



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DA PARAÍBA
CENTRO DE CIÊNCIAS E TECNOLOGIA
DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL
CURSO DE ENGENHARIA SANITÁRIA E AMBIENTAL**

TRABALHO DE CONCLUSÃO DE CURSO

NAYRLON FREITAS MEDEIROS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE REATIVO DE
ESPÉCIES QUÍMICAS EM MEIOS POROSOS**

Campina Grande – PB
2014

NAYRLON FREITAS MEDEIROS

**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE REATIVO DE
ESPÉCIES QUÍMICAS EM MEIOS POROSOS**

Trabalho de Conclusão de Curso em forma de artigo apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental da Universidade Estadual da Paraíba, em cumprimento à exigência para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Sanitária e Ambiental.

Orientador: Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira

M488m Medeiros, Nayrlon Freitas.

Modelagem e simulação numérica de espécies químicas em meios porosos [manuscrito] / Nayrlon Freitas Medeiros. - 2014.
38 p. : il. color.

Digitado.

Trabalho de Conclusão de Curso (Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental) - Universidade Estadual da Paraíba, Centro de Ciências e Tecnologia, 2014.

"Orientação: Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira, Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental".

1. Modelagem ambiental. 2. Dispersão de poluentes. 3. Contaminação do solo. I. Título.

21. ed. CDD 631.4

NAYRLON FREITAS MEDEIROS

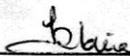
**MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE REATIVO DE
ESPÉCIES QUÍMICAS EM MEIOS POROSOS**

Trabalho de Conclusão de Curso em forma de artigo apresentado ao Curso de Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental da Universidade Estadual da Paraíba, em cumprimento à exigência para obtenção do grau de Bacharel em Engenharia Sanitária e Ambiental.

Aprovado em 11 de MARÇO de 2014



Prof. Dr. Fernando Fernandes Vieira / UEPB
Orientador



Profª Drª Lígia Maria Ribeiro Lima / UEPB
Examinadora (1)



Profª Drª Celeide Maria Belmont Sabino Meira / UEPB
Examinadora (2)

A Deus por sua grandeza e magnitude.

Aos meus pais e querida irmã pelo amor incondicional.

AGRADECIMENTOS

A Deus por ter me dado saúde e ânimo para realizar as atividades e superar as dificuldades.

Aos meus pais Maria de Fátima Freitas Medeiros e Francisco Silva Medeiros pela paciência, apoio e amor durante toda a caminhada.

A minha irmã Nayara, meu cunhado Abineto, minha tia Lúcia e meus sobrinhos Filipe e Laryssa pelo incentivo nos meus estudos.

Ao meu orientador Fernando Fernandes Vieira pela disponibilidade, motivação e confiança durante minha formação acadêmica.

Aos amigos Luísa, Iusley, Melline, Tairone, Dayvison, Isabelle, Tássio Henrique, Leandro, Wesla, Isabella, Amanda.

A esta Universidade, ao corpo docente de Engenharia Sanitária e Ambiental, e todos os funcionários pela competência e ética que sempre estiveram presentes.

A disponibilidade da banca examinadora.

A todos que direta ou indiretamente fizeram parte da minha formação, o meu muito obrigado.

MODELAGEM E SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO TRANSPORTE REATIVO DE ESPÉCIES QUÍMICAS EM MEIOS POROSOS

Medeiros, Nayrlon Freitas.¹

RESUMO

Agentes como demasiado crescimento demográfico, urbanização acelerada e desenvolvimento industrial tem contribuído direta e indiretamente na qualidade das águas. A preocupação com esse recurso natural tem sido crescente principalmente nas últimas décadas visto que sua disponibilidade é um fator limitante para o desenvolvimento socioeconômico. Nesse contexto o presente trabalho objetiva o desenvolvimento de um modelo matemático e simulação numérica do transporte reativo de espécies químicas em meios porosos, ou seja, se faz um estudo que possibilite o entendimento de como um determinado poluente se comporta ao ser transportado no solo considerando parâmetros como coeficiente de difusão, velocidade de escoamento, coeficiente de reação química e o coeficiente de retardo. O problema é composto de meio poroso com apenas uma camada e considera-se a transferência de massa bidirecional transiente, com reação química irreversível, assume a concentração injetada em $x=0$ e fluxo do poluente sendo funções conhecidas e dependentes do tempo. Pode-se concluir que o modelo desenvolvido para simular o comportamento dos poluentes é válido, mesmo com suas simplificações, visualizou-se que a influência dos parâmetros dos coeficientes, onde tais parâmetros indicaram se a pluma do poluente irá se deslocar para regiões mais profundas ou se dispersar em regiões mais próximas da superfície.

Palavras Chaves: Modelagem Matemática, Dispersão de poluentes, contaminação do solo.

1- Estudante de Engenharia Sanitária e Ambiental da Universidade Estadual da Paraíba

MATHEMATICAL MODEL AND NUMERIC SIMULATION OF THE REACTIVE TRANSPORT OF CHEMICAL SPECIES THROUGH POROUS AREAS

Medeiros, Nayrlon Freitas.

ABSTRACT

Agents such as excessive population growth, accelerated urbanization, and industrial development have contributed directly and indirectly to the quality of water. The observed concern with this natural resource has been growing principally in the last few decades is the limiting factor for socioeconomic development. In this context, the present work attempts to develop a mathematical model and numeric simulation of the reactive transport of chemical species through porous areas. In other words, this study attempts to understand how a pollutant behaves while being transported not only considering parameters such as the coefficient of diffusion, speed of drainage/discharge, the coefficient of chemical reaction, or the drag coefficient. The problem is composed of porous material with barely a layer and is considered a transfer of bidirectional transient mass, with irreversible chemical reaction, assumes a concentration injected in $x=0$ and pollutant flow being known functions and dependent on time. One can conclude that the developed model to simulate the behavior of pollutants is valid, despite its simplifications. It was observed that the influence of the parameters of the coefficients, where such parameters indicated if the feather of pollution will spread to deeper regions or if it will disperse in regions closer to the surface.

Key words: Mathematical modeling, dispersion of pollutants, soil contamination.

1 - INTRODUÇÃO

Agentes como demasiado crescimento demográfico, urbanização acelerada e desenvolvimento industrial tem contribuído direta e indiretamente na qualidade das águas. A preocupação com esse recurso natural tem sido crescente principalmente nas últimas décadas visto que sua disponibilidade é um fator limitante para o desenvolvimento socioeconômico.

Segundo as agências de proteção ambiental, o derramamento de poluentes no solo e nas águas devido a vazamentos ou acidentes de derivados de petróleo é crescente, havendo sempre a preocupação de como evitar tais ocorrências e como remediar as que já aconteceram. Corseuil e Martins (1997) dizem que destes, a gasolina merece destaque, seja pela quantidade envolvida, ou pela periculosidade, verificada pela liberação, ao entrar em contato com a água subterrânea, dos compostos BTEX (benzeno, tolueno, etil-benzeno e xilenos), que são substâncias depressoras do sistema nervoso central e causadoras de leucemia.

A contaminação no solo por esses poluentes derivados do petróleo causa bastante preocupação, principalmente para a sociedade, pois essas espécies químicas poluentes se deslocam pelo solo podendo atingir as águas subterrâneas, comprometendo sua potabilidade, visto que essas águas estão sendo ou serão usadas como fonte de abastecimento. Desse modo são necessárias pesquisas na área de como conter determinados poluentes, logo uma maneira para melhor controle é conhecer como o determinado poluente se comporta ao ser liberado no solo e quais os fatores que influenciam seu deslocamento.

Nessa perspectiva, a modelagem matemática pode ser inserida como ferramenta para tomada de decisão, pois ela possibilita a geração de cenários futuros, podendo-se assim ter um controle da poluição gerada. Segundo Azevedo *et al.* (1996) os avanços computacionais aliados aos métodos numéricos, têm permitido o desenvolvimento de modelos que descrevem o transporte de solutos no solo, cuja vantagem principal do uso de modelos é a economia de tempo e capital investido, haja vista que possibilitam

simular múltiplos cenários, ao invés de se utilizar longos períodos de observação e de coleta de dados.

