

6 MOVIMENTO E MODELAGEM DE SAIS NO SOLO

Paulo Afonso Ferreira e Mauro Aparecido Martinez

6.1 DESLOCAMENTO DE FLUIDOS MISCÍVEIS

6.1.1 Introdução

O deslocamento de fluidos miscíveis é um processo que ocorre quando um fluido mistura-se com outro fluido e o desloca. A lixiviação de sais no solo é um exemplo de deslocamento miscível. A água de irrigação mistura-se com a solução do solo e desloca-a no perfil.

Entre os autores que desenvolveram pesquisas com vistas a uma descrição sistemática dos processos de deslocamento de fluidos miscíveis, notadamente em estudos de lixiviação de sais em solos salinos, destacam-se os trabalhos de Nielsen & Biggar (1961, 1962, 1963) e Biggar & Nielsen (1962, 1963). A partir desses trabalhos, as técnicas em deslocamento miscível ganharam credibilidade, difundiram-se mundialmente e incorporaram-se às ciências do solo.

Terminologia usada em deslocamento miscível:

- a) fluido - líquido com características físicas e químicas definidas, como a água contendo íons de nitrato;
- b) efluente - fluido coletado na seção de saída de uma coluna de solo;
- c) fluido deslocador - aquele que desloca o fluido atual e ocupa o espaço por ele deixado no meio poroso;
- d) fluido deslocado - aquele que é substituído no espaço poroso pelo fluido deslocador.

Antes de examinar resultados experimentais e procurar entender o que ocorre no meio poroso, quando um fluido desloca outro fluido, é necessário compreender alguns processos físicos envolvidos. Quando um fluido é deslocado para baixo, em uma coluna de solo, a interface entre o fluido deslocador e o deslocado perde nitidez ou definição à medida que o tempo transcorre. Isso ocorre porque há uma mistura entre os dois junto à interface.

A mistura junto à interface é decorrente da difusão de solutos de um fluido para dentro do outro e da diferença de velocidade das partículas líquidas dentro de um mesmo poro e de poros de diferentes tamanhos. O movimento dos solutos resulta tanto da diferença de concentração (difusão) quanto da diferença de potencial hidráulico (fluxo de massa). Outro aspecto importante decorre da geometria irregular da matriz do solo, que torna o escoamento de natureza errática e faz com que os solutos do fluido-deslocador dispersem para dentro do deslocado, caracterizando uma *dispersão*, que não deve ser confundida com *difusão*. Portanto, a mistura que ocorre na interface entre dois fluidos, geralmente, é devida à dispersão (deslocamento errático) e à difusão. Para o caso de escoamento na direção vertical, a diferença de densidade entre os fluidos deslocado e deslocador é outra característica que favorece a dispersão.

Para analisar as mudanças na concentração de solutos no efluente de uma coluna de solo, os dados devem ser apresentados de uma forma padrão denominada *curva de efluente*. Uma curva de efluente é obtida plotando-se os valores da relação C/C_0 , no eixo vertical, e o número de volume de poros, percolados, no eixo horizontal. Na relação C/C_0 , C é a concentração do soluto no efluente e C_0 a concentração inicial do soluto no fluido deslocador.

O número de volumes de poros (p) é dado pela expressão:

$$p = \frac{Qt}{V_o} \quad (6.1)$$

em que,

Q - vazão, $\text{cm}^3 \text{min}^{-1}$;

t - tempo de coleta do efluente, min; e

V_o - volume de poros do meio poroso ocupado pelo fluido (é considerado igual ao volume de poros da amostra somente quando o meio for saturado).

Quando o líquido deslocador é uma solução e o deslocado é água pura, a relação C/C_0 será zero no início e se aproximará de 1 com o decorrer do tempo, isto é, quando o volume de efluente coletado for aproximadamente igual a dois volumes de poros.

6.1.2 Tipos de escoamento através do meio poroso

Escoamento do tipo pistão: é um tipo teórico de deslocamento miscível, pois não considera qualquer tipo de mistura junto à interface dos líquidos. As Figuras 6.1 e 6.2 ilustram este tipo de deslocamento. Observa-se que, ao passar um volume de poros, C/C_0 é igual a 1 (Figura 6.2).

Escoamento do tipo laminar: é um tipo mais realístico de deslocamento miscível, que ocorre em um tubo capilar. Neste caso, o fluido deslocador moverá mais rapidamente no centro do tubo, relativamente às paredes, sendo que ao passar um volume de poros de efluente, a relação C/C_0 é igual a 0,5, Figura 6.3.

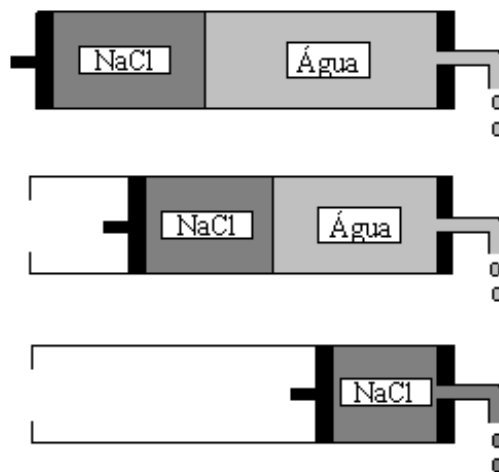


Figura 6.1 Escoamento do tipo pistão em um tubo.

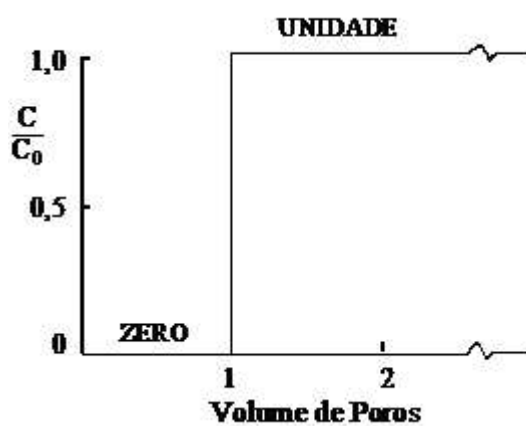


Figura 6.2 Curva de efluente de escoamento do tipo pistão (Adaptado de Nielsen & Biggar, 1962).

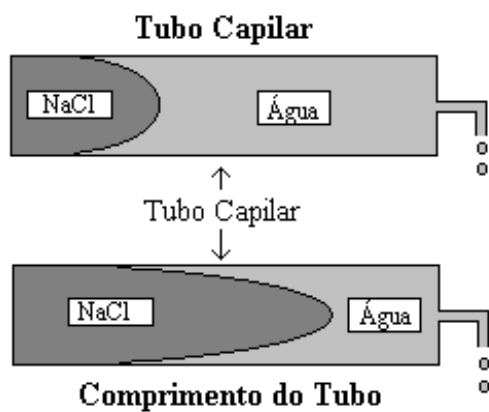


Figura 6.3 Escoamento em um tubo capilar.

Quanto menor for o diâmetro do capilar e maior o seu comprimento, mais mistura ocorrerá na interface dos líquidos. A Figura 6.4 apresenta a curva típica para este caso.

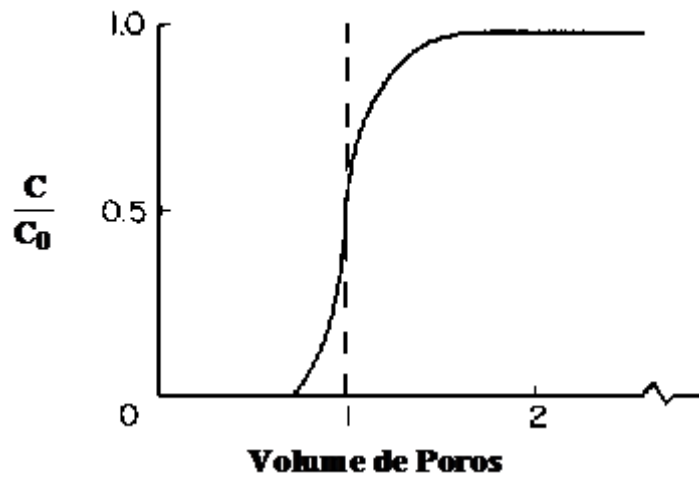


Figura 6.4 Curva de efluente para escoamento em um tubo capilar (Adaptado de Nielsen & Biggar, 1962).

A Figura 6.5 apresenta a curva de efluente de um solo saturado. Devido ao efeito simultâneo da dispersão e difusão na interface entre os fluidos, ela é mais vertical até completar um volume de poros. A relação $C/C_0 \cong 1$ após passados dois volumes de poros de efluente.

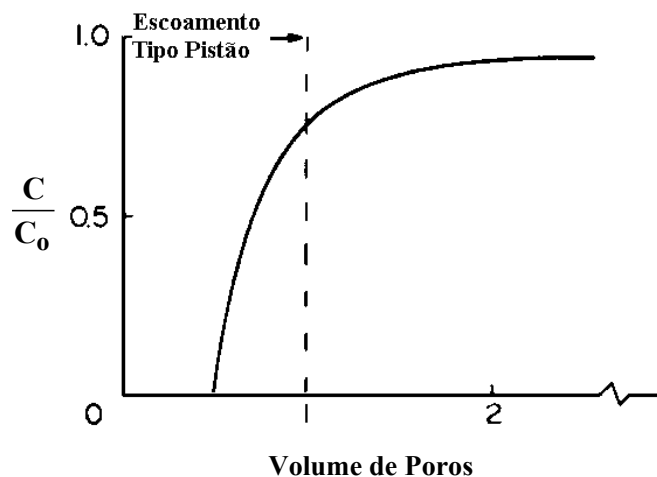


Figura 6.5 Curva de efluente para diferentes velocidades de escoamento nos poros como ocorre em solo saturado (Adaptado de Nielsen & Biggar, 1962).

