

5 Validação Numérica

Neste capítulo são mostradas as comparações das respostas numéricas e analíticas para várias condições de contorno, com o objetivo de validar numericamente a resposta do programa VirTran-3D. Inicialmente são apresentadas as comparações para a simulação do fluxo em regime saturado e não saturado. Posteriormente são mostradas as comparações para as simulações do transporte de vírus para fluxo saturado e fluxo parcialmente saturado.

Para as validações bidimensionais foi definida a geometria mostrada na Figura 5.1. A geometria consiste num plano de 8 x 4 m com espessura unitária, de rumo leste e com inclinação vertical. Na mesma figura são mostrados os parâmetros do modelo Mualem - van Genuchten do material. A geometria empregada para validar a resposta tridimensional é mostrada na Figura 5.2. Neste caso foi construído um paralelepípedo de dimensões 8 x 4 x 1 m. Os mesmos parâmetros empregados no caso bidimensional para descrever o fluxo foram empregados para a geometria tridimensional.

As mesmas condições de contorno foram empregadas nas geometrias bidimensional e tridimensional, como mostrado nas Figuras 5.1 e 5.2. Foram impostas condições de Dirichlet nos extremos do domínio gerando um gradiente hidráulico no sentido do comprimento. Duas condições iniciais foram testadas: na primeira considerou-se o domínio saturado com carga de pressão constante nula, na segunda condição, considerou-se uma carga de pressão constante negativa (-5 m) em todo o domínio.

A seguir são apresentados os casos analisados e as comparações com as soluções analíticas e/ou numéricas disponíveis para a validação dos cálculos.

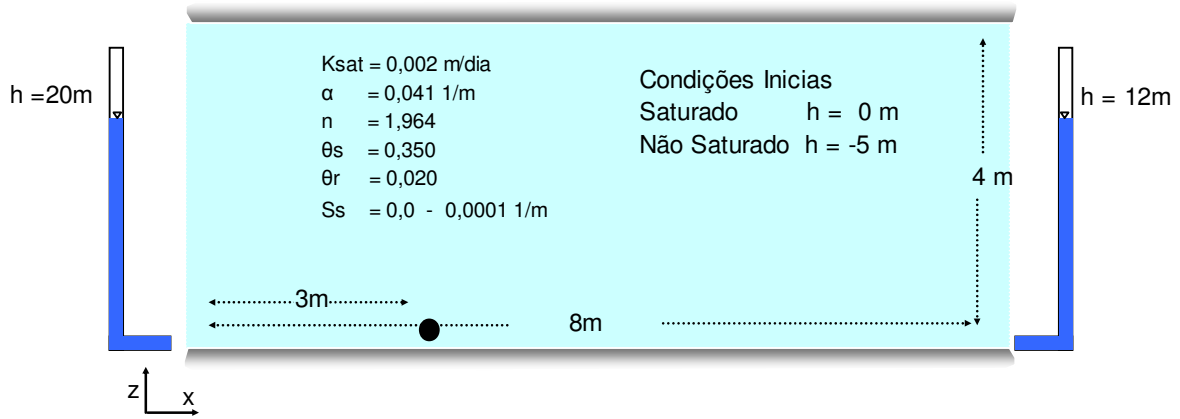


Figura 5.1. Geometria para a validação bidimensional.

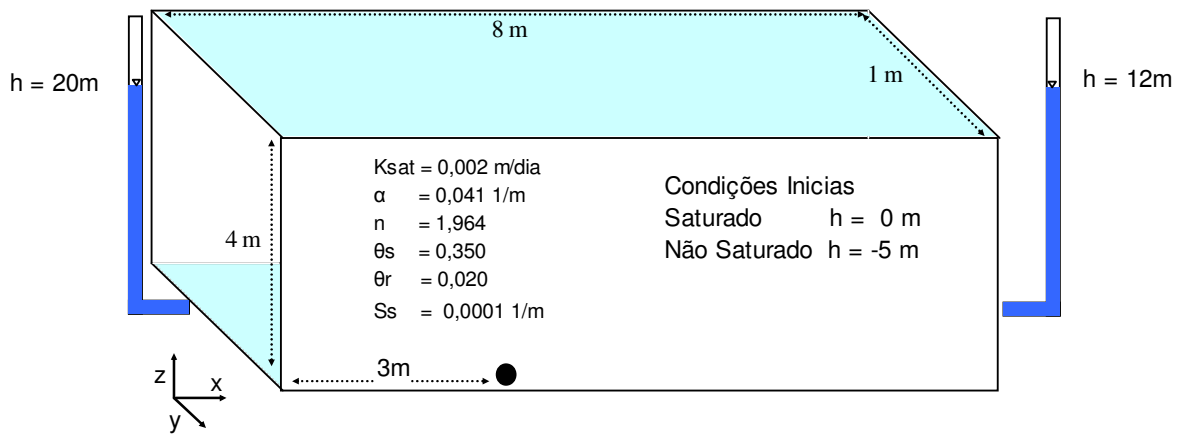


Figura 5.2. Geometria para a validação tridimensional.

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0321281/CA

5.1. Validação Numérica do Fluxo

Para a validação do cálculo do fluxo foram discretizadas as geometrias mostradas nas Figuras 5.1 e 5.2 em triângulos e tetraedros, respectivamente. Para o problema bidimensional foram definidos 200 elementos triangulares e 125 nós. Para o problema tridimensional foram definidos 2415 elementos tetraédricos e 645 nós. Em ambas as geometrias foram monitoradas as cargas de pressão no ponto localizado na base do domínio em $x = 3 \text{ m}$, como indicado nas figuras.

