8
Referências Bibliográficas

ABBASSI, H.; TURKI, S.; BEM NASRALLAH, S., **Interpolation Functions in Control Volume Finite Element Method**. Computational Mechanics 30, pp. 303-309, 2003.

ABDEL-SALAM, A.; CHRYSIKOPOULOS, C. V., **Analytical Solutions for One-Dimensional Colloid Transport in Saturated Fractures**. Advances in Water Resources 17, pp. 283-296, 1994.

ABDEL-SALAM, A.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Unsaturated flow in a Quasi-Three-Dimensional Fractured Medium with Spatially Variable Aperture**. Water Resources Research, Vol. 32, No. 6, pp. 1531-1540, 1996.

AHMAD, N.; BOYBEYI, Z., **Advection-Diffusion Equation on Unstructured Adaptive Grids**. NOAA/EPA Symposium on Air Quality Modeling and its Applications, pp. 20-21, Durham, North Carolina, 2005.

ARREDONDO, S., **Aguas Subterráneas y Fuentes Termales**. Atlas Geológico. Grande Área Metropolitana 1era ed. Editorial Tecnológica de Costa Rica, pp 197-210, 1994.

ASTORGA, Y., **Estado y Gestión del Recurso Hídrico en Costa Rica**. Undécimo Informe sobre El Estado de la Nación en Desarrollo Humano Sostenible, capitulo IV, 2005.

AZADPOUR-KEELEY, A; FAULKNER, B.R.; CHEN, J.S., Movement **and Longevity of Viruses in the Subsurface**. EPA/540/S-03/500 April 2003, pp.24, 2003

BAI, M.; ELSWORTH, D.; ROEGIERS, J. C., **Multiporosity/Multipermeabilty Approach to the Simulation of Naturally Fractured Reservoirs**. Water Resources Research 29 (6), pp. 1621-1633, 1993.

BAI, M.; ROEGIERS, J. C., **Triple-Porosity Analysis of Solute Transport**. Journal of contaminant Hydrology 28, pp. 247-266, 1997.

BALES, R.C.; GERBA, CH.; GRINDIN, G.; JENSEN S., **Bacteriophage Transport in Sandy Soil and Fractured Tuff.** Applied and Environmental Microbiology 55(8). pp 2061-2067. 1989.

BALES, R.C.; HINKLE, S.R.; KROEGER, T.W.; STOCKING, K.; GERBA, C.P., **Bacteriophage adsorption during transport through porous-media – chemical perturbations and reversibility**. Environmental Science & Technology 25, pp. 2088–2095, 1991.

BALES, R.C., LI, S.; MAGUIRE, K.M; YAHYA, M.T; GERBA, C.P., MS-2 and **Poliovirus transport in porous media: hydrophobic effects and chemical perturbations**. Water Resources Research. 29, pp. 957–963, 1993.

BALES, R.C.; LI, S.M.; YEH, T.C.J.; LENCZEWSKI, M.E.; GERBA,C.P., **Bacteriophage and Microsphere transport in saturated porous media: forced-gradient experiment at borden, ontario**.Water Resources Research 33, pp. 639–648, 1997.

BALIGA, B.R; PATANKAR, S.V., **A New Finite-Element Formulation for Convection-Diffusion Problems**. Numerical Heat Transfer, Vol. 3 pp. 393-409, 1980.

BARENBLATT, G.; ZHELTOV, I.; KOCHINA, I., **Basic Concepts in the Theory of Seepage of Homogeneous Liquidsin Fissured Rocks (Strata).** J.Appl.Math.Mech.Engl.Transl. 24 (5), pp. 1286-1303, 1960.

BERKOWITZ B.; BEAR J.; BRAESTER C., **Continuum Models for Contaminant Transport in Fratured Porosu Media**. Water Resources Research 24(8) pp. 1225-1236, 1988.

BERKOWITZ, B., **Characterizing Flow and Transport in Fractured Geological Media: A Review**. Advances in Water Resources 25, pp. 861-884, 2002.

BERRYMAN J., **Extention of Poroelastic Analysis to Double-Porosity Materials: New Technique in Microgeomechanics**. Journal of Engineering Mechanics. 128 (8), pp. 840-847, 2002.

BGS-SENARA, **Mapa Hidrogeológico del Valle Central de Costa Rica**. British Geological Survey – Servicio Nacional de Aguas Subterráneas, Riego y Avenamiento, 1985.

BIBBY, R., **Mass Transport of Solutes in Dual-Porosity Media**. Water Resources Research 17 (4), pp. 1075-1081, 1981.

BODIN, J.; DELAY, F; DE MARSILY, G., **Solute Transport in a Single Fracture with Negligible Matrix Permeability: 1. Fundamental Mechanisms**. Hydrogeology Journal 11, pp. 418–433, 2003(a).

BODIN, J.; DELAY, F; DE MARSILY, G., **Solute Transport in a Single Fracture with Negligible Matrix Permeability: 2. Mathematical Formalism**. Hydrogeology Journal 11, pp. 434-454, 2003(b).

BORGES, A., M**odelagem Numérica de Fluxo Bifásico e Transporte em Meios Porosos com Transferência de Massa e Co-solvência**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 2002.

BRADFORD, S.; YATES, S.; BETTAHAR, M.; SIMUNEK, J., **Physical factors affecting the transport and fate of colloids in saturated porous media.** Water Resources Research 38 (12), 1327. 2002.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; BETTAHAR, M.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; YATES, S., **Modelling Colloid Attachement, Straining, and Exclusion in Saturated Porous Media**. Environ. Sci. Technol. 37, pp. 2242-2250, 2003.

BRADFORD, S.; BETTAHAR, M.; ŠIMŮNEK, J.; van GENUCHTEN, M.; BROWN, G., **Straining and Attachment of Colloids in Physically Heterogeneous Porosu Media**. Vadose Zone Journal 3, pp. 384-394, 2004.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; BETTAHAR, M.; TADASSA, Y.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; YATES, S., **Straining of colloids at textural interfaces**. Watrer Resources Research 41, W10404, 2005.

BRADFORD, S; BETTAHAR M., **Straining, Attachment, and Detachment of *Cryptosporidium* Oocysts in Saturated Porous Media.** J. Environ. Qual. 34:469–478, 2005.

BRADFORD, S.; BETTAHAR, M., **Concentration dependent transport of colloids in saturated porous media.** Journal of Contaminant Hydrology 82, pp. 99-117, 2006.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; BETTAHAR, M.; VAN GENUCHTEN, M.TH.; YATES, S., **Significance of straining in colloid deposition: Evidence and Implications**. Water Resources Research 42, W12S15, 2006.

BRADFORD, S.; ŠIMŮNEK, J.; WALKER, SH., **Transport and straining of E. Coli O157:H7 in saturated porous media.** Water Resources Research 42, W12S12, 2006b.

BROOKS, R; COREY, T., **Hydraulic properties of porous media**. Hydrology Paper No 3. Civil Engineering Department. Colorado State Univ. Fort Collins. Colorado. 27 pp. (apud van Genuchten ,1980) 1964.

BRUNONE, B.; FERRANTE, M.; ROMANO, N.; SANTINI, A., **Numerical Simulations of One-Dimensional Infiltration into Layered Soils with the Richards Equation Using Different Estimates of the Interlayer Conductivity**. Vadose Zone Journal (2), pp. 193-200, 2003.

CACAS, M.C.; LEDOUX, E.; DE MARSILY, G.; TILLIE, B.; BARBEAU, A.; DURANS, E.; FEUGA, B.; PEAUDECREF, P., **Modelling Fractures flow with stochastic discrete frature network: calibration and validation,I. The Flow Model**. Water Resources Research 26 (3), pp. 479-489, 1990.

CAMPOS, J.L., **Análise Numérica do Transporte de Contaminantes em Meios Porosos com Reações Químicas**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 1999.

CARSLAW, H. S.; JAEGER, J.C., **Conduction of Heat in Solids**. Oxford, University Press, 1946.

CÉLIA, M.; BOULOUTAS, E.; ZARBA, R., **A general mass-conservative numerical solution for te unsaturated flow equation**. Water Resources Research 26, pp. 1483-1496. 1990.

CHAVE P.; HOWARD, G.; SCHIJVEN, J.; APPLEYARD, S.; FLADERER F.; SCHIMON, W., **Groundwater protection zones**. Em World Health Organization. Protecting Groundwater for Health: Managing the Quality of Drinking-water Sources. Editado por O. Schmoll, G. Howard, J. Chilton and I. Chorus. London, UK. pp.465-492,2006.

CHRYSIKOPOULOS, C.V., **Virus transport in the subsurface**, in *Groundwater Pollution Control*, Chapter 3, pp. 95-144, edited by K.L Katsifarakis, Computational Mechanics Publicationss, WIT Press, Ahurst, Southampton, UK, 2000.

CHRYSIKOPOULOS, C; SIM, Y., **One-dimensional vírus transport in homogeneous porous media with time-dependent distribution coefficient**. Journal of Hydrology 185, pp.199-219. 1996.

COMMITTEE ON FRACTURE CHARACTERIZATION AND FLUID FLOW, NATIONAL RESEARCH COUNCIL, **Rock Fractures and Fluid Flow, Contemporary Understanding and Applications.** National Academy Press, Washington, D.C. pp. 572, 1996.

CORDAZZO, J**., Solução Numérica do Problema de Derramamento de Gasolina Acrescida de Álcool no Solo e Contaminação de Aqüíferos.** Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, Brasil. 2000.

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C.; HURTADO, F. S. V., **The Element-Based Finite Volume Method Applied to Petroleum Reservoir Simulation.** Anais da Rio Oil & Gas Expo and Conference, Rio de Janeiro, 2004(d).

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C; HURTADO, F. S. V., **The Negative Transmissibility Issue When Using CVFEM in Petroleum Reservoir Simulation – 1. Theory**, Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering -- ENCIT 2004, Braz. Soc. of Mechanical Sciences and Engineering -- ABCM, Rio de Janeiro, Brazil, 2004(a).

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C; HURTADO, F. S. V., **The Negative Transmissibility Issue When Using CVFEM in Petroleum Reservoir Simulation – 2**. **Results**, Proceedings of the 10th Brazilian Congress of Thermal Sciences and Engineering -- ENCIT 2004, Braz. Soc. of Mechanical Sciences and Engineering -- ABCM, Rio de Janeiro, Brazil, 2004(b).

CORDAZZO, J.; MALISKA, C. R.; SILVA, A. F. C; HURTADO, F. S. V., **Representação de Reservatórios Heterogêneos e com Falhas Geológicas em Malhas Não-Estruturadas**, CILAMCE – XXV Iberian Latin-American Congress on Computational Methods in Engineering, Recife, Pernambuco, Brasil, 2004(c).

CRIST, J.; MCCARTHY, J.; ZEVI, Y.; BAVEYE, PH.; THROOP, J.; STEENHUIS, T., **Pore-Scale Visualization of Colloid Transport and Retention in Partly Saturated Porous Media.** Vadose Zone Journal 3, pp.444–450, 2004.

DA SILVA, J.C., **Modelagem e Simulação Numérica do Fluxo Bifásico e do Transporte Multicomponente em Meios Porosos com Interação Termo-Química**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 2004.

DARNAULT, C.; ROCKNE, K.; STEVENS, A.; MANSOORI, A.; STURCHIO, N., **Fate of environmental pollutants**. Water Environment Research. 77(6), pp. 2576-2658, 2005.

DARNAULT, CH.; STEENHUIS, T.; GARNIER, P.; KIM, Y.; JENKINS, M.; GHIORSE, W.; BAVEYE, P.; PARLANGE J., **Preferential flow and transport of cryptosporidium parvum oocysts througn the vadose zone: experiments and modelling.** Vadose Zone Journal 3, pp. 262-270, 2004.

DENOVIO, N.; SAIERS, J.; RYAN, J., **Colloid Movement in Unsaturated Porous Media: Recent Advances and Future Directions.** Vadose Zone Journal 3, pp.338–351, 2004.

DEBORDE, D.C.; WOESSNER, W.W.; KILEY, Q.T.; BALL, P., **Rapid transport of viruses in a floodplain aquifer**. Water Resources Research. 33, pp.2229–2238, 1999.

DENYER, P.; KUSSMAUL, S., **Introducción**. em, AtlasGeológico. Grande Área Metropolitana.1era Ed. Editorial Tecnologica de Costa Rica, pp. 11-18, 1994.

DERSHOWITZ, W.; MILLER, I., **Dual Porosity Fracture Flow and Transport**. Geophysical Research Letters 22 (11), pp. 1441-1444, 1995.

DRAGILA, M.; WHEATCRAFT, S. W., **Free-Surface Films. Em Panel on Conceptual Models of Flow and Transport in the Fractured Vadose Zone**, U.S. National Committee for Rock Mechanics, Board on Earth Sciences and Resources, National Research Council. National Academy Press, Washington, D.C. pp. 217-241, 2003.

DUGUID, J.; LEE, P. C., **Flow in Fratured Porous Media**. Water Resources Research 13 (3), pp. 558-566, 1977.

DYKHUIZEN, R. C., **Transport of solutes through unsaturated fractured media**. Water Resources Research. 21, pp. 1531-1539, 1987.

EPA, **APPENDIX E.CONTAMINANT PERSISTENCE AND MOBILITY FACTORS**. The Class V Underground Injection Control Study. EPA/816-R-99-014a. 1999.

EPA, **Onsite Wastewater Treatment Systems Manual**. EPA/625/R-00/008.2002.

FARD, M. K.; DURLOFSKY, L.J.; AZIZ, K., **An Efficient Discrete Fracture Model Applicable for General Purpose Reservoir Simulators**. SPE 79699, pp. 11, 2003.