6.1.3 Curvas experimentais de efluentes

A Figura 6.6 apresenta a curva de efluente de cloro para um solo arenoso. O fluido-deslocador é uma solução de cloreto, escoando à velocidade $0,79 \text{ cm h}^{-1}$. Observa-se que o

ponto de inflexão da curva de efluente corresponde ao volume de poros = 1 e à relação $C/C_0 = 0,5$.

A Figura 6.7 apresenta a curva de efluente de cloreto escoando através de um meio argiloso. Observa-se que a relação C/C_0 não se aproxima da unidade tão rapidamente como no caso do arenoso. Este retardamento é devido à maior porcentagem de microporos.

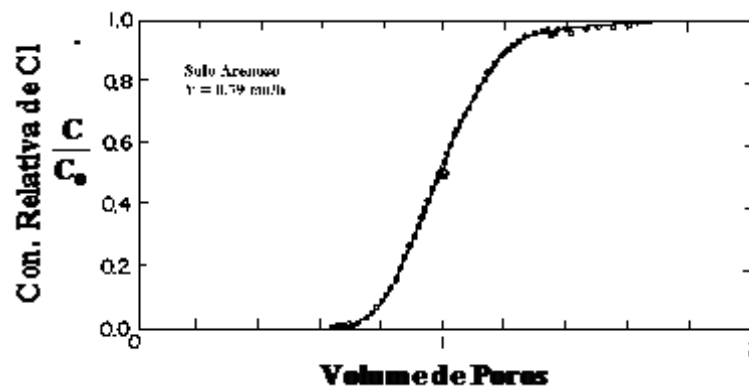


Figura 6.6 Curva de efluente de cloro para um solo arenoso (Adaptado de Nielsen & Biggar, 1962).

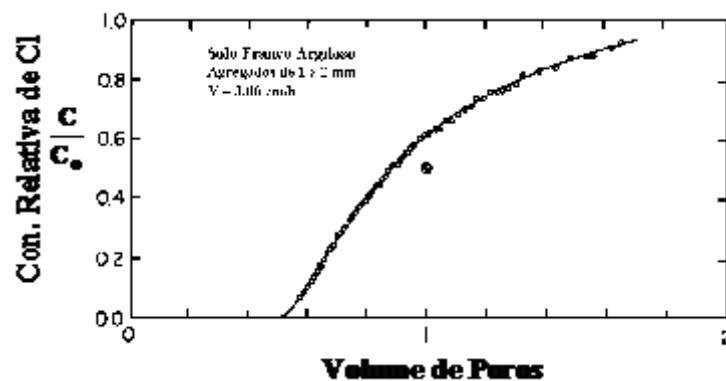


Figura 6.7 Curva de efluente de cloro para um solo franco argiloso (Adaptado de Nielsen & Biggar, 1962).

6.2 SOLUÇÕES ANALÍTICAS PARA O DESLOCAMENTO DE FLUIDOS MISCÍVEIS

Quando a velocidade de escoamento dos fluidos é relativamente alta e o percurso curto, a mistura é, predominantemente, devida à dispersão. Por outro lado, quando a velocidade é baixa e o percurso longo, predominará a difusão.

Equações diferenciais que descrevem a mistura na interface dos fluidos, quando resolvidas para condições iniciais e de contorno apropriadas, permitem calcular a

concentração do fluido deslocador, num meio poroso, a uma distância x da seção de entrada e a um tempo t contado a partir do instante em que os fluidos deslocador e deslocado entraram em contato.

6.2.1 Equação diferencial para a dispersão longitudinal

Antes de proceder à derivação da equação diferencial para a dispersão longitudinal torna-se importante estabelecer a natureza física do modelo de escoamento, ou seja:

- a) o fluido deslocador possui uma concentração C_0 de soluto;
- b) o fluido deslocado possui densidade e viscosidade iguais às do fluido deslocador;
- c) no meio poroso, há um plano movendo-se na direção horizontal x a uma velocidade v igual à velocidade média de escoamento dos fluidos; e
- d) inicialmente, as interfaces dos fluidos são coplanares, formando uma interface nítida (ainda sem mistura).

Em razão do interesse no grau de dispersão do soluto através do plano que se move próximo à interface dos fluidos, é necessário considerar um sistema de eixos coordenados movendo-se através do meio poroso à uma velocidade v equivalente à velocidade média de escoamento dos fluidos. Posteriormente, este sistema de coordenadas móveis será referido a um sistema fixo para tornar possíveis as medições físicas e a aferição do modelo. O sistema fixo de coordenadas é importante, pois, seria difícil medir as distâncias entre os pontos em um fluido em movimento.

O sistema fixo de coordenadas possui variável espacial x e tempo variável t , tal que a transformação para o sistema móvel de coordenadas espacial x_1 e tempo variável t_1 seja dado por:

$$x = x_1 + vt_1 \quad (6.2)$$

$$t = t_1 \quad (6.3)$$

Seja o sistema físico apresentado na Figura 6.8, referido aos sistemas de coordenadas fixas e móveis. Denominando v à velocidade de deslocamento do sistema móvel (x_1, t_1) , a qual é também a velocidade do plano de interface dos dois fluidos, equivale a dizer que a interface é estacionária no sistema (x_1, t_1) . Portanto, no sistema móvel, o plano deve estar sempre em $x_1 = 0$.

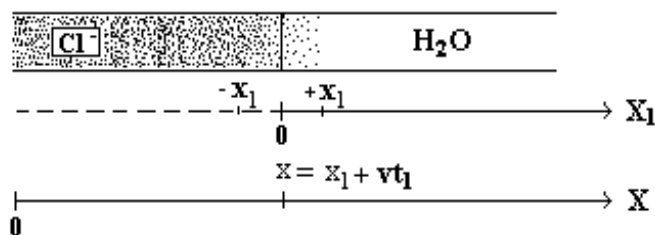


Figura 6.8 Deslocamento da água pelo cloro numa coluna de solo referida aos sistemas de coordenadas fixas X e móvel X_1 .

A equação diferencial que descreve a mistura na interface, no sistema x_1, t_1 , quando resolvida, fornecerá a concentração C em x_1, t_1 .

Para encontrar a equação diferencial no sistema x_1, t_1 considera-se, inicialmente, que existe uma dispersão uniforme de um soluto na direção x através de uma *placa de líquido* de seção transversal A e espessura Δx_1 , movendo-se à velocidade v , tal que $x_1 = x - vt$ (Figura 6.9).

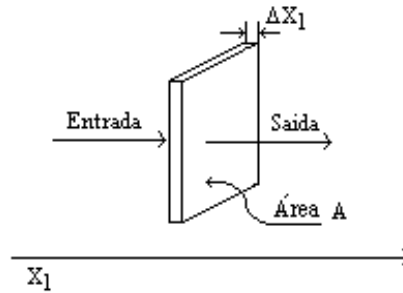


Figura 6.9 Dispersão através de uma *placa de fluido* movendo com o fluido na direção x a uma velocidade média v tal que $x_1 = x - vt$.

A quantidade de massa de soluto que atravessa a face esquerda da placa por unidade de tempo é qA , onde que q significa gramas de soluto transferidas por unidade de tempo e A é a área perpendicular à direção do escoamento. A massa de soluto que deixa a placa através da face oposta da placa é dada por:

$$\left(q + \frac{\partial q}{\partial x_1} \Delta x_1 \right) A$$

Portanto, gramas de soluto que entram na placa menos gramas de soluto que deixam a placa, na unidade de tempo é

$$\text{Entrada-saída} = qA - \left(qA + \frac{\partial q}{\partial x_1} \Delta x_1 A \right) \quad \text{ou}$$

$$\text{Entrada-saída} = - \frac{\partial q}{\partial x_1} \Delta x_1 A \quad (6.4)$$

Sendo C a concentração do soluto por unidade de volume, a quantidade de massa do soluto dentro da placa será $C (\Delta x_1 A)$ e a taxa à qual as gramas de soluto variam, por unidade de tempo, dentro da placa é

$$\frac{\partial}{\partial t} (C \Delta x_1 A) = \left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) \Delta x_1 A \quad (6.5)$$

Pelo princípio de continuidade ou de conservação das massas, gramas de soluto transferidas, por dispersão, para dentro da placa por unidade de tempo menos gramas transferidas para fora da placa, por unidade de tempo, tem que ser igual à mudança em gramas de soluto dentro da placa, por unidade de tempo, isto é, os segundos membros das Equações 6.4 e 6.5 são iguais, ou

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t_1} = - \frac{\partial q}{\partial x_1} \quad (6.6)$$

Em 1935, Taylor propôs uma equação linear que quantifica a massa de soluto transferida por unidade de área e tempo q , da forma

$$q = -E \frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_1} \quad (6.7)$$

em que,

E - coeficiente de dispersão, o qual não deve ser confundido com o coeficiente de difusão D , da equação de Fick, pelo fato de E ser independente da concentração do soluto; e

$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial x_1}$ - gradiente de concentração.

