1,0E-03	7,4E-05
40	2.5	6,2E-04	5,8E-04	7.5	1,3E-05	6,4E-04	12.5	3,5E-04	5,9E-04
50	2.5	1,8E-04	1,9E-04	7.5	4,0E-05	1,9E-04	12.5	7,7E-05	1,6E-04
60	2.5	2,7E-05	1,0E-05	7.5	4,9E-05	1,1E-04	12.5	6,0E-06	6,3E-05

Tabela 7 – Análise de convergência-Liu et al. (2000):

Esta solução x Liu et al. (2000)					
L=20 cm		C(x,t)		DIFERENÇA Ci - Ci-1	
NT	t*[dias]	x=0.2	x=0.95	x=0.2	x=0.95
10	2	0,988038	-0,512528	0,00E+00	0,00E+00
20	2	0,582227	-0,034536	4,06E-01	4,78E-01
30	2	0,561288	0,0171062	2,09E-02	5,16E-02
40	2	0,558102	0,015047	3,19E-03	2,06E-03
50	2	0,557241	0,0138032	8,61E-04	1,24E-03
60	2	0,556889	0,0153051	3,52E-04	1,50E-03
70	2	0,556727	0,0157942	1,62E-04	4,89E-04
80	2	0,556707	0,0150834	2,00E-05	7,11E-04
90	2	0,556778	0,0144862	7,10E-05	5,97E-04

Dispersão efetiva linear, $D^*(x) = 10 - 0,1x$.

De acordo com a Tabela 5 acima, e a Fig. (5) abaixo, as soluções conforme apresentadas, convergiram para o primeiro caso em torno de 30 termos. Foram necessários NT= 40 para se alcançar a convergência do Caso 2 e do caso proposto por Liu et al. (2000), NT= 50, na entrada e NT= 70 na fronteira, adotando um critério de 10^{-4} , Tabelas 6 e 7.

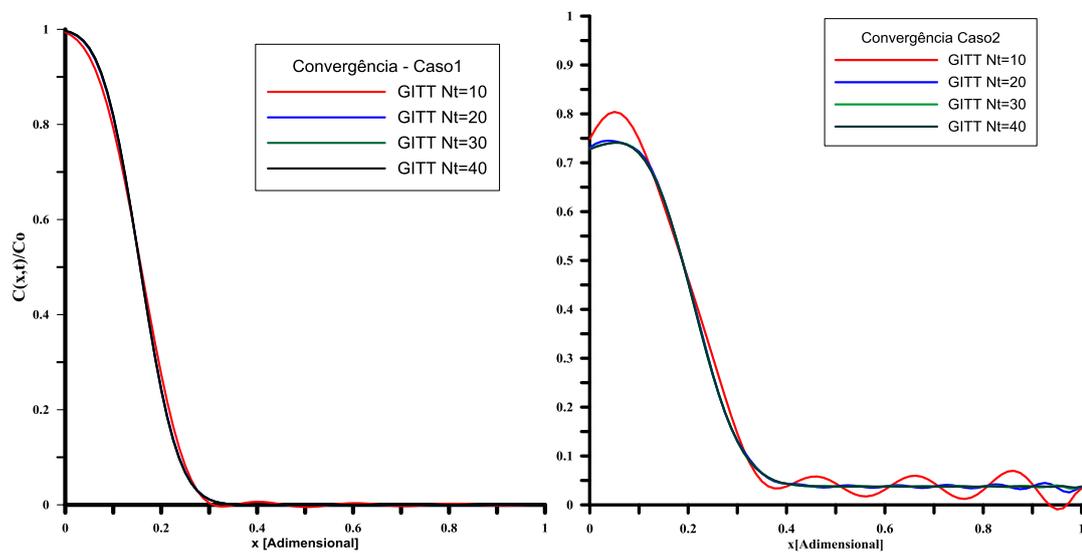


Figura 5 - Análise de convergência dos Casos 1 e 2.

Tabela 8 – Análise de convergência dos Casos 3; 3.1 e 3.2 - L=20 cm:

L=20 cm	Caso 3		Caso 3.1		Caso 3.2	
t*=2 dias	C(x,t)	C(x,t)	C(x,t)	C(x,t)	C(x,t)	C(x,t)
NT	x=0.35	x=0.95	x=0.35	x=0.95	x=0.35	x=0.95
10	0,8790390	-0,5803180	0,9005740	-0,5862830	0,8412560	-0,5024510
20	0,5485120	-0,0425965	0,5506120	-0,0430604	0,5519930	-0,0347034
30	0,5335350	0,0150676	0,5353590	0,0145239	0,5384130	0,0154064
40	0,5297000	0,0158675	0,5314160	0,0160179	0,5349540	0,0150477
50	0,5281400	0,0153807	0,5297260	0,0156928	0,5336080	0,0143428
60	0,5273690	0,0163682	0,5287940	0,0162547	0,5330220	0,0155138
70	0,5269620	0,0157638	0,5282700	0,0148599	0,5327460	0,0155283
80	0,5270570	0,0138131	0,5283900	0,0120224	0,5328290	0,0144045
90	0,5276060	0,0122203	0,5290850	0,0097383	0,5332360	0,0134738
100	0,5281760	0,0115788	0,5297940	0,0087290	0,5336580	0,0131713
110	0,5284920	0,0114233	0,5301820	0,0084477	0,5338950	0,0131269
120	0,5285930	0,0113614	0,5303030	0,0083691	0,5339710	0,0130832
130	0,5286050	0,0113560	0,5303160	0,0083713	0,5339800	0,0130720
140		0,0114107	0,5303170	0,0084294	0,5339840	0,0131185
150		0,0114777	0,5303710	0,0084984		0,0131746
160		0,0140806		0,0123875		0,0145835
170		0,0167212		0,0161812		0,0161024
180		0,0167938		0,0162479		0,0161601
190		0,0168303		0,0162852		0,0161886
200	0,5283770	0,0168437	0,5300860	0,0163009	0,5337540	0,0161970
10	0,0E+00	0,0E+00	0,0E+00	0,0E+00	0,0E+00	0,0E+00
20	3,3E-01	5,4E-01	3,5E-01	5,4E-01	2,9E-01	4,7E-01
30	1,5E-02	5,8E-02	1,5E-02	5,8E-02	1,4E-02	5,0E-02
40	3,8E-03	8,0E-04	3,9E-03	1,5E-03	3,5E-03	3,6E-04
50	1,6E-03	4,9E-04	1,7E-03	3,3E-04	1,3E-03	7,0E-04
60	7,7E-04	9,9E-04	9,3E-04	5,6E-04	5,9E-04	1,2E-03
70	4,1E-04	6,0E-04	5,2E-04	1,4E-03	2,8E-04	1,5E-05
80	9,5E-05	2,0E-03	1,2E-04	2,8E-03	8,3E-05	1,1E-03
90	5,5E-04	1,6E-03	7,0E-04	2,3E-03	4,1E-04	9,3E-04
100	5,7E-04	6,4E-04	7,1E-04	1,0E-03	4,2E-04	3,0E-04
110	3,2E-04	1,6E-04	3,9E-04	2,8E-04	2,4E-04	4,4E-05
120	1,0E-04	6,2E-05	1,2E-04	7,9E-05	7,6E-05	4,4E-05
130	1,2E-05	5,4E-06	1,3E-05	2,1E-06	9,0E-06	1,1E-05
140		5,5E-05	1,0E-06	5,8E-05	4,0E-06	4,6E-05
150		6,7E-05	5,4E-05	6,9E-05	5,3E-01	5,6E-05
160		2,6E-03		3,9E-03	0,0E+00	1,4E-03
170		2,6E-03		3,8E-03	0,0E+00	1,5E-03
180		7,3E-05		6,7E-05	0,0E+00	5,8E-05
190		3,6E-05		3,7E-05	0,0E+00	2,9E-05
200		1,3E-05		1,6E-05	5,3E-01	8,4E-06

A Tabela 8 mostra a análise de convergência dos Casos 3, 3.1 e 3.2. Estes exigiram maior número de termos para atingir uma convergência satisfatória, estando numa faixa entre $NT=60$, na entrada, para o Caso 3 e $NT=170$ na saída, Caso 3.2, conforme mostra as Figuras (6) e (7).

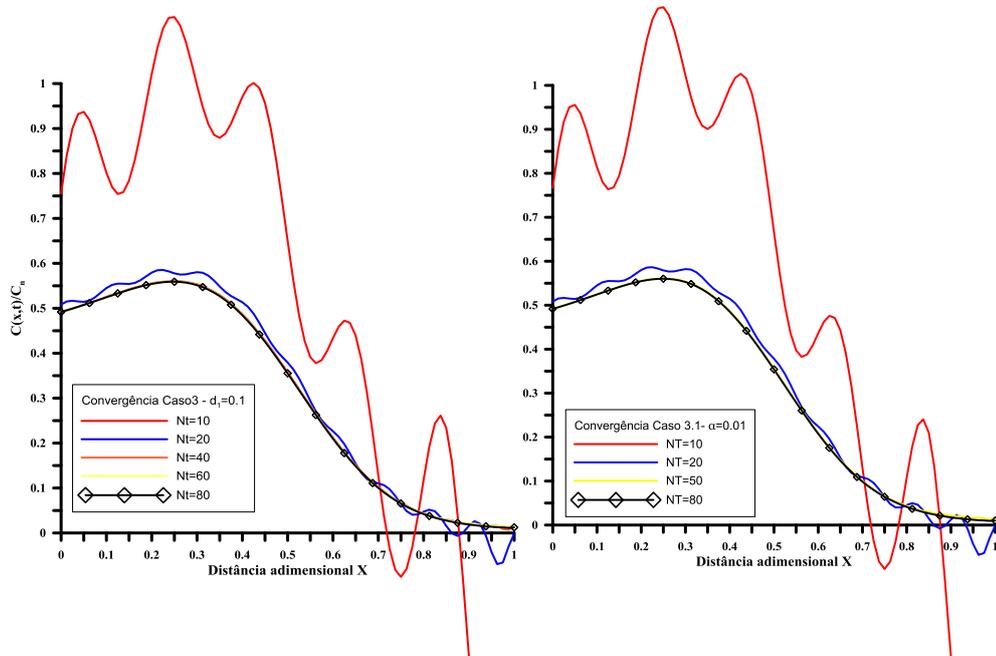


Figura 6 - Análise de convergência dos Casos 3 e 3.1 para $L=20$ cm.