5.1.1. Fluxo em Regime Saturado

Para a validação numérica do cálculo do fluxo saturado foi considerada uma carga de pressão nula e constante em todos os pontos do domínio. Neste caso considera-se que existe fluxo transiente devido ao efeito do armazenamento específico. A solução numérica foi comparada com a solução analítica proposta por Carslaw e Jaeger (1946). Esta solução analítica pode ser revisada no Anexo 1. Na Figura 5.3 é mostrada a comparação da variação da carga de pressão no ponto de monitoramento. Os resultados mostram serem satisfatórios.

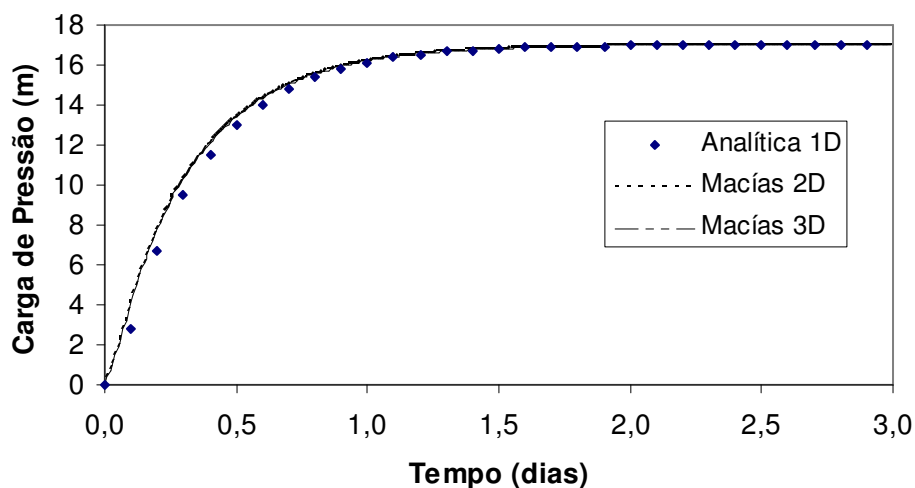


Figura 5.3 Fluxo Transiente Saturado - Comparação dos Resultados.

5.1.2. Fluxo em Regime Não Saturado

Para a validação numérica do cálculo do fluxo não saturado foram consideradas as mesmas malhas e condições de contorno do caso anterior. Neste caso as condições iniciais correspondem à carga de pressão negativa ($h = -5$ m) constante em todo o domínio. A solução numérica foi comparada com a solução numérica fornecida pelo programa SWMS2D. Na Figura 5.4 é mostrada a comparação. Os resultados mostram serem satisfatórios.

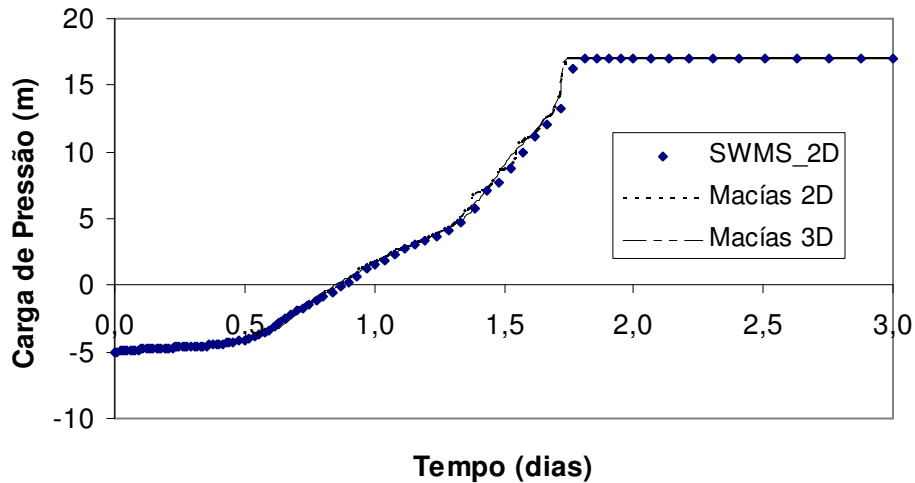


Figura 5.4 Fluxo Transiente não Saturado - Comparação dos Resultados.

A partir dos resultados anteriores conclui-se que o programa desenvolvido resolve de maneira satisfatória o fluxo transiente com saturação variável para problemas tridimensionais e bidimensionais.

5.2. Validação Numérica do Transporte

São apresentadas a seguir as comparações das simulações do transporte de vírus com as respostas analíticas e/ou numéricas disponíveis. As comparações foram feitas em termos das curvas de concentração dos vírus na fase líquida.

5.2.1. Transporte em Regime Saturado

Neste item são mostradas as comparações para as simulações do transporte de vírus sob condições de fluxo saturado em regime permanente. Foram empregadas as mesmas geometrias e malhas dos exemplos anteriores. Para a simulação do transporte foi utilizada uma permeabilidade saturada com valor $K_{sat} = 0,167$ m/dia. As condições de contorno para o fluxo são as mesmas indicadas nas Figuras 5.1 e 5.2. Os parâmetros de transporte empregados na simulação são:

$$\alpha_l = 1\text{m} \quad \alpha_t = \alpha_w = 0 \text{ m (isto é, existe apenas dispersão longitudinal)}$$

$$K_d = 0 \quad \text{(não existe sorção em equilíbrio)}$$

$$\begin{aligned}K_{att} &= 0,8 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\K_{det} &= 0,0008 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\K_{str} &= 0,5 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \quad \text{(para a matriz porosa)} \\K_{str} &= 0,334 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \quad \text{(para a fratura)} \\\mu_l &= 0,03 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\\mu_{din} &= 0,09 \text{ (dia}^{-1}\text{)} \\\rho &= 1550 \text{ kg/m}^3\end{aligned}$$

Todas as simulações do transporte foram realizadas considerando as duas configurações seguintes.