FEACHEM, R.G.; BRADLEY, D.J.; GARELICK, H.; MARA D.D., **Sanitation and Disease: Health Aspects of Escreta and Wastewater Mangement.** 1983**.** Consultado em: http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafe/OSRAS_165-172.pdf.

FETTER, C. W., **Applied Hydrogeology**. 3rd. Edition, Prentice Hall, New Jersey, USA, pp. 691, 1994.

FLINT, A.; FLINT, L.; BODVARSSON, G.; KWICKLIS, M.; FABRYKA-MARTIN, J., **Evolution of the Conceptual Model of Unsaturated Zone Hydrology at Yucca Mountain, Nevada**. Journal of Hydrology 247, pp.1-30, 2001a.

FLINT, A.; FLINT, L.; BODVARSSON, G.; KWICKLIS, M.; FABRYKA-MARTIN, J., **Development of the Conceptual Model of unsaturated hydrology at Yucca Mountain, Nevada**. Conceptual Models of Flow and Transport in the Fratured Vadose Zone. National Research Council. National Academy Press. Pp. 47-85, 2001b.

FLYNN, R.M., **Virus transport and attenuation in perialpine gravel aquifers**. Tese de Doutorado. University of Neuchâtel (Switzerland) Faculty of Sciences. Pp.178, 2003.

FRIND E. O., **Groundwater Modelling (Numerical Methods).** Lecture Notes. EARTH 456/656. Department of Earth Sciences. University of Waterloo, pp. 143, 1995.

FUNG, L.; BUCHANAN, LL; SHARMA, R., **Hybrid-CVFE Method for Flexible-Grid Reservoir Simulation**. SPE Reservoir Engineering, pp. 188-194, 1994.

FUNG, L.; HIEBERT, A.; NGHIEM, L. **Reservoir Simulation with Control-Volume Finite-Element Method**. SPE Reservoir Engineering, pp.1349-357, 1992.

GERBA, C.P., **Applied and Theoretical Aspects of Vírus Adsorption to Surfaces.** Adv. Appl. Microbiol. 30, pp. 133-168, 1984.

GERBA, C.P.;WALLIS, C.; MELNICK, J.L., **Fate of wastewater bacteria and viruses in soil.** Journal of the Irrigation and Drainage Division 101, pp. 157-174, 1975.Citado em: http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafe/OSRAS_165-172.pdf.

GERKE, H. H.; VAN GENUCHTEN, M. TH., **A Dual-Porosity Model for Simulating the Preferential Movement of Water and Solutes in Structured Porous Media**. Water Resources Research 29, pp. 305–319, 1993a.

GERKE, H. H.; VAN GENUCHTEN, M. TH., **Evaluation of A First Order Water Transfer Term for Variably Saturated Dual-Porosity Flow Models**. Water Resources Research 29, pp. 1225–1238, 1993b.

GERSCOVICH, D. M., **Fluxo em Meios Porosos Saturados e Não Saturados Modelagem Numérica com Aplicações ao Estudo da Estabilidade de Encostas do Rio de Janeiro**. 1994.

GINN, T.R.; WOOD, B.D.; NELSON K.E.; SCHEIBE T.D.; MURPHY E.M.; CLEMENT T.P., **Processes in microbial transport in the natural subsurface**. Advances in Water Resources 25, pp.1017–1042, 2002.

GINROD P., **The impact of colloids on th migration and dispersal of radionuclides within fractured rock**. Journal of Contaminant Hydrology 13, pp. 167-181, 1993.

GODFREE, A.; FARRELL J., **Processes for Managing Pathogens**. J. Environ. Qual. 34, pp.105–113, 2005.

GOIS, J. P.; ESTACIO, K. C.; OISHI, C. M.; BERTONI, V.; BOTTA, V. A.; NAGAMINE, A.; KUROKAWA, F. A., **Aplicação de Volumes Finitos na Simulação Numérica de Contaminantes em Lençóis Freáticos**. Notas do ICMC - Série Computação, São Carlos, Vol. 87, pp. 1-33, http://www.lcad.icmc.usp.br/~kemelli/publicacoes.htm, 2005.

GRINROD, P.; EDWARDS, M.S.; HIGGO, J.; WILLIAMS, G.M., **Analysis of colloid and tracer breakthrough curves**. Journal of Contaminant Hydrology 21, pp. 243-253, 1996.

GWO, J. P.; JARDINE, P. M.; WILSON, G. V.; YEH, G.Y., **A Multiple-Pore Region Concept to Modeling Mass Transfer in Subsurface Media**. Journal of Hydrology 164, pp. 217-237, 1995.

HARVEY, R.; RYAN, J., **Use of PRD1 bacteriophage in groundwater viral transport, inactivation and attachment studies.** FEMS Microbiology Ecology 49, pp. 3-16, 2004.

HOKR, M.; J. MARYŠKA, J., **Numerical Solution of Two-Region Advection-Dispersion Transport and Comparison with Analytical Solution on Example Problems.** Proceedings of ALGORITMY 2002, 16th Conference on Scientific Computing, pp. 130-137, Slovakia, 2002.

HOPMANS, J. W.; VAN GENUCHTEN, M. Th., **Vadose Zone: Hydrological Processes.** Em Hillel D.(ed), Encyclopedia of soils in the Environment, pp. 209-216. Elsevier Ltd. Oxford, U.K, 2005.

HUYAKORN, P.; PINDER, G., **Computational Methods in Subsurface Flow**. Academic Press. London, pp. 472, 1983.

HUYAKORN, P.; WHITE, H.O.; WADSWORTH, T.D.,**TRAFRAP-WT A two dimensiuonal finite element code for simulating fluid flow and transport of radionuclides in fractured porous media with water table boundary consitions.** Hydrogeologic Inc. Herndon VA., pp.72, 1987.

IBARAKI M. E SUDICKY E., **Colloid-Facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media. 1. Numerical formulation and sensitivity analysis.** Water Resources Research 31(12), pp.2945-2960, 1995a.

IBARAKI M. E SUDICKY E., **Colloid-Facilitated contaminant transport in discretely fractured porous media. 2. Fracture network examples**. Water Resources Research 31(12), pp.2961-2969,1995b.

JAMES, S.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Analytical solutions for monodisperse and polydisperse colloid transport in uniform fractures**. Colloids and Surfaces A: Physicochem. Eng. Aspects 226, pp101-118. 2003a.

JAMES, S.C.; BILEZIKJIAN, T.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Contaminant transport in a fracture with spatially variable aperture in the presence of monodispere and polydispere colloids.** Stoch. Environ. Res. Risk Assess 19, pp. 266-279, 2005.

JAMES, S.C.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Effective velocity and effective dispersion coefficient for finite-sized particles flowing in a uniform fracture.** Journal of Colloid and Interface Science 263, pp. 288–295, 2003b.

JARVIS, N. J., **The MACRO Model (Version 3.1). Technical Description and Sample Simulations.** Reports and Dissertations 19. Department of Soil Science, Swedish University of Agricultural Science, Uppsala, Sweden, pp. 51, 1994.

JOHN, D.; ROSE A., **Review of Factors Affecting Microbial Survival**. Groundwater 39 (19), pp 7345-7356, 2005.

KELLER, A.; SIRIVITHAYAPAKORN, S., **Transport of colloids in unsaturated porous media:Explaining large-scale behavior based on pore-scale mechanisms**. Water resources Research 40, W12403, 2004.

KELLER, A.; AUSET, M, **A review of visualization techniques of biocolloid transport processes at the pore scale under saturated and unsaturated conditions**. Advances in Water Resources 30, pp.1392–1407, 2007.

KELLER, A.; SIRIVITHAYAPAKORN S., CHRYSIKOPOULOS, C., **Early breakthrough of colloids and bacteriophage MS2 in a water-saturated sand column.** Water Resources Research 40, W08304, 2004.

KENNEDY, CH.; LENNOX, W., **A Control Volume Model of Solute Transport in a Single Fracture**. Water Resources Research 31 (2), pp. 313-322, 1995.

KESSLER, J., **Colloid transport and deposition in water-saturated and unsaturated sand and Yucca Mountain tuff. Effect of ionic strength and moisture saturation. TR-110546.** Electric Power research Institute, Califórnia, pp. 66,1999.

KINOSHITA, T.; BALES, R.C.; MAGUIRE, K.M.; GERBA, C.P., **Effect of Ph on bacteriophage transport through sandy soils**. Journal of Contaminant Hydrology 14, pp. 55-70, 1993.

LAGENDIJK, V.; JANSEN, D.; KÖNGETER, J., **Unsaturated Flow Phenomena Simulating Groundwater Flow within Fractured Permeable Formations Applying the Multi-Continuum Approach**. Proceedings of Abstracts and Papers of the 3rd International Conference on Hydro-Science and -Engineering (ICHE): Brandenburg University of Technology at Cottbus, Berlin, Germany, Ed. by K.P. Holz [et al.]. Mississippi: Center for Computational Hydroscience and Engineering, Univ. of Mississippi (Advances in Hydro-Science and -Engineering; 3) (Paper on CD-ROM), pp. 1-19, 1998.

LAZAROV, R. D.; MISHEV, I. D.; VASSILEVSKI, P. S., **Finite Volume Methods for Convection-Diffusion Problems,** SIAM J. Numer. Anal. 33 (1), pp. 31-55, 1996.

LEDAIN MUIR, B.; BALIGA, B., **Solution of Three-Dimensional Convection-Diffusion Problems Using Tetrahedral Elements and Flow-Oriented Upwind Interpolation Functions**. Numerical Heat Transfer 9, pp. 143-162, 1986.

LEE, CH.; DENG, B.; CHANG, J., **A Continuum Approach for Estimating Permeability in Naturally Fractured Rocks**, Engineering Geology 39, pp. 71-85, 1995.

LENHART, J.; SAIERS, J., **Transport of sillica colloids through unsaturated porosu media: experimental results and model comparisons.** Environ. Sci. Technol. 36, pp. 769-777, 2002.

LEWIS, J; FOSTER, S.; DRASAR, B., **The risk of grondwater pollution by on-site sanitation in developing countries. A literature review.** IRCWD-Report No 01/82. pp. 78, 1988.

LIU, H-H.; BODVARSSON, G., **Constitutive Relation for Unsaturated Flow in a Fracture Network**. Journal of Contaminant Hydrology 252, pp. 116-125, 2001.

LIU, H-H.; HAUKWA, C.; AHLERS, C. F.; BODVARSSON, G.; FLINT, A.; GUERTAL W., **Modeling flow and transport in unsaturated fractured rock: an evaluation of the continuum approach**. Journal of Contaminant Hydrology (62–63), pp. 173-188, 2003.

LONG, J. C. S.; REMER, J. S.; WILSON, C. R.; WITHERSPOON P. A., **Porous Media Equivalent for Networks of Discontínuous Fractures**. Water Resources Research 18 (3), pp. 645-658, 1982.

LOVELAND, J.; BHATTACHARJEE, S.; RYAN, J.; ELIMELECH, M., **Colloid transport in a geochemically heterogeneous porosu médium: aquifer tank experiment and modeling.** Journal of Contaminant Hydrology 65, pp. 161-182, 2003.

LYRA, P.; WILLMERSDORF, R.; ARAÚJO, F.; DE CARVALHO, D., **An Adaptative Edge-Based Unstructured Finite Volume Formulation for the Solution of Biphasic Flows in Porous Media**. Neitaanmaki P. Rossi T., Majava K. e Pironneau O. (eds), European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECOMAS 17, 2004.

SHUKLA M.K., ELLSWORTH T.R., HUDSON R.J. E NIELSEN D.R., **Effect of Water Flux on Solute Velocity and Dispersion.** Soil Sci. Soc. Am. J. 67, pp. 449–457, 2003.

MALISKA, C. R., **Transferência de Calor e Mecânica de Fluidos Computacional**. 2da ed, Livros Técnicos e Científicos Editora S.A. Rio de Janeiro, pp. 453, 2004.

MALOSZWEVSKI, P.; ZUBER, A., **Tracer Experiments in Fractured Rocks: Matrix Difussio and Validity of Models**.Water Resources Research 29(8), pp. 2723-2735, 1993.

TULLER, M.; OR, D., **Hydraulic Conductivity of Variably Saturated Porous Film and Corner Flow in Angular Pore Space**. Water Resources Research 37(5), pp. 1257-1276, 2001.

MATTHES, G.; PEKDEGER, A., Cocncepts of a survival and transport model of pathogenic bactéria and viruses in groundwater. The Science of the Total Envionment 21, pp.149-159,1981.

MEDEMA, G.J.; SHAW, S.; WAITE, M.; SNOZZI, M.; MORREAU, A.; GRABOW, W., **Catchment characterisation and source water quality**. Assessing Microbial Safety of Drinking Water. WHO/OEDC, London. 2003.

MEZENTSEV, A.; MATTHAI, S.; PAIN, CH.; EATON, M., **A Bounded Control Volume Hybrid Finite Element Method for Subsurface Multiphase Flow Simulations**. Neitaanmaki P. Rossi T.,Majava K. e Pironneau O. (eds). European Congress on Computational Methods in Applied Sciences and Engineering ECOMAS, pp. 20, 2004.

MISHEV, I., **Finite Volume Methods on Voronoi Meshes**. Disponível no site http://www.isc.tamu.edu/publications-reports/tr/9609.pdf, pp. 23, consultado em Nov 2007.