Substituindo q na Equação 6.6, por seu valor dado na Equação 6.7, obtém-se a equação diferencial para a dispersão longitudinal, ou seja,

$$\frac{\partial \mathcal{C}}{\partial t_1} = E \frac{\partial^2 \mathcal{C}}{\partial x_1^2} \quad (6.8)$$

Solução para a dispersão na interface dos fluidos: inicialmente, considera-se uma coluna de solo longa e saturada com água pura. No instante $t_1 = 0$, substitui-se a água na metade negativa da coluna, isto é, $x_1 < 0$, por uma solução de cloreto (Figura 6.10). Se a concentração de íons de cloreto do fluido deslocador for C_0 , as condições iniciais e de contorno serão:

$$C(x_1, t_1) = C_0 \text{ para } x_1 < 0 \text{ e } t_1 = 0 \quad (6.9)$$

$$C(x_1, t_1) = 0 \text{ para } x_1 > 0 \text{ e } t_1 = 0 \quad (6.10)$$

$$\lim_{x_1 \rightarrow \infty} C(x_1, t_1) = 0 \text{ para } 0 < x_1 < \infty \text{ e } 0 < t_1 < \infty \quad (6.11)$$

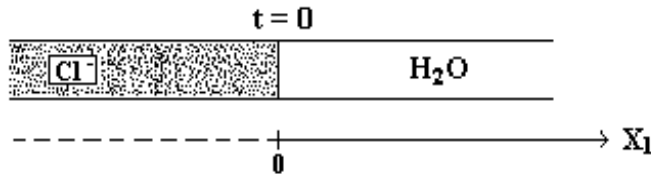


Figura 6.10 Ilustração de condições iniciais e de contorno em coluna de solo tendo o cloro como líquido deslocador da água.

A solução da Equação 6.8, sujeita às condições de contorno das Equações 6.9, 6.10 e 6.11, conforme Kirkham & Powers (1972), é

$$C(x_1, t_1) = \frac{1}{2} Co \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left[\frac{x_1}{2(Et_1)^{1/2}} \right] \right\} \quad (6.12)$$

A Equação 6.12 é a solução do problema para o sistema móvel. Para transformá-la para o sistema fixo, é suficiente lembrar que $t_1 = t$ e $x_1 = x - vt$. Procedendo a esta substituição e dividindo membro a membro por Co , tem-se

$$\frac{C}{Co} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left[\frac{x - vt}{2(Et)^{1/2}} \right] \right\} \quad (6.13)$$

Embora sendo a solução do problema em coordenadas fixas, a Equação 6.13 ainda não é a forma mais conveniente para calcular pontos sobre uma curva de efluente. Para escrever o segundo membro da Equação 6.13, em termos do número de volume de poros (p), faz-se:

a) $v = v_d/\alpha$, velocidade média de avanço, em que v_d é o fluxo e α é a porosidade efetivamente ocupada pela solução, podendo ser representada pela porcentagem de umidade a base de volume (θ_v).

b) $V_0 = \alpha V$, volume efetivo de poros, em que V é o volume da amostra de solo ($A \times L = \text{área} \times \text{comprimento}$).

c) $p = Q t/V_0$, número de volume de poros, em que Q é a vazão e t o tempo, conforme Equação 6.1.

Portanto, o número de volume de poros p é dado por

$$p = \frac{Qt}{V_0} = \frac{Qt}{\alpha V} = \frac{\frac{Qt}{A}}{\alpha V} = \frac{v_d t}{\alpha L} = \frac{vt}{L} \quad (6.14)$$

Para $x = L$, pode-se escrever o argumento da função erro,

$$\frac{x - vt}{2(Et)^{1/2}} = \frac{(L - vt)}{2(Et)^{1/2}} = \frac{\left(1 - \frac{vt}{L}\right)}{2\left(\frac{Et}{L^2}\right)^{1/2}}.$$

Substituindo vt/L por p e t por pL/v e, substituindo o resultado na Equação 6.13, obtém-se:

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ 1 - \operatorname{erf} \left[\frac{i - p}{2\left(\frac{Ep}{vL}\right)^{1/2}} \right] \right\} \quad (6.15)$$

O valor do coeficiente de dispersão E é calculado empregando-se a relação

$$E = \frac{vL}{4\pi S^2} \quad (6.16)$$

O valor de S na equação 6.16 é a declividade da curva experimental de efluente, a um determinado valor de p , o qual é geralmente aquele correspondente ao ponto de inflexão.

Função-Erro

Considerando que as soluções aqui apresentadas implicam no emprego da função-erro ($\operatorname{erf} x$), torna-se importante conhecer algumas de suas propriedades. A função-erro é uma função de densidade de probabilidade e seu valor está entre -1 e $+1$. De acordo com a Figura 6.11, ela é assintótica à reta $y = 1$ quando $x \rightarrow \infty$ e à reta $y = -1$ quando $x \rightarrow -\infty$. Sua expressão analítica é

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-t^2} dt \quad (6.17)$$

Como a integral do segundo membro é complexa, é preferível calcular seu valor por meio do desenvolvimento em série, isto é,

$$\operatorname{erf} x = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(x - \frac{x^3}{1!3} + \frac{x^5}{2!5} - \frac{x^7}{3!7} + \dots \right) \quad (6.18)$$

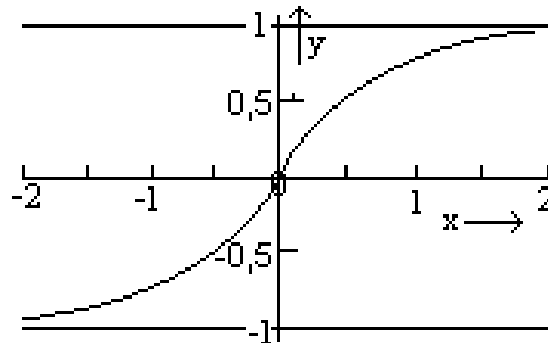


Figura 6.11 Representação gráfica da função-erro.

A função-erro complementar ($\operatorname{erfc} x$) é dada por:

$$\operatorname{erfc} x = 1 - \operatorname{erf} x \quad (6.19)$$

Pelo gráfico da função, observa-se que:

- a) trata-se de uma função ímpar, isto é, $\operatorname{erf}(-x) = -\operatorname{erf} x$;
- b) $\operatorname{erf} 0 = 0$;
- c) $\operatorname{erf} \infty = 1$; e
- d) $\operatorname{erf} -\infty = -1$.

Ainda, pela equação 6.19, resulta:

- a) $\operatorname{erfc} \infty = 0$; e
- b) $\operatorname{erfc}(-\infty) = 2$.

Para uso corrente, pode-se usar os valores de $\operatorname{erf} x$ e $\operatorname{erfc} x$ da Tabela 6.1, onde observa-se que a $\operatorname{erf} x$ converge rapidamente, isto é, $x = 2,5$, $\operatorname{erf} 2,5 = 0,999593$.

Tabela 6.1 Função-erro e função-erro complementar.

x	erf x	erfc x	x	erf x	erfc x
0	0	1,0	1,0	0,842701	0,157299
0,05	0,056372	0,943628	1,1	0,880205	0,119795
0,1	0,112463	0,887537	1,2	0,910314	0,089686
0,15	0,167996	0,832004	1,3	0,934008	0,065992
0,2	0,222703	0,777297	1,4	0,952285	0,047715
0,25	0,276326	0,723674	1,5	0,966105	0,033805
0,3	0,328627	0,671373	1,6	0,976348	0,023652
0,35	0,379382	0,620618	1,7	0,983790	0,016210
0,4	0,428392	0,571008	1,8	0,989091	0,010909
0,45	0,475482	0,524518	1,9	0,992700	0,007210
0,5	0,520500	0,479500	2,0	0,995322	0,004678
0,55	0,563323	0,436677	2,1	0,997021	0,002979
0,6	0,603856	0,396144	2,2	0,998137	0,001863
0,65	0,642029	0,357971	2,3	0,998857	0,001143
0,7	0,677801	0,322199	2,4	0,999311	0,000689
0,75	0,711156	0,288844	2,5	0,999503	0,000407
0,8	0,742101	0,257899	2,6	0,999764	0,000236
0,85	0,770668	0,229332	2,7	0,999866	0,000134
0,9	0,796908	0,203092	2,8	0,999925	0,000075
0,95	0,820891	0,179109	2,9	0,999959	0,000041

Exemplo:

A velocidade média de escoamento v de um fluido através de um meio poroso formado por uma coluna de 30 cm de comprimento, a qual foi preenchida com lã de vidro de modo a resultar numa porosidade de 200μ , é 4,94 cm/h. A declividade da curva de efluente, determinada experimentalmente, é 4,44 a um volume de poros $p = 1$.

a) Calcule o coeficiente de dispersão E dos íons de cloreto.

b) Utilize o valor $E = 0,598 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$ (calculado em a), para traçar a curva teórica de efluente e compare os resultados com a linha contínua da Figura 6.12.

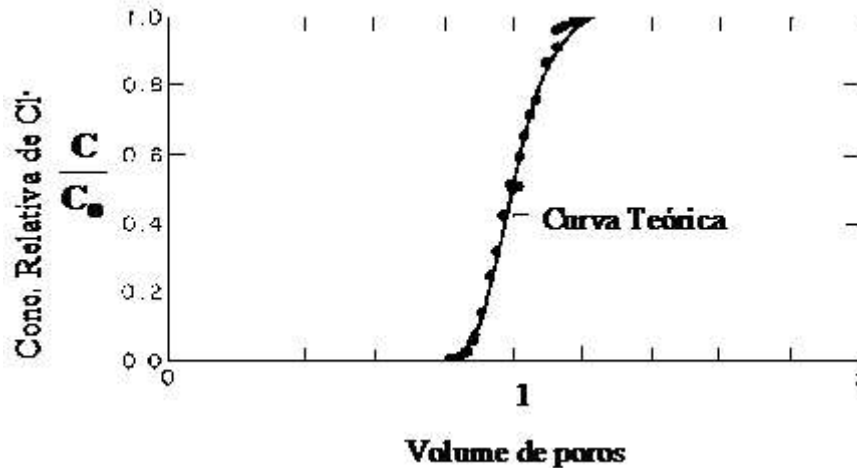


Figura 6.12 Curva de efluente de cloro para um meio poroso formado por lã de vidro e ajustado para porosidade 200 μ (Adaptada de Nielsen & Biggar, 1962).