- No primeiro caso foi colocada a condição de Dirichlet com concentração unitária constante ($C_o = 1 \text{ vírus/m}^3$) no extremo esquerdo do domínio ($x = 0$), e a condição de Cauchy no extremo direito ($x = 8$). As análises feitas com esta condição foram denominadas Análises Tipo Dirichlet.
- No segundo caso foi colocada a condição de Neuman com valor $0,167 \text{ vírus/m}^2/\text{dia}$ no extremo esquerdo do domínio ($x = 0$), e a condição de Cauchy no extremo direito ($x = 8$). As análises feitas com esta condição foram denominadas Análises Tipo Neuman.

São apresentados a seguir os resultados das comparações para transporte no meio poroso, na fratura e no meio fraturado-poroso.

a. Meio Poroso

Considera-se neste exemplo apenas transporte no meio poroso. As análises foram feitas em duas e três dimensões, e foram avaliados dois casos de simulação:

- Caso I: Transporte considerando advecção, dispersão, sorção dinâmica e decaimento nas fases líquida e sorvida.
- Caso II: Transporte considerando advecção, dispersão e filtração mecânica.

Para o Caso I, as comparações dos resultados das análises para as condições de contorno Tipo Dirichlet e Tipo Neuman, são mostradas nas Figuras 5.5 e 5.6. Os valores numéricos foram comparados com as soluções analíticas propostas por Sim e Chrysikopoulos (1995) para o transporte unidimensional de vírus para os dois tipos de condição de contorno mencionados. Estas soluções analíticas podem ser revisadas no Anexo 1. Nas Figuras 5.5 e 5.6 são apresentados perfis de concentração ao longo do comprimento do domínio (eixo x, em $y=z=0$), para 0,5 e 5,0 dias de simulação.

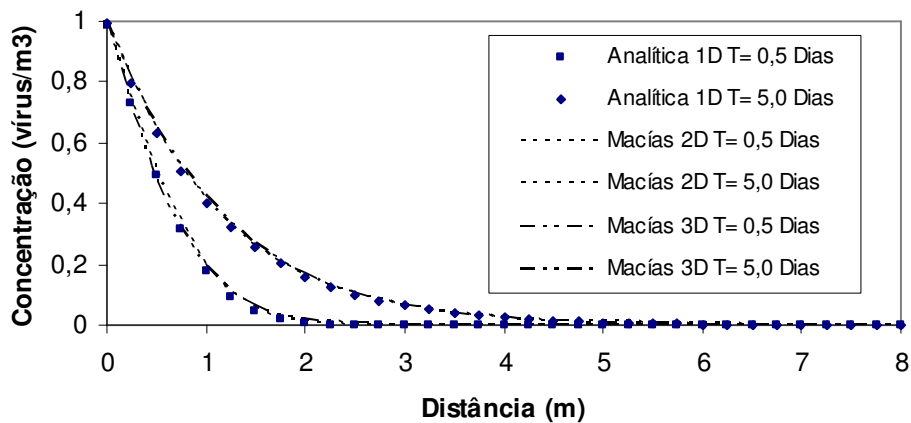


Figura 5.5 Transporte Caso I com condição de Tipo Dirichlet

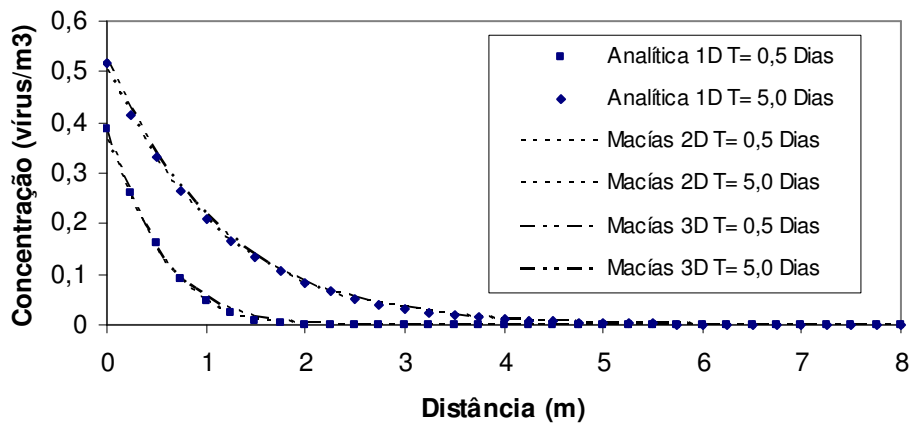


Figura 5.6 Transporte Caso I com condição de Tipo Neuman

Para o Caso II, as comparações dos resultados das análises para as condições de contorno Tipo Dirichlet e Tipo Neuman, são mostradas nas Figuras 5.7 e 5.8. Os valores numéricos foram comparados com as soluções analíticas propostas por Sim e Chrysikopoulos (1995) para o transporte unidimensional de vírus para os dois tipos de condição de contorno mencionados. Estas soluções analíticas podem ser revisadas no Anexo 1. Nas Figuras 5.7 e 5.8 são apresentados perfis de concentração ao longo comprimento do domínio (eixo x, em $y=z=0$), para 0,5 e 5,0 dias de simulação.