O presente trabalho objetiva o desenvolvimento de um modelo matemático e simulação numérica do transporte reativo de espécies químicas em meios porosos, ou seja, faz um estudo que possibilita o entendimento de como um determinado poluente se comporta ao ser transportado no solo considerando parâmetros como coeficiente de difusão, velocidade de escoamento, coeficiente de reação química e o coeficiente de retardo.

Modelos matemáticos podem ser usados para responder as seguintes questões que invariavelmente surgem durante o estudo de remediação. Quais são os potenciais receptores a serem impactados pelos poluentes? Quais são os níveis de concentrações esperadas e qual o risco associado? Quanto tempo deverá levar para a completa degradação da pluma do poluente?

Para responder tais questões, necessita-se de uma descrição adequada dos vários processos intrínsecos de remediação natural que ocorrem no local. Para realizar tal descrição, deve-se desenvolver um modelo matemático robusto, capaz de prever simultaneamente o comportamento do transporte reativo, de microrganismos, de substratos e poluentes no interior do meio poroso.

2 - REVISÃO TEÓRICA

A revisão da literatura baseou-se em trabalhos relativos ao entendimento dos mecanismos de transporte de espécies químicas em solos e águas subterrâneas sob as consultas de teses de mestrado e doutorado, revistas e artigos do portal de periódicos da Capes.

2.1 - Poluição do solo e dos recursos hídricos por espécies químicas

Na tarefa de remediar o solo e os aquíferos, uma grande variedade de processos físico-químicos e biológicos tem sido utilizada. No entanto, os

custos envolvidos são muito altos e, em alguns casos desnecessários, uma vez que segundo Rice *et al.* (1995), vários estudos de monitoramento desenvolvidos em áreas contaminadas nos Estados Unidos da América, sustentam a hipótese da viabilidade do uso dos microrganismos presentes no solo na degradação natural de substâncias nocivas introduzidas no meio ambiente.

É necessário o conhecimento das características mais importantes do solo, assim como seus parâmetros para que se tenha uma melhor eficiência da simulação quando se rodar o modelo matemático.

Os processos de acumulação e transporte de contaminantes através do solo dependem da natureza do contaminante e do tipo do solo em questão. A composição e as propriedades dos resíduos são fatores significativos no desenvolvimento da interação com o substrato do solo. Se, contudo, for possível estimar as propriedades físicas e químicas mais importantes dos contaminantes e conhecer bem as características do solo, poderemos compreender melhor o seu transporte e, assim, dimensionar melhores barreiras naturais ou artificiais para áreas contaminadas ou para futuras áreas de disposição do resíduo. (Demuelenaere, 2004, p.30).

Um dos principais contaminadores do solo por meio de vazamento são os postos de combustíveis, segundo o órgão de controle ambiental paulista, a Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) em 2005 os vazamentos em postos de combustíveis foram responsáveis por 73 % dos casos de áreas contaminadas no Estado de São Paulo, o que corresponde a 1596 áreas.

Em função do número elevado de casos de vazamentos, o licenciamento ambiental dos postos de combustíveis tornou-se obrigatório, tendo a CETESB elaborado uma série de documentos no sentido de orientar e padronizar os trabalhos nessa área (CETESB, 2006).

Ao entrarem em contato com o solo esses poluentes se deslocam podendo alcançar o lençol freático. Mariano (2010) diz que os contaminantes estarão em maior quantidade na água subterrânea quando os poluentes atingirem o lençol freático, e devido aos efeitos maléficos à saúde humana causados por esses compostos, é de fundamental importância estudar a capacidade de microrganismos promoverem a sua degradação.

Os processos em que estão inseridas as reações químicas ocasionadas, por exemplo, por microrganismos, podem ser chamados de biorremediação, onde esses microrganismos irão degradar as espécies químicas poluentes sem a interferência de tecnologias de remediação.

Para Costa e Teixeira (2010, *apud* Fleck *et al.*, 2013) o enfoque preventivo do controle ambiental se tornou necessário para determinar os efeitos da ação humana sobre a integridade química, física e biológica do meio natural. Dentro deste contexto, surgem os modelos matemáticos de qualidade da água, como importantes instrumentos de controle da poluição hídrica.

2.2 - Modelagem matemática em sistemas ambientais como ferramenta

A modelagem é uma ferramenta muito importante que pode ser usada em sistemas ambientais, seus objetivos são interpretar e analisar o comportamento de um sistema, otimizar ou propor modificações, testar hipóteses e fazer precisões da resposta em diferentes condições operacionais. Pode-se dizer que o modelo matemático é uma simplificação da realidade, ou seja, ele aborda os parâmetros mais importantes a serem estudados. Para Smith e Smith (2007) modelar é aplicar matemática a solução de problemas, e transformar um problema prático em um modelo matemático, buscando solução que possa ser aplicada na situação original. O objetivo de todo modelo é explicar o funcionamento de um determinado sistema. Nesse sentido a modelagem matemática pode simular cenários futuros, sendo essa uma das suas principais vantagens.

Bastos (2010) diz que mesmo com as inúmeras aplicações, a modelagem matemática de ecossistemas vem sendo inserida aos poucos se tornando mais reconhecida, já que a necessidade crescente de respostas imediatas diante de problemas globais exige uma ferramenta holística, que seja hábil para o trabalho com fenômenos ambientais complexos.

Fleck *et al.*, (2013) descreve que a modelagem matemática torna-se uma importante ferramenta de apoio aos gestores públicos no processo de gerenciamento dos recursos hídricos, possibilitando atender aos objetivos

propostos pela Política Nacional dos Recursos Hídricos em todas as suas esferas. Como existe uma grande abundância de modelos matemáticos disponíveis, atualmente é preciso que se conheça qual o que melhor se adequa a situação, por meio das condições da área de estudo.

No desenvolvimento da modelagem deve-se construir o modelo que melhor se adequa ao problema, pois cada sistema tem suas características próprias.

[...] CORDAZZO propõe um modelo com a respectiva solução numérica bidimensional para o problema do derramamento de contaminante na região saturada do solo, conhecida como lençol freático, em volumes finitos, com modelo de biodegradação de 1ª ordem, adaptado para a situação da gasolina brasileira, isto é, considerando a influência do etanol na biodegradação dos constituintes BTEX (benzeno, tolueno, etilbenzeno e xileno) da gasolina e no fenômeno de cosolvência do etanol na gasolina, assumindo que a solubilidade dos compostos hidrofóbicos na água aumenta log-linearmente. O efeito de sorção (retardo da pluma) da gasolina também é considerado no modelo, supondo uma sorção linear. A equação de transporte resolvida numericamente leva em consideração a dispersão, advecção, sorção e a biodegradação dos compostos BTEX, bem como do etanol. Também é resolvido numericamente o campo de velocidades da água subterrânea, através das equações de Darcy, possibilitando que regiões com diferentes permeabilidades sejam levadas em consideração. CORDAZZO (2000).

A técnica de transformar a equação diferencial de transporte a partir da transformada de Laplace, e resolvê-la numericamente por elementos finitos é apresentada por Sudick (1989). Esta técnica apresentou bons resultados, e pela inexistência da discretização temporal, os erros numéricos decorrentes desta discretização foram sensivelmente diminuídos.

A equação de advecção-dispersão foi resolvida analiticamente para avaliar o transporte transiente de soluto em um meio poroso bidimensional, isotrópico e semi-infinito, com um pulso de concentração injetado ao longo do escoamento em uma direção Leij e Dane (1990). A solução foi obtida com as transformadas de Fourier e Laplace.

Chen *et al.* (1992) propõem um modelo unidimensional para a simulação da biodegradação e transporte de benzeno e tolueno na subsuperfície. Os processos modelados incluem troca de massa entre as fases constituintes (sólido, líquido, gás e biomassa), transporte advectivo e difusivo, e

biotransformação, bem como a produção de biomassa microbiana. Neste trabalho, a importância da estimação precisa dos parâmetros microbianos é enfatizada.

Um trabalho claramente diferente dos anteriores é apresentado por Strack (1992), que sugere um modelo “não-Fickniano” para a dispersão em meios porosos. Esta aproximação permite, pela eliminação da derivada segunda da equação de transporte, a solução de uma “frente” de contaminante.