Solução:

Dados: $L = 30 \text{ cm}$; $v = 4,94 \text{ cm/h}$; $S = 4,44$; $p = 1$.

a) Coeficiente de dispersão

$$E = \frac{vL}{4\pi S^2} = \frac{4,94 \cdot 30}{4 \cdot \pi \cdot 4,44^2} = 0,598 \text{ cm}^2 \text{ h}^{-1}$$

b) Valores dos pontos P (p ; C/C_0) sobre a curva da Figura 6.12, que se desenvolve no intervalo $0,75 < p < 1,3$, serão calculados fazendo x igual ao argumento da função erro, isto é,

$$x = \frac{1-p}{2\left(\frac{Ep}{vL}\right)^{1/2}}$$

b.1) Primeiro ponto P(0,75; C/C_0)

$$x = \frac{1-0,75}{2\left(0,598 \cdot 0,75 / 4,94 \cdot 30\right)^{1/2}} = 2,27$$

Substituindo este valor na equação 2.14, obtém-se

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} (1 - \text{erf } 2,27) = \frac{1}{2} (1 - 0,998) = 0,0005 \approx 0$$

O valor 0,998 é obtido diretamente da Tabela 6.1. O primeiro ponto sobre a curva é P(0,75; 0,0).

b.2) Segundo ponto, P(0,85; C/C₀)

$$x = \frac{1 - 0,85}{2(0,598 \cdot 0,85 / 4,94 \cdot 30)^{\frac{1}{2}}} = 1,28 \text{ e}$$

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} (1 - \text{erf } 1,28) = \frac{1}{2} (1 - 0,92) = 0,04$$

Segundo ponto P(0,85; 0,04)

b.3) Terceiro ponto, P(0,95; C/C₀)

$$x = \frac{1 - 0,95}{2(0,598 \cdot 0,95 / 4,74 \cdot 30)^{\frac{1}{2}}} = 0,40$$

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} (1 - \text{erf } 0,40) = \frac{1}{2} (1 - 0,428) = 0,286.$$

Terceiro ponto P(0,95; 0,286)

b.4) Quarto ponto, P(1,0; C/C₀)

$$\text{Para } p = 1 \Rightarrow \frac{C}{C_0} = 0,5$$

Quarto ponto, P (1; 0,5)

b.5) Quinto ponto, P(1,1; C/C₀)

$$x = \frac{1 - 1,1}{2(0,598 \cdot 1,1 / 4,94 \cdot 30)^{\frac{1}{2}}} = -0,75$$

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} [1 - \text{erf}(-0,75)] = \frac{1}{2} [1 - (-\text{erf } 0,75)] = \frac{1}{2} (1 + 0,711) = 0,85$$

Quinto ponto P(1,1; 0,85)

b.6) Sexto ponto, P(1,2; C/C₀)

$$x = \frac{1 - 1,2}{2(0,598 \cdot 1,2 / 4,94 \cdot 30)^{\frac{1}{2}}} = -1,437$$

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} (1 + \text{erf } 1,437) = \frac{1}{2} (1 + 0,95) = 0,975$$

Sexto ponto P (1,2; 0,975)

Quando plotados sobre a curva experimental, estes pontos mostram excelente ajuste da função aos valores medidos.

6.2.2 Solução para dispersão de um pulso (“slug”) de um fluido

Às vezes um soluto químico, dissolvido em água, é aplicado no solo e, em seguida, é aplicada água pura para transportá-lo para dentro do perfil do solo. Na prática, um pulso (“slug”) pode consistir na aplicação de alguns milímetros de água de irrigação contendo fertilizantes dissolvidos, seguida pela aplicação de água pura.

Novamente, a solução será obtida em coordenadas móveis ($x_1; t_1$) e depois será transformada para o sistema fixo. O sentido positivo da coordenada vertical é para baixo. O problema consiste em encontrar uma expressão para a curva de efluente de um pulso (“slug”) de água-soluto-água. A solução consiste em imaginar um meio poroso, idêntico ao solo, estendido na direção vertical a partir da superfície do solo ($x = 0$) a $x = -\infty$.

O pulso (“slug”) é teoricamente colocado no meio poroso acima da superfície do solo, de modo que a solução no meio poroso de comprimento $-x_0$ cm possui concentração C_0 . Acima de $-x_0$ cm a concentração é zero, bem como abaixo da superfície do solo (Figura 6.13).

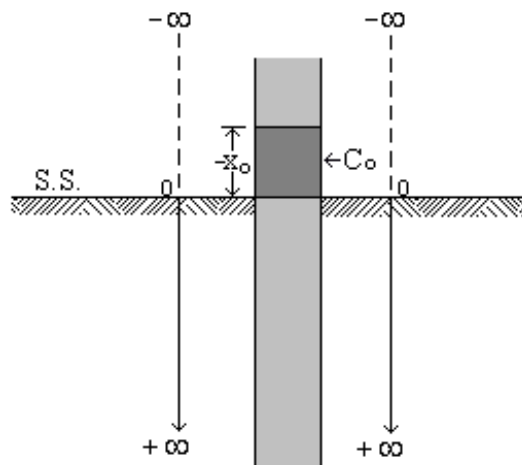


Figura 6.13 Esquema representando a infiltração de um pulso (“slug”).

Se no instante $t = 0$ inicia-se o escoamento em todo o sistema imaginário, à uma velocidade constante v , para baixo, isto seria o mesmo que aplicar uma quantidade finita de solução de concentração C_0 na superfície do solo, à mesma velocidade v , seguida de água com concentração $C = 0$.

A elaboração do meio fictício acima de $x = 0$ visou permitir a solução do problema no sistema móvel ($x_1; t_1$).

A equação diferencial, que descreve a dispersão no sistema ($x_1; t_1$), é a equação 6.8, ou seja,

$$\frac{\partial C}{\partial t_1} = E \frac{\partial^2 C}{\partial x_1^2}$$

Conforme Figura 6.13, as condições iniciais e de contorno são:

$$C(x_1, t_1) = 0, \text{ para } -\infty < x_1 < -x_0, t_1 = 0 \quad (6.20)$$

$$C(x_1, t_1) = C_0, \text{ para } -x_0 < x_1 < 0, t_1 = 0 \quad (6.21)$$

$$C(x_1, t_1) = 0, \text{ para } 0 < x_1 < \infty, t_1 = 0 \quad (6.22)$$

$$\lim_{x_1 \rightarrow \infty} C(x_1, t_1) = 0 \text{ para } x_1 > 0, t_1 > 0 \quad (6.23)$$

A solução da Equação 6.8 sujeita às condições 6.20 a 6.23, conforme Kirkham & Powers (1972) é

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \left[\operatorname{erf} \frac{1 + \frac{x_0}{L} - p}{2[Ep / (vL)]^{1/2}} \right] - \left[\operatorname{erf} \frac{1 - p}{2[Ep / (vL)]^{1/2}} \right] \right\} \quad (6.24)$$

Para calcular pontos sobre a curva de efluente, são necessários o valor inicial de x_0 , o número de volume de poros coletados p , a velocidade média v e o comprimento da coluna L . O valor de x_0 pode ser obtido da relação

$$x_0 = Vs / \alpha A \quad (6.25)$$

em que,

Vs - $\alpha x_0 A$, volume da solução ;

A - área transversal; e

α - porosidade efetiva.

O número de volume de poros e o coeficiente de dispersão são calculados conforme Kirkham & Powers (1972), empregando-se as expressões:

$$p = 1 + x_0 / 2L \quad (6.26)$$

$$E = \frac{vL \left(\frac{x_0}{2L} \right)^2}{2 \left(\frac{1 + x_0}{2L} \right)^2 Z^2} \quad (6.27)$$

Para obter o valor de Z , determina-se $1/2 C/C_{\text{omax}}$ na curva experimental de efluente o qual corresponde ao valor de $\Phi(z)$ na função de distribuição normal, ou,

$$\frac{1}{2} \frac{C}{C_o} \text{max.} = \frac{1}{(2\pi)^{\frac{1}{2}}} \int_0^Z e^{-\frac{w^2}{2}} dw$$

O valor de Z é obtido na Tabela 6.2 da função de distribuição normal para $1/2 C/C_{\text{omax}} + 0,5$ (adiciona-se $\Phi(0) = 0,5$, porque a tabela fornece os valores de $\Phi(z)$ apenas para $z > 0$).

Exemplo:

Corey et al. (1963) passaram 75 ml de uma solução de CaCl_2 através de uma coluna de areia previamente saturada com água. A área transversal da coluna era 25 cm^2 , o comprimento 30 cm, a porosidade efetiva $0,213 \text{ cm}^3 \text{ cm}^{-3}$ e a velocidade de escoamento $0,186 \text{ cm h}^{-1}$.

A curva experimental de efluente está representada na Figura 6.14.