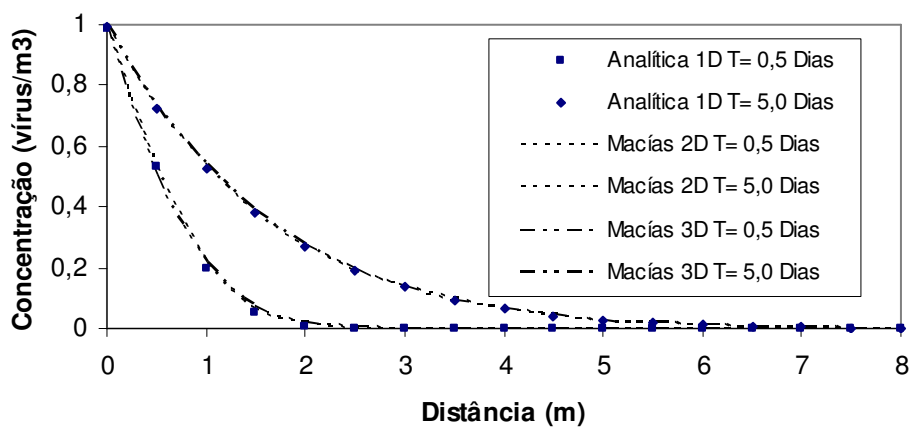


Figura 5.7 Transporte Caso II com condição de Tipo Dirichlet

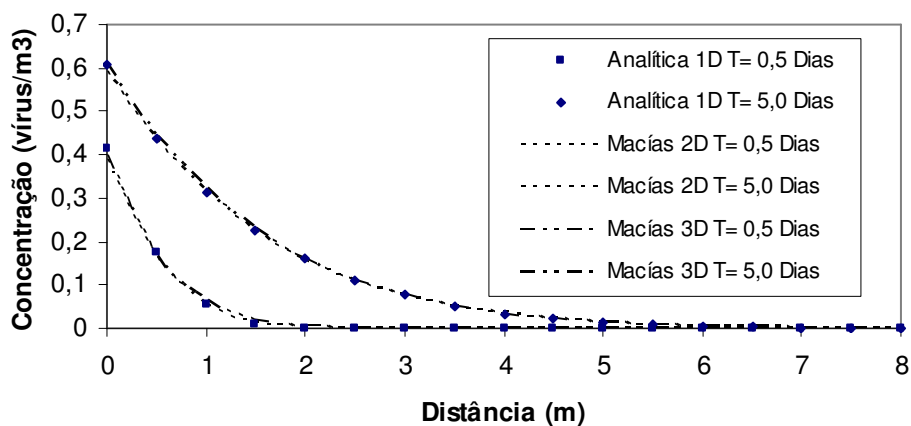


Figura 5.8 Transporte Caso II com condição de Tipo Neuman

b. Fratura

Considera-se neste exemplo transporte de vírus apenas numa fratura. Neste caso, os fenômenos simulados são a advecção, a dispersão e a sorção irreversível. Os resultados foram comparados com a solução analítica proposta por Abdel-Salam e Chrysikopoulos (1994) para o transporte de colóides em fraturas saturadas com abertura constante. Esta solução analítica pode ser revisada no Anexo 1. Embora a solução analítica apresentada não esteja em termos do parâmetro K_{atf} da Equação 4.12, existe uma relação entre este parâmetro e os parâmetros da formulação de Abdel-Salam e Chrysikopoulos (1994). Essa relação é apresentada a seguir.

$$K_{atf} = \frac{2kU}{(2b)^2} \quad (5.1)$$

onde U é a velocidade intersticial, $2b$ a abertura da fratura e k o coeficiente de deposição das partículas na superfície da fratura (dimensão de comprimento).

Neste exemplo foram empregadas a mesma malha e geometria da Figura 5.1. Foi considerada uma abertura $2b = 0.1$ m. Para os valores $k = 0,01$ m, velocidade $U = 0,167$ m/dia, a taxa de filtração resultante é $K_{atf} = 0,334$ (dia⁻¹). De maneira similar ao tratamento do meio poroso, as análises foram feitas considerando as condições de contorno Tipo Dirichlet e Tipo Neuman com os mesmos valores acima indicados.

Nas Figuras 5.9 e 5.10 são mostradas as comparações das respostas numéricas com a solução analítica. Nessa figuras são apresentados perfis de concentração ao longo do comprimento do domínio (eixo x , em $y=z=0$), para 0,5 e 5,0 dias de simulação.