Um modelo numérico foi desenvolvido para descrever a biorremediação de hidrocarbonetos na água subterrânea considerando degradação aeróbica Munoz e Irrázaval (1998). O modelo resolve independentemente o transporte de três solutos (oxigênio, hidrocarbonetos e microrganismos) usando o método das características. As interações entre os três solutos, nas quais oxigênio e hidrocarbonetos são consumidos pelos microrganismos, são representados pela cinética de Monod, resolvendo pelo método de Runge-Kutta.

A proposição e utilização de modelos estimulam a reflexão crítica sobre a criação, escolha, validação e uso desses modelos; desperta para o raciocínio e a pesquisa, levando a formulação de hipóteses e realização de observações. Assim, no campo da modelagem, não ha um modelo absoluto e definitivo, mas sim uma aproximação contínua do problema real estudado. Há de se destacar também que existem várias formas de se produzir representações da realidade, vários tipos de representações, não só de objetos diferentes, mas também do mesmo objeto; e a partir de um modelo que se obtém uma imagem simplificada dos fatos; que um modelo pode ser aprimorado ou ser substituído por outro mais geral. (BASTOS, 2010, p.44).

Leal e Rupert (2000) desenvolveram uma solução híbrida para um modelo bidimensional de seleção de transporte em um aquífero homogêneo com escoamento subterrâneo uniforme. A Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITT) foi utilizada para prover a solução híbrida numérico-analítica, e dois procedimentos numéricos foram utilizados, tendo sido selecionado um caso teste para verificar a eficácia das soluções propostas.

Leal e Rupert (2001) utilizaram a GITT para simular o transporte bidimensional de contaminantes em um sistema de multicamadas. Duas camadas foram consideradas, sendo que, na primeira, uma zona não saturada

é tratada como sendo a camada de percolação. O campo de escoamento é conhecido e a fonte de concentração encontra-se no topo do sistema. Os autores analisaram dois tipos de condições de contorno: injeção de fluxo constante e fluxo dependente do tempo e concluíram que a GITT é empregada com sucesso para a obtenção da distribuição da concentração transiente em um sistema hipotético heterogêneo com campo de escoamento conhecido e constante. Eles verificaram que, uma melhoria na modelagem do termo fonte teria um forte impacto nos resultados finais. Concluíram que o comportamento transiente da pluma de contaminante é eficientemente simulado através da aproximação híbrida proposta. Esse tipo de modelo pode ser aplicado a problemas ambientais envolvendo contaminação do solo por eliminação de poluentes e avaliação de segurança de áreas próximas a depósitos.

De acordo com Larentis (2004) a implementação da Política Nacional dos Recursos Hídricos (PNRH) necessita de ferramentas para que se possa verificar se seus objetivos estão sendo alcançados, a que custo isto pode ocorrer e quais são as medidas mais adequadas a serem tomadas. Uma dessas ferramentas é a modelagem matemática.

Para Paula (2011) a calibração, verificação, análise de incerteza e sensibilidade do modelo utilizado com os dados experimentais são fundamentais para que exista consistência entre os resultados preditos pelo modelo e os valores reais do sistema estudado e, com isto, a modelagem possa ser efetivamente usada como ferramenta de apoio em processos decisórios.

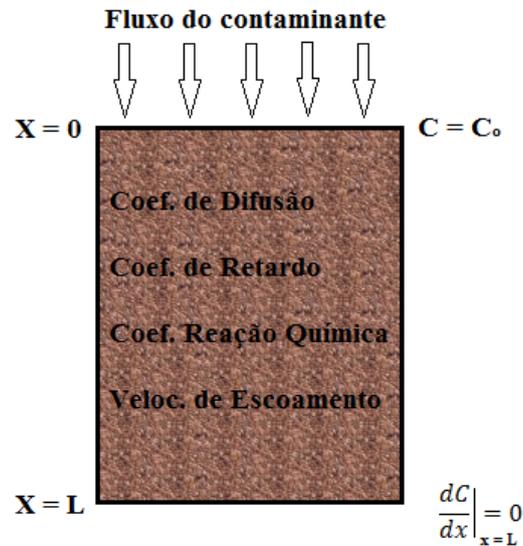
3 - REFERENCIAL METODOLÓGICO

3.1 - Definição do problema

O problema é composto de meio poroso com apenas uma camada, conforme ilustrado na Figura 1. Considera-se o problema de transferência de massa bidirecional transiente, com reação química irreversível, sendo constantes as propriedades dentro da camada: o coeficiente de dispersão, o

fator de retardamento, a velocidade de dispersão e a velocidade de reação. Assume-se a concentração injetada em $x=0$ e fluxo do poluente, sendo funções conhecidas e dependentes do tempo.

Figura 1: Esquemática do problema.



Fonte: Autoria própria

Para resolução do problema será levado em consideração os processos físicos e químicos que irão ocorrer no interior do volume de controle.

3.2 – Equação da continuidade

O ponto de partida para o desenvolvimento de equações diferenciais que descrevem o transporte de solutos em materiais porosos é considerar o fluxo de soluto que entra e sai em um dado elemento de volume fixado em relação ao domínio do escoamento.

De acordo com a conservação das massas pode-se realizar o balanço material para a espécie química, por meio da aplicação de volume de controle:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fluxo mássico} \\ \text{entrando no} \\ \text{volume} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Fluxo mássico} \\ \text{saindo do} \\ \text{volume} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{c} \text{Perda ou Ganho} \\ \text{de Massa devido} \\ \text{a reações} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{de massa no} \\ \text{volume} \end{array} \right] \quad (1)$$

A concentração do soluto C é definida como sendo a massa de soluto por unidade de volume de solução. A massa de soluto por unidade de volume em um meio poroso é então εC . Para um meio homogêneo a porosidade é uma constante, portanto, $\frac{\partial(\varepsilon C)}{\partial x} = \varepsilon \frac{\partial C}{\partial x}$. A massa do soluto transportada na direção x pode ser representada por dois mecanismos de transporte de soluto:

$$\text{Transporte por advecção} \rightarrow u\varepsilon C dA \quad (2)$$

$$\text{Transporte por dispersão} \rightarrow \varepsilon D_x \frac{\partial C}{\partial x} dA \quad (3)$$

u - velocidade do poro

$$u = \frac{q}{\varepsilon}$$

q - velocidade de Darcy

D_x é o coeficiente de dispersão e dA é um elemento da área transversal ao volume. O coeficiente de dispersão está relacionado à dispersividade α e ao coeficiente de difusão molecular \dot{D} pela seguinte equação:

$$D = \alpha u + \dot{D}_x \quad (4)$$

A forma da componente dispersiva do fluxo de massa, Equação (3) é análoga a primeira Lei de Fick que diz que o fluxo de massa é proporcional ao gradiente de concentração (BIRD *et al.*, 1960; BEJAN, 1964; CRANK, 1956).

Se F_x representa a massa total de soluto por unidade de área transportada na direção x , por unidade de tempo, tem-se:

$$F_x = u\varepsilon C - \varepsilon D_x \frac{\partial C}{\partial x} \quad (5)$$

O sinal negativo antes do termo dispersivo indica que o contaminante se move, por dispersão, em direção a zonas de concentração mais baixas. Similarmente, as expressões para as demais direções:

$$F_y = v\varepsilon C - \varepsilon D_y \frac{\partial C}{\partial y} \quad (6)$$

$$F_z = w\varepsilon C - \varepsilon D_z \frac{\partial C}{\partial z} \quad (7)$$

o total de soluto entrando no volume é definido por:

$$F_x dz dy + F_y dx dz + F_z dx dy$$

e o total que deixa o volume de controle é definido por:

$$\left(F_x + \frac{\partial F_x}{\partial x} dx \right) dy dz + \left(F_y + \frac{\partial F_y}{\partial y} dy \right) dx dz + \left(F_z + \frac{\partial F_z}{\partial z} dz \right) dx dy$$

em que os termos parciais indicam a mudança espacial do soluto na especificada direção. A diferença da quantidade que entra e sai é então:

$$\left(\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} \right) dx dy dz$$

A diferença entre o fluxo que entra no elemento de volume e o fluxo que sai é igual à quantidade de substância dissolvida acumulada no elemento de volume mais a perda (ou menos o ganho) de massa de soluto no elemento de volume que pode ocorrer como resultado de reações químicas ou bioquímicas (FREEZE e CHERRY, 1979). A taxa de mudança da massa no elemento é:

$$-\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dz + \sum Q(C) dx dy dz$$

a expressão completa da conservação da massa torna-se então:

$$\frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = -\varepsilon \frac{\partial C}{\partial t} + \sum Q(C) dx dy dz \quad (8)$$

Um aspecto importante considerado nesse estudo é que a perda ou ganho de massa de soluto no volume de controle (Q) deve-se a velocidade de reação do soluto em questão. O último termo da equação (8) torna-se então:

$$\sum Q(C) = -KRC$$

em que R é o fator de retardo e K é a velocidade de reação.

