



Julio Ernesto Macías Alvarenga

**MODELAGEM NUMÉRICA DO TRANSPORTE DE VÍRUS EM
AQÜÍFEROS FRATURADOS - POROSOS**

Tese de Doutorado

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil.

Orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Rio de Janeiro

Abril de 2008



Julio Ernesto Macías Alvarenga

**Modelagem Numérica do Transporte de Vírus em
Aqüíferos Fraturados - Porosos**

Tese apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio como requisito parcial para obtenção do título de Doutor em Engenharia Civil. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Eurípedes do Amaral Vargas Jr.

Orientador

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Luiz Fernando Campos Ramos Martha

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Denise Maria Mano Pessoa

Departamento de Engenharia Civil – PUC-Rio

Roberto Francisco de Azevedo

Departamento de Engenharia Civil – UFV

João Luiz Elias Campos

Consultor

José Eugênio Leal

Coordenador Setorial do Centro

Técnico Científico – PUC-Rio

Rio de Janeiro, 07 de Abril de 2008

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, do autor e do orientador.

Julio Ernesto Macías Alvarenga

Geólogo graduado pela Universidade da Costa Rica. Mestrado em Engenharia Civil na área de geotecnia pela Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Ficha Catalográfica

Macías, Julio E.

Modelagem Numérica do Transporte de Vírus em aquíferos fraturados – porosos / Julio E. Macías Alvarenga; orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Jr. – Rio de Janeiro: PUC, Departamento de Engenharia Civil, 2008.

257 f.: il. ; 29,7 cm

Tese (doutorado) – Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Departamento de Engenharia Civil.

Inclui referências bibliográficas.

1. Engenharia Civil – Teses. 2. Transporte de vírus. 3. Aquífero fraturado – poroso. 4. Fluxo saturado-não saturado. 5. Modelagem numérica. I. Vargas júnior, Eurípedes do Amaral. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. III. Título.

CDD : 624

Dedicatória:

*A mis padres, por el dón de la vida y por la lucha constante de buscar lo
mejor para sus hijos, especialmente em los tiempos de guerra.*

AGRADECIMENTOS

Ao professor Eurípedes Vargas pela amizade e pela orientação durante a realização desta pesquisa.

A Olga pelo amor e carinho.

Aos colegas da PUC, Tiago, Favio, Luciana, Wagner, Roberto, Marcelo, Juan Pablo, Marlesu, pela amizade e pelos ensinamentos de vida.

Aos amigos Daniel, Johanna, Sergio, pelo convívio.

As instituições que financiaram esta pesquisa, CAPES, CNPq e TECGRAF.

Ao povo brasileiro pela oportunidade de desenvolver uma pesquisa que era do meu interesse fazia um bom tempo. Muito Obrigado!

Resumo

Macías, Julio E.; Vargas Jr, Eurípedes do Amaral. **Modelagem Numérica do Transporte de Vírus em Aquíferos Fraturados - Porosos**. Rio de Janeiro, 2008. 252p. Tese de Doutorado – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A avaliação do potencial de contaminação de captações de água, por causa das águas residuais provenientes dos sistemas de tanque séptico, é feita a partir da definição da distância de separação mínima que deve existir entre a captação e o local de infiltração do efluente. A determinação dessa distância define a zona de proteção da captação. Existem três metodologias para definir o tamanho dessa zona de proteção: metodologias baseadas em distâncias fixas e tempos de trânsito, metodologias baseadas na vulnerabilidade e metodologias baseadas no risco de infecção.

No caso da Costa Rica, as avaliações são feitas através do uso da metodologia baseada no tempo de trânsito. O tempo de trânsito empregado corresponde ao tempo de sobrevivência dos vírus. Nesta análise determina-se a distância máxima percorrida pelos vírus durante esse tempo, e essa distância define a separação mínima. Esse método considera que o transporte ocorre por percolação vertical saturada através da zona não saturada, e por transporte ao longo da interface água-ar na zona saturada segundo o gradiente natural.

Neste trabalho apresenta-se um novo procedimento, baseado no risco de infecção, para a determinação da distância de separação considerando os efeitos da saturação variável e o fraturamento. Este procedimento determina a distância máxima percorrida, a partir do cálculo das concentrações de vírus. A distância de separação mínima corresponde à distância entre a fonte de injeção e o ponto aonde a concentração atinge o valor máximo de concentração permitida. Para o desenvolvimento deste novo procedimento foi implementado um código de programação que inclui: fluxo saturado-não saturado e transporte explícito nos poros e nas fraturas, advecção, dispersão, decaimento, sorção na superfície dos sólidos, sorção nas interfaces água-ar e água-sólido, filtração mecânica e exclusão de poros.