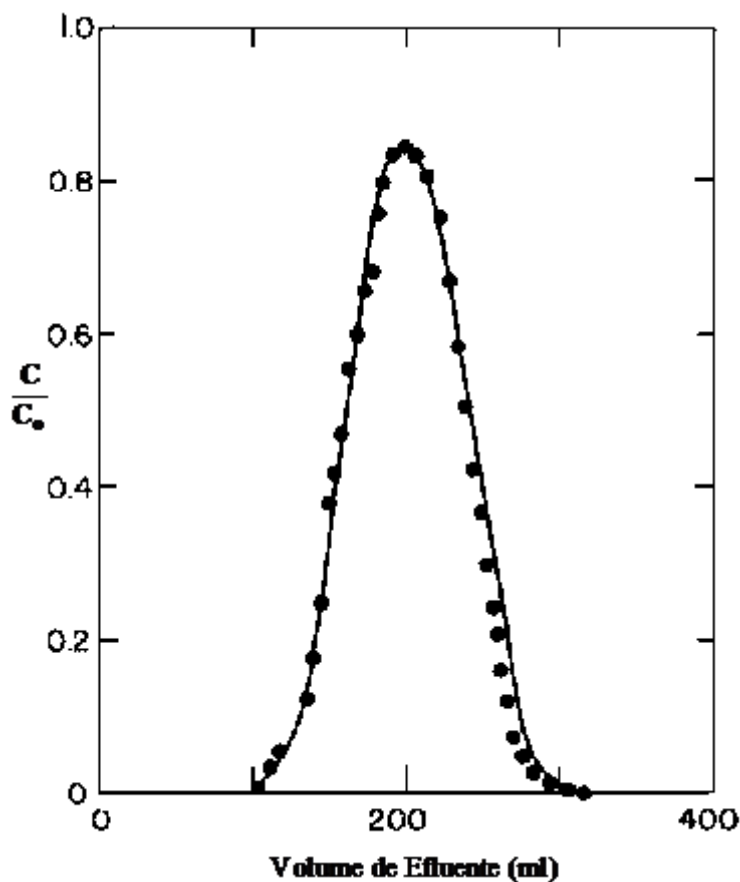


Figura 6.14 Curva de efluente de cloro para coluna de areia de 30 cm de comprimento. A linha sólida corresponde aos valores calculados (Adaptado de Corey et al., 1963).

Calcule:

- O valor de $x_0/2L$;
- O valor p (Equação 6.26), segundo o qual a teoria prediz que C/C_0 é máximo. Calcule a quantos ml de efluente corresponde este valor;
- O coeficiente de dispersão E (o valor de v é fornecido diretamente); e
- A curva teórica de efluente.

Compare os resultados com a linha contínua da Figura 6.14.

Solução:

$$a) x_0 = \frac{V_s}{\alpha A} = \frac{75}{0,213 \times 25} = 14,085 \text{ cm}$$

$$\frac{x_0}{2L} = \frac{14,08}{2 \times 30} = 0,2347$$

$$b) p = 1 + \frac{x_0}{2L} = 1 + \frac{14,085}{2 \times 30} = 1,235$$

$$V_0 = AL\alpha = 25 \times 30 \times 0,213 = 159,75 \text{ cm}^3$$

$$c) E = \frac{vL \left(\frac{x_0}{2L} \right)^2}{2 \left(1 + \frac{x_0}{2L} \right) Z^2}$$

Obtenção do valor de Z

Na curva da Figura 6.14, obtém-se o valor $C/C_{\text{omax}} = 0,8414$ (ponto de máximo da curva) e, portanto, $1/2 \times C/C_{\text{omax}} = 0,4207$. Portanto, para obter o valor de Z na Tabela 6. de distribuição normal, é necessário somar 0,5 ao valor $1/2(C/C_0)_{\text{max}}$, ou seja,

$$\Phi(Z) = 0,5 + 1/2(C/C_0)_{\text{max}} = 0,5 + 0,4207 = 0,9207.$$

Para $\Phi(Z) = 0,9207$, obtém-se diretamente da Tabela 6.2 o valor de $Z = 1,41$. Portanto,

$$E = \frac{0,186.30(0,2347)^2}{2(1 + 0,2347)(1,41)^2} = 0,0626 \text{ cm}^2 / \text{h}$$

d) Curva teórica de efluente:

Conforme a Figura 6.14, a curva desenvolve-se no intervalo de valores de volume de efluente entre 100 e 320 ml. Fazendo os argumentos da função-erro da Equação 6.24 iguais a x_1 e x_2 , isto é,

Tabela 6.2 Valores da função de distribuição normal $\Phi(z)$

$$\Phi(-z) = 1 - \Phi(z), \Phi(0) = 0,5000$$

z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$	z	$\Phi(z)$
0.01	5040	0.51	6950	1.01	8438	1.51	9345	2.01	9778	2.51	9940
0.02	5080	0.52	6985	1.02	8461	1.52	9357	2.02	9783	2.52	9941
0.03	5120	0.53	7019	1.03	8485	1.53	9370	2.03	9788	2.53	9943
0.04	5160	0.54	7054	1.04	8508	1.54	9382	2.04	9793	2.54	9945
0.05	5199	0.55	7088	1.05	8531	1.55	9394	2.05	9798	2.55	9946
0.06	5239	0.56	7123	1.06	8554	1.56	9406	2.06	9803	2.56	9948
0.07	5279	0.57	7157	1.07	8577	1.57	9418	2.07	9808	2.57	9949
0.08	5319	0.58	7190	1.08	8599	1.58	9429	2.08	9812	2.58	9951
0.09	5359	0.59	7224	1.09	8621	1.59	9441	2.09	9817	2.59	9952
0.10	5398	0.60	7257	1.10	8643	1.60	9452	2.10	9821	2.60	9953
0.11	5438	0.61	7291	1.11	8665	1.61	9463	2.11	9826	2.61	9955
0.12	5478	0.62	7324	1.12	8686	1.62	9474	2.12	9830	2.62	9956
0.13	5517	0.63	7357	1.13	8708	1.63	9484	2.13	9834	2.63	9957
0.14	5557	0.64	7389	1.14	8729	1.64	9495	2.14	9838	2.64	9959
0.15	5596	0.65	7422	1.15	8749	1.65	9505	2.15	9842	2.65	9960
0.16	5636	0.66	7454	1.16	8770	1.66	9515	2.16	9846	2.66	9961
0.17	5675	0.67	7486	1.17	8790	1.67	9525	2.17	9850	2.67	9962
0.18	5714	0.68	7517	1.18	8810	1.68	9535	2.18	9854	2.68	9963
0.19	5753	0.69	7549	1.19	8830	1.69	9545	2.19	9857	2.69	9964
0.20	5793	0.70	7580	1.20	8849	1.70	9554	2.20	9861	2.70	9965
0.21	5832	0.71	7611	1.21	8869	1.71	9564	2.21	9864	2.71	9966
0.22	5871	0.72	7642	1.22	8888	1.72	9573	2.22	9868	2.72	9967
0.23	5910	0.73	7673	1.23	8907	1.73	9582	2.23	9871	2.73	9968
0.24	5948	0.74	7704	1.24	8925	1.74	9591	2.24	9875	2.74	9969
0.25	5987	0.75	7734	1.25	8944	1.75	9599	2.25	9878	2.75	9970
0.26	6026	0.76	7764	1.26	8962	1.76	9608	2.26	9881	2.76	9971
0.27	6064	0.77	7794	1.27	8980	1.77	9616	2.27	9884	2.77	9972
0.28	6103	0.78	7823	1.28	8997	1.78	9625	2.28	9887	2.78	9973
0.29	6141	0.79	7852	1.29	9015	1.79	9633	2.29	9890	2.79	9974
0.30	6179	0.80	7881	1.30	9032	1.80	9641	2.30	9893	2.80	9974
0.31	6217	0.81	7910	1.31	9049	1.81	9649	2.31	9896	2.81	9975
0.32	6255	0.82	7939	1.32	9066	1.82	9656	2.32	9898	2.82	9976
0.33	6293	0.83	7967	1.33	9082	1.83	9664	2.33	9901	2.83	9977
0.34	6331	0.84	7995	1.34	9099	1.84	9671	2.34	9904	2.84	9977
0.35	6368	0.85	8023	1.35	9115	1.85	9678	2.35	9906	2.85	9978
0.36	6406	0.86	8051	1.36	9131	1.86	9686	2.36	9909	2.86	9979
0.37	6443	0.87	8078	1.37	9147	1.87	9693	2.37	9911	2.87	9979
0.38	6480	0.88	8106	1.38	9162	1.88	9699	2.38	9913	2.88	9980
0.39	6517	0.89	8133	1.39	9177	1.89	9706	2.39	9916	2.89	9981
0.40	6554	0.90	8159	1.40	9192	1.90	9713	2.40	9918	2.90	9981
0.41	6591	0.91	8186	1.41	9207	1.91	9719	2.41	9920	2.91	9982
0.42	6628	0.92	8212	1.42	9222	1.92	9726	2.42	9922	2.92	9982
0.43	6664	0.93	8238	1.43	9236	1.93	9732	2.43	9925	2.93	9983
0.44	6700	0.94	8264	1.44	9251	1.94	9738	2.44	9927	2.94	9984
0.45	6736	0.95	8289	1.45	9265	1.95	9744	2.45	9929	2.95	9984
0.46	6772	0.96	8315	1.46	9279	1.96	9750	2.46	9931	2.96	9985
0.47	6808	0.97	8340	1.47	9292	1.97	9756	2.47	9932	2.97	9985
0.48	6844	0.98	8365	1.48	9306	1.98	9761	2.48	9934	2.98	9986
0.49	6879	0.99	8389	1.49	9319	1.99	9767	2.49	9936	2.99	9986
0.50	6915	1.00	8413	1.50	9332	2.00	9772	2.50	9938	3.00	9987

$$X_1 = \frac{1 + \frac{x_0}{L} - p}{2 \left[\frac{Ep}{vL} \right]^{1/2}}; \quad e \quad X_2 = \frac{1 - p}{2 \left[\frac{Ep}{vL} \right]^{1/2}},$$

calculam-se os valores de C/C_o para cada valor de p .