MOHANTY, B.P.; BOWMAN, R.S.; HENDRICKX, J.M.; VAN GENUCHTEN, M.TH., **New Piecewise-Continuous Hydraulic Functions for Modeling Preferential Flow in an Intermittent-Flood-Irrigated Field**, Water Resources Research 33 (9), pp. 2049–2063, 1997.

MONTEAGUDO, J. E.; FIROOZABADI, A., **Control-Volume Method for Numerical Simulation of Two-Phase Immiscible Flow in Two- And Three-Dimensional Discrete-Fractured Media**. Water Resources Research 40, W07405, 2004.

NOWAKOWSKI, K.; LAPCEVIC, P.; VORALEK, J.; BICKERTON, G., **Preliminary Interpretation of Tracer Experiments Conducted in Adiscrete Rock Fracture Under Conditions of Natural Flow**. Gephysical Research Letters 22 (11), pp. 1417-1420, 1995.

OR, D.; TULLER, M., **Hydraulic Conductivity of Partially Saturated Fractured Porous Media: Flow in a Cross-Section**. Advances in Groundwater 26(8), pp. 883-898, 2003.

OSWALD J.; IBARAKI M., **Migration of colloids in discretely fractured porous media; effect of colloidal matrix diffusion**. Journal of Contaminant Hydrology 52, pp. 213-244, 2001.

PACHEPSKY, Y.A.; SADEGHI, A.M.; BRADFORD, S.A.; SHELTON, D.R.; GUBER, A.K.; DAO, T., **Transport and fate of manure-borne pathogens. Modelling Perspective**. Agricultural Water Management 86, pp. 81-92, 2006.

PANEL ON CONCEPTUPTAL MODELS OF FLOW AND TRANSPORT IN THE FRATURED VADOSE ZONE., **Conceptual Models of Flow and Transport in the Vadose Zone.** Us. National Committe for Rock Mechanics, Board on Earth Sciences and Resources, National Research Council. National Academy Press, Washington, D.C., pp. 372, 2003.

PANKOW, J. J.; JOHNSON, R.; HEWETSON, J.; CHERRY J., **An Evaluation of Contaminant Migration Paterns at Two Waste Disposal Sites on Fractured Porous Media in Terms of the Equivalent Porous Medium Model**. Journal of Contaminant Hydrology 1, pp. 65-76, 1986.

PATANKAR, S. V., **Numerical Heat Transfer and Fluid Flow**. Em Minkowycz e Sparrow (editores). Series in Computational and Physical Processes in Mechanics and Thermal Science, Taylos & Francis. U.S.A., pp. 197, 1980.

PEDLEY, S.; YATES,M.; SCHIJVEN, J.F.; WEST J.; HOWADR, G.; BARRETT, M., Pathogens**: Health relevance, transport and attenuation** Em: 2006 World Health Organization. Protecting Groundwater for Health: Managing the Quality of Drinking-water Sources. (Eds) O. Schmoll, G. Howard, J. Chilton e I. Chorus. IWA Publishing, London, UK, pp. 49-80, 2006.

PÉREZ, D., **La explotación del Agua Subterránea, Un Nuevo Enfoque**. Editorial Científico-Técnica, Habana, Cuba, pp. 500, 1995.

PENROD, S.L.; OLSON, T.M.; GRANT, S.B., **Deposition kinetics of two viruses in packed beds of quartz granular media**. Langmuir 12, pp. 5576–5587, 1996.

PIEPER, A.P.; RYAN, J.N.; HARVEY, R.W.; AMY, G.L.; ILLANGASEKARE, T.H.; METGE, D.W., **Transport and recovery of bacteriophage PRD1 in a sand and gravel aquifer: effect of sewage-derived organic matter**. Environmental Science & Technology 31, pp.1163–1170, 1997.

PHILLIP, J. R., **The Theory of Absorption in Aggregated Media**. Aust. J. Soil Res. 6, pp. 1–19, 1968.

PRAKASH, C., **An Improved Control Volume Finite-Element Method for Heat and Mass Transfer, and for Fluid Using Equal-Order Velocity-Pressure Interpolation**. Numerical Heat Transfer 9, pp 253-276, 1986.

PRUESS, K.; NARASIMAHAN, T. N., **A Practical Method for Modeling Fluid and Heat Flow in Fractured Porous Media.** SPE 10509, pp. 14-26, 1985.

PRUESS, K.; WANG, J. S. Y., **Numerical Modeling of Isothermal and Non-Isothermal Flow in Unsaturated Fractured Rock - A Review**. Evans, D.D., Nicholson, T.J. (Eds.), Flow and Transport through Unsaturated Fractured Rock, Geophysics Monograph, vol. 42. American Geophysical Union, Washington,DC, pp. 11–22, 1987.

RAMÍREZ, R.; ALFARO, A., **Mapa de Vulnerabilidad Hidrogeológica de uma parte Del Valle Central de Costa Rica**. Revista Geológica de América Central (27), Número Especial: HIDROGEOLOGIA. Editorial Universidad de Costa Rica, pp. 53-60, 2002.

RASMUSSEN, T.C.; EVANS, D.D., **Fluid flow and solute transport modeling in three dimensional networks of variably saturated discrete fractures.** U.S. Nucl. Regulat. Comm., Washington, D.C., Report NUREG/CR-5239, 1989.

REICHENBERGER, V.; JAKOBS, H.; BASTIAN, P.; HELMIG, R., **A Mixed-Dimensional Finite Volume Method for Multiphase Flow in Fractured Porous Media**. Advances in Water Resources 29(7), pp. 1020-1036, 2006.

REIMUS P.; CALLAHAN T.J.; WARE S.D.; HAGA M.; COUNCE D.A., **Matrix diffusion coefficients in volcanic rocks at the Nevada test site: Influence of matrix porosity, matrix permeability, and fracture coating minerals.** Journal of Contaminant Hydrology 93 (1-4), pp. 85-95, 2007.

REIMUS, P., **The use of synthetic colloids in tracer transport experiments in saturated rock fractures**. Los Alamos National Laboratory.New Mexico. Documento LA-130004-T Tese UC-802.1995(a).

REIMUS, P**., Transport of Synthetic Colloids through single saturated fractures: a literature review**. Los Alamos National Laboratory.New Mexico. Documento LA-12707-MS UC-802. pp 108. 1995(b).

REITSMA, S.; KUEPER, B., **Laboratory Measurement of Capillary Pressure - Saturation Relationship in a Rock Fracture**. Water Resources Research 30(4), pp. 865-878, 1994.

ROBINSON, B.; MCLIN, S.E; VISWANATHAN, H., **Hydrologic Behavior of Unsaturated, Fractured Tuff: Interpretation and Modeling of a Wellbore Injection Test**. Vadose Zone Journal 4, pp.694–707, 2005.

ROLIM, S., **Sistemas de Lagunas de Estabilización. Como utilizar aguas residuales tratadas em sistemas de regadío.** Mc Graw Hill Interamericana. Bogotá, Colômbia, pp. 370, 2000.

ROSALES, E.; VARGAS, S., **Diagnóstico Salud en la Vivienda en Costa Rica**, Organización Panamericana de la Salud, Red Interamericana de Centros de Salud em la Vivienda, http://www.cepis.org.pe/bvsasv/e/diagnostico/costarica.pdf. 2001.

RYAN, J.; HARVEY, R.; MEDGE, D.; ELIMELECH, M.; NAVIGATO, T.; PIEPER, A., **Field and Laboratory Investigation of Inactivation of Viruses (PRD1 and MS2) Attached to Iron Oxide-Coated Quartz Sand**. Environmental Science & Technology 36 (11), pp. 2403-2413, 2002.

SASIC KALAGASIDIS, BEDNAR, T.; HAGENTOFT, C., **Evaluation of the Interface Moisture Conductivity between Control Volumes - Comparison between Linear, Harmonic and Integral Averaging.** em "Performance of Exterior Envelopes of Whole Buildings IX International Conference",Vortrag: Buildings IX, Clearwater Beach; 05.12.2004 - 10.12.2004.pp. 1 – 7, 2004.

SCHIJVEN J. & ŠIMŮNEK J., **Kinetic modeling of virus transport at the field scale**. J. Contam. Hydrol. 55, pp. 113-135, 2002.

SCHIJVEN, J.; HASSANIZADEH, S., **Removal of Viruses by Soil Passage: Overview of Modeling, Processes and Parameters.** Critical Reviews in Environmental Science and Technology 30(1), pp. 49-127, 2000.

SCHIJVEN, J.F.; HOOGENBOEZEM, W.; MAJID HASSANIZADEH, S.; PETERS, J.H., **Modeling removal of bacteriophages MS2 and PRD1 by dune recharge at Castricum, Netherlands**. Water Resources Research 35(4), pp.1101-1111, 1999.

SCHMELLING, S; ROSS, R, **Contaminant Transport in Fractured Media: Models for Decision Makers**. EPA Superfund Groundwater Issue. Documento EPA/540/4-89/004, 1989.

SCHNEIDER, F. A.; MALISKA, C. R., **Acoplamento Pressão-Velocidade em Escoamentos Bidimensionais Incompressíveis Usando Malhas Não-Estruturadas**. XX CILAMCE – 20th Iberian Latin-American Computacional Methods in Engineering, pp. 26, Novembro, 1999.

SCHNEIDER, F. A.; MALISKA, C. R., **Uma Formulação em Volumes Finitos Usando Malhas Não-Estruturadas**, VIII ENCIT – Encontro Nacional de Ciências Térmicas, CD-ROM edition, Porto Alegre, Brasil, 2000.

SCHWARTZ, J.; LEMLEY, A.; PRATAP, K., **Household Chemicals and Your Septic System.** Water treatment notes (16), Cornell Cooperative Extension, College of Human Ecology. Cornell University, New York, pp.5, http://waterquality.cce.cornell.edu/publications.htm#notes, 2004.

SILVA, S.G., **Um Estudo Numérico do Transporte de Poluentes em Meios Porosos Saturados**. Dissertação de Mestrado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro.1991.

SIM, Y.; CHRYSIKOPOULOS, C., **Three-Dimensional Analytical Models for Vírus Transport in Saturated Porous Media**. Transport in Porous Media 30, pp. 87–112, 1998.

SIM, Y.; CHRYSIKOPOULOS, C.V., **Analytical Models for One-Dimensional Virus Transport in Saturated Porius Media**. Water Resources Research 31 (5), pp. 1429-1437, 1995.

ŠIMŮNEK, J.; HE, CH.; PANG, L.; BRADFORD, S.A., **Colloid-Facilitated Solute Transport in Variably Saturated Porous Media: Numerical Model and Experimental Verification** .Vadose Zone Journal 5, pp.1035–1047, 2006.

ŠIMŮNEK, J.; JARVIS, N.; VAN GENUCHTEN, M.; GÄRDENÄS, A., **Review and Comparison of Models for Describing Non-Equilibrium and Preferential Flow and Transport in the Vadose Zone**. Journal of Hydrology 272, pp. 14–35, 2003.

SIRIVITHAYAPAKORN, S., KELLER, A., **Transport of colloids in saturated porous media: A pore-scale observation of the size exclusion effect and colloid acceleration**. Water Resources Research 39 (4), 1109, 2003.

SMITH, L.; SCHWARTZ, F.W., **Na analysis of the influence of frature geometry on mass transport in fratured media**. Water Resources Research 20 (9), pp. 1241-1252, 1984.

SUDICKY, E.A.; MCLAREN, R.G., **The Laplace transform galerkin technique for large-scale simulation of mass transport in discretely-fratured porous formations**. Water Resources Research 28 (4), pp. 499-514, 1992.

TELLES, I., D**esenvolvimento de um Sistema Integrado para Modelagem de Fluxo e Transporte em Meios Porosos e Fraturados**. Tese de Doutorado. Departamento de Engenharia Civil. Pontifícia Universidade Católica de Rio de Janeiro. 2006.

THERRIEN, R.; SUDICKY, E. A., **Three Dimensional Analysis of Variable-Saturated Flow and Solute Transport in Discretely-Fractured Porous Media**. Jour. Cont. Hydrol. 23, pp. 1-44, 1996.

BARTH, T.; OHLBERGER, M., **Finite Volume Methods: Foundation and Analysis**. Encyclopedia of Computational Mechanics, (Eds) Erwin Stein, René de Borst e Thomas J.R. Hughes. John Wiley & Sons, Ltd. 2004.

TORAN, L.; PALUMBO, A.V., **Colloid Transport through fractured and unfractured laboratory sand columns**. Journal of Contaminant Hydrology 9, pp 289-303, 1992.

TORKZABAN, S.; HASSANIZADEH, S.; SCHIJVEN, J; van den BERG, H., **Role of air-water interfaces on retention of viruses under unsaturated conditions.** Water Resources Research 42, W12S14, 2006.

TUFENKJI, N.; ELIMELECH, M., **Spatial distribution of cryptosporidium oocysts in porous media: evidence for dual mode deposition.** Environ. Sci. Technol. 39, pp. 3620-3629, 2005.

TULLER, M.; OR, D., **Unsaturated Hydraulic Conductivity of Structured Porous Media. A Review of Liquid Configuration–Based Models**. Vadose Zone Journal 1, pp. 14-37, 2002.

VAN DAM, J. C.; ROOIJ, G. H.; HEINEN, M.; STAGNITTI, F., **Concepts and dimensionality in modeling unsaturated waterflow and solute transport**. pp. 1-36. Em, R A Feddes, G H de Rooij, J C van Dam (eds): Unsaturated-zone

Modeling - Progress, Challenges and Applications.Springer. pp. 364. revisado em http://library.wur.nl/frontis/unsaturated/01_van_dam.pdf, 2004.