Numa interpretação clássica o retardamento da migração do poluente deve-se aos processos de sorção. Os processos de sorção incluem a adsorção, a sorção química, a absorção e a troca iônica. Para o estudo em questão o termo sorção, será utilizado para indicar o resultado de todos os processos que ocorrem. A sorção é experimentalmente determinada pela medida de quanto um soluto pode ser sorvido por uma partícula sedimentar, solo ou rocha. Alíquotas do soluto em concentrações variadas são misturadas com o sólido, e a quantidade removida do soluto é determinada. A capacidade de um sólido para remover é uma função da concentração do soluto. Os resultados são plotados em um gráfico, chamado de isoterma, que mostra a concentração do soluto versus a quantidade sorvida no sólido (FETTER, 1999). Se existir uma relação direta e linear entre a quantidade de soluto sorvido no sólido, \hat{C} (mg/kg), e a concentração do soluto, C (mg/L), pode-se calcular o coeficiente de distribuição, K_d (L/kg), que é a grandeza utilizada para avaliar a capacidade de retenção de um solo, através de uma isoterma linear de sorção, sendo definido pela equação:

$$\hat{C} = K_d C \quad (9)$$

em que K_d é o coeficiente de distribuição que é uma característica própria de um determinado solo em relação a uma determinada solução, podendo variar de acordo com alguns fatores como a atividade do solo, concentração inicial da substância na solução, concentração de outras substâncias presentes na solução, pH da solução, temperatura e velocidade de percolação. Por meio do coeficiente de distribuição, pode-se determinar o fator de retardamento, que é um parâmetro comumente utilizado nos modelos de transporte de contaminantes, como:

$$R = 1 + \frac{\rho_d K_d}{\theta} \quad (10)$$

em que θ é o teor de umidade volumétrico, que é igual à porosidade do solo que está saturado e ρ_d é a densidade do solo seco [M/L³].

Substituindo (5), (6) e (7) em (8) e cancelando ε em ambos os lados obtém-se:

$$\left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_x \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_y \frac{\partial C}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(D_z \frac{\partial C}{\partial z} \right) \right] - \left[\frac{\partial}{\partial x} (\mu C) + \frac{\partial}{\partial y} (v C) + \frac{\partial}{\partial z} (w C) \right] = R \frac{\partial C}{\partial t} - KRC \quad (11)$$

É importante ressaltar, que no estudo em questão, o escoamento é considerado incompressível, ou seja, o divergente do campo na velocidade é nulo:

$$\nabla \cdot \mathbf{V} = 0$$

$$\frac{\partial u}{\partial x} + \frac{\partial v}{\partial y} + \frac{\partial w}{\partial z} = 0 \quad (12)$$

em que \mathbf{V} é a velocidade

a equação (11) torna-se:

$$\left[D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - \left[u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right] = R \frac{\partial C}{\partial t} - KRC \quad (13)$$

4 - RESULTADOS E DISCUSSÕES

4.1 - Transporte de poluentes em meios porosos com reações químicas

Para descrever o nosso problema temos as equações a seguir:

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - W \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - KC(x,t) \quad (1)$$

$$C(0,t) = 1.0 \quad (2)$$

$$C(x,0) = C_0 \quad (3)$$

$$\frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = 0 \quad (4)$$

4.1.1 - Definição do problema auxiliar

Para resolver a equação (1) utiliza-se a Técnica da Transformada Integral Generalizada (GITG), propondo-se o seguinte problema auxiliar e suas condições iniciais:

$$\frac{\partial^2 \tilde{\Psi}(x\mu)}{\partial x^2} + \mu^2 \tilde{\Psi}(x\mu) = 0 \quad (5)$$

$$\tilde{\Psi}(0) = 0 \quad (6)$$

$$\frac{d\tilde{\Psi}}{dx}(1) = 0 \quad (7)$$

Autofunção:

$$\tilde{\Psi}_i = \sin(\mu_i x) \quad (8)$$

Autovalores:

$$\cos(\mu_i x) = 0 \quad (9)$$

usando a equação (5), mostra-se que as autofunções $\tilde{\Psi}(x)$ são ortogonais de tal forma que:

$$\int_0^1 \tilde{\Psi}_i(x) \tilde{\Psi}_j(x) dx = \begin{cases} 0, \text{ se } i = j \\ 0, \text{ se } i \neq j \end{cases} \quad (10)$$

em que $\tilde{\Psi}_i(x)$ são as autofunções normalizadas,

$$\tilde{\Psi}_i(x) = \frac{\Psi_i(x)}{N_i^{1/2}} \quad (11)$$

e a norma N é dada por,

$$N_i = \int_0^1 \Psi_i^2(x) dx \quad (12)$$

4.1.2- Par Transformada-Inversa

Escrevendo-se o potencial $C(t)$ como sendo uma expansão que tem como base as autofunções originadas do problema auxiliar associado ao problema original.

$$C(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_i \bar{C}(t) \quad (13)$$

em que $\bar{C}(t)$ é uma função desconhecida que depende de t .

Multiplicando-se a equação (13) pela autofunção normalizada, $\tilde{\Psi}_i(x)$, integrando-se em todo o domínio da variável x e considerando-se a propriedade da ortogonalidade, a partir da Equação (8) obtém-se o seguinte par transformada-inversa:

$$\bar{C}(x, t) = \int_0^1 \tilde{\Psi} C(x, t) dx \quad (14)$$

$$C(x, t) = \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_i \bar{C}(t) \quad (15)$$

4.1.3-Transformação Integral do Problema

Desmembrando a equação (1) em termos temos,

Transformando a 1ª parte da equação (1),

$$R \frac{\partial C(x, t)}{\partial t}$$

Multiplicando-se pela autofunção normatizada, $\tilde{\Psi}_i(x)$, e integrando todo o domínio, obtém-se a equação:

$$\int_0^1 R \frac{\partial C(x, t)}{\partial t} \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

Fazendo a substituição pela equação (15) temos,

$$\int_0^1 R \frac{\partial}{\partial t} \left[\sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_j(x) \bar{C}_j(t) \right] \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

Organizando os termos da equação,

$$\sum_{j=1}^{\infty} R \frac{d}{dt} \bar{C}_j(t) \int_0^1 \tilde{\Psi}_i(x) \tilde{\Psi}_j(x) dx \quad (16)$$

Assim usando a propriedade da ortogonalidade na equação (16) temos,

$$R \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} = R \frac{d}{dt} \bar{C}_i(t) \quad (17)$$

Transformando o 2º termo da equação (1),

$$W \frac{\partial C(x,t)}{\partial x}$$

Multiplicando-se pela autofunção normatizada, $\tilde{\Psi}_i(x)$, e integrando todo o domínio, obtém-se a equação:

$$\int_0^1 W \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

Fazendo a substituição pela equação (15) temos,

$$\int_0^1 W \frac{\partial}{\partial x} \left[\sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_j(x) \bar{C}_j(t) \right] \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

Retirando-se os termos da integral,

$$\sum_{j=1}^{\infty} W \bar{C}_j(t) \int_0^1 \frac{d}{dx} \tilde{\Psi}_j(x) \tilde{\Psi}_i(x) dx \quad (18)$$

para simplificar definimos,

$$\int_0^1 \frac{d}{dx} \tilde{\Psi}_i(x) \tilde{\Psi}_j(x) dx = A_{ij} \quad (19)$$

Assim substituindo a equação (19) na (18) temos,

$$W \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = \sum_{j=1}^{\infty} W A_{ij} \bar{C}_j(t) \quad (20)$$