$p = 0,75$

$$X_1 = \frac{1 + 0,469 - 0,75}{2 \left[0,0626 \cdot 0,75 / 0,186 \cdot 30 \right]^{1/2}} = 3,919$$

$$X_2 = \frac{1 - 0,75}{2 \left[0,0626 \cdot 0,75 / 0,186 \cdot 30 \right]^{1/2}} = 1,363$$

$$\frac{C}{C_o} = \frac{1}{2} (\text{erf } 3,919 - \text{erf } 1,363) = \frac{1}{2} (1 - 0,946) = 0,027$$

Primeiro ponto (0,75;0,027)

$p = 0,94$

$$X_1 = \frac{0,529}{0,2054} = 2,57$$

$$X_2 = \frac{0,06}{0,2054} = 0,292$$

$$\frac{C}{C_o} = \frac{1}{2} (\text{erf } 2,57 - \text{erf } 0,292) = \frac{1}{2} (0,999 - 0,32) = 0,34$$

Segundo ponto (094; 0,34)

$p = 1,235 \quad \rightarrow \quad C/C_o = 0,84$

Terceiro ponto (1,235;0,84)

$p = 1,56$

$$X_1 = \frac{-0,091}{0,264} = -0,34$$

$$X_2 = \frac{-0,56}{0,264} = -2,12$$

$$\frac{C}{C_o} = \frac{1}{2} [-\text{erf } 0,34 - (-\text{erf } 2,12)] = \frac{1}{2} (-0,37 + 0,998) = 0,31$$

Quarto ponto (1,56;0,31)

$p = 1,75$

$$X_1 = \frac{-0,281}{0,279} = -1,0$$

$$X_2 = \frac{-0,75}{0,279} = -2,69$$

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} [-\text{erf } 1,0 - (-\text{erf } 2,69)] = \frac{1}{2} (-0,842 + 0,999) = 0,08$$

Quinto ponto (1,75;0,08)

Conforme a Figura 6.14, esses pontos teóricos ajustam-se muito bem aos valores experimentais.

Resumo sobre os modelos de dispersão

Nos modelos, até então abordados, admitiu-se que a dispersão longitudinal é o único processo de mistura entre dois fluidos. Considerou-se, também, que o valor de E independe da concentração do soluto e, ainda, que não ocorre adsorção nem desorção. O grau de dispersão depende da velocidade v e do comprimento da coluna, L .

6.2.3 Equação diferencial para difusão e fluxo de massa

Nielsen & Biggar (1963) têm advertido sobre os modelos que negligenciam a difusão pois eles não se ajustam bem aos dados experimentais quando o escoamento é muito lento e a porosidade do meio muito irregular.

Admitindo que μ_x seja a massa de matéria (soluto) movendo-se através do volume-controlado da Figura 6.15, na direção x , por unidade de área e tempo, então, a massa que entra no elemento pela face esquerda é

$$\text{entrada} = \mu_x \Delta y \Delta z \quad (6.29)$$

A massa que sai na face oposta é dada por:

$$\text{saída} = \left(\mu_x + \frac{\partial \mu_x}{\partial x} \Delta x \right) \Delta y \Delta z \quad (6.30)$$

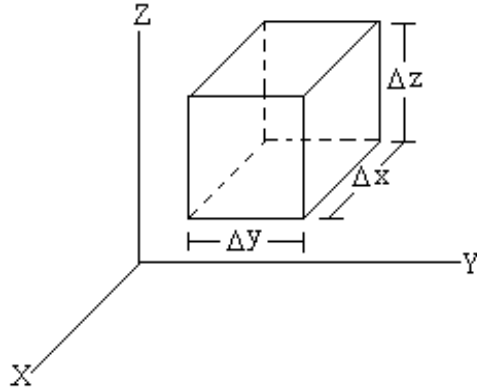


Figura 6.15 Elemento-volume de um meio poroso através do qual um soluto é transferido por difusão e fluxo de massa.

A mudança na quantidade de material dentro do volume-controle na unidade de tempo, na direção x , é

$$\begin{aligned} \text{entrada} - \text{saída} &= \mu_x \Delta y \Delta z - \left(\mu_x + \frac{\partial \mu_x}{\partial x} \Delta x \right) \Delta y \Delta z \\ &\text{ou} \\ \text{entrada} - \text{saída} &= - \frac{\partial \mu_x}{\partial x} \Delta x \Delta y \Delta z \end{aligned} \quad (6.31)$$

Pela lei de Fick, tem-se que a massa de material difundindo-se através de uma seção unitária, transversal à direção do movimento e por unidade de tempo é $-D \partial C / \partial x$, em que D é o coeficiente de difusão e C a concentração do material (soluto) em $g \ell^{-1}$.

A massa de material transferida através de uma seção transversal e unitária, por unidade de tempo e por fluxo de massa, é $v_x C$, em que v_x é a velocidade média de escoamento na direção x , em h^{-1} .

A massa total de material μ_x movendo-se através de uma seção transversal unitária, por unidade de tempo, é a soma das frações que se movimentam por difusão e fluxo de massa, isto é,

$$\mu_x = -D \frac{\partial C}{\partial x} + v_x C \quad (6.32)$$

Substituindo μ_x da Equação 6.31 por seu valor na equação 6.32, resulta

$$\text{entrada} - \text{saída} = \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (6.33)$$

Por analogia, nas direções y e z será

$$\text{entrada} - \text{saída} = \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} - v_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (6.34)$$

e

$$\text{entrada - saída} = \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} - v_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad (6.35)$$

A soma das Equações 6.33, 6.34 e 6.35 fornece a diferença total entre a massa que entra e aquela que sai no elemento-controlado. Esta diferença total deve ser igual, por continuidade, à mudança em relação ao tempo na concentração C do soluto, no volume-controlado. Portanto, considerando o escoamento apenas na direção x , tem-se a relação

$$\left(\frac{\partial C}{\partial t} \right) \Delta x \Delta y \Delta z = \left(D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) \Delta x \Delta y \Delta z \quad \text{ou}$$

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (6.36)$$

6.2.4 Solução para difusão e fluxo de massa junto a uma interface de fluidos miscíveis

A solução da Equação 6.36, que permitirá traçar a curva de efluente de um fluido deslocador de concentração C_0 (Figura 6.16) será pesquisada para um meio poroso semi-infinito e as seguintes condições iniciais e de contorno:

$$C(x,t) = 0, \quad \text{para } x > 0 \text{ e } t = 0 \quad (6.37)$$

$$C(x,t) = C_0, \quad \text{para } x = 0 \text{ e } t > 0 \quad (6.38)$$

$$\lim_{x \rightarrow \infty} C(x,t) = 0, \quad \text{para } t > 0 \quad (6.39)$$

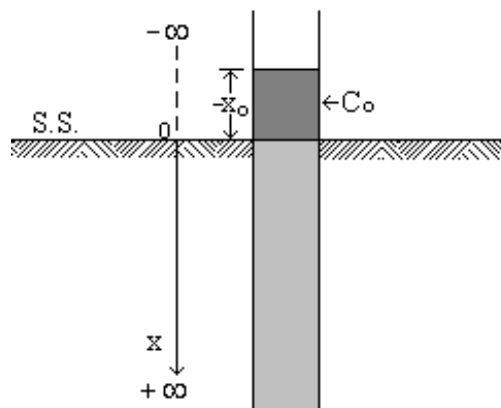


Figura 6.16 Ilustração das condições iniciais e de contorno para difusão e fluxo de massa.

Conforme Kirkham & Powers (1972), a solução é

$$\frac{C}{C_0} = \frac{1}{2} \left\{ \operatorname{erfc} \frac{1-p}{2(Dp/vL)^{1/2}} + e^{vL/D} \operatorname{erfc} \frac{1+p}{2(Dp/vL)^{1/2}} \right\} \quad (6.40)$$

O valor de D é calculado empregando a relação:

$$D = \frac{vL}{4\pi S^2} \quad (6.41)$$

em que S é a declividade da curva experimental de efluente para $p = 1$.

6.3 SOLUÇÕES NUMÉRICAS DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE SOLUTO NO SOLO

6.3.1 Equação geral de transporte de soluto no solo

A equação diferencial que descreve, de forma geral, o transporte de uma “espécie” de soluto reativo no solo pode ser escrita como:

$$\frac{\rho}{\theta} \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial x_k} \left(D_h \frac{\partial C}{\partial x_k} \right) - v_{xk} \frac{\partial C}{\partial x_k} - \mu_l C - \frac{\mu_s \rho}{\theta} + \gamma_l + \frac{\gamma_s \rho}{\theta} \quad (6.42)$$

em que ρ é a massa específica do solo (ML^{-3}); S é a concentração adsorvida por unidade de massa da fase sólida (MM^{-1}); C é a concentração de soluto na fase líquida (ML^{-3}); θ é a umidade a base de volume (L^3L^{-3}); t é tempo (T); x_k é a coordenada na direção k (L); D_h é o coeficiente de dispersão-difusão (L^2T^{-1}), o qual reflete os efeitos combinados da difusão e dispersão hidrodinâmica no transporte; v é a velocidade média da solução nos poros (LT^{-1}); μ_l e μ_s são os coeficientes de degradação do soluto nas fases líquida e sólida, respectivamente (T^{-1}); γ_l e γ_s são os coeficientes de produção do soluto nas fases líquida e sólida, respectivamente ($ML^{-3}T^{-1}$ e T^{-1}).