VAN GENUCHTEN, M. TH.; DALTON, F., **Models for Simulating Salt Movement in Aggregated Field Soils**. Geoderma 38, pp. 165-183, 1986.

VAN GENUCHTEN, M. TH.; WIERENGA, P. J., **Mass Transfer Studies in Sorbing Porous Media.** I. Analytical Solutions. Soil Sci. Soc.Am. J. 40, pp. 473-481, 1976.

VAN GENUCHTEN, M. TH.;ŠIMŮNEK J., **Integrated modeling of vadose zone flow and transport processes**. Em: Unsaturated Zone Modeling: Progress, Challenges and Applications, Wageningen UR Frontis Series, Kluwe Academic Publishers, The Netherlands Vol. 6, Capítulo 2, pp, 37-69, 2005.

VAN GENUCHTEN, M.TH., **A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils**. Soil.Sci.Soc. Am. J. 44:892-898,1980.

VARGAS A., **Manantiales de una parte del valle Central de Costa Rica**. Revista Geológica de América Central (27), Número Especial: HIDROGEOLOGIA. Editorial Universidad de Costa Rica, pp. 39-52, 2002.

VISWANATHAN, H.S.; REIMUS, P.W., **Saturated Zone Colloid Transport**.OCRWN.ANL-NBS-HS-000031 REV01, pp 82. 2003.

WAN, J.; WILSON, J.; KIEFT T., Influence of the Gas-Water Interface on Transport of Microorganisms through Unsaturated Porous Media. Applied and Environmental Microbiology, pp. 509-516, Feb, 1994.

WANG, H.; WANG, E.; TIAN, K., **A Model Coupling Discrete and Continuum Fracture Domains for Groundwater Flow in Fractured Media**. Journal of Hydraulic Research 42, pp. 45–52, 2004.

WIKIPEDIA, Revisado no site http://en.wikipedia.org/wiki/Virus, 2007.

WIMPENNY, J., **Modelling in microbiology**. 8th International Symposium on Microbial Ecology Halifax, Nova Scotia, Canada.August 9-14, pp.8,1998.

WINSLOW, A., **Numerical Solution of the Quasilinear Poisson Equation in a Nonuniform Triangle Mesh**. Journal of Computational Physics 135, pp. 128-138, 1967.

YANJIE C.; YAN J.; FLUIR M.; YATES M., **Mechanisms of vírus removal during transport in unsaturated porous media**. Water Resources Research 37 (2), pp. 253-270, 2001.

YAO, K.; HABIBIAN, M.; O'MELIA, CH., **Water and Waste Water Filtration: Concepts and Applications**. Environmental Science & Technology 5 (11) , pp. 1105-1112, 1971.

YATES, M.V.; YATES, S., **A comparison of geostatistical methods for estimating virus inactivation rates in groundwater.** Water Resources Research 21, pp. 1119-1125, 1987.

YATES, M.V.; YATES, S., **Modelling microbial fate in the subsurface environment.** Critical Reviews in Environmental Control 17 (4), pp. 307-344, 1988. citado em: http://www.dlg.nsw.gov.au/Files/SepticSafw/OSRAS165-172.pdf.

YATES, M.V.; YATES, S.; WAGNER, J.; GERBA, C., **Modelling virus survival and transport in the subsurface.** Journal of Contaminant Hydrology 1, pp 329-345, 1987.

ZEVI, Y.; DATHE, A.; McCARTHY, J.; RICHARDS, B.; STEENHUIST, T.S., **Distribution of Colloid Particles onto Interfaces in Partially Saturated Sand** Environ. Sci. Technol. 39, pp. 7055-7064, 2005b.

ZEVI, Y.; DATHE, A.; McCARTHY, J.; RICHARDS, B.; STEENHUIS, T., **Distribution of colloid particles onto interfaces in partially saturated sand.** Environ. Sci. Technol. 39, pp. 7055-7065, 2005a.

ZHANG, P.; JOHNSON, W.; PIANA, M.; FULLER, CH.; NAFTZ, D., **Potential artifacts in interpretation of differential breakthrough of colloids and dissolved tracers in the context of transport in a zero-valent iron permeable reactive barrier.** Groundwater 39(6), pp. 831-840, 2001.

ZHANG, X.; SANDERSON, D.; BARKER, A., **Numerical Study of Fluid Flow of Deforming Fractured Rocks Using Dual Permeability Model**. Geophys. J. Int. 151, pp. 452-468, 2002.

APÊNDICE A:
Equações Governantes do Problema

A.1.
Equações que descrevem o Fluxo

As equações que descrevem os fluxos na matriz e nas fraturas estão baseadas no conceito da continuidade da massa do fluido num volume de referência. A obtenção dessas equações é mostrada a seguir.

A.1.1.
Fluxo na Matriz

Considere o volume de referência mostrado na Figura A1, com dimensões dx, dy e dz. Agora considere o fluxo de água acontecendo paralelamente ao eixo X do sistema de coordenadas mostrado na mesma figura, fluindo no sentido indicado pelas setas. Imagine que o fluxo ingressa no volume de referência pelo lado esquerdo e sai pelo lado direito.

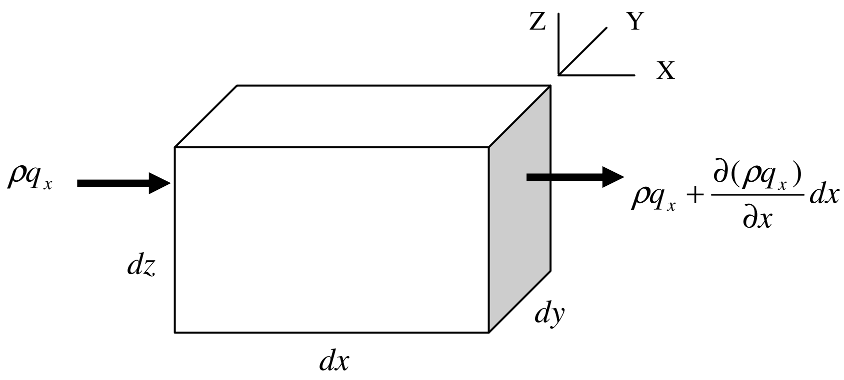

Figura A1. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Unidimensional

A quantidade de massa do fluido que ingressa no volume é dada pela vazão específica q_x na direção X multiplicada pela massa específica do fluido. A vazão q_x representa o volume de fluido por unidade de área por unidade de tempo que ingressa pela face esquerda do volume de referência. O produto ρq_x representa então o fluxo de massa do fluido que ingressa por unidade de área por unidade de tempo. No extremo direito do volume de referência, a quantidade de massa que sai, corresponde à massa que ingressou mais um termo adicional que reflete as mudanças dentro do volume de referência. Esse termo adicional pode significar acréscimo ou decréscimo na massa de fluido. Em termos matemáticos isto é representado através de um termo diferencial que reflete a variação da quantidade de massa ao longo da distância dx, e é representado simbolicamente pela expressão $\frac{\partial \rho q_x}{\partial x} dx$. O sinal da derivada indicará se a massa de fluido que sai é menor ou maior à massa de fluido que ingressou. Se considerarmos que o fluxo ocorre nas três direções do nosso sistema de coordenadas, o balanço no volume de referência terá as componentes mostradas na Figura A2.

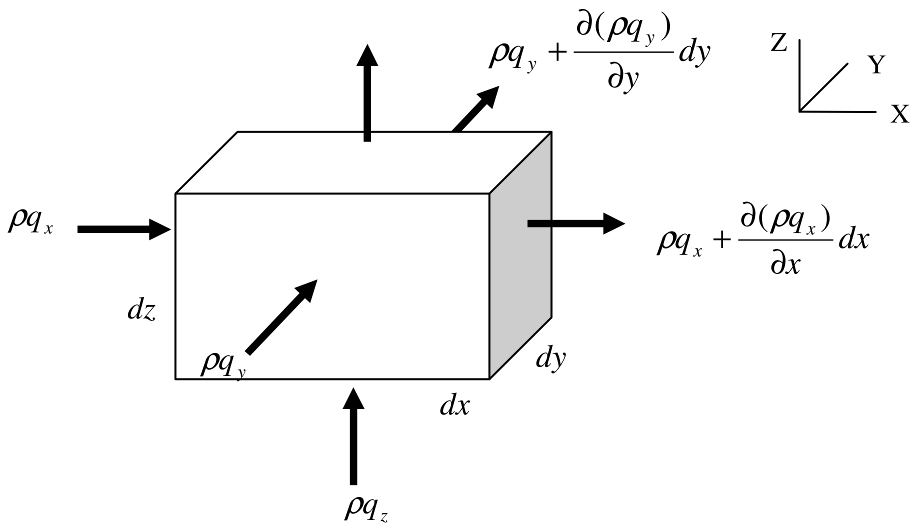

Figura A2. Volume de Referência no Meio Poroso. Fluxo Tridimensional

Neste caso existe fluxo de massa do fluido ingressando e saindo nas três direções do sistema de coordenadas. Por convenção define-se que o fluxo de massa que entra é positivo e o fluxo de massa que sai é negativo. Para realizar o balanço no volume de referência, simplesmente subtraímos os fluxos de massa que saem dos fluxos de massa que ingressam no sistema. A partir do balanço é obtida a quantidade de massa de fluido que entra ou sai do sistema por unidade de área por unidade de tempo. Bastará multiplicar esse valor pelas áreas e tempos correspondentes para obter a massa total de fluido que ingressou ou saiu do sistema. O anteriormente anunciado é colocado em termos matemáticos no Quadro A1.

Quadro A1. Equações do balanço de fluido no meio poroso

Direção	Fluxo[1] Entra	Fluxo que Sai [1]	Balanço [2] (Fluxo entra-Fluxo sai)	Massa que entra ou sai [3]
X	ρq_x	$\rho q_x + \frac{\partial(\rho q_x)}{\delta x}dx$	$(\rho q_x - \rho q_x - \frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x}dx)dydz$	$-\frac{\partial(\rho q_x)}{\partial x}dxdydzdt$
Y	ρq_y	$\rho q_y + \frac{\partial(\rho q_y)}{\delta y}dy$	$(\rho q_y - \rho q_y - \frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y}dy)dxdz$	$-\frac{\partial(\rho q_y)}{\partial y}dxdydzdt$
Z	ρq_z	$\rho q_z + \frac{\partial(\rho q_z)}{\delta z}dz$	$(\rho q_z - \rho q_z - \frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z}dz)dxdy$	$-\frac{\partial(\rho q_z)}{\partial z}dxdydzdt$

1: massa por unidade de área por unidade de tempo

2: massa por unidade de tempo

3: massa (unidades de massa)

A quantidade total de massa de fluido que entra ou sai do sistema num determinado intervalo de tempo dt é dado pela Equação A1.

$$-\frac{\partial \rho q_x}{\partial x}dxdydzdt - \frac{\partial \rho q_y}{\partial y}dxdydzdt - \frac{\partial \rho q_z}{\partial z}dxdydzdt \quad (A1)$$

Como acima colocado, o termo diferencial reflete as mudanças que ocorrem dentro do volume de referência. A Equação A1 deverá ser numericamente igual à variação da massa que ocorre dentro do volume. Essa variação de massa pode ser expressa em termos matemáticos da seguinte forma:

$$\frac{\partial M}{\partial t}dt \quad (A2)$$

em que M é a massa e t, o tempo. A massa pode ser expressa em função do volume total (V_t) do volume de referência, da porosidade (n), do grau de saturação (S_w) e da massa específica (ρ) do fluido. A expressão resultante é,

$$\frac{\partial(\rho S_w n V_t)}{\partial t}dt \quad (A3)$$

O volume total V_t resulta do produto dxdydz. Substituindo na Equação A3 resulta,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t}dxdydzdt \quad (A4)$$

Equacionando A1 e A4, a equação de continuidade resultante é,

$$(-\frac{\partial \rho q_x}{\partial x}-\frac{\partial \rho q_y}{\partial y}-\frac{\partial \rho q_z}{\partial z})dxdydzdt=\frac{\partial(\rho Sn)}{\partial t}dxdydzdt \quad \text{(A5)}$$

No caso de se ter termos fontes (Q) definidos como volume de fluido injetado/retirado por volume unitário por tempo unitário, a equação de continuidade resultante é,

$$(-\frac{\partial \rho q_x}{\partial x}-\frac{\partial \rho q_y}{\partial y}-\frac{\partial \rho q_z}{\partial z}\pm \rho Q)dxdydzdt=\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t}dxdydzdt \quad \text{(A6)}$$

Se expandirmos no tempo o lado direito da equação (A6) obtém-se,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t}dxdydzdt=(\rho S_w\frac{\partial n}{\partial t}+\rho n\frac{\partial S_w}{\partial t}+S_w n\frac{\partial \rho}{\partial t})dxdydzdt \quad \text{(A7)}$$

A parcela $\frac{\partial \rho}{\partial t}$ corresponde à compressibilidade do fluido e pode ser expressa da maneira seguinte:

$$\frac{\partial(\rho)}{\partial t}=\beta\rho^2 g\frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{(A8)}$$

onde β é o coeficiente de compressibilidade do fluido, g a gravidade e ψ a carga de pressão do fluido.

A parcela $\frac{\partial n}{\partial t}$ corresponde com a compressibilidade do meio poroso e pode ser expressa da maneira seguinte:

$$\frac{\partial(n)}{\partial t}=\alpha\rho g\frac{\partial \psi}{\partial t} \quad \text{(A9)}$$

onde α é o coeficiente de compressibilidade do meio poroso.