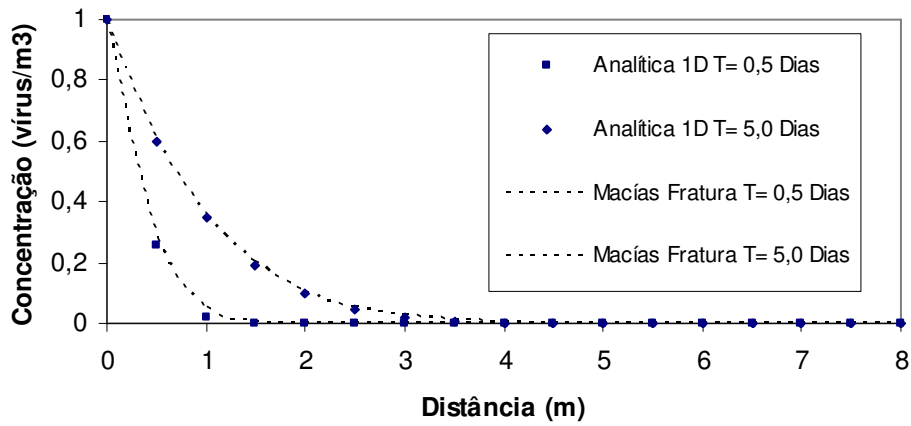


Figura 5.9 Transporte na Fratura com condição de Tipo Dirichlet

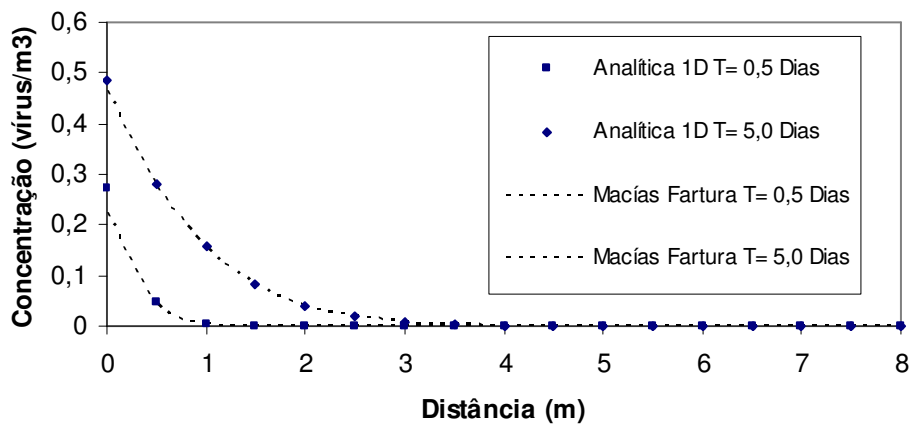


Figura 5.10 Transporte na Fratura com condição de Tipo Neuman

c. Meio Fraturado-Poroso

Embora não exista uma solução analítica para comparar a solução de um sistema fraturado-poroso, foi testada uma geometria simples para validar a resposta numérica. Considere a mesma geometria da Figura 5.2, e seja que existe uma fatura vertical paralela ao comprimento do paralelepípedo e com abertura $2b = 0,001$ m. A fratura está localizada no ponto médio da largura ($y = 0,5$ m). Esta geometria é mostrada na Figura 5.11. Se definirmos as propriedades da fratura e matriz, e as condições de contorno como sendo as mesmas empregadas na validação do Caso I do item (a), então os mesmos resultados obtidos com a solução de Sim e Chrysikopoulos (1995) deverão permitir validar a solução

numérica para o sistema acoplado matriz-fratura. Isto é, deverão se obter os mesmos valores mostrados nas Figuras 5.5 e 5.6.

Para esta geometria, foi construída uma malha conjunta acoplada de tetraedros e triângulos. Neste caso, a quantidade total de nós resultante foi de 27643, isto condizente com 122880 tetraedros e 2048 triângulos.

Como no Caso I do item (a), foram empregadas as condições de contorno de Tipo Dirichlet e Neuman. As comparações são mostradas nas Figuras 5.12 e 5.13. Nessas figuras são apresentados perfis de concentração ao longo do comprimento do domínio para a fratura e para a matriz porosa. O perfil da matriz porosa foi monitorado nas coordenadas $y=z=0$. O perfil na fratura foi monitorado nas coordenadas $y = 0,5 z = 0$.

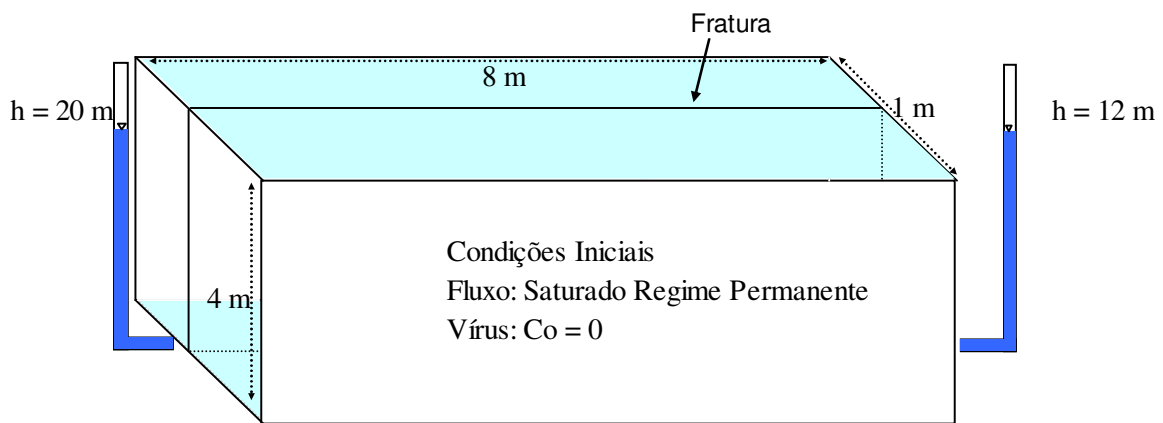


Figura 5.11 Geometria do Meio Fraturado – Poroso.