A solução da Equação 6.42 requer uma expressão relacionando a concentração adsorvida na fase sólida (S) à concentração na fase líquida (C). Várias dessas expressões, conhecidas como isotermas, estão disponíveis na literatura (Parker & Genuchten, 1984). As isotermas mais comumente usadas, devido à simplicidade das equações, são as de Freundlich e de Langmuir (Bear, 1979; Green & Karickhoff, 1990).

Além das isotermas, a Equação 6.42 deve ser implementada com equações auxiliares que descrevem as condições iniciais e de contorno do sistema em estudo. Em todos os casos, considera-se a condição inicial na forma

$$C(x_k, 0) = C_0(x_k) \text{ para } t = 0 \text{ em } R \quad (6.43)$$

em que C_0 é a concentração inicial do soluto e R representa a região em que ocorre o transporte do soluto.

Discussões têm ocorrido sobre os tipos de condições de contorno mais apropriadas aos sistemas finitos e semi-infinitos (Parker & Genuchten, 1984). No entanto, de maneira genérica, as condições de contorno podem ser expressas nas formas

$$C(x_k, t) = C_1(x_k, t), \text{ para } t > 0 \text{ em } B_1 \quad (6.44)$$

e

$$v_{xk} C - D_h \frac{\partial C}{\partial x_k} = v_{xk} C_e(t), \text{ para } t > \text{ em } B_2 \quad (6.45)$$

A Equação 6.44 descreve o contorno B_1 , no qual a condição de contorno do tipo concentração constante (C_1) é aplicável. A Equação 6.45 descreve as condições no contorno B_2 , no qual ocorre a condição de contorno tipo fluxo. Nesta equação, C_e representa a concentração na solução aplicada ao sistema.

As Equações 6.8 e 6.35, e suas respectivas condições inicial e de contorno, podem ser obtidas a partir das Equações 6.42, 6.43, 6.44 e 6.45, considerando-se uma série de simplificações. Uma das simplificações consideradas é a não-adsorção do soluto na fase sólida. Esta simplificação elimina o primeiro termo do lado direito da Equação 6.42. Outra simplificação consiste em considerar o coeficiente de dispersão constante, isto é, independente da concentração do soluto, da umidade do solo e da posição na região considerada, o que permite simplificar o primeiro termo do lado direito da Equação 6.42.

6.3.2 Soluções das equações de transporte de soluto aplicando métodos numéricos

Nas seções 6.21 a 6.24 foram apresentadas soluções analíticas para as situações específicas de transporte de solutos no solo, representadas pelas Equações 6.8 e 6.35. Embora matematicamente simples, essas soluções têm aplicação prática restrita devido à complexidade, a nível de campo, do transporte de soluto no solo. Tal complexidade decorre, dentre outros fatores, da heterogeneidade e anisotropia do solo, o que faz com que as características hidrodinâmicas variem conforme a direção do movimento e de ponto a ponto no perfil do solo. Além disso, a ocorrência de escoamento em condições de meio não saturado torna os parâmetros hidrodinâmicos dependentes da umidade do solo, resultando em equações diferenciais não-lineares. A geometria irregular do meio constitui, também, num fator que dificulta muito a obtenção de soluções analíticas. Dentre outros, esses fatores tornam os métodos numéricos uma das principais ferramentas para a solução de problemas de transporte de interesse prático.

A análise numérica existe desde os tempos dos Babilônios (Huyakorn & Pinder, 1983). No entanto, somente após a Segunda Guerra Mundial é que ocorreram significantes avanços em metodologias de simulação. Nas últimas décadas, o uso intenso da análise numérica em simulações é devido, em grande parte, ao rápido desenvolvimento da capacidade dos computadores atuais.

Existem vários métodos alternativos para se obter a solução numérica de uma equação diferencial (Pinder & Gray, 1997; Huyakorn & Pinder, 1983; Segerlind, 1984; Gerald & Wheatley, 1984). Dentre os mais importantes incluem-se: diferenças finitas (finite difference method), elementos finitos (finite element method), colocação (collocation method), características (characteristics method) e elemento-de-contorno (boundary element method).

Cada um desses métodos possuem vantagens e desvantagens. O método das diferenças finitas é simples em conceito e implementação; o de elementos finitos permite maior flexibilidade quanto à geometria da região e maior precisão para certos tipos de operadores diferenciais; o método da colocação tanto permite flexibilidade na geometria quanto maior precisão; o método do elemento-de-contorno pode reduzir a dimensão de problemas envolvendo certos tipos de operadores diferenciais; e o método das características pode ser eficientemente empregado na simulação de problemas de transporte dominado por convecção (Huyakorn & Pinder, 1983).

Os métodos numéricos mais populares são os métodos das diferenças finitas e dos elementos finitos, apresentados a seguir. Ambos fundamentam-se no conceito de discretização, segundo o qual uma região contínua R é representada por um número de subáreas adjacentes (Figura 6.17).

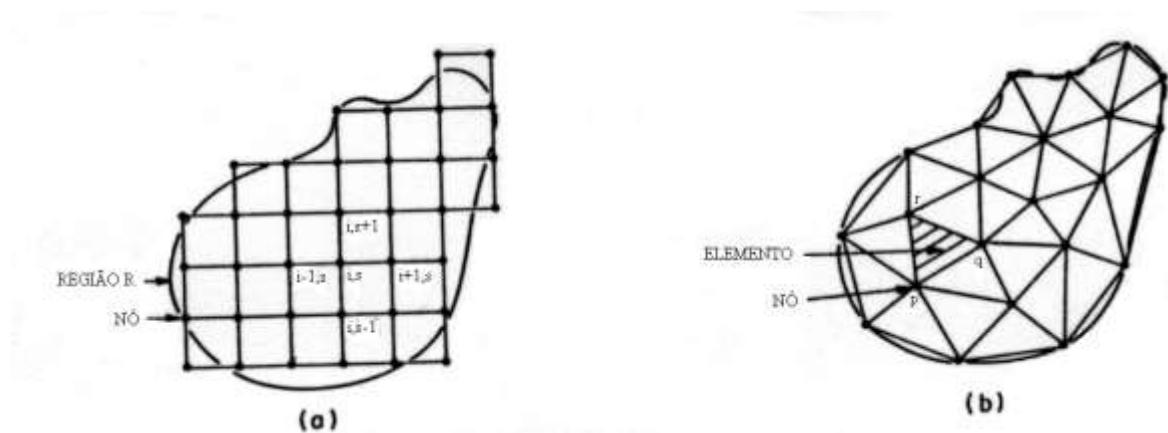


Figura 6.17 Discretização de uma região R (duas dimensões) para aplicação dos métodos diferenças finitas (a) e elementos finitos (b).

Diferenças finitas: A obtenção da solução de uma equação diferencial, usando diferenças finitas, é obtida por meio de uma seqüência de passos. Para exemplificar o procedimento, consideraremos uma região unidimensional (Figura 6.18).

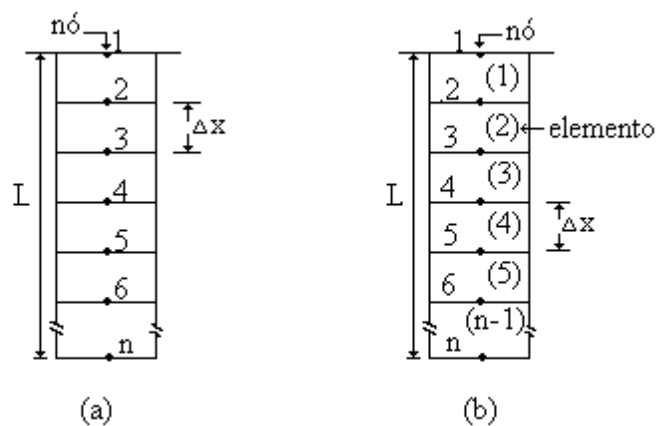


Figura 6.18 Discretização de uma região unidimensional R para aplicação dos métodos diferenças finitas (a) e elementos finitos (b).

O primeiro passo consiste em substituir as derivadas das equações diferenciais parciais por equações na forma de diferenças finitas. Essas equações relacionam entre si os valores das variáveis dependentes em pontos vizinhos. A Equação 6.36, que descreve o transporte de soluto em uma dimensão, pode ser escrita em diferenças finitas, na forma

$$\frac{C_i^{j+1} - C_i^j}{\Delta T} = D \left\{ \frac{C_{i-1}^{j+1} - 2C_i^{j+1} + C_{i+1}^{j+1}}{2(\Delta x)^2} + \frac{C_{i-1}^j - 2C_i^j + C_{i+1}^j}{2(\Delta x)^2} \right\} - g \left\{ \frac{C_{i+1}^{j+1} - C_{i-1}^{j+1}}{4(\Delta x)} + \frac{C_{i+1}^j - C_{i-1}^j}{4(\Delta x)} \right\} \quad (6.46)$$

em que i e j estão relacionados à posição espacial e temporal do ponto onde se deseja obter C . A forma de diferenciação apresentada na Equação 6.46 é conhecida com diferença centrada ou formulação de Crank-Nicolson. Porém, outras formas de diferenciação podem ser usadas. Conhecendo-se os valores de C_i^j no tempo $j\Delta t$, resolvemos para C_i^{j+1} no tempo $(j+1)\Delta t$.