Agora transformando o 3º termo da equação (1),

$$D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2}$$

Multiplicando-se pela autofunção normatizada, $\tilde{\Psi}_i(x)$, e integrando todo o domínio, obtém-se a equação:

$$\int_0^1 D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

Fazendo a substituição pela equação (15) temos,

$$\int_0^1 D \frac{\partial^2}{\partial x^2} \left[\sum_{j=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_j(x) \bar{C}_j(t) \right] \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

retirando os termos da integral,

$$\sum_{j=1}^{\infty} D \bar{C}_j(t) \int_0^1 \frac{\partial^2}{\partial x^2} \tilde{\Psi}_j(x) \tilde{\Psi}_i(x) dx \quad (21)$$

Observando a equação do problema auxiliar podemos reescrever a equação (21) da seguinte forma:

$$- \sum_{j=1}^{\infty} D \bar{C}_j(t) \mu_j^2 \int_0^1 \tilde{\Psi}_j(x) \tilde{\Psi}_i(x) dx$$

Pelo princípio da ortogonalidade obtemos a seguinte expressão:

$$- \sum_{i=1}^{\infty} D \bar{C}_i(t) \mu_i^2 = -D \mu_i^2 \bar{C}_i(t) \quad (22)$$

Transformando a 4ª e última parte da equação (1) temos que:

$$KC(x,t)$$

Multiplicando-se pela autofunção normalizada, $\tilde{\Psi}_i(x)$, e integrando todo o domínio, obtém-se a equação:

$$\int_0^1 K \sum_{i=1}^{\infty} \tilde{\Psi}_i(x) \tilde{\Psi}_j(x) \bar{C}_i(t) dx$$

Fazendo a substituição pela equação (15) temos,

$$\sum_{i=1}^{\infty} K \bar{C}_i(t) \int_0^1 \tilde{\Psi}_i(x) \tilde{\Psi}_j(x) dx$$

Aplicando o princípio da ortogonalidade temos,

$$\sum_{i=1}^{\infty} K \bar{C}_i(t) = K \bar{C}_i(t) \quad (23)$$

Assim substituindo as equações (17), (20), (22) e (23) na equação (1) temos,

$$R \frac{d}{dt} \bar{C}_i(t) - \sum_{j=1}^{\infty} wA_{ij} \bar{C}_i(t) = -D\mu_i^2 \bar{C}_i(t) - K \bar{C}_i(t)$$

Reorganizando a equação temos,

$$\frac{d}{dt} \bar{C}_i(t) = \frac{1}{R} [-D\mu_i^2 \bar{C}_i(t) - K \bar{C}_i(t) + \sum_{j=1}^{\infty} wA_{ij} \bar{C}_j(t)]$$

Podemos simplificar e obtermos a equação:

$$\frac{d}{dt} \bar{C}_i(t) = \frac{1}{R} [-(D\mu_i^2 + K) \bar{C}_i(t) + \sum_{j=1}^{\infty} wA_{ij} \bar{C}_j(t)] \quad (24)$$

4.2 – Análises de influência dos Parâmetros

4.2.1 – Análise do efeito da variação do coeficiente de difusão (D)

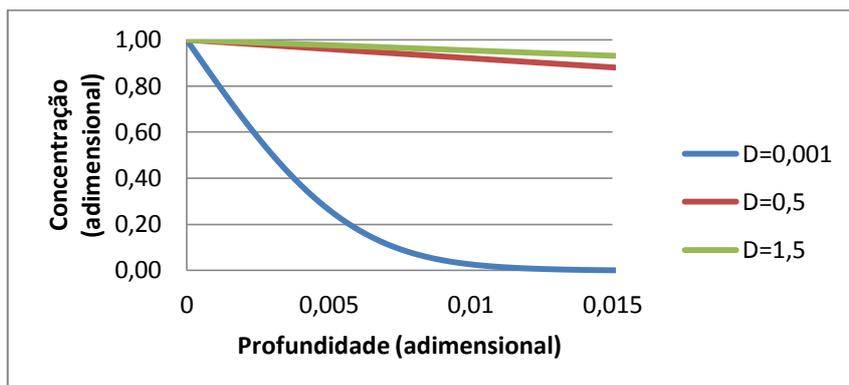
O coeficiente de dispersão-difusão (D) é um parâmetro físico da equação de transporte de solutos no solo. Esse parâmetro expressa dois fenômenos de transporte aditivos: a difusão, que ocorre em razão da existência

de gradiente de concentração, e a dispersão mecânica, que é um movimento proporcionado por variações na velocidade de deslocamento da solução dentro dos poros individuais e entre poros de diferentes formas, tamanhos e direções.

Esta análise procurou compreender a influência da variação do coeficiente de difusão (D), em situações distintas. O coeficiente de difusão nos fornece informação de como a espécie poluente se desloca dentro das soluções devido à existência de gradientes de concentração.

No primeiro caso avaliaram-se os perfis de concentração com a influência do coeficiente de difusão para os valores de (D) iguais 0,001; 0,5 e 1,5. E mantiveram-se os valores de coeficiente de retardo (R) e da velocidade (W), constantes e iguais a 1,00 e 0,001, respectivamente. E consideraram-se os coeficientes de reação (K) de 0,0 e 5,0. Também se fixou o tempo adimensional em $t=0,10$.

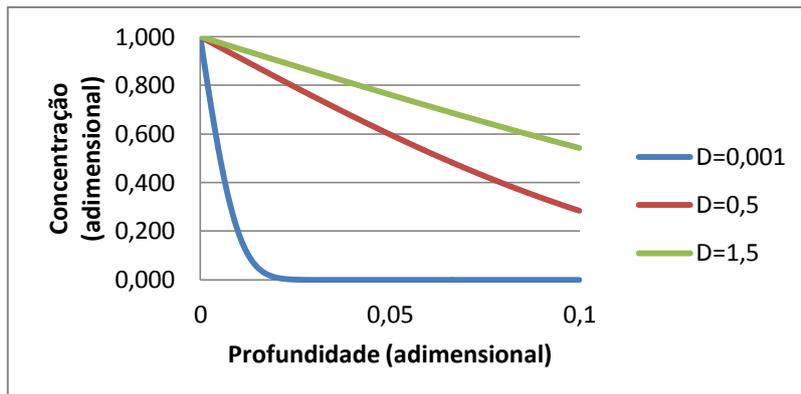
Figura 2: Perfil da concentração em função da profundidade, variando D e mantendo constante $W=0,001$ $R=1,0$ e $K=0$.



Fonte: Dados primários, 2014.

Pode-se observar que na ausência de reação química (Figura 2), a qual é responsável pelo consumo do poluente, à medida que o coeficiente de difusão aumenta, a pluma de poluição se desloca para regiões mais profundas do solo.

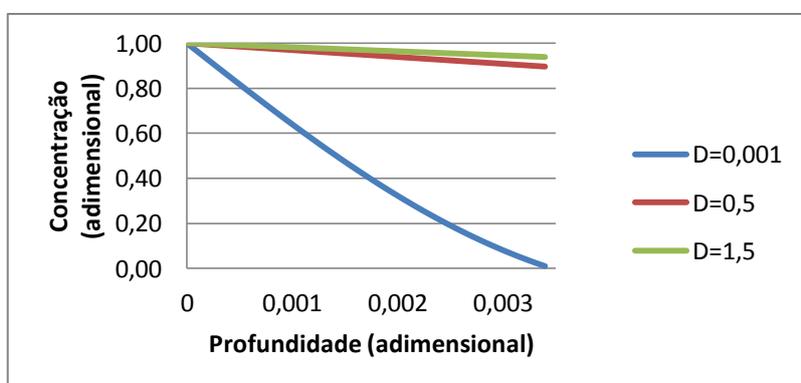
Figura 3: Perfil da concentração em função da profundidade, variando D e mantendo constante $W=0,001$ $R=1,0$ e $K=5,0$.



Fonte: Dados primários, 2014.

Nas situações onde existe reação química, pode-se observar que ocorre o consumo da espécie poluente em regiões próximas a superfície, não havendo, portanto uma grande propagação da pluma de poluentes para regiões afastadas da superfície. No entanto vale salientar que independentemente da existência ou não de reações químicas, para elevados valores do coeficiente de difusão, a pluma de poluição atingirá regiões profundas do solo.