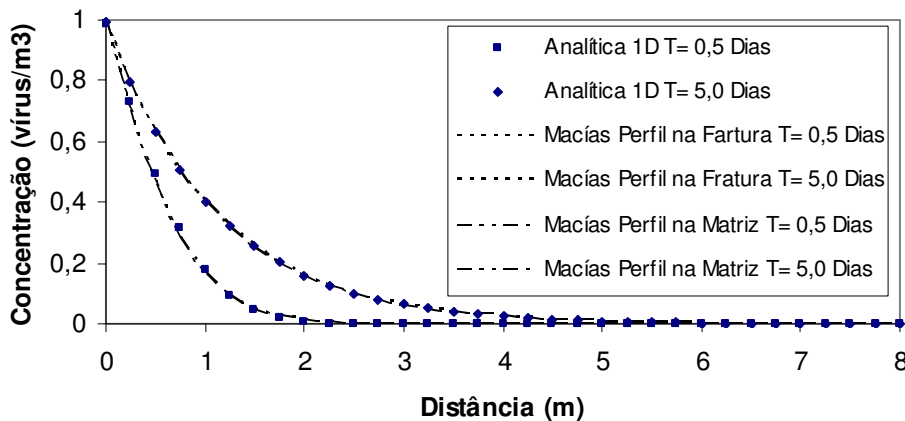


Figura 5.12 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Dirichlet

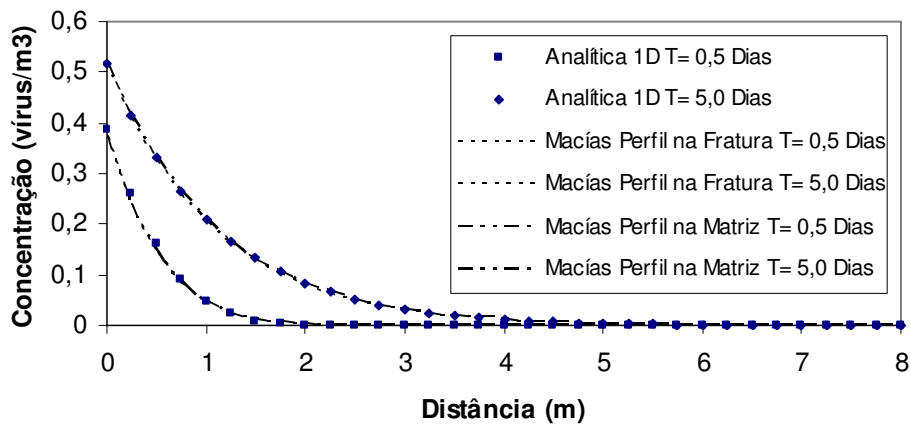


Figura 5.13 Transporte no Meio Fraturado-Poroso com condição de Tipo Neuman.

5.2.2. Transporte em Regime Não Saturado

Nesta seção são mostradas as comparações para exemplos de transporte em condição de saturação parcial. Duas condições foram estudadas, saturação constante e saturação variável. As análises foram feitas somente para transporte no meio poroso, para duas e três dimensões. No caso bidimensional, a geometria testada foi um plano vertical de 1 m de largura por 5 m de altura e discretizado com 956 nós e 1800 elementos triangulares. Para o caso tridimensional, a geometria testada foi um paralelepípedo com base 1 x 1 m e 5m de altura. A discretização foi feita com 54321 nós e 24000 elementos tetraédricos.

Os parâmetros empregados nas análises são:

$$\theta_r = 0,02$$

$$\theta_s = 0,5$$

$$\alpha = 0,041$$

$$m = 0,491$$

$$n = 1,964$$

$$\alpha_l = \alpha_t = \alpha_w = 1 \text{ m (dispersão isotrópica)}$$

Para estes exemplos foram considerados apenas os processo advectivos e dispersivos no transporte. Os resultados obtidos com o programa VirTran-3D foram comparados com os resultados do programa SWMS2D. As análises feitas são descritas a seguir.

a. Saturação Constante

Neste caso o meio poroso foi considerado parcialmente saturado e com saturação homogênea em todo o domínio. A permeabilidade saturada utilizada foi $K_{sat} = 100$ m/dia. As condições iniciais e de contorno para o fluxo consistiram na aplicação de uma carga de pressão constante em todo o domínio com valor $h = -110$ m, equivalente a uma saturação de 26% ou alternativamente a um teor de umidade volumétrico de $\theta = 0,13$. Devido à carga de elevação, existe fluxo vertical descendente, com gradiente unitário e velocidade 0,0288 m/dia constante. As condições de contorno para o problema de transporte consistiram na aplicação de uma concentração unitária constante na parte superior da coluna e gradiente nulo na parte inferior. Foi monitorado um ponto localizado no centro da coluna a 1,2 m de profundidade. Na Figura 5.14 é mostrada a comparação dos resultados.

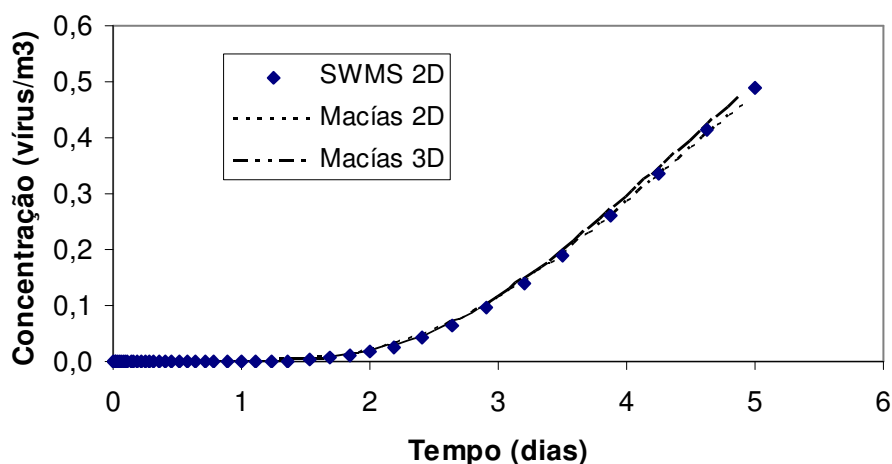


Figura 5.14 Transporte no Meio Poroso em condição de fluxo permanente não saturado.