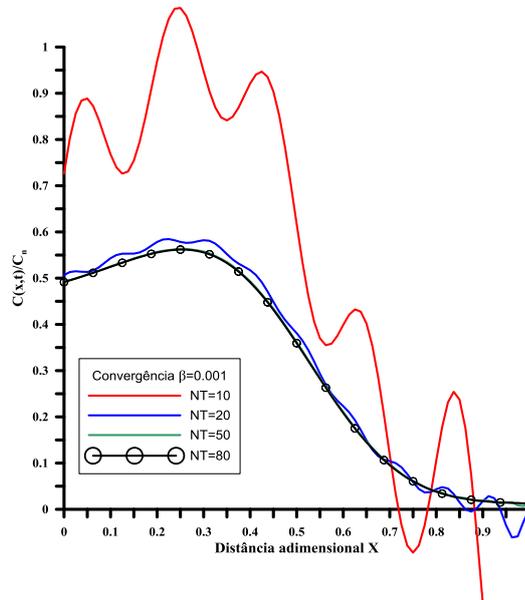


Figura 7 - Análise de convergência do Caso 3.2 para $L=20$ cm.

Nesta dissertação foram utilizados dois problemas-exemplo conforme Liu et al. (2000), sendo um homogêneo e o outro heterogêneo, como mostram as Figs. (8) e (10), respectivamente, obtendo boa concordância entre as abordagens.

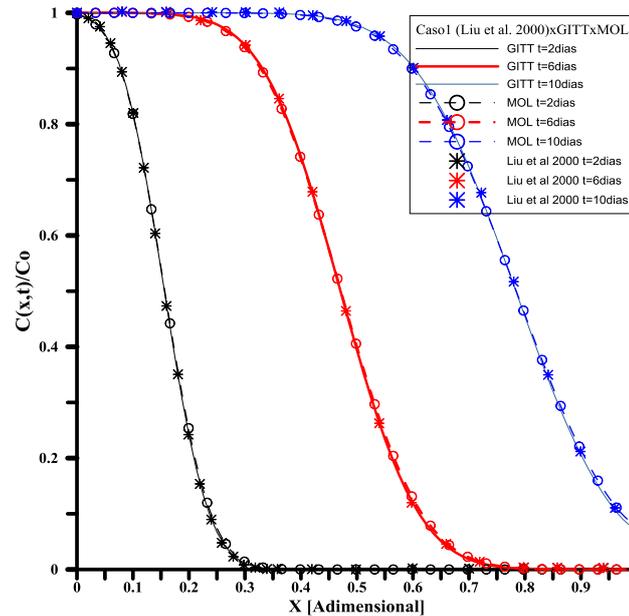


Figura 8- Variação da concentração em um meio poroso homogêneo, sem reação: $C^*(x^*, 0) = 0$; $\gamma^*(C^*) = 0 \text{ d}^{-1}$; $f^*(t^*) = 1$; $R^*(x^*) = 4,25$; $v^*(x^*) = 10 \text{ cm/d}$; $D^*(x^*) = 4 \text{ cm}^2/\text{d}$ e $L = 30 \text{ cm}$.

Pelo fato de o primeiro problema ser linear, suas condições de contorno, inicial, coeficientes de retardo, velocidade e dispersão serem constantes, podemos verificar que todas as técnicas empregadas estão de acordo com o método numérico, sendo este problema-exemplo utilizado no intuito de testar e validar a técnica em um caso mais simples.

O Caso 2 descreve a mudança na concentração sob condições semelhantes ao Caso 1. Contudo, agora consideramos a existência de uma reação e condições de fronteira variando com o tempo, de acordo com os parâmetros determinados por van Genuchten e Alves (1982). Conforme mostra a Fig. (9), a concentração do soluto no meio, tende à concentração constante da entrada, C_a , à medida que avançamos no tempo e que os termos de reação provocam altos gradientes de concentração no início do estudo ou podem reduzi-los drasticamente, quando o termo de consumo supera a produção ou o inverso, fazendo com que estes se estendam para as regiões mais profundas. Como pode ser visto, o método proposto é capaz de descrever com acurácia o fenômeno decorrente, em casos lineares e com coeficientes constantes, sem muita dificuldade.

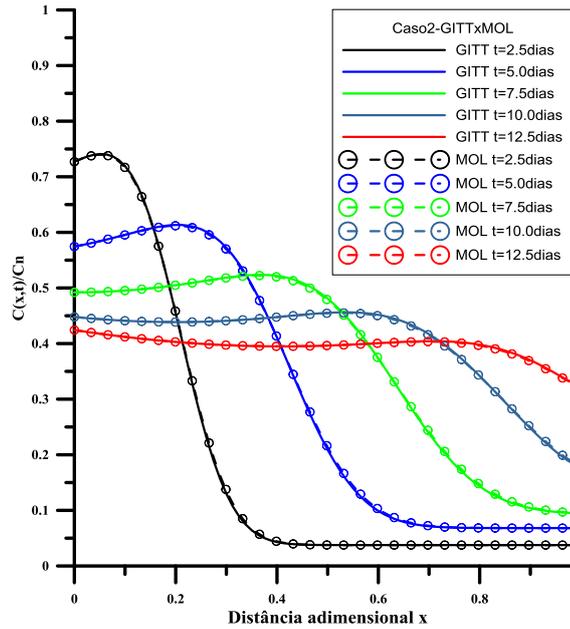


Figura 9 – Variação da concentração em um meio poroso homogêneo com concentração na entrada variando exponencialmente com o tempo e com reação $\gamma'(C') = (0,5 - 0,25C')d^{-1}$; $C^*(x^*, 0) = 0$; $f^*(t^*) = 4 + 6e^{-0,25t^*}$; $R^*(x^*) = 3$; $v^*(x^*) = 25$ cm/d e $D^*(x^*) = 37,5$ cm²/d. Para uma profundidade média $L=100$ cm.

A Fig. (10) mostra o resultado obtido de forma híbrida e através do método numérico MOL, desenvolvido neste trabalho, em detrimento da solução obtida por Liu et al. (2000), para o caso de solo heterogêneo em uma única camada, estando os resultados condizentes aos encontrados na literatura e atestados pela solução numérica.

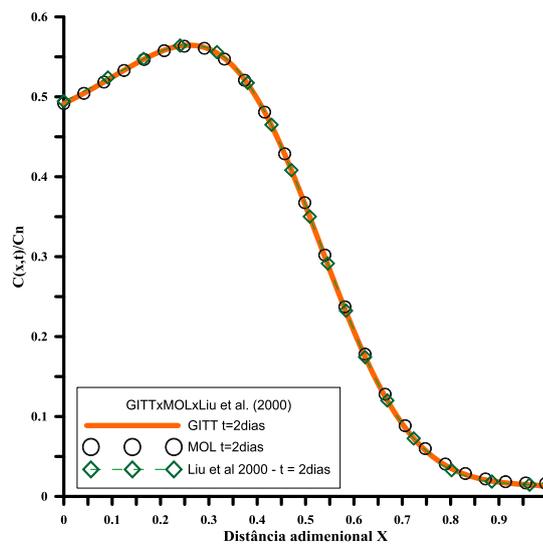


Figura 10 – Comparação entre os resultados obtidos neste trabalho por GITT e com o método numérico MOL de Liu et al. (2000).

A Fig. (11) descreve o comportamento do fluxo de soluto num solo heterogêneo, com reação. Por conta da variação de suas propriedades com a profundidade e da existência de um termo fonte variável, contendo taxa de reação e retardamento aumentando na direção positiva do eixo de x verifica-se uma maior variação de sua concentração, na região mais profunda do solo. Isto fez com que as curvas variando no espaço tendessem mais rapidamente à concentração constante, C_a , considerando um tempo de estudo prolongado, o que contribui para a convergência.

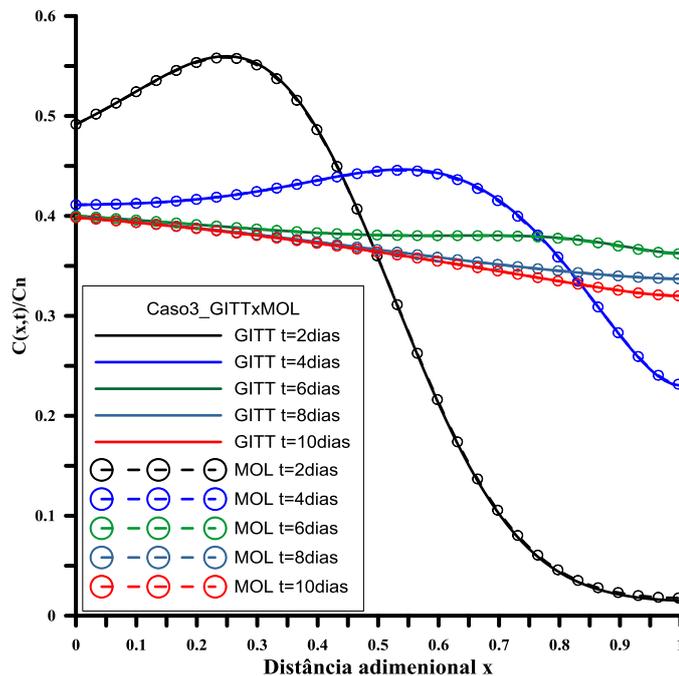


Figura 11 - Variação da concentração em um meio poroso heterogêneo, com condição de entrada variando exponencialmente com o tempo, admitindo que todos os coeficientes sejam variáveis com a profundidade: $f^*(t^*)=0,4+0,6e^{-t^*}$; com taxas de consumo de primeira ordem $\gamma_1^*(x)C^s=(0,1+0,01x^s)C^s d^{-1}$ e produção de ordem zero $\gamma_0^*(x^s)=0,01+0,001x^s$; $R^*(x^s)=2,4+0,04x^s$; $v^*(x^s)=14-0,2x^s$ cm/d e $D_L^*(x^s)=10+0,1x^s$ cm²/d, para $L=20$ cm.