A parcela $\frac{\partial S_w}{\partial t}$ corresponde à variação do grau de saturação no tempo, e se multiplicada pela porosidade pode ser expressa em termos do chamado teor de umidade volumétrico (θ). O segundo termo do lado direito da Equação A7, pode ser escrito da seguinte forma.

$$n\rho\frac{\partial(S_w)}{\partial t}=\rho\frac{\partial(nS_w)}{\partial t}=\rho\frac{\partial \theta}{\partial t} \quad \text{(A10)}$$

Substituindo as expressões A8, A9 e A10 na Equação A7, obtém-se,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t}dxdydzdt=(\rho\frac{\partial \theta}{\partial t}+\rho S_w\alpha\rho g\frac{\partial \psi}{\partial t}+S_w n\beta\rho^2 g\frac{\partial \psi}{\partial t})dxdydzdt \quad \text{(A11)}$$

Arranjando termos, a Equação A11 é transformada para,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t}dxdydzdt = (\rho\frac{\partial\theta}{\partial t} + \rho S_w\frac{\partial\psi}{\partial t}(\rho g(\alpha + n\beta))dxdydzdt \qquad \text{(A12)}$$

Onde o termo $\rho g(\alpha + n\beta)$ é chamado de coeficiente de armazenamento específico e tem unidades (L^3 / L^3 L), e representa o volume de fluido liberado por volume unitário do meio poroso por queda unitária na carga de pressão, e é normalmente representado pelo símbolo S_s. A Equação A12 modificada é,

$$\frac{\partial(\rho S_w n)}{\partial t}dxdydzdt = (\rho\frac{\partial\theta}{\partial t} + \rho S_w\frac{\partial\psi}{\partial t}S_s)dxdydzdt \qquad \text{(A13)}$$

O lado esquerdo da Equação A5 pode incorporar as equações de movimento do fluido. A equação de Darcy é a que descreve o movimento de um fluido num meio poroso. A equação de Darcy é da forma seguinte:

$$q_l = -k\frac{\partial(\psi + z)}{\partial l} \qquad \text{(A14)}$$

onde q_l representa a vazão específica do fluido (volume por unidade de área por unidade de tempo) na direção *l*, *k* corresponde à condutividade (permeabilidade) hidráulica saturada do meio poroso, e $\frac{\partial(\psi + z)}{\partial l}$ representa a variação ou gradiente da carga total ao longo do comprimento *l*. Novamente ψ representa a carga de pressão e z a carga de elevação. A permeabilidade é na realidade uma propriedade tensorial, e pode ser decomposta nas direções do sistema de coordenadas escolhido. No caso de um sistema de coordenadas tridimensionais com eixos XYZ, o tensor de permeabilidades é dado por:

$$\begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xy} & k_{xz} \\ k_{yx} & k_{yy} & k_{yz} \\ k_{zx} & k_{zy} & k_{zz} \end{bmatrix} \qquad \text{(A15)}$$

Para o caso específico de fluxo na direção X, a vazão específica é dada pela Equação A16.

$$q_x = -\left[k_{xx}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{xy}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{xz}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial z}\right] \qquad \text{(A16)}$$

O fluxo na direção X é dado por três parcelas que dependem cada uma dos gradientes nas três direções dos eixos do sistema de coordenadas. A primeira parcela representa fisicamente o volume de água que é transmitido na direção X por causa da variação da carga nessa direção, a segunda parcela corresponde com o volume de fluido transmitido na direção X por causa do gradiente na direção Y, e finalmente a terceira parcela corresponde com o volume de fluido transmitido na direção X por causa do gradiente na direção Z. As componentes do tensor de permeabilidade são interpretadas fisicamente como a facilidade com que o fluido é transmitido numa direção por conta da variação do gradiente numa direção determinada. Assim k_{xx} representa a facilidade com que o fluido é transmitido na direção X por conta do gradiente na direção X, e para k_{xy} e k_{xz} a interpretação física é, a facilidade de o fluido ser deslocado na direção X por causa dos gradientes nas direções Y e Z, respectivamente. Resumindo, os fluxos nas três direções do sistema de coordenadas XYZ são:

$$q_x = -\left[k_{xx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{xy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{xz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad \text{(A17)}$$

$$q_y = -\left[k_{yx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{yy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{yz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad \text{(A18)}$$

$$q_z = -\left[k_{zx} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x} + k_{zy} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial y} + k_{zz} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial z} \right] \quad \text{(A19)}$$

Empregando a notação indicial, as Equações A17, A18 e A19 podem ser expressas da seguinte forma:

$$q_i = -\left[k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j} \right] \quad \text{(A20)}$$

onde i,j =1,2,3, sendo 1=X,2=Y,3=Z, e x_j=X,Y,Z dependendo do valor de j.

Para se considerar o efeito da não saturação no meio poroso, o tensor de permeabilidade K_{ij} é multiplicado pelo valor K_{rw} que representa a função de permeabilidade relativa cujo valor varia entre zero e um dependendo do grau de saturação. Desta forma a Equação A20 é modificada para

$$q_i = -\left[k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j} \right] \quad \text{(A21)}$$

Colocando as Equações A13 e A20 na Equação A6, obtém-se a equação diferencial governante do fluxo num meio poroso (contínuo) tridimensional.

$$(-\frac{\partial}{\partial x_i} \rho(-k_{rw} k_{ij} \frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm \rho Q) dxdydzdt = (\rho \frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_w \frac{\partial \psi}{\partial t} S_s) dxdydzdt$$

(A22)

Simplificando termos e considerando que a massa específica não varia no espaço, tem-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q = \frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t} \qquad \text{(A23)}$$

Esta é a equação diferencial referida no Capitulo 4. No caso de considerar o valor de S_s igual a zero, a Equação A23 se reduz à clássica equação de Richards.

A.1.2.
Fluxo na Fratura

A equação de continuidade do fluido na fratura é obtida empregando o mesmo raciocínio utilizado para o meio poroso. Neste caso, a fratura é modelada como duas placas paralelas separadas por uma distância denominada abertura e simbolizada como 2b. Na Figura A3 mostra-se o volume de referência da fratura e o sistema de coordenadas empregado. Neste caso o fluxo na direção Y está representado pelos valores $q_{n/I+}$ e $q_{n/I-}$, que correspondem com as vazões específicas que ingressam ou saem do volume de referência (provenientes da matriz) através dos planos I^+ e I^-.

No Quadro A2 são definidas as parcelas de fluxo para cada direção. No caso da direção Y, só é considerada a quantidade de fluido que ingressa no volume.

De maneira similar ao problema do meio poroso, a massa de fluido dentro da fratura é representada a partir da porosidade e do grau de saturação (n_f, S_{wf}).

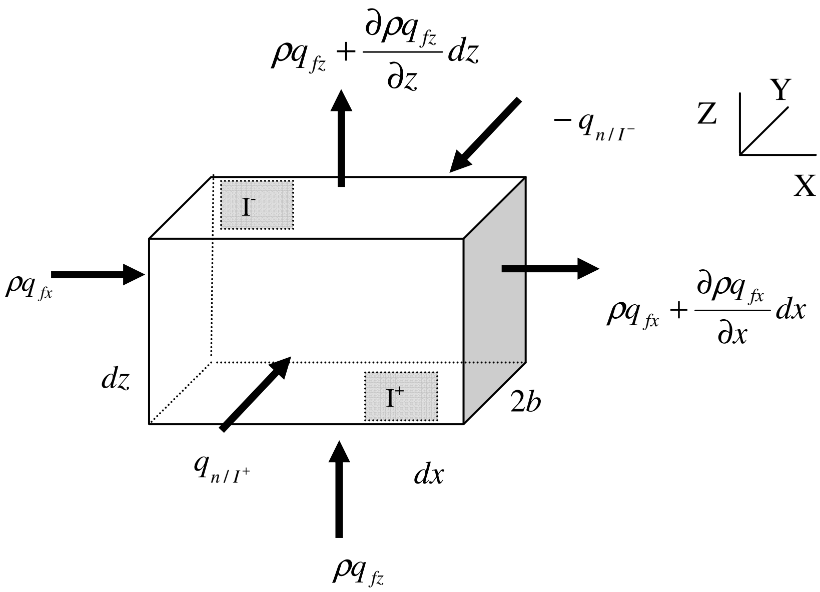

Figura A3. Volume de Referência na Fratura. Fluxo Tridimensional

Quadro A2. Equações do balanço de fluido na fratura

Direção	Fluxo que Entra [1]	Fluxo que Sai [1]	Balanço [2] (Fluxo entra-Fluxo sai)	Massa que entra ou sai [3,4]
X	ρq_{fx}	$\rho q_{fx} + \frac{\partial \rho q_{fx}}{\partial x} dx$	$(\rho q_{fx} - \rho q_{fx} - \frac{\partial \rho q_{fx}}{\partial x} dx)2bdz$	$-\frac{\partial 2b\rho q_{fx}}{\partial x} dxdzdt$
Y	$\rho q_{n/I^+} - \rho q_{n/I^-}$		$(\rho q_{n/I^+} - \rho q_{n/I^-})dxdz$	$(\rho q_{n/I^+} - \rho q_{n/I^-})dxdzdt$
Z	ρq_{fz}	$\rho q_{fz} + \frac{\partial \rho q_{fz}}{\partial z} dz$	$(\rho q_{fz} - \rho q_{fz} - \frac{\partial \rho q_{fz}}{\partial z} dz)2bdx$	$-\frac{\partial 2b\rho q_{fz}}{\partial z} dxdzdt$

1: massa por unidade de área por unidade de tempo

2: massa por unidade de tempo

3: massa (unidade de massa)

4: a abertura 2b foi incorporada dentro da variação diferencial do fluxo

Na equação A24 se apresenta a equação de continuidade da massa de fluido resultante para a fratura. Nessa equação também são considerados termos fontes Q_f, definidos como volume de fluido injetado por volume unitário da fratura por tempo.

$$(-\frac{\partial \rho 2bq_{fx}}{\partial x} - \frac{\partial \rho 2bq_{fz}}{\partial z} + \rho q_{n/I+} - \rho q_{n/I-} \pm \rho 2bQ_f)dxdzdt = 2b\frac{\partial(\rho S_{wf} n_f)}{\partial t}dxdzdt \tag{A24}$$

Desenvolvendo o lado direito da Equação A24, obtém-se uma expressão similar à Equação A12. Isto é mostrado na Equação A25.

$$2b\frac{\partial(\rho S_{wf} n_f)}{\partial t}dxdzdt = 2b(\rho\frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_{wf}\frac{\partial \psi}{\partial t}(\rho g(\alpha_f + n_f \beta))dxdzdt \tag{A25}$$

Neste caso, o valor do armazenamento específico é dado pela expressão $S_{sf} = \rho g \beta$ que resulta da consideração da fratura indeformável e com porosidade unitária ($n_f = 1$, e $\alpha_f = 0$). A Equação A25 é reduzida para,

$$2b\frac{\partial(\rho S_{wf} n_f)}{\partial t}dxdzdt = 2b(\rho\frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_{wf} S_{sf}\frac{\partial \psi}{\partial t})dxdzdt \tag{A26}$$

Os termos q_{fx} e q_{fz} da Equação A24 podem ser expressos a partir da Lei de Darcy. Neste trabalho de tese considera-se que para a fratura são aplicáveis os conceitos de capilaridade e meio continuo. A mesma expressão da Equação A21 pode ser empregada para determinar os fluxos nas direções X e Z. No caso da fratura, o tensor de permeabilidade terá quatro componentes como mostradas na Equação A27.

$$\begin{bmatrix} k_{xx} & k_{xz} \\ k_{zx} & k_{zz} \end{bmatrix} \tag{A27}$$

Incorporando a Equação A21 na Equação A24 e considerando que i,j =1,2, sendo 1=X,2=Z, e x_j=X,Z dependendo do valor de j, obtém-se a equação do balanço de massa para a fratura,

$$\begin{aligned}(-\frac{\partial}{\partial x_i}\rho 2b(-k_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + \rho q_{n/I+} - \rho q_{n/I-} \pm \rho 2bQ_f)dxdzdt = \\ 2b(\rho\frac{\partial \theta}{\partial t} + \rho S_{wf} S_{sf}\frac{\partial \psi}{\partial t})dxdzdt\end{aligned} \tag{A28}$$

Simplificando termos e considerando que a massa específica não varia no espaço, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f = 2b(\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_{wf} S_{sf}\frac{\partial \psi_f}{\partial t}) \tag{A29}$$

No caso da fratura, a permeabilidade saturada pode ser calculada a partir de chamada lei cúbica, que no caso de placas paralelas é expressa da seguinte forma:

$$k_f = \rho g \frac{(2b)^2}{12\mu} \tag{A30}$$

onde μ corresponde à viscosidade do fluido.

A Equação A29 é a mesma apresentada no Capítulo 4 para descrever o fluxo na fratura. Pode–se notar também que a Equação A29 pode ser vista como um caso particular da Equação A23. Se considerarmos em A29 a abertura unitária ($2b = 1$) e trocarmos o valor do armazenamento específico da fratura pelo valor do meio poroso, obter-se-ia o caso particular de A23 para fluxo bidimensional de um meio poroso. Esta é uma propriedade importante porque permite empregar os algoritmos computacionais do fluxo na fratura, para representar também o fluxo bidimensional no meio poroso.

A.2.
Equações que descrevem o transporte de vírus

As equações que descrevem o transporte de vírus na matriz e nas fraturas estão baseadas no conceito da continuidade da quantidade de vírus num volume de referência. As deduções dessas equações são mostradas a seguir.