b. Saturação variável

Neste exemplo, o transporte foi simulado em regime de fluxo com saturação variável. Foram empregadas as mesmas malhas e geometrias do caso anterior. A permeabilidade saturada utilizada foi $K_{sat} = 0,1$ m/dia. Foi colocada uma carga de pressão constante $h = -110$ m como condição inicial em todo o domínio. Para provocar fluxo com saturação variável foi colocada uma carga de pressão $h = 1$ m no topo da coluna e no extremo inferior foi colocada uma condição de tipo superfície livre. As condições de contorno para o problema de transporte consistiram na aplicação de uma concentração unitária constante na parte superior da coluna e gradiente nulo na parte inferior. Como no caso anterior foi monitorado um ponto localizado no centro da coluna a 1,2 m de profundidade. Na Figura 5.15 é mostrada a comparação das cargas de pressão e na Figura 5.16 as concentrações.

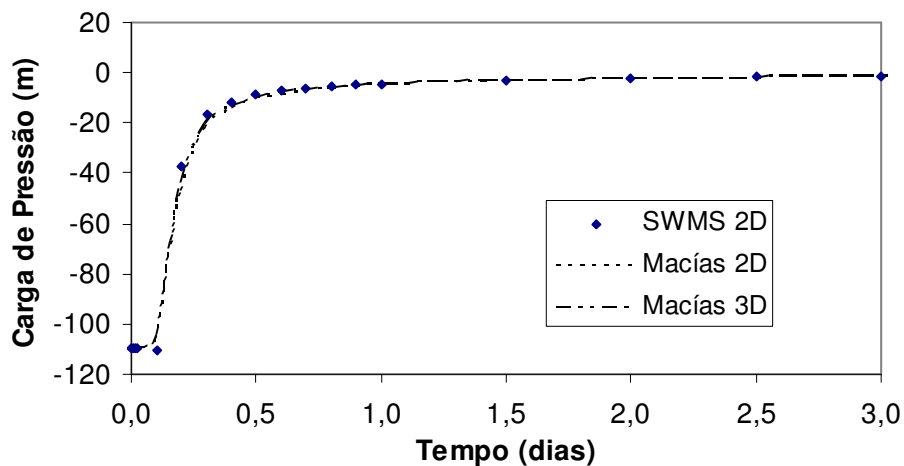


Figura 5.15 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da carga de pressão no ponto de observação.

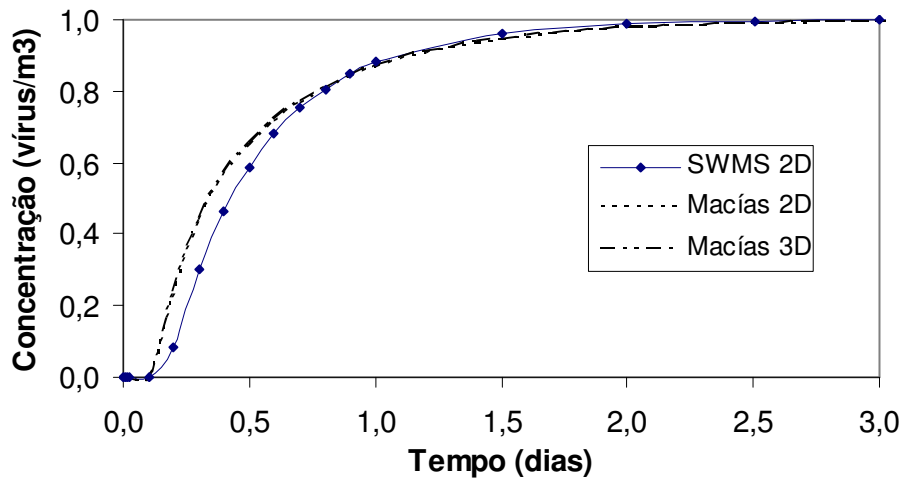


Figura 5.16 Transporte no Meio Poroso sob condição de fluxo em saturação variável. Variação da concentração no ponto de observação.

No caso da Figura 5.16, existe uma diferença entre as respostas do programa VirTran-3D e o SWMS 2D. Essa diferença pode estar relacionada à:

- diferenças na interpolação dos termos advectivos e dispersivos
- diferença no balanço de massa entre os dois programas. No SWMS 2D o erro indicado no balanço de massa é de 5 a 9 %.
- diferenças na discretização espacial do MEF e do MVF

5.3. Outras verificações numéricas

Nesta seção é verificada a consistência física e numérica da resposta do programa VirTran-3D quando considerados os efeitos da exclusão e da sorção na interface água-ar. Não foi obtida uma solução analítica para esses dois fenômenos, pelo que optou-se por comparar as concentrações obtidas apenas com os processos advectivos-dispersivos com as concentrações obtidas considerando os fenômenos mencionados, para verificar se a ferramenta numérica consegue reproduzir o efeito desejado.