A seguir apresentamos os resultados obtidos quando se variam as taxas de consumo, produção, coeficiente de difusão e dispersividade, no intuito de verificar as influências nas respectivas taxas de convergência. Iniciamos com os termos de reação e variando-os verificamos que os mesmos são de extrema importância neste processo, visto que ocasionam uma maior ou menor redução da concentração na entrada, refletindo bruscamente na concentração, conforme poderemos constatar na Fig. (12).

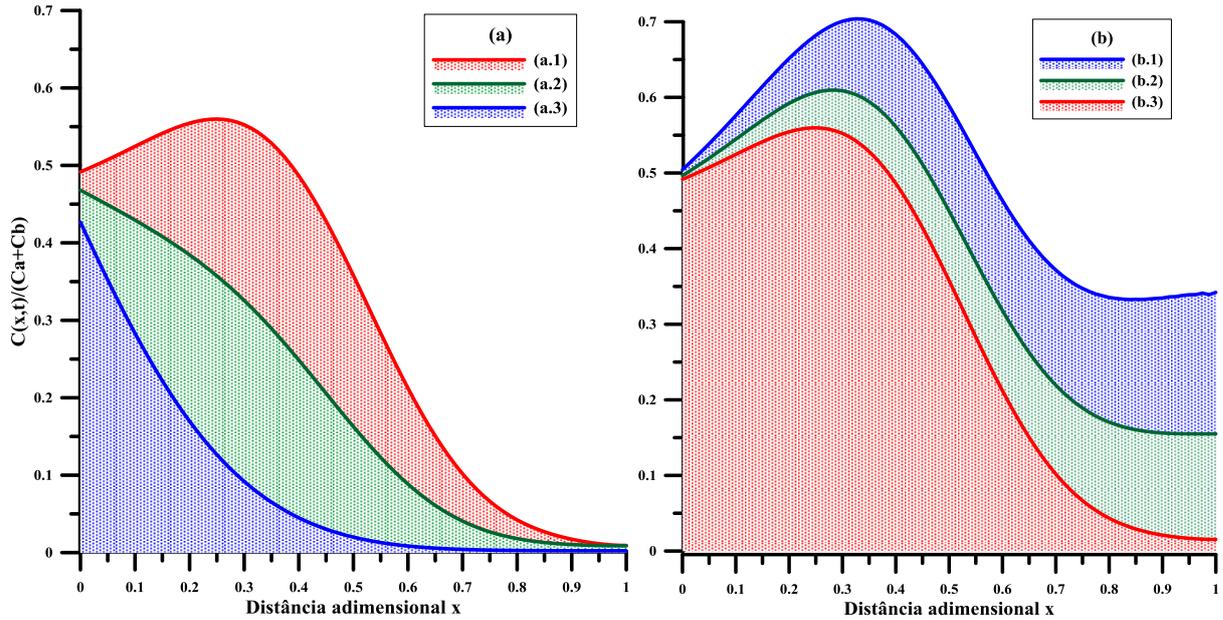


Figura 12- Variação das taxas de consumo e produção na EAD-Caso 3. A Figura (12a) mostra o resultado da variação da taxa de consumo para uma mesma taxa de produção $\gamma_{00}^* = 0,1$; $\gamma_{01}^* = 0,01$, sendo (a.1): $\gamma_{10}^* = 0,1$; $\gamma_{11}^* = 0,01$; (a.2): $\gamma_{10}^* = 1$; $\gamma_{11}^* = 0,1$ e (a.3): $\gamma_{10}^* = 3$; $\gamma_{11}^* = 0,5$. A Figura (12b) demonstra o resultado variação da taxa de produção para uma taxa de consumo fixa $\gamma_{10}^* = 0,1$; $\gamma_{11}^* = 0,01$, sendo (b.1): $\gamma_{00}^* = 0,25$; $\gamma_{01}^* = 0,05$; (b.2): $\gamma_{00}^* = 0,1$; $\gamma_{01}^* = 0,01$ e (b.3): $\gamma_{00}^* = 0,01$; $\gamma_{01}^* = 0,001$.

Estas mudanças afetam diretamente as taxas de convergência das soluções. Por exemplo, o aumento na taxa de consumo γ_{11}^* , Fig. (12.a), fez com que a convergência do Caso 3 (a.1), fosse reduzida de NT= 160 para um número máximo de termos em torno NT= 6, no Caso 3 (a.3), conforme mostra a Tabela 9, a seguir.

Tabela 9 – Análise de convergência do Caso 3 (a.3):

Caso3-[a.3]: $\gamma_{10}^* = 3$ $\gamma_{11}^* = 0,5$					
$t^* = 2$ dias	C(x,t)			C(x,t)	
NT	x=0.15	x=0.95	NT	DIFERENÇA $C_i - C_{i-1}$	
1	0,22234	0,0024419	1	0,0E+00	0,0E+00
2	0,221448	0,0022965	2	8,9E-04	1,5E-04
4	0,221345	0,0023675	4	1,0E-04	7,1E-05
6	0,221834	0,0023622	6	4,9E-04	5,2E-06
10	0,221912	0,0023614	10	7,8E-05	8,4E-07
20	0,221929	0,0023587	20	1,7E-05	2,7E-06
160	0,221933	0,0023583	160	4,0E-06	3,2E-07

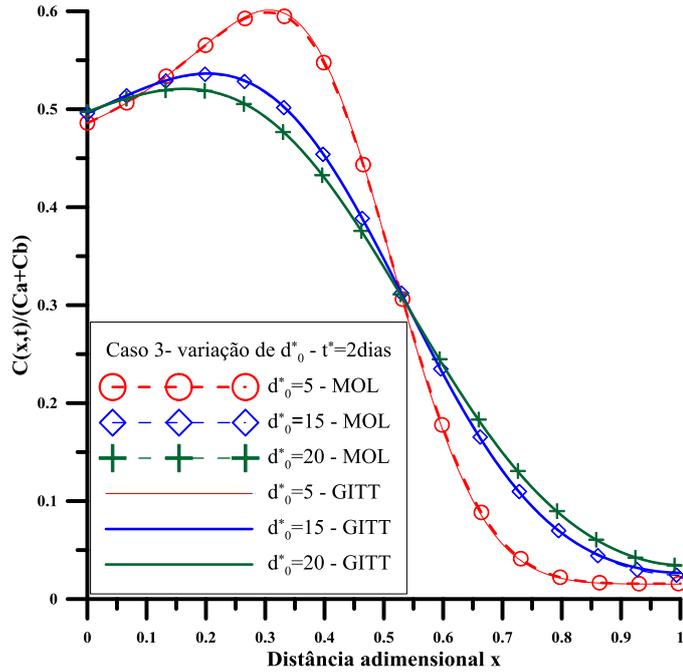


Figura 13- Resultado do estudo da variação do coeficiente de difusão d_0^* .

A Figura (13) mostra o estudo da variação do coeficiente de dispersividade linear. Bem como a reação, este termo é fator preponderante nesse processo e de difícil definição, estando eles limitados a valores específicos dentro de cada intervalo.

As dispersividades, Fig. (14) foram variadas dentro dos intervalos admissíveis para cada um dos três modelos e verificado que o modelo exponencial possui pouca flexibilidade na variação deste parâmetro, sendo o modelo linear o mais flexível destes.

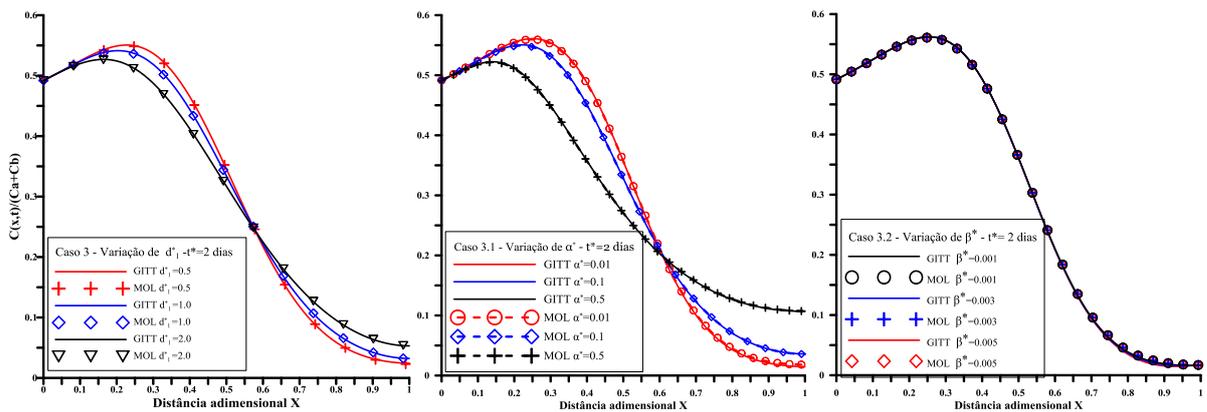


Figura 14 – Resultado do estudo da variação dos coeficientes de dispersão d_1^* , α^* e β^* .