A.2.1.
Transporte na Matriz

Considere o volume de referência mostrado na Figura A4, com dimensões dx, dy e dz. Agora considere o fluxo acontecendo paralelamente ao eixo X do sistema de coordenadas mostrado na mesma figura, e no sentido indicado pelas setas. Imagine que o fluxo ingressa no volume de referência pelo lado esquerdo e sai pelo lado direito.

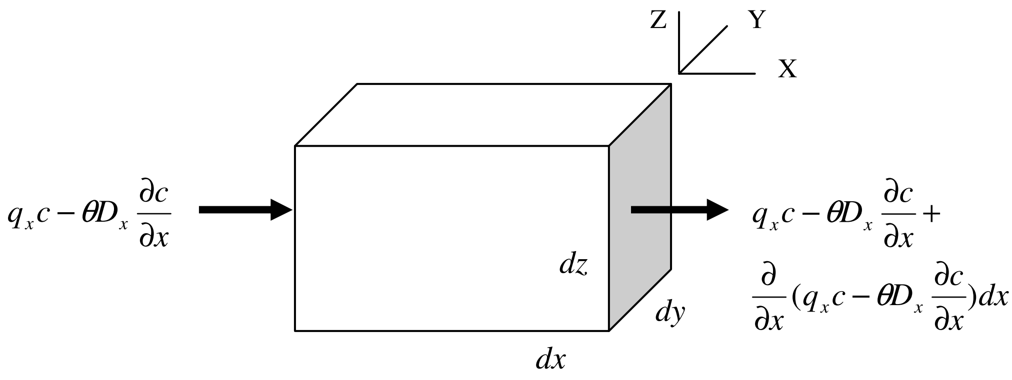

Figura A4. Volume de Referência no meio poroso. Transporte Unidimensional

A quantidade de vírus que ingressa no volume é dada pelo transporte advectivo e pelo transporte dispersivo. O transporte advectivo é dado pela vazão específica q_x na direção X multiplicada pela concentração dos vírus no fluido (número de vírus por volume unitário de fluido). O produto $q_x c$ representa a quantidade de vírus que ingressa por unidade de área por unidade de tempo. O transporte dispersivo é dado pela Lei de Fick e representado simbolicamente como $-\theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}$, onde D_x [L^2/T] corresponde à dispersão dos vírus no fluido e $\frac{\partial c}{\partial x}$ à variação da concentração na direção X. O valor θ corresponde com o teor de umidade volumétrico. No extremo direito do volume de referência, a quantidade de massa que sai corresponde à massa que ingressou mais um termo adicional que reflete as mudanças dentro do volume de referência. Esse termo adicional pode significar acréscimo ou decréscimo da quantidade de vírus. Em termos matemáticos isto é representado através de um termo diferencial que reflete a variação da quantidade de vírus ao longo da distância dx, e representado simbolicamente pela expressão $\frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})dx$. O sinal da derivada indicará se a quantidade de vírus que sai é menor ou maior à quantidade que ingressou. Se considerarmos que o fluxo ocorre nas três direções do nosso sistema de coordenadas, o balanço no volume de referência terá as componentes mostradas na Figura A5.

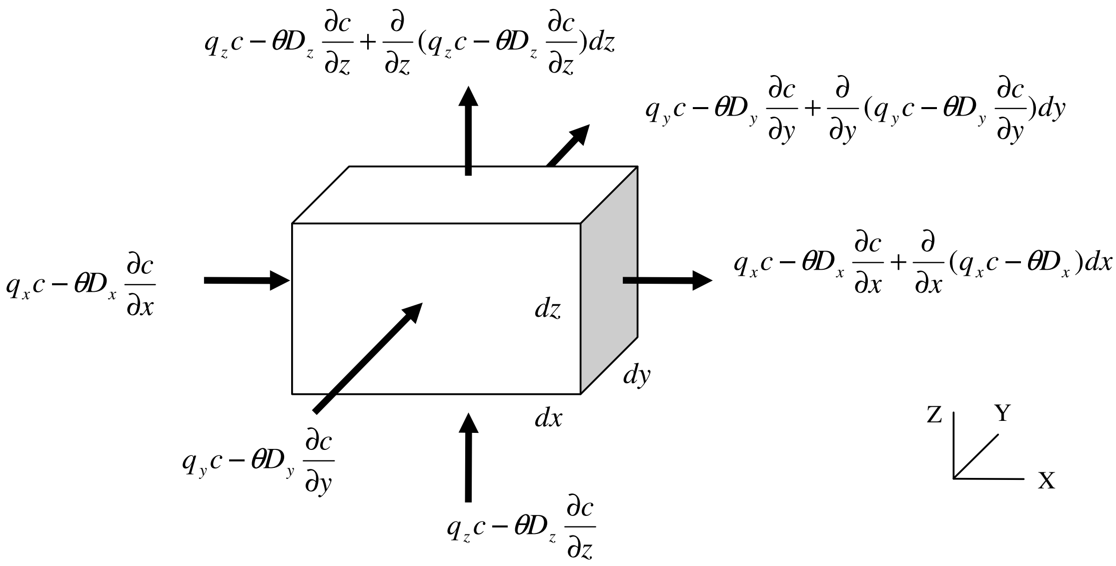

Figura A5. Volume de Referência no Meio Poroso. Transporte Tridimensional

Neste caso existe fluxo de vírus ingressando e saindo nas três direções. Por convenção define-se que a quantidade de vírus que entra é positiva e a que sai é negativa. Para realizar o balanço de massa no volume de referência ,simplesmente subtraem-se os fluxos que saem dos fluxos que ingressam no sistema. Bastará multiplicar esse valor pelas áreas e tempos correspondentes para obter a quantidade total de vírus que ingressou ou saiu do sistema. O anunciado anteriormente é colocado em termos matemáticos no Quadro A3.

Quadro A3. Equações do balanço dos vírus na matriz porosa.

Direção	**Fluxo[1] que Entra**	**Fluxo que Sai [1]**	**Balanço [2] (Fluxo entra-Fluxo sai)**	**N Vírus que entra ou sai [3]**
X	$q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}$	$q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})dx$	$(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x} - (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})dx)dydz$	$-\frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})\, dxdydzdt$
Y	$q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}$	$q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y} + \frac{\partial}{\partial y}(q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y})dy$	$(q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y} - (q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial y}(q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y})dy)dxdz$	$-\frac{\partial}{\partial y}(q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y})\, dxdydzdt$
Z	$q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}$	$q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})dz$	$(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z} - (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) - \frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})dz)dxdy$	$-\frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta Dz \frac{\partial c}{\partial z})\, dxdydzdt$

1: número de vírus por unidade de área por unidade de tempo

2: número de vírus por unidade de tempo

3: número de vírus

Desta maneira, a quantidade total de vírus que entra ou sai do sistema num determinado intervalo de tempo dt, é dado pela Equação A31.

$$\left[-\frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial y}(q_y c - \theta D_y \frac{\partial c}{\partial y}) - \frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})\right] dxdydzdt \tag{A31}$$

Se considerarmos o caráter tensorial da dispersão, teremos que essa propriedade pode ser escrita em termos matriciais nas componentes do sistema de coordenadas. Para o caso tridimensional são nove as componentes do tensor, como mostrados na Equação A32.

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xy} & D_{xz} \\ D_{yx} & D_{yy} & D_{yz} \\ D_{zx} & D_{zy} & D_{zz} \end{bmatrix} \tag{A32}$$

Empregando a notação indicial, a Equação A31pode ser escrita da seguinte forma,

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j} - q_i c)dxdydzdt \tag{A33}$$

As concentrações dos vírus dentro do volume de referência podem ser expressas em relação ao estado em que estes se encontram, isto é, em suspensão na fase líquida, sorvidos nas superfícies sólidas, retidos nos poros menores ou sorvidos na interface água-ar. As concentrações são mostradas a seguir.

Concentração na fase	**Concentração expressa como: Número de vírus por...**	**Símbolo**
Líquida	Volume unitário de fluido	C
Sólida em sorção em equilíbrio	Unidade de massa do sólido	S_{eq}
Sólida em sorção dinâmica	Unidade de massa do sólido	S_{din}
Poros menores por filtração mecânica	Unidade de massa do sólido	S_{str}[1]
Interface água-ar	Área unitária da interface água-ar	Γ

1: do inglês straining

Se considerarmos adicionalmente que existe inativação de vírus nas diferentes fases acima mencionadas, é possível se definir uma expressão para quantificar o número total de vírus que são inativados. Essa expressão é mostrada na Equação A34.

$$Q_\mu dxdydzdt = (\theta C\mu_l + \rho_b S_{eq}\mu_{eq} + \rho_b S_{din}\mu_{din} + \rho_b S_{str}\mu_{str} + A_{aw}\Gamma\mu_{aw})dxdydzdt \tag{A34}$$

Onde Q_μ representa a soma de todas as parcelas da inativação, ρ_b [M/L3] a massa específica do meio poroso seco (bulk density), A_{aw} [L^2/L^3] a área da interface água-ar por volume unitário do meio poroso, e os coeficientes de inativação [1/T] para cada fase são: $\mu_l, \mu_{eq}, \mu_{din}, \mu_{str}, \mu_{aw}$.

A variação do número de vírus dentro do volume de referência pode ser expressa a partir das concentrações em cada fase, como mostrado na Equação A35.

$$(\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t})dxdydzdt \qquad \text{(A35)}$$

Acoplando as Equações A33, A34 e A35 obtém-se a equação de continuidade para os vírus no volume de referência. A equação resultante é:

$$\begin{aligned}&[\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}]dxdydzdt = \\ &[\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{ij}\frac{\partial c}{\partial x_j}-q_i c)-Q_\mu]dxdydzdt\end{aligned} \qquad \text{(A36)}$$

onde Q_μ é dado pela Equação A34.

Adicionalmente, para complementar a descrição do transporte dos vírus, se faz necessária a determinação das equações diferenciais auxiliares que descrevem as concentrações nas fases sorvidas e filtradas.

A concentração sorvida em equilíbrio é descrita por uma relação linear como mostrado na equação A37.

$$S_{eq}=K_d C \qquad \text{(A37)}$$

A variação da concentração sorvida dinamicamente nas superfícies dos sólidos é dada pela diferença entre as quantidades dos vírus que são retirados da fase líquida, menos as quantidades que são liberadas da fase sólida e menos a inativação dos vírus sorvidos. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}dxdydzdt=(\theta C K_{att}\psi_{att}-S_{din}\rho_b K_{\det}-S_{din}\rho_b\mu_{din})dxdydzdt \qquad \text{(A38)}$$

onde K_{att} [1/T] representa o coeficiente de sorção dinâmico, ψ_{att} o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção, e K_{det} [1/T] o coeficiente de desorção.

A variação da concentração filtrada mecanicamente é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (filtrados pelos poros menores) menos as quantidades inativadas dos vírus filtrados. Simbolicamente, o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} dxdydzdt = (\theta C K_{str} \psi_{str} - \rho_b S_{str} \mu_{str}) dxdydzdt \qquad \text{(A39)}$$

onde K_{str} [1/T] representa o coeficiente de filtração e ψ_{str} o coeficiente adimensional que representa a variação da filtração na distância a partir do ponto de injeção.

A variação da concentração sorvida na interface água-ar é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (retidos na interface), menos as quantidades que são liberadas e menos as quantidades de vírus inativados nessa interface. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} dxdydzdt = (\theta C K_{aw} \psi_{aw} - A_{aw}\Gamma K_{daw} - A_{aw}\Gamma \mu_{aw}) dxdydzdt \qquad \text{(A40)}$$

onde K_{aw} e K_{daw} [1/T] representam os coeficientes de sorção e desorção dinâmicos na interface água-ar, e ψ_{aw} o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção.

Desta forma, o conjunto das Equações A36, A37, A38, A39 e A40 representa o sistema de equações que descrevem o transporte de vírus num meio poroso tridimensional.

A.2.2.
Transporte na Fratura

A equação de continuidade dos vírus na fratura é obtida empregando o mesmo raciocínio utilizado para o meio poroso. Neste caso, a fratura é modelada como duas placas paralelas separadas por uma distância denominada abertura e simbolizada como 2b. Na Figura A6 mostra-se o volume de referência da fratura e o sistema de coordenadas empregado. Neste caso o fluxo na direção Y está representado pelos valores Ω_{n/I^+} e Ω_{n/I^-} que correspondem com os fluxos de vírus que ingressam ou saem do volume de referência (provenientes da matriz) através dos planos I^+ e I^-.