Foi realizada uma análise comparativa entre as metodologias acima descritas para três geometrias tipo representativas das condições estratigráficas de algumas áreas do Vale Central da Costa Rica. Os resultados obtidos indicaram que a metodologia normalmente empregada na Costa Rica pode ser inadequada para prever na maioria dos casos a possibilidade de contaminação.

Palavras-chave

Transporte de vírus, Aquífero fraturado – poroso, Modelagem numérica, Fluxo saturado-não saturado.

Abstract

Macías, Julio E.; Vargas Jr, Eurípedes do Amaral. **Numerical Modeling of Virus Transport in Fractured-Porous Media**. Rio de Janeiro, 2008. 252p. Ph.D. Thesis – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Setback distances of wellhead and catchments from septic tanks are established by three approaches: methods based on fixed setback distances or fixed travel times; methods based on vulnerability analysis and methods based on infection risk.

In Costa Rica, the determination of setback distances is based on fixed travel times. This approach considers that during a specified travel time all microorganisms will be inactivated, and that the distance traveled during this time defines the minimum safe separation. In this approach a unitary hydraulic gradient and saturated hydraulic conductivity are considered for transport in the unsaturated zone and the natural hydraulic gradient and saturated conductivity for transport in the saturated zone. Only advection is considered as the responsible mechanism for virus transport.

A new procedure is presented in this document to define the setback distance. This procedure is based on the infection risk approach. According to this approach the minimum required setback distance is defined as the distance between the injection point and the location where the contaminant reaches a maximum allowable concentration. This procedure was implemented in a computer code that considers variable saturated water flow, fractured-porous media, advection, dispersion, dynamic sorption, inactivation and mechanical filtration.

A comparative analysis was performed for three hypothetical geometries using the two approaches described. The results indicate the approach normally used in Costa Rica may not reproduce adequately the possibility of catchments and wellhead contamination.

Keywords

Virus transport, fractured-porous aquifers, numerical modeling, variably saturated water flow.

Sumário

Resumo	1
Palavras-chave	2
Abstract	3
Keywords	3
1 Apresentação	13
1.1. Motivação	13
1.2. Metodologia de Trabalho	14
1.3. Estrutura do Documento	16
2 Introdução	19
2.1. Zonas de Proteção	26
2.2. Aquíferos	28
2.3. Modelos Conceituais	31
2.3.1. Modelos Conceituais para o Fluxo em Saturação Variável	31
2.3.2. Modelos Conceituais para o transporte de poluentes	37
2.4. Modelos Matemáticos	38
2.5. Revisão da aplicação dos Modelos para Fluxo e Transporte	42
2.5.1. Contínuo - Contínuo Equivalente	43
2.5.2. Contínuo - Contínuo Equivalente com porosidade composta	45
2.5.3. Dupla Porosidade e Dupla Permeabilidade	45
2.5.4. Fraturado Discreto	47
2.5.5. Fraturado Poroso	47
2.6. Revisão dos modelos de transporte de vírus	48
2.7. Literatura Nacional	50
2.8. Objetivos	51

3 Vírus	54
3.1. Vírus	57
3.2. Fatores que regulam a sobrevivência	60
3.3. Transporte de Vírus	63
3.3.1. Adveção – Dispersão	63
3.3.2. Inativação	67
3.3.3. Sorção	68
3.3.4. Filtração (Straining)	73
4 Equações do Problema e Solução Numérica	85
4.1. Equações do Fluxo	85
4.2. Equações do Transporte de Vírus	86
4.3. Discretização das Equações	89
4.4. Programa VirTran-3D	91
5 Validação Numérica	97
5.1. Validação Numérica do Fluxo	98
5.1.1. Fluxo em Regime Saturado	99
5.1.2. Fluxo em Regime Não Saturado	99
5.2. Validação Numérica do Transporte	100
5.2.1. Transporte em Regime Saturado	100
5.2.2. Transporte em Regime Não Saturado	107
5.3. Outras verificações numéricas	110
6 Análise Comparativa: Aquíferos do Vale Central	113
6.1. Aquíferos na Grande Área Metropolitana	118
6.2. Geometrias Tipo	120
6.3. Análise do Transporte – MTAv	125
6.4. Análise do Transporte – Programa VirTran-3D	127
6.5. Análise dos Resultados e Comparação das Metodologias	135
7 Conclusões e Sugestões	141
7.1. Conclusões	141