Variando-se os modelos de dispersão, a convergência das soluções para cada modelo fica dependente do valor atribuído a cada coeficiente, conforme descreve as Tabelas 7 e 8. Ao se variar os respectivos coeficientes de dispersão, verificamos um aumento da taxa de convergência à medida que também seja elevado seus valores, respeitando os limites de

aceitação impostos pela técnica ou pelo próprio modelo matemático. Neste trabalho foram estudadas as variações dos parâmetros de entrada nos intervalos $d_1^*=[0, 2]$; $\alpha^*=[0, 1]$ e $\beta^*=[0, 5 \times 10^{-3}]$. O modelo exponencial é o que apresenta maior dificuldade para convergir e também maior sensibilidade em sua variação. No entanto, os modelos linear e parabólico tem maior flexibilidade para a inserção de novos parâmetros a serem estudados, considerando um tempo de simulação maior que $t^*= 2$ dias.

Pelo fato de a convergência ter maior dificuldade em ser alcançada próxima a fronteira, foi verificado, Figs. (15) e (16), que num tempo menor que $t^*= 2$ dias, em $x= L$ o modelo parabólico foi quem melhor se adequou, atingindo uma taxa de convergência satisfatória mais rapidamente, convergindo em torno de $NT= 200$.

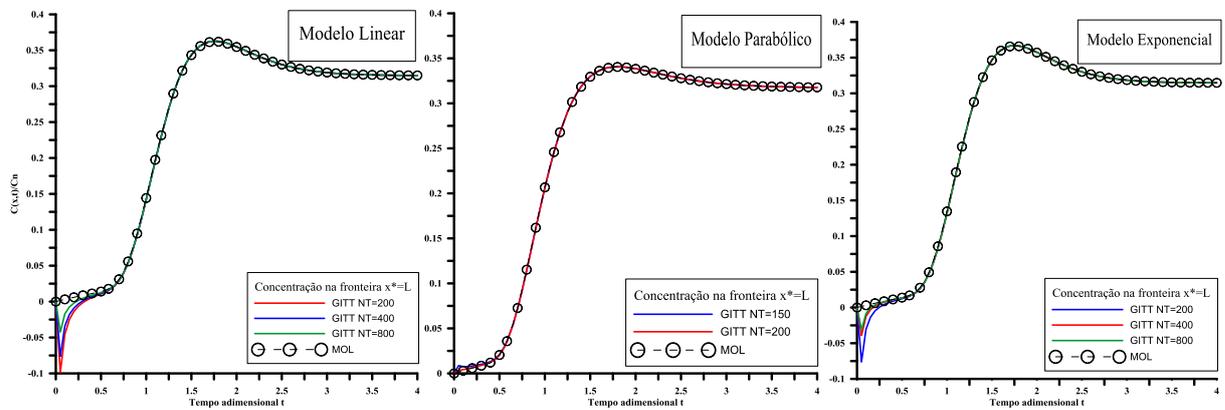


Figura 15 – Convergência próxima à fronteira $x=L$, concentração variando no tempo.

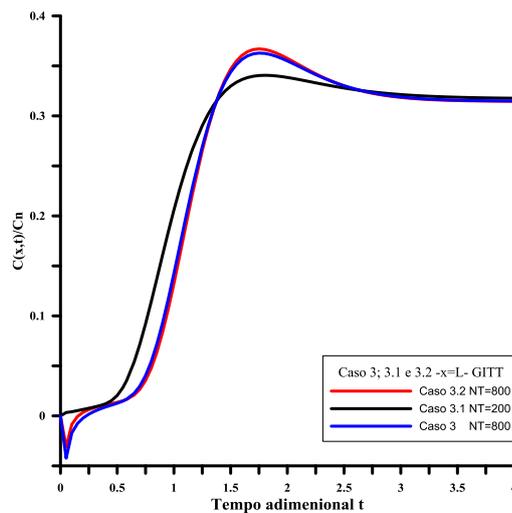


Figura 16 – Comparação entre os modelos linear, parabólico e exponencial variando no tempo, próximo a fronteira $x=L$, num tempo menor que $t^*= 2$ dias.

Os tempos computacionais requeridos nos cinco casos estudados, a partir de suas convergências, encontram-se dentro de um valor limite de [0,37 s; 2,39 s], utilizando um processador Intel Core i7, memória Ram de 8 GB.

CAPÍTULO 5

5 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Neste trabalho foi aplicada a técnica da transformada integral generalizada a três casos que medem o campo de concentração de solutos em meios porosos, sendo dois homogêneos e um heterogêneo, com sorção linear e condições de contorno constantes ou variando no tempo, incluindo ou não o termo de reação. Os resultados demonstram que a técnica híbrida, numérico-analítica, utilizada nesta dissertação consegue rapidamente convergir para um resultado satisfatório, estando entre um valor mínimo de 30 termos, no Caso 1 e um máximo de 170 termos, na fronteira, utilizando o modelo exponencial, Caso 3.2, aplicado a uma dimensão média $L=20$ cm, considerando um tempo maior que $t^*=2$ dias.

Os resultados também mostram que na fronteira, num tempo menor que $t^*=2$ dias, o modelo parabólico foi o único que concordou com sua solução numérica, a uma taxa de convergência satisfatória, em torno de $NT = 200$, enquanto um número de termos próximo de $NT = 800$, nos dois outros modelos, ainda não foi capaz de fazê-los concordar com suas soluções numéricas, dentro deste intervalo de tempo.

Dos modelos analisados, o modelo linear é o que apresenta maior flexibilidade na variação do seu coeficiente de dispersão, podendo ser o mais abrangente e representativo deles. Contudo, ao considera-se um tempo de estudo muito curto, este pode não ser o mais adequado.

A técnica empregada nesta dissertação possui relativa facilidade em estender sua aplicação a outros modelos de coeficientes que se queiram variar, implicando apenas no acréscimo de novas integrais analíticas que modificam apenas os coeficientes A_{ij} e B_{ij} no sistema de EDOs. Isto possibilita relativa flexibilidade em considerar que os coeficientes de retardamento, velocidade de fluxo e o termo de reação também possam mais de um modelo existente. Desta forma, conseguimos facilmente englobar outros modelos em um único código, desde que consideremos a sorção de equilíbrio linear.

Pelo fato de não existirem soluções analíticas para todos os problemas-filtro, contamos com um código próprio para este fim, no intuito de que este absorva parte da rigidez do sistema de EDOs, resultante da transformação. Quando o meio é muito heterogêneo ou o termo de reação muito significativo, ficam restritas as abordagens analíticas, sendo indispensáveis as técnicas numéricas.

A escolha de um filtro apropriado e de um problema de autovalor adequado é um fator preponderante neste processo, pois em consequência, estes conseguem absorver parte da não linearidade da equação, reduzindo o custo na solução do sistema de EDOs, através da DIVPAG. A técnica aqui empregada permite que sejam feitas estas considerações e ainda suas devidas adequações a cada caso. Isto demonstra que a GITT é uma poderosa ferramenta no emprego a problemas de transporte em meios porosos homogêneos ou heterogêneos, podendo ter grande aplicabilidade neste tipo de simulação.

Diante dos fatos, já podemos adiantar as propostas para trabalhos futuros, em que podemos aplicar as abordagens feitas nesta dissertação, salvo algumas modificações.

- 1-Modelos de sorção de equilíbrio não lineares;
- 2-Solos heterogêneos composto de multicamadas;
- 3-Variação no número de compostos;
- 4-Coefficientes de retardo, dispersão e velocidade não lineares;
- 5-Condição inicial variando espacialmente.

REFERÊNCIAS

- ALMEIDA A. R; COTTA R. M. Integral transform methodology for convection-diffusion problems in petroleum reservoir engineering. **Int. J Heat Mass Transfer** v.38, n. 18, p 3359±67, 1995.
- Al-HUMOUD, J.; CHAMKHA A. J. Reactive contaminant transport with space-dependent dispersion and time-dependent concentration source. **J. Porous Media** 10 (4), 377–390, 2007.
- BACHE, B.W.; WILLIAMS, E.G. A phosphate sorption index for soils. **J. Soil Sci.** v. 27, p. 289–296, 1971.
- BALSAN, R. Impactos Decorrentes da Modernização da Agricultura Brasileira. Campo-Território: **Revista de Geografia Agrária**, v. 1, n. 2, p. 123-151, ago. 2006.
- BARRY, D.A. Modelling contaminant transport in the subsurface: theory and computer programs. In H. Ghadiri and C., W. Rose (Eds.), *Modelling Chemical Transport in Soil: Natural and Applied Contaminants*, Lewis Publishers, Chelsea, MI, pp. 105–144, 1992.
- BAUER, P.; ATTINGER, S; KINZELBACH, W. Transport of a decay chain in homogenous porous media: analytical solutions. **Journal of Contaminant Hydrology**. v. 49, p. 217–239, 2001.
- BEAR, J. **Hydraulics of Groundwater**. Dover, New York, 2007.
- _____. Analysis of flow against dispersion in porous media - Comments. **Journal of Hydrology**. v 40, p 381-385, 1979.
- _____. **Dynamics of Fluids in Porous Media**. Dover, New York, 1972.
- BIGGAR, J., W; NIELSEN, D. R. Miscible displacement and leaching phenomena. **Agronomy** 11, 254–274, 1967.
- BOYCE, W E.; R. C. DiPRIMA. **Elementary Different al Equations and Boundary Value Problems**. 7. Ed. New York : Wiley, 2000.
- BRENNER, H. The diffusion model of longitudinal mixing in beds of finite length: Numerical values. **Chemical Engineering Science**. Vol. 17, pp. 229-243, 1962.
- CASSOL, M.; WORTMANN, S.; RIZZA, U. Short communication: Analytic modeling of two-dimensional transient atmospheric pollutant dispersion by double GITT and Laplace Transform techniques. **Environ. Model. Softw.** v 24, n 1, p 144–151, 2009.
- CANOSA, J; R. G. DE OLIVEIRA, A New Method for the Solution of the Schrödinger Equation. **J. Comput. Phys.** v 5, p 188-207, 1970.
- CANOSA, J. Numerical Solution of Mathieu’s Equation. **Comput. Phys.** v. 7, p 255-272, 1971.