Figura 4: Perfil da concentração em função da profundidade, variando D, e mantendo constante $W=0,001$ $R=15,0$ e $K=0$.



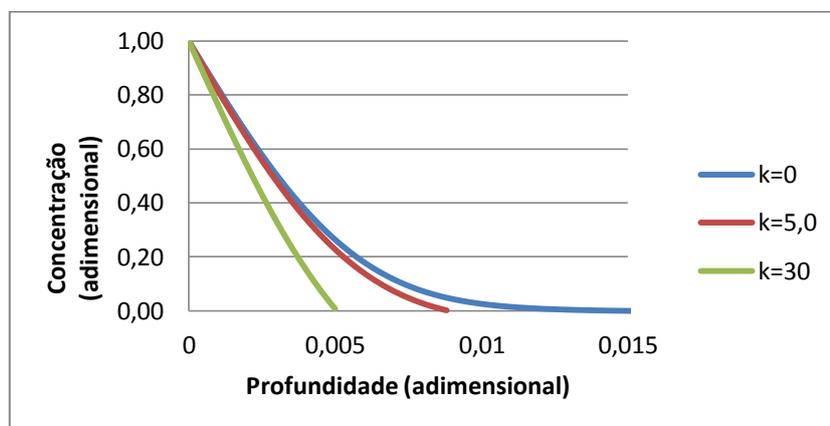
Fonte: Dados primários, 2014.

Nesse caso para o valor de coeficiente de Retardo alto, igual a 15, e velocidade de 0,001 e sem coeficiente de reação, observa-se que a concentração do poluente atinge pequenas profundidades.

4.2.2 – Análise do efeito da variação do coeficiente de reação química (K)

Nesta análise procurou-se compreender a influência do coeficiente de reação química (K). Esse coeficiente é responsável pela degradação do poluente no solo, onde sua presença ou ausência pode aumentar ou diminuir a chance, que o poluente possui para atingir grandes profundidades, podendo contaminar águas subterrâneas. Na Figura 5 estão ilustrados os perfis de concentração para valores de coeficiente de reação química (K) iguais a 0,0; 5,0 e 30,0.

Figura 5: Perfil da concentração em função da profundidade, variando K, e mantendo constante $W=0,001$; $R=1,0$ e $D=0,001$.



Fonte: Dados primários, 2014.

Como era esperado pode-se observar que quanto maior o coeficiente de reação química menor é a profundidade que um determinado poluente pode chegar ao solo, esse parâmetro é de grande importância, pois conhecendo-o pode-se dizer se um determinado tipo de solo é capaz de se autorremediar, ou seja, se recuperar sem a intervenção de outras medidas de tecnologias ativas de remediação.

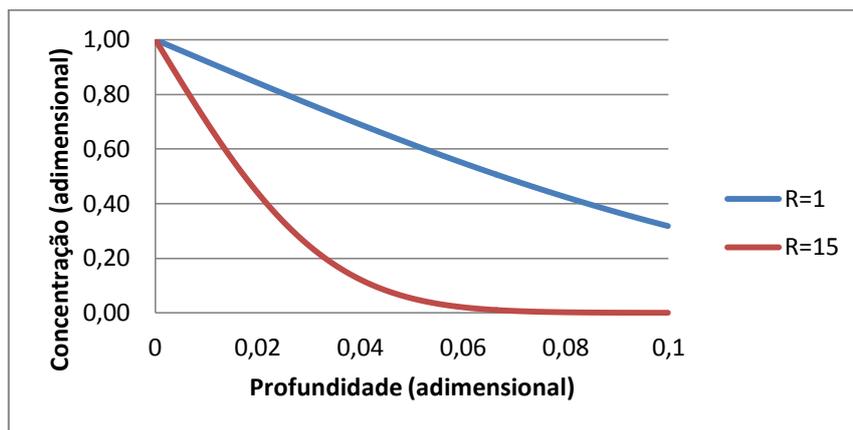
4.2.3 – Análise do efeito da variação do coeficiente de retardo (R)

Nesta análise procurou-se compreender a influência do coeficiente de retardo (R). O coeficiente de retardo nos fornece informação da dificuldade que a espécie poluente possui para se deslocar no meio poroso, ou seja, a

capacidade que o meio possui para retardar o escoamento do poluente. Analisou-se a influência da variação do coeficiente de retardo em dois cenários distintos, os quais são caracterizados por diferentes taxas de velocidade de reação química.

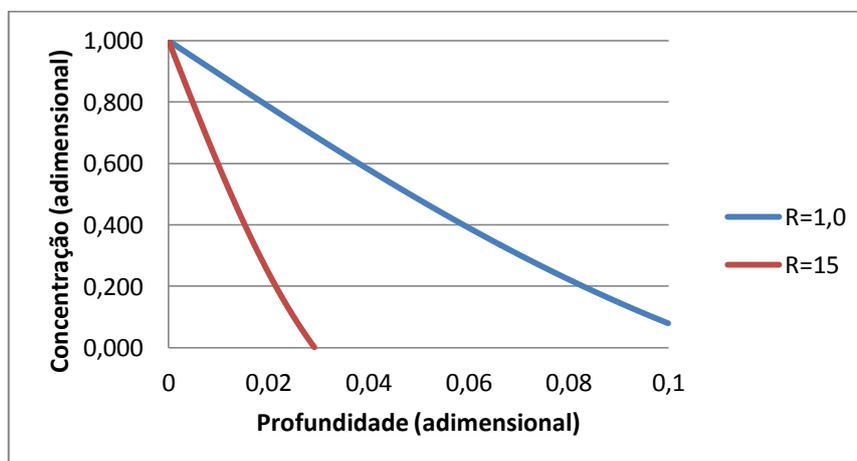
Nas Figuras 6 e 7 estão ilustrados os perfis de concentração para valores de coeficiente de retardo (R) iguais a 1,0 e 15,0 para coeficientes de reação química de 0,0 e 30,0.

Figura 6: Perfil da concentração em função da profundidade, variando R , e mantendo constante $D=0,5$ $W=0,01$ e $K=0$.



Fonte: Dados primários, 2014.

Figura 7: Perfil da concentração em função da profundidade, variando R , e mantendo constante $D=0,5$ $W=0,001$ e $K=30,0$.



Fonte: Dados primários, 2014.

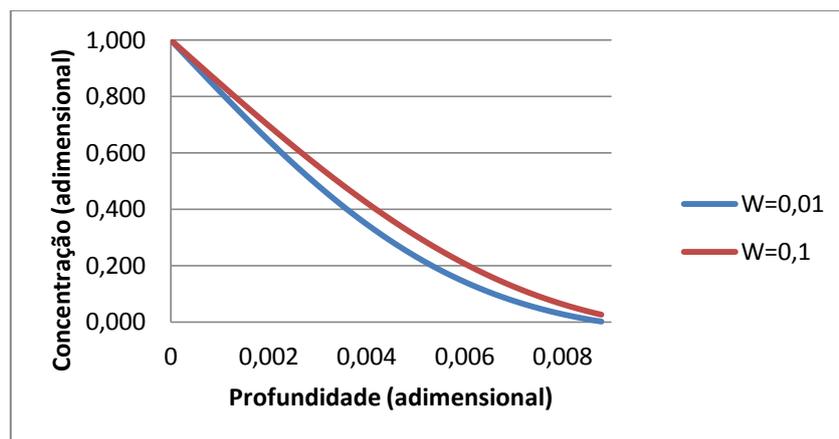
Pode-se observar que na ausência ou presença de reação, quanto menor o coeficiente de retardo a pluma de poluição se desloca para regiões mais profundas do solo. E com altos valores de coeficiente de retardo e de reação química o poluente é degradado mais rapidamente

4.2.4 - Análise do efeito da variação da velocidade do escoamento (W)

Nesta análise procurou-se compreender a influência da velocidade de escoamento (w). A velocidade do escoamento nos fornece informação da velocidade que a espécie poluente se desloca no meio poroso.