O próximo passo consiste em escrever a equação em diferenças finitas, Equação 6.46, para cada ponto (nó), nos quais os valores da variável dependente é desejado (Figura 6.18). A Equação 6.46 é escrita para os nós internos, isto é, para aqueles que não fazem parte do contorno da região. Assim, para uma região unidimensional discretizada com “ n ” nós, seriam determinadas $n-2$ equações. As equações para os dois nós restantes (os dos contornos) são escritas em função do tipo de condição de contorno. Se as condições de contorno forem do tipo expressa na Equação 6.44, não há necessidade de escrever as equações para aqueles nós e os valores de C_1 serão incorporados às equações dos nós 1 e $n-1$. Caso as condições de contorno sejam do tipo expresso na Equação 6.45, então, escrevem-se equações específicas para os nós dos contornos. É possível ter, ainda, condições de contorno diferentes nos diferentes contornos da região. Neste caso, para a obtenção das equações nos contornos, aplica-se a cada contorno o descrito anteriormente.

O último passo consiste na solução do sistema de equações, resultante da implementação do passo anterior. O sistema de equações com n (ou $n-1$, ou $n-2$, dependendo do tipo de condição de contorno) equações e respectivas variáveis dependentes é resolvido para cada tempo $j\Delta t$. Dessa forma, são obtidos valores da variável dependente, C , em cada tempo e pontos discretos da região.

Elementos finitos: A análise de um problema físico, empregando elementos finitos, inicia-se pela divisão da região em uma série de elementos finitos (Figuras 6.17 e 6.18). Os elementos, conectados por um número discreto de nós, podem ter forma triangular, retangular, etc.. Cada elemento é identificado por um número e pelas linhas que ligam os nós situados em seu contorno.

A seguir escolhe-se uma solução aproximada, que é substituída na equação diferencial. Como a solução aproximada não satisfaz a equação diferencial, resultará um resíduo ou erro. Suponha, por exemplo, que a função $C = c(x,t)$ seja uma solução aproximada da equação 6.36. Então, a substituição de $C = c(x,t)$ na Equação 6.36 resulta em um resíduo $Re(x)$, isto é,

$$\frac{\partial c}{\partial t} - D \frac{\partial^2 c}{\partial x^2} + v \frac{\partial c}{\partial x} = Re(x) \quad (6.47)$$

No entanto, o método requer que este resíduo torne-se zero dentro da região, isto é,

$$\int_0^L W_i(x) Re(x) dx = 0 \quad (6.48)$$

em que W_i é uma função de ponderação e L é o comprimento da região (no caso de uma região unidimensional). Há várias possibilidades para a função de ponderação. Uma delas consiste em escolher, como função de ponderação, a função usada para a solução aproximada. Quando esta função de ponderação é utilizada, o método recebe o nome de método de Galerkin, o qual é a base do método elemento finito para problemas envolvendo derivada de primeira ordem. Geralmente, a solução aproximada utilizada é uma função polinomial de primeiro grau, mas pode-se escolher polinômios de maior grau.

Uma vez definida a forma da solução aproximada, a equação do resíduo (Equação 6.48) é escrita para cada nó de um elemento, obtendo-se expressões que relacionam os valores das variáveis nos nós daquele elemento. Essas expressões são escritas em forma matricial e recebem o nome de matrizes dos elementos. Este procedimento é repetido para cada elemento existente na região.

As matrizes dos elementos são combinadas de modo a fornecer um sistema de equações algébricas que descreve a região como um todo. Aplicando-se o procedimento anteriormente descrito à equação 6.36, obtém-se

$$[G] \left\{ \frac{dc}{dt} \right\} + [K] \{c\} - \{F\} = 0 \quad (6.49)$$

em que $[G]$ e $[K]$ são denominadas matrizes de capacitância global e de rigidez global, respectivamente. A matriz $[G]$ depende das características geométricas dos elementos e da interação soluto-solo (parâmetros relacionados aos termos do lado esquerdo da Equação 6.36) e a matriz $[K]$ depende das características geométricas dos elementos e dos parâmetros de transporte do meio (parâmetros relacionados aos dois termos do lado direito da Equação 6.36). $\{F\}$ é denominado vetor de força global e depende, além da geometria dos elementos, das condições iniciais e de contorno e da existência de fontes ou sumidouros na região. No caso presente, o da Equação 6.36, $\{F\}$ inclui apenas as condições iniciais e de contorno, uma vez que ela não contempla a existência de fontes ou sumidouros na região. No caso da solução de uma equação mais abrangente como, por exemplo, a Equação 6.42, termos relativos à produção ou degradação de soluto no solo poderiam ser incluídos no vetor $\{F\}$.

A Equação 6.49 representa um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem em t . Aplicando-se diferenças finitas à Equação 6.49, obtém-se um sistema de equações algébricas na forma

$$[A]^{j+w} \{c\}^{j+1} = \{B\}^{j+w} \quad (6.50)$$

em que,

$$[A]^{j+w} = \frac{[E]^{j+w}}{\Delta t} + w[K]^{j+w} \quad (6.51)$$

e

$$\{B\}^{j+w} = \left[\frac{[E]^{j+w}}{\Delta t} - (I-w)[K]^{j+w} \right] \{c\}^{j+w} - \{F\}^{j+w} \quad (6.52)$$

Nas Equações 6.50, 5.51 e 6.52, w é um fator de ponderação relacionado ao tempo. A solução do sistema de equações (Equação 6.50) resulta na obtenção de valores de $c(x,t)$, nos pontos discretizados na região e em um tempo $j\Delta t$.

Os métodos de diferenças finitas e elementos finitos foram apresentados de uma forma bastante simples por meio da Equação 6.36. No entanto, a potencialidade dos métodos está justamente em solucionar problemas mais complexos. De modo semelhante ao que descrito anteriormente, é possível obter a solução de uma equação de transporte geral (Equação 6.42) considerando-se: solos heterogêneos e anisotrópicos; solutos que podem ser adsorvidos ao solo; transporte de água no solo em condições transientes; coeficiente de dispersão hidrodinâmico dependente da concentração de soluto na solução e da velocidade da água no solo; etc..

Vários modelos, fundamentados em soluções numéricas, que simulam o transporte de soluto no solo estão disponíveis aos pesquisadores que trabalham na área. Em revisão feita por van der Heijde et al. (1985), são apresentados modelos com diferentes graus de complexidade e que aplicam diferentes técnicas numéricas. Após a revisão feita por estes autores, surgiram outros novos modelos como, por exemplo, o modelo WAVE (mathematical model for simulating Water and Agrochemicals in soil, crop and Vadose Environment) desenvolvido por VANCLOOSTER et al. (1994). No entanto, é grande a necessidade de pesquisas no sentido de aprimorar e testar este tipo de modelo. No Brasil, principalmente na área de transporte de água e soluto no solo, pouco tem sido feito no sentido de desenvolver e testar modelos fundamentados em análise numérica.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BEAR, J. **Hydraulics of groundwater**. New York, McGraw-Hill Inc. 1979.569p.
- BIGGAR, J.W & NIELSEN, D.R. Missible displacement: II. Behavior of tracers. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, 26: 125 - 128, 1962.
- BIGGAR, J.W & NIELSEN, D.R. Missible displacement: V. Exchange processes. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, 27: 623 - 627, 1963
- COREY, J.C.; NIELSEN, D.R.; BIGGAR, J.W. Missible displacement in saturated and unsaturated sandstone. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, 27:258 - 262. 1963.
- GERALD, C.F. & WHEATLEY, P.O. **Applied Numerical Analysis**. Reading, Addison-Wesley Publishing Company, Inc. 3ª ed. 1984.579p.
- GREEN, R.E. & KARICKHOFF, S.W. Sorption Estimates for Modeling. In: CHENG, H.H. (ed). **Pesticides in the soil environment: processes, impacts, and modeling**. Madison, Soil Science Society of America, Inc. 1990.529p.
- HILLEL, D. **Fundamentals of soil physics**. Academic Press, Inc. 1980. 413p.
- HUYAKORN, P.S. & PINDER, G.F. **Computational methods in subsurface flow**. New York, Academic Press, Inc. 1983.473p.
- KIRKHAM, D. & POWERS, W.L. **Advanced soil physics**. New York, John Wiley-Interscience, 1972.534p.

- NIELSEN, D.R. & BIGGAR, J.W. Missible displacement in soils: I. Experimental information. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.** 25: 1-5, 1961.
- NIELSEN, D.R. & BIGGAR, J.W. Missible displacement: III. Theoretical considerations. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.** 26: 216-221, 1962.
- NIELSEN, D.R. & BIGGAR, J.W. Missible displacement: IV. Mixing in glass beads. **Soil Sci. Soc. Am. Proc.**, 27: 10-13, 1963.
- PARKER, J.C. & GENUCHTEN, M.Th. **Determining transport parameters from laboratory and field tracer experiments.** Blacksburg, Virginia Agricultural Experiment Station, Bulletin 84-3. 1984. 89p
- van der HEIJDE, P.; BACHAMAT, Y.; BREDEHOEFT, J.; ANDREWS, B.; HOLTZ, D.; SEBASTIAN, S. **Groundwater management: the use of numerical models.** Washington, American Geophysical Union. 1985. 180p
- PINDER, G.F. & GRAY, W.G. **Finite element simulation in surface and subsurface hydrology.** New York, Academic Press, Inc. 1977. 295p.
- SEGERLIND, L.J. **Applied finite element analysis.** New York, John Wiley & Sons. 1984.427p.
- VANCLOOSTER, M.; VIAENE, P.; DIELS, J.; CHRISTIAENS, K. **WAVE: a mathematical model for simulating water and agrochemicals in the soil and vadose environment.** Belgium. Institute for Land and Water Management. Reference & User's Manual (release 2.0).1994.