CHO, C. M. Convective Transport of Ammonium with Nitrification in Soil. **Can. J. Soil Sci.**, v 51: p 339-350, Oct. 1971.

COSTA, G., BRONSON, R. **Equações Diferenciais**. 3.Ed. Tradução de (Fernando Enrique Silveira). Porto Alegre: Bookman, 2008. 400 p.

COTTA, R. M. **Integral transforms in computational heat and fluid flow**. Boca Raton: CRC Press, 1993.

CLEMENT, T. P.: Generalized solution to multispecies transport equations coupled with a first-order reaction network. **Water Resource. Res.** v. 37, p 157–163, 2001.

CHEN, J. S. et al. A novel method for analytically solving multi-species advective–dispersive transport equations sequentially coupled with first-order decay reactions. **Journal of Hydrology** 420–421, 191–204, 2012.

CHEN, J. S.; LIU, C. W. Generalized analytical solution for advection–dispersion equation in finite spatial domain with arbitrary time-dependent inlet boundary condition. **Hydrol. Earth Sys. Sci.** 15, 2471–2479, 2011.

CHEN, J. S. et al. Analytical power series solution for contaminant transport with hyperbolic asymptotic distance-dependent dispersivity. **J. Hydrol.** 362, 142–149, 2008a.

CHEN, J. S.; Ni, C .F.; LIANG, C. P. Analytical power series solutions to the two-dimensional advection–dispersion equation with distance-dependent dispersivities. **Hydrol. Process.** 22 (24), 4670–4678, 2008b.

CHRYSIKOPOULOS, C. V.; KITANIDIS, P.K.; ROBERTS, P., V. Analysis of one-dimensional solute transport through porous media with spatially variable retardation factor. **Water Resour. Res.** 26 (3), 437–446, 1990.

DYMINSKI, A. S. Contaminação de solos e águas subterrâneas. Curitiba: Centro de Estudos de Engenharia Civil - CESEC, 2006. Disponível em: <http://www.cesec.ufpr.br/docente/andrea/TC019_Contaminacao_de_solos.pdf>. Acesso em: 12 Ago 2012.

DAGAN, G. Time-dependent macrodispersion for solute transport in anisotropic heterogeneous aquifer. **Water Resour Res** 1988; 24(9):1491±500.

FITTER, A.H.; SUTTON, S.D. The use of the Freundlich isotherm for soil phosphate sorption data. **J. Soil Sci.** v. 26, p. 241–246, 1975.

GARDNER, W. R. Movement of nitrogen in soil. In: W. V. BARTHOLOMEW and F. E. CLARK (Eds). **Soil nitrogen. Agronomy.** v.10, p. 550-572, 1965. American Society of Agronomy, Madison, Wis.

GEAR, C. W. The automatic integration of stiff ordinary differential equations. **Information Processing** 68 (Proc. IFIP Congress, Edinburgh, 1968) North-Holland, Amsterdam, 1969, p.187–193. MR 0260180 (41 #4808).

GORDON, R. G, In.: **Methods in Computational Physics**. In: ADLER et al. Eds.), v. 10. Academic Press, New York, 1971.

GUNARY, D., A new adsorption isotherm for phosphate in soil. **J. Soil Sci.** v. 21, p. 72–77, 1970.

HAMDI, S. et al. Method of Lines. Scholarpedia, 2(7):2859, 2009. Disponível em: <http://www.scholarpedia.org/article/Method_of_lines>. Acesso em: 01 Jun. 2012.

HUNT, B. Scale-dependent dispersion from a pit. **J. Hydrol. Eng.** v 7, n. 4, p 168–174, 2002.

_____. Dispersion model for mountain streams. **J. Hydrol. Eng.** v. 125 n. 2, p 99–105, 1999.

_____. Contaminant source solutions with scale-dependent dispersivity. **J. Hydrol. Eng.** V. 3, n. 4, p 268–275, 1998.

HUANG, K.; van GENUCHTEN, M. Th.; ZHANG, R. Exact solutions for one-dimensional transport with asymptotic scale-dependent dispersion. **Appl. Math. Model.** v. 20, p 298–308, Apr. 1996.

IMSL Library, MATH/LIB, Houston, TX, 1994.

JANKOSZ, A. V. **Calibração e validação do modelo matemático Hydrus 1-D através de colunas de solo em laboratório**. Dissertação (Mestrado em Solos): Setor de Ciências Agrárias, Universidade Federal do Paraná. Curitiba, 2008.

JURY, W. A; W. F. SPENCER; W. J. FARME. Behavior Assessment Model for Trace Organics in Soil: I. Model Description. **J. Environ. Qual.**, Vol. 12, no. 4, 1983.

KAY, B. D.; ELRICK, D. E. Adsorption and movement of lindane in soils. **Soil Science** 104:314-322, 1967.

KUMAR, A.; JAISWAL, D., K.; KUMAR, N. Analytical solutions to one-dimensional advection–diffusion equation with variable coefficients in semi-infinite media. **J. Hydrol.** v 380, n (3–4), p 330–337, 2010.

KUMAR, A.; JAISWAL, D., K.; KUMAR, N. Analytical solutions to one-dimensional advection–diffusion equation with variable coefficients in a finite domain. **J. Earth Syst. Sci.** v 118, n (5), p. 539–549, 2009.

LAI, Sung-Ho; JURINAK, J., J. Numerical approximation of cation exchange in miscible displacement through soil columns. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.** V. 35, p 894–899, 1971.

LINDSTROM, F., T.; BOERSMA, L.; STOCKARD, D. A theory on the mass transport of previously distributed chemicals in a water saturated sorbing porous medium. Isothermal cases, **Soil Sci.** v 112, p 291–300, 1971.

LAPIDUS, L.; AMUNDSON, N.R., Mathematics of adsorption in beds: VI. The effect of longitudinal diffusion in ion exchange and chromatographic columns. **J. Phys. Chem.** V. 56, p. 984–988, 1952.

LEIJ, F. J.; SKAGGS, T., H.; M. Th. van GENUCHTEN. Analytical Solutions for Solute Transport in Three-dimensional Semi-infinite. *Water Resources Research*, v. 27, n 10, p. 2719-2733, 1991.

LOGAN, J., D. Solute transport in porous media with scale-dependent dispersion and periodic boundary conditions. **J. Hydrol**, v 184, p 261–276, 1996.

LIU, C.; SI, B., C. Analytical modeling of one-dimensional diffusion in layered systems with position-dependent diffusion coefficients. **Advances in Water Resources**. v. 31, p. 251–268, 2008.

LIU, C., et al. Use of the generalized integral transform method for solving equations of solute transport in porous media. **Advances in Water Resources** v. 23, p 483±492, 2000.

LIU, C; BALL, W., P; ELLIS, J., H. An analytical solution to one-dimensional solute advection±dispersion equation in multi-layer porous media. **Transport Porous Media**, 30:25±43, 1998.

LUNN, M; LUNN, R., J; MACKAY, R. Determining analytic solutions of multiple species contaminant transport, with sorption and decay. **Journal of Hydrology** v. 180, p. 195-210, 1996.

MONCADA, M. P. H. **Estudo em laboratório de características de colapso e transporte de soluto associadas à infiltração de licor cáustico em um solo laterítico**. Dissertação (Programa de pós-graduação em Engenharia Civil) – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2004.

MOHSEN M. F. N.; M. H. BALUCH. An analytical solution of the diffusion-convection equation over a finite domain. *Appl. Math. Modelling*, Vol. 7, Aug.1983.

MOLDRUP, O. et al. Gas permeability in undisturbed soils: measurements and predictive models. **Soil Sci.** v 163, p 180–189, 1998.

MCLAREN, A.D.; Nitrification in soil-systems approaching a steady state. **Soil Sci Soc. Am. Proc.** v. 33, p. 551–556, 1969.

MIKHAILOV, M. D; ÖZISIK M. N. **Unified analysis and solution of heat and mass diffusion**. New York: Wiley, 1984.

MILLINGTON, R. J; J. P. QUIRK. Permeability of porous media. **Trans. Faraday Soc.** v57, p.1200-1207, 1961.

MISRA, C; MISHRA, B. K. Miscible displacement of nitrate and chloride under field conditions. **Soil Science Society of America Journal** . v. 41: p. 496-499, 1977.

ÖZISIK, M., N; MURRAY, R., L. On the Solution of Linear Diffusion Problems with Variable Boundary Conditions. **J. Heat Transfer**, Vol. 96, p. 48-51, 1974.

PÉREZ GUERRERO, J. S; T. H. SKAGGS. Analytical solution for one-dimensional advection–dispersion transport equation with distance-dependent coefficients. **Journal of Hydrology**. v 390, p. 57–65. Jun. 2010.

PÉREZ GUERRERO, J. S; T. H. SKAGGS; M. Th. van GENUCHTEN. Analytical Solution for Multi-Species Contaminant Transport in Finite Media with Time-Varying Boundary Conditions. **Transp Porous Med.** v 85: p171–188, Mar 2010.