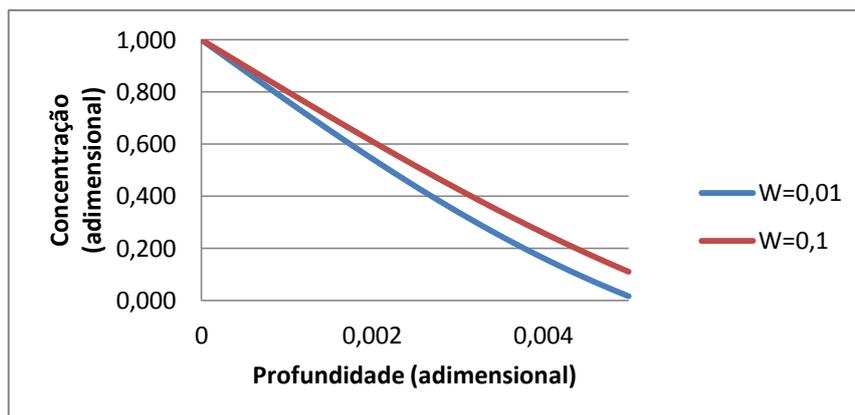
Nas Figuras 8 e 9 estão destacados os perfis de concentração para valores da velocidade de escoamento (w) iguais a 0,01 e 1,00. Observou-se que quanto maior a velocidade de escoamento, com e sem a reação química, a pluma de poluição se desloca mais rapidamente para regiões mais profundas do solo.

Figura 8: Perfil da concentração em função da velocidade, mantendo constante $D=0,001$; $R=1,0$ e $K=5,0$.



Fonte: Dados primários, 2014.

Figura 9: Perfil da concentração em função da velocidade, mantendo constante $D=0,001$; $R=1,0$ e $K=30,0$.



Fonte: Dados primários, 2014.

Verificou-se que a variação da velocidade é menor se comparada ao comportamento do gráfico com a variação dos outros parâmetros estabelecidos nesse estudo.

5 – CONCLUSÃO

O modelo desenvolvido para simular o comportamento dos poluentes é válido, mesmo com suas simplificações, visualizou-se que a influência dos parâmetros dos coeficientes de difusão, reação química e retardo e a velocidade de escoamento no solo. Tais parâmetros indicaram se a pluma do poluente irá se deslocar para regiões mais profundas ou se dispersar em regiões mais próximas da superfície.

Percebeu-se que o coeficiente de difusão assume um dos mais importantes fatores visto que se ele for alto, o determinado poluente irá se dispersar para regiões mais profundas da superfície. Já a velocidade de escoamento, apesar de importante, não contribui significativamente se comparada aos outros coeficientes com seus valores altos, uma vez que o coeficiente de retardo impede a passagem da espécie poluente no meio poroso e o coeficiente de reação química degrada o poluente presente.

A importância desse estudo se dá ao fato que é mais viável economicamente fazer uma simulação de como está sendo deslocado uma

determinada espécie química poluente, para que se possa posteriormente fazer o planejamento para uma correta remediação da área, pois assim pode-se evitar maiores danos ao ambiente e ter um maior controle sobre os processos envolvidos. Dessa maneira a modelagem serve como uma ferramenta de prevenção e ajuda na tomada de decisão tanto na remediação de áreas poluídas, quanto para diversas atividades que tenham potencial poluidor.

REFERÊNCIAS

APARECIDO, J. B.; COTTA, R. M. **Fully Developed Laminar Flow in Trapezoidal Ducts**, Anais do IX Congr. Bras. de Eng. Mecânica - IX COBEM, v. 1, p. 25-28, 1987.

APARECIDO, J. B.; COTTA, R. M.; ÖZISIK, M. N. **Analytical Solutions to Two-Dimensional Diffusion Problems in Irregular Geometries**, J. Franklin Inst., v. 326, p. 421-434, 1989.

AZEVEDO, A. S.; Kanwar, R. S.; Singh, P.; Pereira, L. S. **Movement of NO₃- and atrazine through soil columns as affected by lime application**. Transactions of the Asae, St. Joseph, v.39, n.3, p.937-945, 1996.

BASTOS, Argemiro Midonês. **Modelagem de Escoamento Ambiental como Subsídio à Gestão de Ecossistemas Aquáticos no Baixo Igarapé da Fortaleza - AP**. 2010. 118 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Pós-graduação em Biodiversidade Tropical, Universidade Federal do Amapá - Unifap,, Macapá-ap, 2010

BEAR, J. 1972. *Dynamics of Fluids in Porous Media*, American Elsevier, New York.

BEJAN, A. 1994, **Convection Heat Transfer**, Capítulo 9, John Wiley & Sons.

BIRD, R. B.; STEWART, W. E.; LIGHTFOOT, E. N. (1960), **Transport Phenomena**, Wiley International Edition.

BORDEN, R. C., GOMES, C. A.; BECKER, M. T. (1995). **Geochemical Indicators of Intrinsic Bioremediation, Groundwater**, v.33, p.180-189.

BRATBERG, D.; HOPKINS, L. (1995). ***Risk Based Corrective Action and Risk Assessment Procedures in the United States: a 1995 Survey***. In: Proceedings of the 1995 Petroleum Hydrocarbon and Organic Chemicals in Ground Water: Prevention, Detection, and Restoration Conference, Houston, Texas. Nov., p. 25-31.

BURNETT, R. D.; FRIND, E. O. (1987). ***Simulation of Contaminant Transport in Three Dimensions, 2. Dimensionality Effects***, Water Resour. Res., v. 23, n. 4, p. 695-705.

CHAPELLE, F. H. (1996). ***Ground-water Microbiology and Geochemistry***, John Wiley Sons, Inc., New York, NY.

CHEN, Y. M.; ABRIOLA, L.; ALVAREZ, P.; ANID, P.; VOGEL, T. (1992). ***Modeling Transport and Bioremediation of Benzene and Toluene in Sandy Aquifer Material: Comparison with Experimental Measurements***, Water Resour. Res., 28, n. 7: 1833-1847.

CHRISTOFOLETTI, A. ***Modelagem de Sistemas Ambientais***. Editora Edgard Blucher (1999), 4^a reimpressão (2007). São Paulo. 236p. 2007.

CLEARY, R. W.; UNGS, M. J. (1978). ***Analytical Models for Ground-water pollution and Hydrology: Princeton University***, Water Resources Program Report 78-WR-15, 165 p.

CODELL, R. B.; KEY, K. T.; WHELAN, G. (1982). ***A Collection of Mathematical Models for Dispersion in Surface Water and Groundwater: U.S. Nuclear Regulatory Commission Report NUREG-0868***.

CORDAZZO, J. (2000). ***Modelagem e Simulação Numérica do Derramamento de Gasolina acrescida de Álcool em Águas Subterrâneas***, Florianópolis, Santa Catarina.

CORSEUIL, H. X., MARTINS, M. D. M., 1997, ***Contaminação de Águas Subterrâneas por Derramamentos de Gasolina: O Problema é Grave?*** In: Engenharia Sanitária e Ambiental, Vol. 2, No. 2, Abril/Junho (1997).

COSTA, D. J. L.; TEIXEIRA, D. ***Aplicação de modelo de autodepuração para avaliação da qualidade da água do Ribeirão do Ouro***, Araraquara-SP. Revista Uniara, n.1, v.13, p.49-62, 2010.

COTTA, R. M. **Benchmark Results in Computational Heat and Fluid Flow: The Integral Transform Method**, Int. J. Heat Mass Transfer, v. 37, p.381-393, 1994.

COTTA, R. M. **Integral Transforms in Computational Heat and Fluid Flow**, CRC Press, Boca Raton, 1993.

COTTA, R. M., **Steady-State Diffusion with Space-Dependent Boundary Condition Parameters**, Anais do 1º Encontro Nacional de Ciências Térmicas-ENCIT 86, p.163-166, Rio de Janeiro, 1986.

COTTA, R. M.; MIKHAILOV, M. D. **Heat Conduction (Lumped Analysis, Integral Transforms and Symbolic Computation)**, John Wiley & Sons., Strasburg, France. To Appear, 1997.

COTTA, R. M.; ÖZISIK, M. N., **Diffusion Problems with General Time-Dependent Coefficients**, Rev. Bras. de Ciências Mecânicas, v. 9, n. 4, p.269-292, 1987.