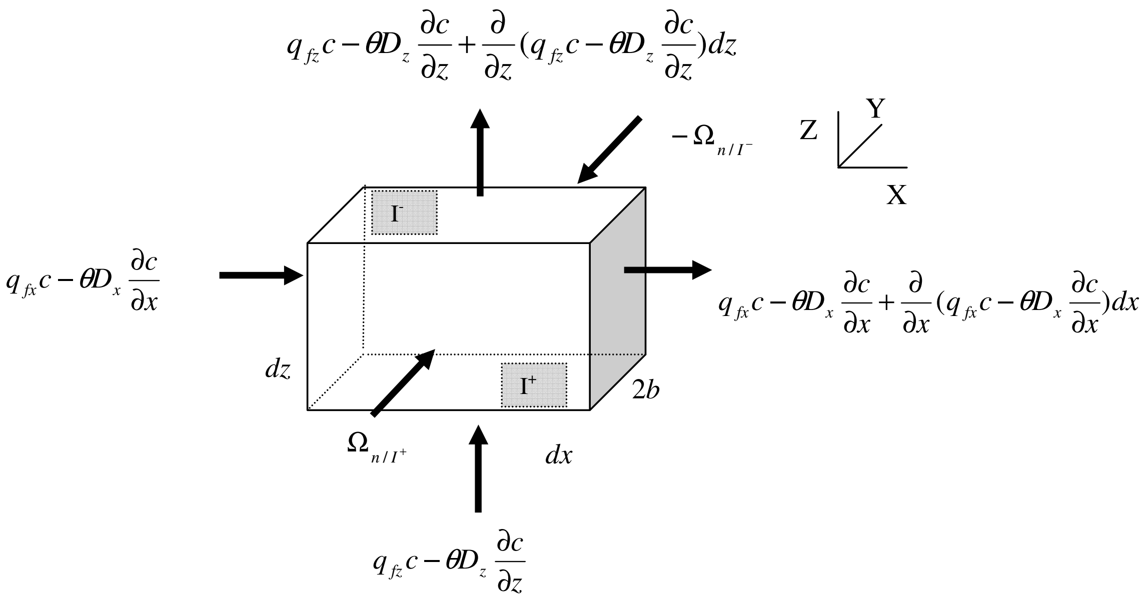

Figura A6. Volume de Referência na Fratura. Transporte Tridimensional

Neste caso existe fluxo de vírus ingressando e saindo nas três direções. Por convenção define-se que a quantidade de vírus que entra é positiva e a que sai é negativa. Para realizar o balanço de massa no volume de referência, simplesmente subtraem-se os fluxos que saem dos fluxos que ingressam. Com isto, é obtida a quantidade de vírus que entra ou sai do sistema por unidade de área por unidade de tempo. Bastará multiplicar esse valor pelas áreas e tempo correspondentes para obter a quantidade total de vírus que ingressou ou saiu do sistema. O anunciado anteriormente é colocado em termos matemáticos no Quadro A4. Nesse quadro são definidas as parcelas de fluxo de vírus para cada direção, e no caso da direção Y só é considerada a quantidade de vírus que ingressa no sistema.

Quadro A4. Equações do balanço dos vírus na fratura.

Direção	Fluxo que Entra [1]	Fluxo que Sai [1]	Balanço [2] (Fluxo entra-Fluxo sai)	Vírus que entra ou sai [3]
X	$q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}$	$q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})dx$	$(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x} - (q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})dx)2bdz$	$-\frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x})$ $2bdxdzdt$
Y	$\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}$		$(\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-})dxdz$	$(\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-})$ $dxdzdt$
Z	$q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}$	$q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z} + \frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})dz$	$(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z} - (q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z}) - \frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})dz)2bdx$	$-\frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta Dz \frac{\partial c}{\partial z})$ $2bdxdzdt$

1: número de vírus por unidade de área por unidade de tempo

2: número de vírus por unidade de tempo

3: número de vírus

A quantidade total de vírus que entra ou sai do sistema num determinado intervalo de tempo dt é dada pela Equação A41.

$$\left[2b\left(-\frac{\partial}{\partial x}(q_x c - \theta D_x \frac{\partial c}{\partial x}) - \frac{\partial}{\partial z}(q_z c - \theta D_z \frac{\partial c}{\partial z})\right) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}\right]dxdzdt \quad \text{(A41)}$$

Se considerarmos o caráter tensorial da dispersão, essa propriedade pode ser escrita em termos matriciais nas componentes do sistema de coordenadas. Para o caso de uma fratura são quatro as componentes do tensor, como mostrado na Equação A42.

$$\begin{bmatrix} D_{xx} & D_{xz} \\ D_{zx} & D_{zz} \end{bmatrix} \quad \text{(A42)}$$

Empregando a notação indicial, a equação A41 pode ser escrita da seguinte forma:

$$\left[2b\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{fij}\frac{\partial c_f}{\partial x_j} - q_{fi}c_f) + \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}\right]dxdzdt \quad \text{(A43)}$$

com i,j=1,2, e o subíndice *f* refere-se à fratura.

As concentrações dos vírus dentro do volume de referência podem ser expressas em relação ao estado em que estes se encontram. Os vírus podem ser encontrados nas seguintes formas: em suspensão na fase líquida, sorvidos nas superfícies da fratura, retidos nos poros menores (isto representaria o caso de abertura variável), ou sorvidos na interface água-ar. As concentrações são mostradas a seguir.

Concentração na fase	**Concentração expressa como: número de vírus por...**	**Símbolo**
Líquida	Volume unitário de fluido	C_f
Sólida em sorção em equilíbrio	Área unitária da fratura	S_{eqf}
Sólida em sorção dinâmica	Área unitária da fratura	S_{dinf}
Poros menores por filtração mecânica	Área unitária da fratura	S_{strf}[1]
Interface água-ar	Área unitária da interface água-ar	Γ_f

1: do inglês straining

Se considerarmos adicionalmente que existe inativação dos vírus nas diferentes fases acima mencionadas, é possível se definir uma expressão para quantificar o número total de vírus inativados. Essa expressão é mostrada na Equação A44.

$$2bQ_{\mu f}\,dxdzdt =$$
$$2b(\theta C_f \mu_{lf} + S_{eqf} A_s \mu_{eqf} + S_{din\,f} A_s \mu_{din\,f} + S_{strf} A_s \mu_{strf} + A_{awf} \Gamma_f \mu_{awf})dxdzdt \tag{A44}$$

onde $Q_{\mu f}$ representa a soma de todas as parcelas da inativação, A_s a área das superfícies sólidas por volume unitário da fratura (no caso de placas paralelas $A_s = \frac{2}{2b}$), A_{awf} a área da interface água-ar por volume unitário da fratura, e os coeficientes de inativação [1/T] para cada fase são: $\mu_{lf}, \mu_{eqf}, \mu_{din\,f}, \mu_{strf}, \mu_{awf}$.

A variação do número de vírus dentro do volume de referência pode ser expressa a partir das concentrações em cada fase, como mostrado na Equação A45.

$$2b(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t})dxdzdt$$

(A45)

Acoplando as equações A43, A44 e A45, obtém-se a equação de continuidade para os vírus no volume de referência. A equação resultante é:

$$2b(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t})dxdzdt =$$
$$\left[2b\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{fij}\frac{\partial c_f}{\partial x_j}-q_{fi}c_f)+\Omega_{n/I^+}-\Omega_{n/I^-}-2bQ_{\mu f}\right]dxdzdt$$

(A46)

onde $2bQ_{\mu f}$ é dado pela Equação A44.

Adicionalmente, para complementar a descrição do transporte de vírus, se faz necessária à determinação das equações diferenciais auxiliares que descrevem a variação da concentração nas fases sorvidas e filtradas.

A concentração sorvida em equilíbrio é descrita por uma relação linear como mostrado na equação A47.

$$S_{eqf} = K_{df} C_f \qquad \text{(A47)}$$

No caso da fratura, o coeficiente K_{df} é definido como o coeficiente de distribuição na fratura com unidades [L^3 / L^2].

A variação da concentração sorvida dinamicamente nas superfícies da fratura é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida, menos as quantidades liberadas das superfícies e menos a inativação dos vírus sorvidos. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma,

$$2b\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}dxdzdt = 2b(\theta C_f K_{attf}\psi_{attf} - S_{din\,f}A_s K_{\det f} - S_{din\,f}A_s\mu_{din\,f})dxdzdt$$

(A48)

onde K_{attf} [1/T] representa o coeficiente de sorção dinâmico, ψ_{attf} o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção e K_{detf} [1/T] o coeficiente de desorção dinâmico.

A variação da concentração filtrada mecanicamente é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (filtrados pelos poros menores) menos as quantidades inativadas dos vírus filtrados. Simbolicamente, o balanço de massa se expressa da seguinte forma:

$$2b\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}dxdzdt = 2b(\theta C_f K_{strf}\psi_{strf} - A_s S_{strf}\mu_{strf})dxdzdt \qquad \text{(A49)}$$

onde K_{str} [1/T] representa o coeficiente de filtração, e ψ_{str} o coeficiente adimensional que representa a variação da filtração na distância a aprtir do ponto de injeção.

A variação da concentração sorvida na interface água-ar é dada pela diferença entre as quantidades de vírus que são retirados da fase líquida (retidos na interface), menos as quantidades liberadas e menos as quantidades de vírus inativados nessa interface. Simbolicamente o balanço de massa se expressa da seguinte forma,

$$2b\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}dxdzdt = 2b(\theta C_f K_{awf}\psi_{awf} - A_{awf}\Gamma_f K_{dawf} - A_{awf}\Gamma_f \mu_{awf})dxdzdt \qquad \text{(A50)}$$

onde K_{awf} *e* K_{dawf} [1/T] representam os coeficientes de sorção e desorção dinâmicos na interface água-ar, e ψ_{awf} o coeficiente adimensional de correção da área disponível para a sorção.

Desta forma, o conjunto das equações A46, A47, A48, A49 e A50 representa o sistema de equações que descrevem o transporte de vírus numa fratura tridimensional, e são as mesmas apresentadas no Capítulo 4.

APÊNDICE B:
Método dos Volumes Finitos (MVF)

B.1.
Generalidades do MVF

As equações diferenciais podem ser resolvidas através de métodos analíticos ou através de métodos numéricos. A aplicação dos métodos analíticos permite obter a solução exata da equação. Porém, a aplicação dessas técnicas está restrita a geometrias simples e condições de contorno também simples. Os métodos numéricos por outro lado, fornecem soluções aproximadas das equações diferenciais, mas permitem a resolução de problemas com geometrias e condições de contorno mais complexas. A utilidade das soluções analíticas está na validação matemática das soluções numéricas e na análise dos problemas de baixa complexidade.

Os métodos numéricos tradicionalmente empregados na engenharia são: Método das Diferenças Finitas, Método dos Elementos Finitos e Método dos Volumes Finitos. A diferença entre eles está na maneira como o domínio do problema é discretizado. Existe ampla literatura sobre os diferentes métodos, e neste apêndice será descrito de maneira geral o Método dos Volumes Finitos (MVF) também conhecido como Método do Volume de Controle (MVC).

A idéia básica do MVF é descrita a seguir (baseado em Patankar, 1980): sobre o domínio do problema é construída inicialmente uma malha de nós que definem os pontos nos quais os valores da solução numérica são obtidos. O domínio do problema é a seguir dividido num determinado número de volumes de controle não sobrepostos, de maneira tal que cada volume de controle esteja localizado ao redor de cada nó da malha. A equação diferencial é integrada sobre cada volume de controle de maneira tal que o princípio de conservação seja garantido dentro do volume. Desta forma, o balanço da quantidade física sob estudo (seja, massa, quantidades de movimento, energia) é satisfeito de maneira exata individualmente para cada volume e portanto para todo o domínio.

Em dependência da maneira como os volumes de controle são construídos, três variantes do MVF são reconhecidas (como explica Maliska, 2004).

- Método Baseado em coordenadas curvilíneas (boundary-fitted coordinates ou body-fitted): este método utiliza o sistema de coordenadas para definir a forma do volume de controle. Neste caso o sistema de coordenadas coincide com a fronteira do domínio e os contornos dos volumes de controle coincidem com linhas de isovalores das coordenadas.

- Método Baseado em Elementos: Neste caso os volumes de controle são construídos a partir de elementos que discretizam o domínio, sejam triângulos, tetraedros, etc. Os contornos do volume de controle neste caso podem ser irregulares e não necessariamente serem paralelos aos eixos do sistema de coordenadas.

-Métodos Baseados em Diagramas de Voronoi: Neste caso os volumes de controle são construídos a partir de uma triangulação de Delaunay.

Nesta pesquisa foi empregado o Método baseado em Elementos. Este método é também conhecido na literatura como Volumes Finitos baseados em Elementos (element-based Finite Volume Methods) e também como Elementos Finitos Baseados no Volume de Controle (Control Volume-based Finite Element Methods). A associação com o MEF surge porque os volumes de controle são construídos a partir das malhas de elementos finitos, e especialmente porque os dois métodos empregam as mesmas funções de interpolação (exceção à interpolação dos termos advectivos). Isto é, a variação espacial da variável primária é descrita pelas funções de interpolação de cada elemento, e adicionalmente os contornos do volume de controle são definidos a partir da geometria dos elementos finitos. Quando o valor da variável primária é armazenado no centróide do elemento finito (ou célula de discretização) se diz que o esquema de discretização é baseado na célula (cell-based or cell centered scheme), neste caso o elemento finito é o próprio volume de controle. Quando o valor da variável primária é armazenado no nó, se diz que o esquema é baseado no nó ou no vértice (vertex-based or vertex centered scheme). Nesta pesquisa, o esquema empregado foi baseado no vértice. Na Figura B1 se apresentam os esquemas mencionados.