_____. Analytical Solution for Multi-Species Contaminant Transport Subject to Sequential First-Order Decay Reactions in Finite Media. **Transp Porous Med**, v. 80, p. 373–387, Mar. 2009.

PANG, L.; HUNT, B. Solutions and verification of a scale-dependent dispersion model. **J. Contam. Hydrol.** 53 (1–2), 21–39, 2001.

PEARSON, J. R. A. A note on the 'Danckwerts' boundary condition for continuous flow reactors. **Chemical Engineering Science** 10:281-284, 1959.

PICKENS, J.F.; GRISAK, G., E. Modeling of scale-dependent dispersion in hydrogeologic systems. **Water Resour. Res.** v. 17, n. (6), p. 1701–1711, 1981.

QUEZADA, C.R.; CLEMENT, T.P.; LEE, K.K. Generalized solution to multi-dimensional multi-species transport equations coupled with a first-order reaction network involving distinct retardation factors. **Adv. Water Resource**. Vol. 27, p. 508–521, 2004.

REDDY, K. R.; PATRICK, Jr. W. H. and PHILLIPS, R. E. Ammonium diffusion as a factor in nitrogen loss from flooded soils. **Soil Science Society of America Journal** 40:528-533, 1976.

RADCLIFFE, D. E; ŠIMŮNEK, J. **Soil Physics with Hydrus: Modeling and Applications**. New York: CRC Press, 2010.

RICHARDS, L. A. Capillary conduction of fluid through porous mediums. **Physics**, v 1, p 318–333, 1931.

ŠIMŮNEK, J; M. TH. van GENUCHTEN; M. ŠEJNA. The HYDRUS-1D Software Package for Simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media. **Department of Environmental Sciences**. University of California Riverside. California, Apr. 2005.

ŠIMŮNEK, J; M. TH. van GENUCHTEN. Contaminant transport in the unsaturated zone: Theory and modeling. In: J., W., DELLEUR (ED.), **Handbook of Groundwater Engineering**, 2nd ed., CRC Press, Boca Raton, FL, p. 22.1-22.46. 2006.

SCHIESSER, W E; G. W GRIFFITHS. **A Compendium of Partial Differential Equation Models Method of Lines Analysis with Matlab**. Cambridge University Press, ISBN-13: 978-0-521-51986-1, 2008.

SIPS, R. On the structure of the catalyst surface, II. **J. Chem. Phys.** v. 18, p. 1024–1026, 1950.

SIBBESEN, E. Some new equations to describe phosphate sorption by soils. **J. Soil Sci.** v. 32, p. 67–74, 1981.

SHAPIRO, R.E.; FRIED M. Relative release and retentiveness of soil phosphates. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.** v. 23, p. 195–198, 1959.

SRINIVASAN, V.; CLEMENT, T. P. Analytical solutions for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems – Part I: Mathematical derivations. **Adv. Water Resource**, v. 31, p 203–218, 2008a.

_____. Analytical solutions for sequentially coupled one-dimensional reactive transport problems – Part II: Special cases, implementation and testing. **Adv. Water Resour**, v. 31, p 219–232, 2008b.

SUN, Y.; CLEMENT, T.P.: A decomposition method for solving coupled multi-species reactive transport problems. **Transp. Porous Media**, v. 37, p 327–346, 1999.

SUN, Y.; PETERSEN, J. N.; CLEMENT, T.,P. Analytical solutions for multiple species reactive transport in multiple dimensions. **J. Contam. Hydrol** v.35, p 429–440, 1999.

TUNITSKII, N. N; V. A. KAMINSKII; S. F. TIMASHEV. **Methods in Physico-Chemical Kinetics**. Chemistry, Moscow, 1972.

van GENUCHTEN M. Th. Convective-Dispersive transport of Solutes Involved in Sequential First-Order Decay Reactions. **Computers and Geosciences**. Vol 1, No 2, p 129-147, 1985.

van GENUCHTEN M. Th.; W. J. ALVES. Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation. **U.S. Department of Agriculture, Technical Bulletin** No. 1661, 151 p, 1982.

van GENUCHTEN M. Th.; P. J. WIERENG. Solute Dispersion Coefficients and Retardation Factors. **American Society Agronomy- Soil Science Society of American**. 677 South Segoe Road, Madison WI 53711, US. **Methods of Soil Analysis, Part I. Physical and Mineralogical Methods-Agronomy Monograph no. 9** (2nd Edition), 1986.

van GENUCHTEN M. Th.; P., J. WIERENG. Mass Transfer Studies in Sorbing Porous Media I. Analytical Solutions. **Soil Sci. Soc. AM. J**, vol. 40, 1976.

van GENUCHTEN M. Th; J. M. DAVIDSON; P., J., WIERENG. An Evaluation of Kinetic and Equilibrium Equations for the Prediction of Pesticide Movement Through Porous Media. **. Soil Sci. Soc. AM. PROC.**, vol. 38, 1974.

VERSTEEG H. K.; W. MALALASEKERA. **An introduction to computational fluid dynamics the finite volume method**. Longman Scientific & Technical. New York , 1995.

WOLFRAM, S. **Mathematica: a system for doing mathematics by computer**, in: The

Advanced Book Program, Addison Wesley, Reading, MA, 1991

YATES, S. R. An analytical solution for one-dimensional transport in heterogeneous porous media. **Water Resour. Res.** v. 26, n. 10, p 2331–2338, 1990.

_____. An analytical solution for one-dimensional transport in heterogeneous porous media with an exponential dispersion function. **Water Resour. Res.** v. 28, n. 18, p 2149–215, 1992.

WEHNER, J. F., and WILHELM, R. H. Boundary conditions of flow reactor. **Chemical Engineering Science** v 6, p 89-93, 1956.

WOLFRAM, S. **Mathematica** – a system for doing mathematics by computer, in: The Advanced Book Program, Addison Wesley, Reading, MA, 1991.

ZOPPOU, C.; KNIGHT, J. H. Analytical solutions for advection and advection–diffusion equations with spatially variable coefficients. **J. Hydraul. Eng.** 123 (2), p 144–148, 1997.

APÊNDICES

1 APÊNDICE A

1.1 TRANSFORMAÇÃO DO PROBLEMA HOMOGÊNEO (3.17)

$$R(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} \right) - v(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} - \gamma_1(x) C_h(x,t), \quad 0 \leq x \leq 1, t > 0 \quad (3.17)$$

Par transformada –inversa:

$$\bar{C}_{1,i}(t) = \int_0^1 \tilde{\psi}_{1,i}(x) C_h(x,t) dx, \quad \text{Transformada} \quad (3.29)$$

$$C_h(x,t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\psi}_{1,i}(x) \bar{C}_{1,i}(t) \quad \text{Inversa} \quad (3.30)$$

$$\tilde{\psi}_{1,i}(x) = \frac{\psi_{1,i}(x)}{\sqrt{N_{1,i}}} \quad (3.31)$$

Obs.: A fim de simplificar, serão omitidas, em alguns casos, as variáveis x e t das funções reais a seguir.

Aplicando o produto interno da equação (3.25) pela equação (3.17)

$$\underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \left(R(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial t} \right) dx}_{T_1} = \underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(D(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} \right) dx}_{T_2} - \underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) v(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} dx}_{T_3} - \underbrace{\int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \gamma_1(x) C_h(x,t) dx}_{T_4}, \quad (3.32)$$

A transformação do lado esquerdo da equação (3.32) é dada com a substituição da concentração $C_h(x,t)$ pela sua fórmula de inversão (3.30).

$$T_1 = \int_0^1 \tilde{\psi}_i R \frac{\partial C_h}{\partial t} dx = \int_0^1 \tilde{\psi}_i R \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\psi}_j \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt} dx = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j R dx \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt} = \sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt}$$

$$T_1 = \sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt} \quad (3.32.1)$$

Integrando por parte o primeiro membro do lado direito da equação (3.32), T_2 , fazemos

$$\begin{cases} u_1 = \tilde{\psi}_i, & du_1 = \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} dx; & dv_1 = \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_h}{\partial x} \right) dx, & v_1 = D \frac{\partial C_h}{\partial x} \\ u_2 = D \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx}, & du_2 = \left[\frac{d^2 \tilde{\psi}_i}{dx^2} D + \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \frac{dD}{dx} \right] dx; & dv_2 = \frac{\partial C_h}{\partial x} dx, & v_2 = C_h \end{cases}$$

O que resulta em

$$T_2 = \int_0^1 \tilde{\psi}_i \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_h}{\partial x} \right) dx = \left[\tilde{\psi}_i D \frac{\partial C_h}{\partial x} - \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} D C_h \right]_0^1 + \int_0^1 \left[\frac{d^2 \tilde{\psi}_i}{dx^2} D + \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \frac{dD}{dx} \right] C_h dx,$$

Para atender as condições de contorno em $x=1$, (3.17c) e (3.24b), temos que

$$\tilde{\psi}_i(1) D(1) \frac{\partial C_h(1,t)}{\partial x} - D(1) \frac{d\tilde{\psi}_i(1)}{dx} C_h(1,t) = 0$$

portanto

$$T_2 = \tilde{\psi}_i(0) D(0) \frac{\partial C_h(0,t)}{\partial x} - D(0) \frac{d\tilde{\psi}_i(0)}{dx} C_h(0,t) + \int_0^1 \left[\frac{d^2 \tilde{\psi}_i}{dx^2} D + \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \frac{dD}{dx} \right] C_h(x,t) dx$$