CRANK, J. (1956). **The Mathematics of Diffusion**, Oxford University Press.

Demuelenaere, R. G. A. **Caracterização de Propriedades de Transporte de metais Pesados em Solos Residuais do Rio de Janeiro**. 2004. Dissertação(mestrado em Engenharia Civil) Departamento de Engenharia Civil da PUC-Rio.

DOMENICO, P. A. (1987). **An Analytical model for Multidimensional Transport of a Decaying Contaminant Species**. Journal of Hydrology, 91, 49-58.

FABRITZ, J. E. (1995), **A Two Dimensional Numerical Model for Simulating the Movement and Biodegradation of Contaminants in a Saturated Aquifer**. Tese de Mestrado. Universidade de Washington.

FETTER, C. W. (1993). **Contaminant Hydrogeology**. New York: Macmillian Publish Company, p. 458.

FETTER, C. W. (1999), **Contaminant Hydrogeology, 2nd**. Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, USA, p 501.

FLECK, L.; TAVARES, M. H. F.; EYNG, E.. **Principais modelos matemáticos de qualidade da água e suas aplicações: uma revisão.** Revista Eletrônica Científica Inovação e Tecnologia, v. 1, n. 7, p.47-62, 2013.

FREEZER, R. A., CHERRY, J. (1979). **Groundwater.** New Jersey: Prentice-Hall.

GUARNACCIA, J.; PINDER, G.; FISHMAN, M. (1997). **NAPL: Simulator Documentation.** National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-97102, October.

HUANG, K.; MOHANTY, P. B.; LEIJ, F. J., VAN GENUCHTEN, M. T.; (1998). **Solution of the non-linear transport equation using modified picard iteration,** Advances in Water Resources, v .21, p. 237-249.

HUNT, B. (1978). **Dispersive sources in uniform ground-water flow,** Journal of Hydraulics Division, v. 104, p. 75-85.

IMSL™ Library, MATH/LIB, version 1.1, Houston, Texas, 1989.

JARUP, L. **Hazards of heavy metal contamination.** British medical bulletin, n. 1, v. 68, p. 167-182, 2003.

KONIKOW, L. F.; BREDEHOEFT, J. D. (1978). **Computer Model of Two-Dimensional Solute Transport and Dispersion in Ground Water.** Techniques of Water Resources Investigation of the United States Geological Survey, Book 7, Reston, VA.

LARENTIS, D. G. **Modelagem matemática de qualidade da água em grandes bacias: Sistema Taquari-Antas-RS.** 159f. Dissertação (Mestrado em Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental). Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2004.

LEAL, M. A.; RUPERTI, N. J. (2000). **A Numerical Study for the Two-Dimensional Solute Transport in Groundwater Pathway via Integral Transform Method,** Hybrid Methods in Engineering, New York, v. 2, n.1.

LEAL, M.A.; RUPERTI, N. J. (2001). **A Hibrid Solution for Simulation of 2-D Contaminant Transport in Heterogeneous Subsurface Systems,** Hybrid Methods in Engineering, v.3, p. 129-144.

LEIJ, F. J.; DANE, J. H. (1990). **Analytical Solutions of the One-Dimensional Advection Equation and Two- or Three-Dimensional Dispersion Equation**. Water Resources Res., v. 26, n. 7, p. 1475-1482.

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

MALISKA, C. R.; MALISKA JR., C. R. (1994). **A Finite Volume Method Using Voronoi Grids for the Solution of Miscible Displacement in Porous Media**, RBCM – J. of the Braz. Soc. Mechanical Sciences, v. XVI, n. 4, p. 415-422.

MARIANO, Adriano Pinto. **Avaliação do potencial de biorremediação de solos e de águas subterrâneas contaminados com óleo diesel**. 2006. 162 f. Tese (Doutorado) - Curso de Geociências e Meio Ambiente, Departamento de Instituto de Geociências e Ciências Exatas, Universidade Estadual Paulista, Rio Claro (sp), 2006.

MIKHAILOV, M. D.; COTTA, R. M. **Integral Transform Solutions by Using Mathematica®**, (To Appear), 1997.

MIKHAILOV, M. D.; ÖZISIK, M. N. **Unified Analysis and Solutions of Heat and Mass Diffusion**, John Wiley, New York, 1984.

MOLSON, J. W. (1999). **BIONAPL-3D User Guide**. University of Waterloo, Department of Earth Sciences, Waterloo, Ontario, Canada.

MUNOZ, J. F.; IRARRÁZAVAL, M. J. (1998). **A Numerical Model for Simulation of Bioremediation of Hydrocarbons in Aquifers**, Ground Water, v. 36, n. 2, p. 215-224.

NEWELL, C. J.; MCLEOD, R. K.; GONZALEZ, J. R. (1996). **BIOSCREEN User's Manual**. National Attenuation Decision Support System. Version 1.3, National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-96/087, August.

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

PAULA, L. M. **Avaliação da qualidade da água e autodepuração do Rio Jordão, Araguari (MG)**. 196 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil). Universidade Federal de Uberlândia, Uberlândia, 2011.

PINDER, G. F. (1973). ***A Galerkin Finite Element Simulation of Groundwater Contamination on Long Island***, New York, Water Resources Res., 9(6), 108-120.

RICE, D., E; GROSE, R. D.; MICHAELSEN, J. C.; DOOHER, B. P., MACQUEEM; D. H., CULLEN, S. J.; KASTENBERG, W. E.; EVERETT, L. G.; MARINO, M. S. (1995). ***California Leaking Underground Fuel Tank (LFT) Historical Cases***, California States Water Resources Publication, UCRL-AR-12207.

RIFAI, H. S.; NEWELL, C. J.; GONZALEZ, J. R.; DENDROU, S.; KENNEDY, L.; WILSON, J. T. (1998). ***BIOPLUME III Natural Attenuation Decision Support System***. National Risk Management Research Laboratory, EPA/600/R-98/010, January.

ROSMAN, P. C. C. **Referência Técnica do SISBAHIA – Sistema Base de Hidrodinâmica Ambiental**, Programa COPPE: Engenharia Oceânica, Área de Engenharia Costeira e Oceanografica, Rio de Janeiro, Brasil. 213p. 2009.

SAGAR, B., (1982). **Dispersion in three dimensions: Approximate analytical solutions**, Journal of Hydraulics division, v. 108, p. 47 – 62.

SANTOS, C. A. C.; COTTA, R. M.; ÖZISIK, M. N. **Laminar Forced Convection Inside Externally Finned Tubes**, Anais do 2º Encontro Nacional de Ciências Térmicas-ENCIT 88, p.87-90, Rio de Janeiro, 1988.

SCOFANO NETO, F.; COTTA, R. M.; RIBEIRO, J. W. **Alternative Analytical Approach to Diffusion Problems with General Coupling at the Boundaries**, Anais do X Congr. Bras. Eng. Mecânica, p.173-176, Rio de Janeiro, Dezembro, 1989.

SERRANO (2001). **Solute transport under non-linear sorption and decay**, Water. Resour., v. 35, p. 1525 – 1533.

SMITH, J.; SMITH, P. **How to develop a model**. Oxford University Press. 125p., 2007.

STRACK, O. D. L. (1992). ***A Mathematical Model for Dispersion With a Moving Front in Groundwater***, Water Resources Research, v. 28, n. 11, pages 2973-2980, November.

SUDICK, E. A. (1989). ***The Laplace Transform Galerkin Technique: A Time-Continuous Finite Element Theory and Application to Mass Transport in Groundwater***. Water Resour. Res., 25(8), 1833-1846.

WEXLER, E. J. (1992). **Analytical Solutions for one-, two-, and three-dimensional solutetransport in ground-water systems with uniform flow**. U.S. Geological Survey, Techniques of Water-Resouces Investigations, Book 3, Chap. B7.

WIEDEMEIER, T. H.; SWANSON, M. A; WILSON, J. T.; KAMPBELL, D. H.; MILLER, R. N.; HANSEN, J. E. (1996). ***Approximation of Degradation Rate Cosntants for Monoaromatic Hidrocarbons (BTEX) in Groundwater***. Goundwater Monitoring and Remediation, v. 16, p.186-194.