7.2. Sugestões	146
8 Referências Bibliográficas	148
APÊNDICE A: Equações Governantes do Problema	163
A.1. Equações que descrevem o Fluxo	163
A.1.1. Fluxo na Matriz	163
A.1.2. Fluxo na Fratura	169
A.2. Equações que descrevem o transporte de vírus	172
A.2.1. Transporte na Matriz	172
A.2.2. Transporte na Fratura	178
APÊNDICE B: Método dos Volumes Finitos (MVF)	184
B.1. Generalidades do MVF	184
B.2. Interpolação e Fluxos nas Interfaces	191
B.3. Condições de Contorno	193
APÊNDICE C: Solução Numérica – Equação de Fluxo na Matriz	194
C.1. Construção do Volume de Controle	194
C.2. Discretização Espacial	196
C.3. Efeito do Contorno	200
C.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	203
C.5. Discretização Temporal	203
APÊNDICE D: Solução Numérica – Equação de Fluxo na Fratura	205
D.1. Construção do Volume de Controle	205
D.2. Discretização Espacial	207
D.3. Efeito do Contorno	210
D.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	212
D.5. Discretização Temporal	213
APÊNDICE E: Solução Numérica – Equação de Transporte na Matriz	215
E.1. Construção do Volume de Controle	215
E.2. Discretização Espacial	217

E.3. Efeito do Contorno	223
E.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	226
E.5. Discretização Temporal	226
 APÊNDICE F: Solução Numérica – Equação de Transporte na Fratura	 228
F.1. Construção do Volume de Controle	228
F.2. Discretização Espacial	230
F.3. Efeito do Contorno	234
F.4. Equação Resultante da Discretização Espacial	236
F.5. Discretização Temporal	237
 APÊNDICE G: Solução Numérica – Equações Complementares	 239
G.1. Equações da Matriz	239
G.2. Equações da Fratura	240
 APÊNDICE H: Função de Interpolação Exponencial	 243
 Anexo 1: Soluções Analíticas	 249
An.1. Fluxo Saturado Unidimensional em Regime Transiente	249
An.2. Transporte unidimensional de vírus no meio poroso saturado	249
An.3. Transporte unidimensional de colóides numa fratura saturada com abertura constante	251

Lista de figuras

Figura 2.1. Esquema do Sistema de Tratamento por Tanque Séptico.	22
Figura 2.2. Esquema gráfico para o cálculo da distância de separação.	25
Figura 2.3. Tipos de vazios: poros e fraturas	29
Figura 2.4. Perfil Esquemático dos Aqüíferos Livre e Confinado	30
Figura 2.5. Efeito da Saturação na Fratura.	33
Figura 2.6. Modelo do Fluxo Pelicular na Fratura	33
Figura 2.7. Modelos Conceituais para Aqüíferos Porosos e Fraturados.	36
Figura 2.8. Esquema gráfico da função composta para a permeabilidade do meio equivalente.	39
Figura 3.1. Tamanhos Característicos de Partículas e Poros	58
Figura 3.2 Estrutura de um Vírus Bacteriófago	58
Figura 3.3. Esquema conceitual do fenômeno de exclusão	64
Figura 3.4. Mecanismos de Sorção e Filtração.	69
Figura 3.5. Mecanismos de Colisão da Teoria da Filtração Coloidal	70
Figura 5.1. Geometria para a validação bidimensional.	98
Figura 5.2. Geometria para a validação tridimensional.	98
Figura 5.3 Fluxo Transiente Saturado - Comparação dos Resultados.	99
Figura 5.4 Fluxo Transiente não Saturado - Comparação dos Resultados.	100
Figura 5.5 Transporte Caso I com condição de Tipo Dirichlet	102
Figura 5.6 Transporte Caso I com condição de Tipo Neuman	102
Figura 5.7 Transporte Caso II com condição de Tipo Dirichlet	103
Figura 5.8 Transporte Caso II com condição de Tipo Neuman	103
Figura 5.9 Transporte na Fratura com condição de Tipo Dirichlet	105
Figura 5.10 Transporte na Fratura com condição de Tipo Neuman	105
Figura 5.11 Geometria do Meio Fraturado – Poroso.	106
Figura 5.12 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Dirichlet	106
Figura 5.13 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Neuman.	107