Atendendo as condições de em $x=0$, para as Eqs. (3.17b) e (3.24a)

$$C_h(0,t) - d_0 \frac{\partial C_h(0,t)}{\partial x} = 0, \quad (3.17b)$$

$$\tilde{\psi}_i(0) - d_0 \frac{d\tilde{\psi}_i(0)}{dx} = 0, \quad (3.24a)$$

Multiplicando a Equação (3.17b) por $\tilde{\psi}_i(0)$ e a Equação (3.24a) por $C_h(0,t)$

$$C_h(0,t) - d_0 \frac{\partial C_h(0,t)}{\partial x} = 0 \quad X \quad \tilde{\psi}_i(0) \Rightarrow -d_0 \tilde{\psi}_i(0) \frac{\partial C_h(0,t)}{\partial x} + \tilde{\psi}_i(0) C_h(0,t) = 0$$

$$\tilde{\psi}_i(0) - d_0 \frac{d\tilde{\psi}_i(0)}{dx} = 0 \quad X \quad C_h(0,t) \Rightarrow -d_0 \frac{d\tilde{\psi}_i(0)}{dx} C_h(0,t) + \tilde{\psi}_i(0) C_h(0,t) = 0$$

subtraindo agora uma da outra, temos que

$$-d_0 \left(\tilde{\psi}_i(0) \frac{\partial C_h(0,t)}{\partial x} - \frac{d\tilde{\psi}_i(0)}{dx} C_h(0,t) \right) = 0$$

portanto

$$T_2 = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \frac{\partial}{\partial x} \left(D \frac{\partial C_h}{\partial x} \right) dx = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \left[\frac{d^2 \tilde{\psi}_i}{dx^2} \tilde{\psi}_j(x) D(x) + \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j(x) \frac{dD}{dx} \right] dx \bar{C}_j(t), \quad (3.32.2)$$

$$T_3 = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) v(x) \frac{\partial C_h(x,t)}{\partial x} dx = \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) v(x) \sum_{j=1}^{\infty} \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} \bar{C}_j(t) dx$$

$$T_4 = \int_0^1 \gamma_1(x) \tilde{\psi}_i(x) C_h(x,t) dx = \int_0^1 \gamma_1(x) \tilde{\psi}_i(x) \sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\psi}_j(x) \bar{C}_j(t) dx,$$

$$T_3 + T_4 = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) v(x) \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} dx \bar{C}_j(t) + \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) \gamma_1 dx \bar{C}_j(t), \quad (3.32.3)$$

Subtraindo as equações (3.32.2) de (3.32.3) obteremos

$$T_2 - (T_3 + T_4) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \left[\frac{d^2 \tilde{\psi}_i}{dx^2} \tilde{\psi}_j D(x) + \frac{dD(x)}{dx} \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j - v(x) \tilde{\psi}_i \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} - \gamma_1 \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j \right] dx \bar{C}_j(t)$$

Como:

$$\frac{d^2 \psi_i(x)}{dx^2} = -\mu_i^2 \psi_i(x)$$

$$T_2 - (T_3 + T_4) = \sum_{j=1}^{\infty} \int_0^1 \left[-\mu_i^2 \psi_i \tilde{\psi}_j D(x) + \frac{dD(x)}{dx} \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j - \tilde{\psi}_i v \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} - \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j \gamma_1 \right] dx \bar{C}_j(t) \quad (3.32.4)$$

A partir deste resultado podemos obter o seguinte sistema infinito de EDOs, conforme a seguir

$$\sum_{j=1}^{\infty} A_{ij} \frac{d\bar{C}_j(t)}{dt} = \sum_{j=1}^{\infty} B_{ij} \bar{C}_j(t), \quad (3.33)$$

$$\bar{C}_j(0) = \bar{f}_j \quad (3.33a)$$

em que:

$$A_{ij} = \int_0^1 R(x) \tilde{\psi}_i(x) \tilde{\psi}_j(x) dx \quad (3.33.1)$$

$$B_{ij} = - \int_0^1 \left[\mu_i^2 \psi_i \tilde{\psi}_j D(x) - \frac{dD(x)}{dx} \frac{d\tilde{\psi}_i}{dx} \tilde{\psi}_j + \tilde{\psi}_i v(x) \frac{d\tilde{\psi}_j}{dx} + \tilde{\psi}_i \tilde{\psi}_j \gamma_1(x) \right] dx \quad (3.33.2)$$

$$\bar{f}_i = - \int_0^1 \tilde{\psi}_i [C_0(x) + C_\lambda(x)] dx \quad (3.33.3)$$

2 APÊNDICE B

2.1 PRIMEIRO CASO

2.1.1 Problema para $C_0(x)$

$$d_0 \frac{d^2 C_0(x)}{dx^2} - \frac{dC_0(x)}{dx} = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.18)$$

$$C_0(0) - d_0 \frac{dC_0(0)}{dx} = ft_0, \quad (3.18a)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = 0, \quad (3.18b)$$

2.1.2 Problema para $C_\lambda(x)$

$$d_0 \frac{d^2 C_\lambda(x)}{dx^2} - \frac{dC_\lambda(x)}{dx} = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.19)$$

$$C_\lambda(0) - d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.19a)$$

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.19b)$$

Segundo Boyce e DiPrima (2000) a solução da equação (3.18) é

$$C_0(x) = C_1 e^{\frac{x}{d_0}} + C_2$$

Aplicando a condição de contorno em $x=1$:

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = \frac{C_1}{d_0} e^{1/d_0} = 0 \rightarrow C_1 = 0 \text{ ou ainda } C_0(x) = C_2$$

Aplicando a condição de contorno em $x=0$:

$$C_2 = ft_0 \rightarrow C_0(x) = ft_0 = 0,4$$

Como a equação (3.18) tem a mesma forma da (3.19) suas soluções são idênticas, logo

$$C_0(x) = ft_0 = 0,4 \quad (3.18.1)$$

$$C_\lambda(x) = ft_1 = 0,6 \quad (3.19.1)$$

2.2 SEGUNDO CASO

2.2.1 Solução da equação filtro $C_0(x)$

$$d_0 \frac{d^2 C_0(x)}{dx^2} - \frac{dC_0(x)}{dx} - \gamma_{10} C_0(x) = -\gamma_{00}, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.20)$$

$$C_0(0) - d_0 \frac{dC_0(0)}{dx} = ft_0, \quad (3.20a)$$

$$\frac{dC_0(1)}{dx} = 0, \quad (3.20b)$$

De acordo com Bronson e Costa (2008) a solução do problema acima é dada pela soma da solução do problema homogêneo mais um problema particular, conforme adiante

$$C_0(x) = \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} + e^{\frac{x}{2d_0}} \left[A_1 \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) + A_2 \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.20.1.1)$$

$$\frac{dC_0(x)}{dx} = \frac{e^{\frac{x}{2d_0}}}{2d_0} \left[(A_1 + \sqrt{\Delta} A_2) \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) + (\sqrt{\Delta} A_1 + A_2) \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.20.1.2)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=0$:

$$C_\lambda(0) - d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_0,$$

$$A_1 + \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} - \left[\frac{A_1}{2} + \frac{\sqrt{\Delta}}{2} A_2 \right] = ft_0 \quad \rightarrow \quad \frac{A_1}{2} - \frac{\sqrt{\Delta}}{2} A_2 = ft_0 - \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} \quad \rightarrow$$

$$A_1 = \sqrt{\Delta} A_2 + 2 \left(ft_0 - \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} \right) \quad (3.20.1.3)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=1$:

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0,$$

$$A_1 \left[\cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) + \sqrt{\Delta} \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) \right] + A_2 \left[\sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) + \sqrt{\Delta} \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) \right] = 0 \quad (3.20.1.4)$$

Fazendo $\sqrt{\Delta}/2d_0 = \Phi$, para $\Delta = 1 + 4d_0\gamma_{10} > 0$ e substituindo (3.20.1.3) em (3.20.1.4), e colocando a constante arbitrária A_2 em evidência, obtemos

$$A_2 = - \frac{2(ft_0 - \gamma_{00}/\gamma_{10}) [2d_0\Phi \sinh(\Phi) + \cosh(\Phi)]}{[(1 + (2d_0\Phi)^2) \sinh(\Phi) + 4d_0\Phi \cosh(\Phi)]} \quad (3.20.1.5)$$

Agora substituindo (3.20.1.5) na Equação (3.20.1.3)

$$A_1 = 2 \left(ft_0 - \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} \right) - \frac{2(ft_0 - \gamma_{00}/\gamma_{10}) 2d_0\Phi [2d_0\Phi \sinh(\Phi) + \cosh(\Phi)]}{[(1 + (2d_0\Phi)^2) \sinh(\Phi) + 4d_0\Phi \cosh(\Phi)]}$$

$$A_1 = \frac{2(ft_0 - \gamma_{00}/\gamma_{10})[\sin(\Phi) + 2d_0\Phi \cos(\Phi)]}{[(1 + (2d_0\Phi)^2)\sinh(\Phi) + 4d_0\Phi \cosh(\Phi)]} \quad (3.20.1.6)$$

Da mesma maneira, substituindo (3.20.1.6) e (3.20.1.5) em (3.20.1.1) obteremos a solução da equação (3.20), que será mostrada como segue

$$C_0(x) = \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} + 2 \left(ft_0 - \frac{\gamma_{00}}{\gamma_{10}} \right) \frac{\{2d_0\Phi \cosh[\Phi(1-x)] + \sinh[\Phi(1-x)]\} e^{\frac{x}{2d_0}}}{\{(1 + (2d_0\Phi)^2)\sinh(\Phi) + 4d_0\Phi \cosh(\Phi)\}} \quad (3.20.1)$$

2.2.2 Solução da equação filtro $C_\lambda(x)$

$$d_0 \frac{d^2 C_\lambda(x)}{dx^2} - \frac{dC_\lambda(x)}{dx} - (\gamma_{10} - \lambda)C_\lambda(x) = 0, \quad 0 \leq x \leq 1 \quad (3.21)$$

$$C_\lambda(0) - d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.21a)$$

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.21b)$$

De acordo com Bronson e Costa (2008) a solução da Equação (3.21) pode ser dada conforme abaixo