Para simular a exclusão de poros foi considerada a geometria da Figura 5.1. O fluxo foi simulado em regime permanente e saturado. A permeabilidade saturada utilizada foi $K_{sat} = 0,167$ m/dia. Foi definido um valor de dispersividade longitudinal $\alpha_l = 1$ m. Os parâmetros restantes como indicados na Figura 5.1. Neste exemplo foi definido arbitrariamente um teor de umidade volumétrico não acessível aos colóides $\theta_{col} = 0,2$, valor superior ao valor residual $\theta_r = 0,02$. Foi escolhido o nó de coordenadas $x = 8$ e $z = 2$, localizado no extremo direito do domínio, para monitorar a variação da concentração no tempo. Para este exemplo, é esperado que a concentração com o efeito da exclusão aumente mais rapidamente no tempo e apresente uma dispersão menor. As condições de contorno para o fluxo são as mesmas mostradas na Figura 5.1. Para o transporte foi definida uma concentração unitária constante no extremo esquerdo do domínio ($x = 0$) e condição de Cauchy no extremo direito ($x = 8$). A condição constante garante entrada de vírus no sistema pelo que a concentração na saída tenderá a aumentar com o tempo até atingir a concentração da entrada. Na Figura 5.17 são mostradas as curvas de concentração no ponto monitorado. Desta figura é claro que quando considerado o efeito da exclusão, a curva de concentração apresenta uma chegada mais rápida e com menor dispersão.

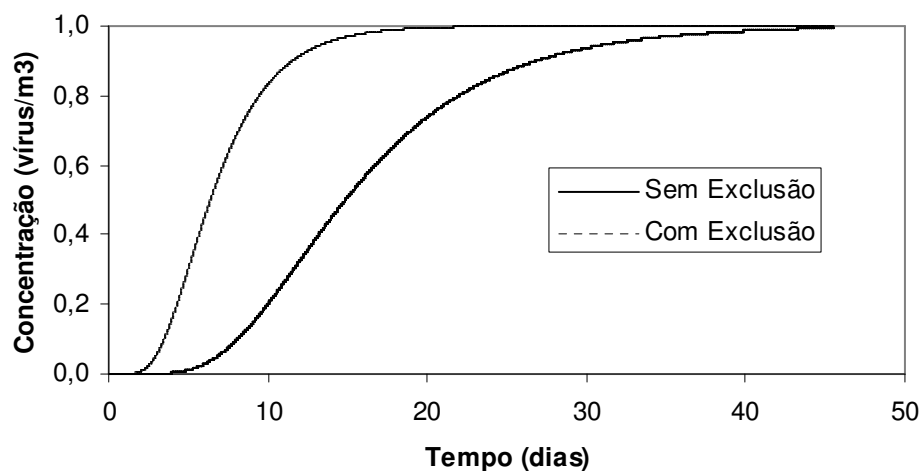


Figura 5.17 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com exclusão e sem exclusão

Para simular o efeito da sorção na interface água-ar, foi escolhido o mesmo caso analisado no item 5.2.2 (a). Foram comparadas as concentrações sem e com sorção. Os parâmetros empregados para a sorção foram $K_{aw} = 0,1 \text{ (dia}^{-1}\text{)}$ e $K_{daw} = 0,01 \text{ (dia}^{-1}\text{)}$. O programa VirTran-3D determina automaticamente a relação da área da interface água-ar por volume unitário do meio poroso. Neste caso, sendo que a saturação é constante, então esse valor é constante e igual a $A_{aw} = 14,6 \text{ (m}^2\text{/m}^3\text{)}$. Se compararmos as Equações 4.6 e 4.8 é possível observar que morfologicamente essas equações são idênticas. A diferença fundamental está nos parâmetros A_{aw} e ρ_b . Isto é, se trocarmos um pelo outro é possível reproduzir a outra equação. Aproveitando essa propriedade, foi simulada a sorção dinâmica na interface água-sólido para este exemplo, considerando os parâmetros $K_{att} = 0,1 \text{ (dia}^{-1}\text{)}$, $K_{det} = 0,01 \text{ (dia}^{-1}\text{)}$ e $\rho_b = 14,6 \text{ (kg/m}^3\text{)}$. Os resultados obtidos são mostrados na Figura 5.18. O ajuste dos valores indica que numericamente a rotina para a determinação da sorção na interface água-ar está correta. Resulta também claro desta figura, que quando considerada a sorção na interface água-ar, a concentração na fase líquida diminui se comparada com a concentração dada pelo transporte advectivo-dispersivo puro.

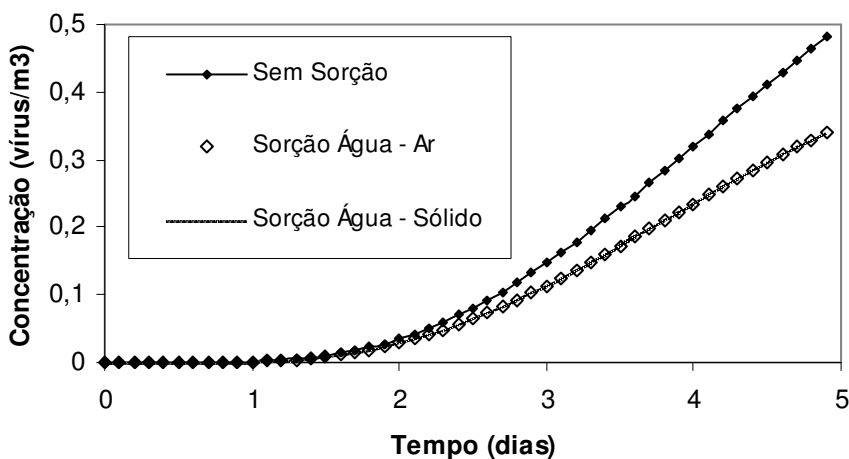


Figura 5.18 Comparação das curvas de concentração para transporte advectivo-dispersivo com sorção e sem sorção na interface água-ar.