Figura 5.14 Transporte no Meio Poroso em condição de fluxo permanente não saturado.	108
Figura 5.15 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da carga de pressão no ponto de observação.	109
Figura 5.16 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da concentração no ponto de observação.	110
Figura 5.17 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com exclusão e sem exclusão	111
Figura 5.18 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com sorção e sem sorção na interface água-ar.	112
Figura 6.1 Variação da Concentração Segundo o MTA _v	114
Figura 6.2 Variação da Concentração Segundo a Metodologia Baseada no Risco	114
Figura 6.3 Localização do Vale Central da Costa Rica	118
Figura 6.4 Estratigrafia dos Aqüíferos do Vale Central da Costa Rica	120
Figura 6.5 Geometrias Tipo.	121
Figura 6.6 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 1.	122
Figura 6.7 Modelo Hidrogeológico da Geometria 1.	122
Figura 6.8 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 2	123
Figura 6.9 Modelo Hidrogeológico da Geometria 2.	123
Figura 6.10 Estratigrafia e Parâmetros da Geometria 3.	124
Figura 6.11 Modelo Hidrogeológico da Geometria 3.	124
Figura 6.12. Resultados das Análises da Geometria 1.	132
Figura 6.13. Resultados das Análises da Geometria 2.	133
Figura 6.14. Resultados das Análises da Geometria 3.	134
Figura A1. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Unidimensional	163
Figura A2. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Tridimensional	164
Figura A3. Volume de Referência na Fratura. Fluxo Tridimensional	170

Figura A4. Volume de Referência no meio poroso.	
Transporte Unidimensional	173
Figura A5. Volume de Referência no Meio Poroso.	
Transporte Tridimensional	174
Figura A6. Volume de Referência na Fratura.	
Transporte Tridimensiona	179
Figura B1. Esquema de armazenamento (modificado de Barth T. e Ohlberger, 2004)	186
Figura B2. Volume de Controle e subvolumes de controle para o nó 1.	187
Figura C1. Subvolume de controle para o nó i, planos internos.	195
Figura C2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.	195
Figura D1. Volume de controle para o nó i.	206
Figura E2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.	217
Figura F1. Volume de controle para o nó i.	229
Figura H1. Sistemas de Coordenadas para a aplicação da função de interpolação exponencial.	245
Figura H2. Exemplo de Aplicação.	247

Lista de tabelas

Tabela 3.1. Concentrações médias em efluentes domésticos	54
Tabela 3.2 Remoção de vírus e bactérias para diferentes sistemas de tratamento	55
Tabela 3.3. Concentrações de microorganismos em águas residuais domésticas cruas e no efluente secundário	56
Tabela 3.4 Tamanhos característicos de alguns microorganismos	57
Tabela 3.5. Doenças e organismos geradores	60
Tabela 3.6 Fatores que influenciam na sobrevivência das bactérias no solo	61
Tabela 3.7. Fatores que influenciam na sobrevivência e transporte dos vírus no solo.	61
Tabela 3.8. Tempos de sobrevivência dos organismos patogênicos	62
Tabela 3.9 Taxas de Inativação para as fases líquida (μ_l) e sorvida (μ_s), valores de Campo.	75
Tabela 3.9 Taxas de Inativação para as fases líquida (μ_l) e sorvida (μ_s), valores de Laboratório.	76
Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de campo.	77
Tabela 3.10 Taxas de adsorção e desorção em meios porosos, valores para alguns vírus e colóides em condições de laboratório.	78
Tabela 3.11 Taxas de adsorção de colóides em fraturas, valores para condições de laboratório.	79
Tabela 3.12 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de laboratório.	80
Tabela 3.13 Valores da eficiência da captura para meios porosos em condições de campo.	82
Tabela 3.14 Taxas de adsorção e desorção para meios porosos não saturados sob condições de laboratório.	83

Tabela 3.15 Taxas de filtração em meios porosos sob condições de campo e laboratório.	84
Tabela 6.1 Velocidades de Percolação – MTAv.	126
Tabela 6.2 Cálculos Intermediários – MTAv.	126
Tabela 6.3 Distâncias Percorridas – MTAv.	127
Tabela 6.4 Informações sobre as malhas geradas.	127
Tabela 6.5 Condições de contorno para a simulação do fluxo.	129
Tabela 6.6 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 1.	130
Tabela 6.7 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 2.	130
Tabela 6.8 Tempos de Processamento computacional para os casos da Geometria 3.	130
Tabela 6.9 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 1.	131
Tabela 6.10 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 2.	131
Tabela 6.11 Distâncias percorridas para os casos da Geometria 3.	131
Tabela 6.12. Distâncias percorridas normalizadas com os valores do método MTAv.	135
Tabela 6.13. Distâncias percorridas normalizadas com os valores do método MTAv.	138