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{(1 + \sqrt{1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda)})x}{2d_0}} + B_2 e^{\frac{(1 - \sqrt{1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda)})x}{2d_0}} \quad (3.21.1)$$

Para $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda)$, que atende a três condições:

Supomos $\Delta < 0$:

$$C_\lambda(x) = e^{\frac{x}{2d_0}} \left[B_1 \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} x\right) + B_2 \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.21.2)$$

Supomos $\Delta = 0$:

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{x}{2d_0}} + B_2 x e^{\frac{x}{2d_0}} \quad (3.21.3)$$

Supomos $\Delta > 0$:

$$C_\lambda(x) = e^{\frac{x}{2d_0}} \left[B_1 \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) + B_2 \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.21.4)$$

2.2.2.1 Solução para $\Delta < 0$:

$$C_\lambda(x) = e^{\frac{x}{2d_0}} \left[B_1 \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} x\right) + B_2 \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.21.2)$$

$$\frac{dC_\lambda(x)}{dx} = \frac{e^{\frac{x}{2d_0}}}{2d_0} \left[(B_1 + \sqrt{|\Delta|}B_2) \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}x\right) + (B_2 - \sqrt{|\Delta|}B_1) \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}x\right) \right] \quad (3.21.2.1)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=0$:

$$C_\lambda(0) - d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} = ft_1, \quad (3.21.2.2)$$

$$-\frac{B_1}{2} - \frac{\sqrt{|\Delta|}}{2}B_2 + B_1 = ft_1 \quad \rightarrow \quad \frac{B_1}{2} - \frac{\sqrt{|\Delta|}}{2}B_2 = ft_1 \quad \rightarrow \quad B_1 = \sqrt{|\Delta|}B_2 + 2ft_1$$

Aplicando a condição de contorno em $x=1$:

$$\frac{dC_\lambda(1)}{dx} = 0, \quad (3.21.2.3)$$

$$B_1 \left[\cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) - \sqrt{|\Delta|} \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) \right] + B_2 \left[\sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) + \sqrt{|\Delta|} \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) \right] = 0$$

Substituindo (3.21.2.2) em (3.21.2.3), obtemos e colocando a constante arbitrária B_2 em evidência, obtemos

$$B_2 = \frac{2ft_1 \left[\sqrt{|\Delta|} \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) - \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) \right]}{\left[(1 - \sqrt{|\Delta|}^2) \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) + 2\sqrt{|\Delta|} \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) \right]} \quad (3.21.2.4)$$

E substituindo (3.21.2.4) em (3.21.2.2) obteremos a constante arbitrária B_1 .

$$B_1 = \frac{2ft_1 \left[\sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) + \sqrt{|\Delta|} \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) \right]}{\left[(1 - \sqrt{|\Delta|}^2) \sin\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) + 2\sqrt{|\Delta|} \cos\left(\frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0}\right) \right]}$$

Fazendo $\sqrt{|\Delta|}/2d_0 = \Omega$, em que $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda) < 0$, fica então definida a Equação

(3.21.2) conforme abaixo

$$C_\lambda(x) = e^{\frac{x}{2d_0}} \left[B_1 \cos(\Omega x) + B_2 \sin(\Omega x) \right] \quad (3.21.2.5)$$

em que:

$$B_1 = \frac{2ft_1 \left[\sin(\Omega) + 2d_0\Omega \cos(\Omega) \right]}{\left[(1 - (2d_0\Omega)^2) \sin(\Omega) + 4d_0\Omega \cos(\Omega) \right]} \quad (3.21.2.6)$$

$$B_2 = \frac{2ft_1 [2d_0\Omega \sin(\Omega) - \cos(\Omega)]}{[(1 - (2d_0\Omega)^2) \sin(\Omega) + 4d_0\Omega \cos(\Omega)]} \quad (3.21.2.7)$$

Substituído (3.21.2.6) e (3.21.2.7) em (3.16.2) obteremos a solução da equação (3.21.1) para $\Delta < 0$, como segue

$$C_\lambda(x) = \frac{2ft_1 \{2d_0\Omega \cos[\Omega(1-x)] + \sin[\Omega(1-x)]\} e^{\frac{x}{2d_0}}}{\{[1 - (2d_0\Omega)^2] \sin(\Omega) + 4d_0\Omega \cos(\Omega)\}}, \quad \Omega = \frac{\sqrt{|\Delta|}}{2d_0} \quad (3.21.1.1)$$

2.2.2.2 Solução para $\Delta = 0$:

$$C_\lambda(x) = B_1 e^{\frac{1}{2d_0}x} + B_2 x e^{\frac{1}{2d_0}x} \quad (3.21.3)$$

$$\frac{dC_\lambda(x)}{dx} = \frac{B_1}{2d_0} e^{\frac{1}{2d_0}x} + B_2 \left(1 + \frac{x}{2d_0}\right) e^{\frac{1}{2d_0}x} \quad (3.21.3.1)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=0$:

$$\begin{aligned} -d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} + C_\lambda(0) &= ft_1, \\ -d_0 \left(\frac{B_1}{2d_0} + B_2 \right) + B_1 &= ft_1 \quad \therefore \quad \frac{B_1}{2} - d_0 B_2 = ft_1 \rightarrow B_1 = 2(ft_1 + d_0 B_2) \end{aligned} \quad (3.21.3.2)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=1$:

$$\begin{aligned} \frac{dC_\lambda(1)}{dx} &= 0, \\ \frac{B_1}{2d_0} e^{\frac{1}{2d_0}} + B_2 \left(1 + \frac{1}{2d_0}\right) e^{\frac{1}{2d_0}} &= 0 \rightarrow B_1 = -B_2(2d_0 + 1) \end{aligned} \quad (3.21.3.3)$$

Igualando (3.21.3.3) e (3.21.3.2)

$$\begin{aligned} 2(ft_1 + d_0 B_2) &= -B_2(2d_0 + 1) \\ 2d_0 B_2 + B_2(2d_0 + 1) &= -2ft_1 \quad \therefore \quad B_2(4d_0 + 1) = -2ft_1 \rightarrow B_2 = -\frac{2ft_1}{4d_0 + 1} \end{aligned} \quad (3.21.3.4)$$

Substituindo (3.21.3.4) em (3.21.3.3)

$$B_1 = \frac{2ft_1(2d_0 + 1)}{4d_0 + 1} \quad (3.21.3.5)$$

Com isso fica então definida a solução da equação (9.1) para $\Delta = 0$, como segue

$$C_\lambda(x) = \frac{2ft_1}{4d_0 + 1} \left[(2d_0 + 1) e^{\frac{1}{2d_0}x} - x e^{\frac{1}{2d_0}x} \right] \quad (9.1.2)$$

2.2.2.3 Solução para $\Delta > 0$:

$$C_\lambda(x) = e^{\frac{x}{2d_0}} \left[B_1 \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) + B_2 \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.21.4)$$

$$\frac{dC_\lambda(x)}{dx} = e^{\frac{x}{2d_0}} \left[(B_1 + \sqrt{\Delta} B_2) \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) + (\sqrt{\Delta} B_1 + B_2) \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} x\right) \right] \quad (3.21.4.1)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=0$:

$$\begin{aligned} -d_0 \frac{dC_\lambda(0)}{dx} + C_\lambda(0) &= ft_1, \\ -\left[\frac{B_1}{2} + \frac{\sqrt{\Delta}}{2} B_2 \right] + [B_1] &= ft_1 \quad \rightarrow \quad \frac{B_1}{2} - \frac{\sqrt{\Delta}}{2} B_2 = ft_1 \quad \rightarrow \quad B_1 = \sqrt{\Delta} B_2 + 2ft_1 \end{aligned} \quad (3.21.4.2)$$

Aplicando a condição de contorno em $x=1$:

$$\begin{aligned} \frac{dC_\lambda(1)}{dx} &= 0, \\ B_1 \left[\cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) + \sqrt{\Delta} \sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) \right] + B_2 \left[\sinh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) + \sqrt{\Delta} \cosh\left(\frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0}\right) \right] &= 0 \end{aligned} \quad (3.21.4.3)$$

Fazendo $\sqrt{\Delta}/2d_0 = \varpi$, em que $\Delta = 1 + 4d_0(\gamma_{10} - \lambda) > 0$ e substituindo (3.21.4.2) em (3.21.4.3), e colocando a constante arbitrária B_2 em evidência, obtemos

$$B_2 = \frac{-2ft_1 [2d_0\varpi \sinh(\varpi) + \cosh(\varpi)]}{[(1 + (2d_0\varpi)^2) \sinh(\varpi) + 4d_0\varpi \cosh(\varpi)]} \quad (3.21.4.4)$$

Agora substituindo (3.21.4.4) na equação (3.21.4.2), obtemos

$$B_1 = \frac{2ft_1 [\sin(\varpi) + 2d_0\varpi \cos(\varpi)]}{[(1 + (2d_0\varpi)^2) \sinh(\varpi) + 4d_0\varpi \cosh(\varpi)]} \quad (3.21.4.5)$$

Da mesma maneira, substituindo (3.21.4.5) e (3.21.4.4) em (3.21.4) obteremos a solução da equação (3.21.1) para $\Delta > 0$, como segue

$$C_\lambda(x) = \frac{2ft_1 \{2d_0\varpi \cosh[\varpi(1-x)] + \sinh[\varpi(1-x)]\} e^{\frac{x}{2d_0}}}{\{[1 + (2d_0\varpi)^2] \sinh(\varpi) + 4d_0\varpi \cosh(\varpi)\}}, \quad \varpi = \frac{\sqrt{\Delta}}{2d_0} \quad (3.21.1.3)$$