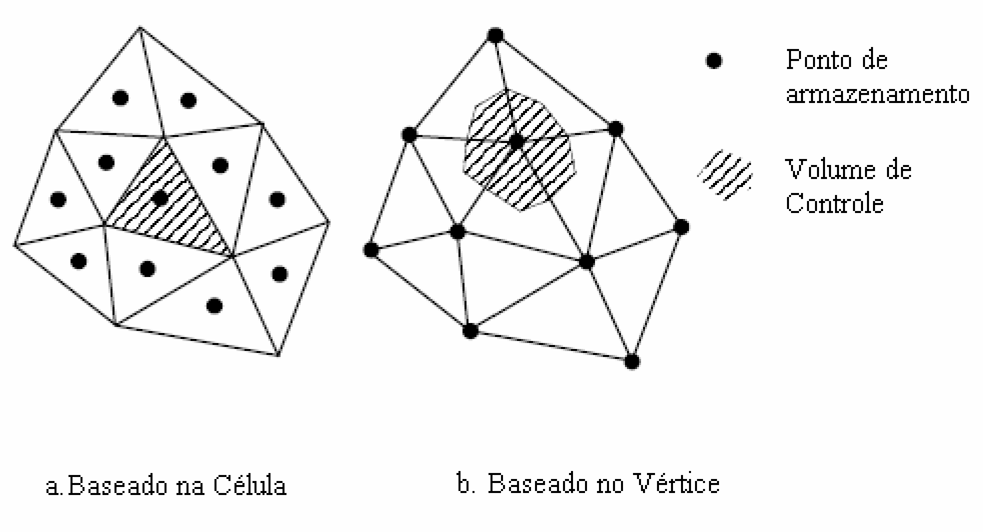

Figura B1. Esquema de armazenamento (modificado de Barth T. e Ohlberger, 2004)

Assim, o esquema a seguir descrito corresponde ao Método dos Volumes Finitos Baseado em Elementos empregando o esquema baseado no vértice.

Na Figura B2 é mostrado um domínio retangular discretizado em nove nós unidos por oito elementos triangulares. Na mesma figura é mostrada uma zona sombreada que representa o volume de controle para o nó 1. Esse volume de controle é construído a partir da soma das parcelas em cada elemento (subvolumes). A construção do volume de controle pode ser feita de diferentes maneiras. Nesta pesquisa, para problemas bidimensionais o domínio foi discretizado com elementos triangulares de três nós. Os volumes de controle foram construídos a partir da união do baricentro de cada triângulo com os pontos médios dos segmentos que definem o contorno do elemento. No caso de problemas tridimensionais foram empregados tetraedros de quatro nós para discretizar o domínio. Os volumes de controle foram construídos, de maneira similar, unindo o baricentro do tetraedro com os baricentros dos triângulos que definem o contorno do elemento. Nas Figuras C1 e D1 dos Apêndices C e D são mostrados os volumes de controle construídos para cada tipo de elemento.

O valor da variável primária armazenada no nó é considerado como o valor representativo de todo o volume de controle. No caso da Figura B2, o valor armazenado no nó 1 será o valor representativo de toda a zona sombreada.

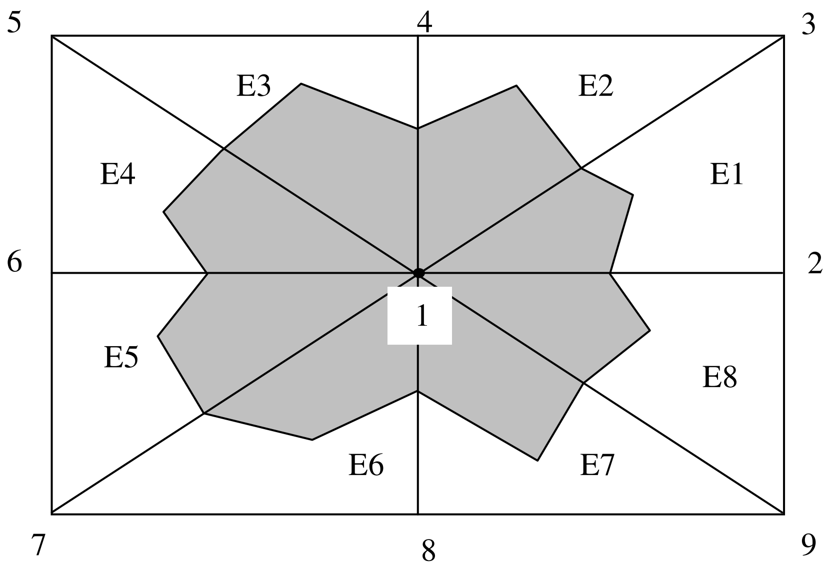

Figura B2. Volume de Controle e subvolumes de controle para o nó 1.

Quando aplicado um método numérico, a equação governante do problema é substituída por um sistema de equações que aproximam a solução exata (isto é, se obterá um sistema de equações discretizadas). Essas equações discretizadas devem manter a conservação da quantidade física sob estudo (vale ressaltar que essa quantidade não é necessariamente a variável primária). Essas equações aproximadas podem ser obtidas de duas maneiras:

- Realizar diretamente o balanço da quantidade sob estudo para cada volume de controle.

- Integrar a equação governante no volume de controle. Esta integração é realizada para cada volume de controle de maneira independente. Por este motivo, esta integração é normalmente classificada como sendo um método de resíduos ponderados, onde o valor da função peso tem valor unitário naquele volume de controle e valor zero nos outros volumes. Para cada volume de controle é montada uma equação aproximada que responde à integração naquele volume. Isto implica que a integral do resíduo naquele volume é nula, isto é, a equação resultante deve manter a conservação da quantidade física sob estudo. Para manter a conservação ou continuidade, a equação diferencial do problema deve ser integrada empregando o teorema do divergente. Esta maneira de aproximar as equações discretizadas é também conhecida como Método de Colocação por Subdomínio. Em alguns livros de texto esta forma de integração é colocada como um método alternativo de integração em Elementos Finitos (Huyakorn e Pinder, 1983).

Nesta pesquisa, as equações discretizadas foram construídas a partir da utilização do método de integração ponderada. A aplicação do método é demonstrada a seguir para um problema simples, empregando a discretização da Figura B2.

Considere a Equação B1 que representa o fluxo de água bidimensional em estado permanente em condição saturada.

$$\frac{\partial}{\partial x}(k\frac{\partial h}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(k\frac{\partial h}{\partial y})=0 \qquad \text{(B1)}$$

a integração do resíduo ponderado desta equação é,

$$\int_A W_1[\frac{\partial}{\partial x}(k\frac{\partial h}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(k\frac{\partial h}{\partial y})]dA=0 \qquad \text{(B2)}$$

onde W_1 é a função de ponderação com valor igual a um no volume de integração e zero nos outros volumes. O valor *A* é a área resultante de um volume com espessura unitária V=1**A*. A Equação B2 é transformada para:

$$\int_A [\frac{\partial}{\partial x}(k\frac{\partial h}{\partial x})+\frac{\partial}{\partial y}(k\frac{\partial h}{\partial y})]dA=0 \qquad \text{(B3)}$$

A partir de (B3) observa-se que a integral da equação do problema deve ser zero, isto é, a continuidade deve ser garantida naquele volume de integração. Aplicando o teorema do divergente em (B3), obtém-se uma nova integral que leva em conta as direções dos fluxos.

$$\int_S [k\frac{\partial h}{\partial x}n_x+k\frac{\partial h}{\partial y}n_y]dS=0 \qquad \text{(B4)}$$

onde S representa a área do contorno do volume de controle (no caso da Figura B2, o comprimento dos segmentos de reta que definem o contorno do volume de controle do nó 1) e n_x e n_y as componentes do vetor normal para fora do domínio aplicado em cada segmento do contorno do volume. A Equação B4 não é outra coisa que a determinação dos fluxos através do contorno do volume, com sinal dado pelo vetor normal. Esse sinal indica se o fluxo é para dentro ou para fora do volume.

Se aplicarmos (B4) para obter a equação discretizada no volume de controle do nó 1 da Figura B2, resulta uma equação em termos dos valores das cargas nodais dos nós 1 até 9. A forma genérica desta equação 1 é mostrada a seguir:

$$G_1 h_1 = G_2 h_2 + G_3 h_3 + G_4 h_4 + G_5 h_5 + G_6 h_6 + G_7 h_7 + G_8 h_8 + G_9 h_9 \qquad \text{(B5)}$$

Os valores G são fatores numéricos resultantes da integração. Neste apêndice não é mostrada a maneira de obter os valores de G em B5. A aplicação da integração com o MVF é mostrada em detalhe nos Apêndices C, D, E e F. Essa integração consiste basicamente na determinação das quantidades de fluido que são transferidas entres os volumes de controle. No caso do exemplo da Figura B2, é a transferência de fluido entre o volume do nó 1 e os volumes de controle dos nós 2 até 9. As grandezas h em B5 correspondem aos valores da variável primária (carga).

A Equação B5 deve respeitar as quatro regras básicas do MVF. Essas quatro regras básicas são descritas em Patankar (1980) e reproduzidas a seguir.

<u>Regra 1: Consistência dos Fluxos nas Interfaces</u>: Os fluxos através das faces compartilhadas por volumes de controle adjacentes devem estar representados pela mesma expressão nas equações discretizadas. O sentido físico desta regra é claro. Os valores dos fluxos que atravessam as faces devem ser os mesmos. Matematicamente isto significa que as funções que descrevem as variações no espaço da variável primária dentro dos volumes de controle adjacentes, devem ter o mesmo valor na interface, isto é, representadas pela mesma equação.

<u>Regra 2: Coeficientes Positivos</u>: Como mostrado em (B5), o valor da variável primária no nó 1 é aproximado a partir da combinação dos valores nos nós em conectividade com ele. O sinal dos coeficientes G (na Equação B5) deve responder ao sentido físico do problema. Nos problemas de fluxo e transporte, a informação é transmitida entre os nós através dos processos advectivos e dispersivos. Em presença dos efeitos puramente dispersivos, a informação do nó 1 é transmitida em todas as direções, isto é, para todos os nós com os quais tem

contato. Desta forma, um aumento no valor da concentração (por exemplo) no nó 1 induz um aumento na concentração nos nós vizinhos. Se G_1 for positivo, então G_2 a G_9 também devem ser positivos. No caso de efeitos advectivos, se considerarmos que na Figura B1 existe um fluxo horizontal da esquerda para a direita, a informação do nó 1 poderá ser transmitida apenas ao nó de número 2. Isto é, um acréscimo na concentração em 1 significa um acréscimo na concentração em 2. Se G_1 for positivo então G_2 deve ser positivo. Do anterior resulta claro que o sinal dos coeficientes na Equação B5 reflete os efeitos do fenômeno físico. Os coeficientes G_1 a G_9 devem ter o mesmo sinal. Se escolhermos uma discretização que gere sinais positivos, então a regra pode ser escrita da seguinte maneira: *Todos os coeficientes (G_1 e os seus vizinhos G_n) devem ser sempre positivos*. O contrário é também válido para sinais negativos.

<u>Regra 3: Somatório dos Coeficientes Vizinhos</u>: Na ausência de termos fontes, a soma dos coeficientes deve respeitar:

$$G_1 = \sum_{n=2}^{9} G_n \tag{B6}$$

alternativamente,

$$\frac{\sum_{n=2}^{9} G_n}{G_1} = 1 \tag{B7}$$

Sendo que o valor da variável primária no nó 1 é obtido a partir da ponderação dos valores nos nós vizinhos, o valor G_1 deve ser igual à soma das contribuições individuais de cada nó. Outra maneira de explicar isto é supor que o valor da variável primária em todos os nós vizinhos é igual, então na ausência de termos fontes o valor no nó 1 deverá ser o mesmo dos vizinhos (Patankar,1980). Esta regra não é respeitada quando são incorporados termos fontes linearizados com coeficiente positivo, como mostrado na Regra 4.

<u>Regra 4: Linearização do Termo Fonte com Coeficiente Negativo</u>: No MVF quando considerados termos fontes, é prática comum a linearização em função do valor da variável primária. Em alguns problemas o termo fonte depende fisicamente de variável primária. No MVF essa linearização é feita para diminuir

a possibilidade da divergência e melhorar a convergência da solução. Seja Q um termo fonte na Equação B1, a linearização pode ser colocada da maneira seguinte:

$$Q = Q_c + Q_p h_1 \tag{B8}$$

onde Q_c e Q_p são constantes. Incorporando (B8) em (B5), a equação resultante é:

$$G_1^{'} h_1 = G_2 h_2 + G_3 h_3 + G_4 h_4 + G_5 h_5 + G_6 h_6 + G_7 h_7 + G_8 h_8 + G_9 h_9 + Q_c \Delta l \tag{B9}$$

onde Δl é um fator geométrico que considera a área de atuação da fonte, e $G_1^{'} = G_1 - Q_p \Delta l$.

Resulta claro que $G_1^{'} \neq \sum_{n=2}^{9} G_n$, quer dizer, a Equação B9 não cumpre com a Regra 3. Apesar de (B9) estar corretamente colocada do ponto de vista matemático, pode apresentar problemas na realidade física do problema. Se a constante Q_p aumentar de valor tal que $G_1^{'}$ seja negativo, a Regra 2 será quebrada. Para manter a consistência física do problema, a constante Q_p deve ser mantida negativa. Com isto, $G_1^{'}$ mantém o mesmo sinal que G_2 a G_9. A Regra 4 pode ser escrita da seguinte forma: *quando um termo fonte for linearizado na forma* $Q = Q_c + Q_p h_1$, *o coeficiente Q_p dever ser sempre mantido negativo ou igual a zero.*

B.2.
Interpolação e Fluxos nas Interfaces

Para a construção das equações discretizadas, é necessária a determinação dos fluxos nas faces dos volumes de controle. Os fluxos nas interfaces são funções dos gradientes da variável primária e dos valores dos parâmetros do material. Esses valores são armazenados nos nós, devendo serem calculados nas interfaces a partir da interpolação dos valores nodais. Desta forma, nas interfaces dos volumes de controle são determinados os gradientes e as propriedades de transmissão representativas daquela interface, por exemplo, permeabilidade, dispersão, velocidade, etc. Para determinar os valores das interfaces, é necessário definir a maneira como os valores da variável variam no espaço. Quer dizer, precisamos definir um perfil da variação desta variável no espaço. Para a determinação das propriedades do material na interface será necessário ponderar os valores desta propriedade.

O perfil da variação no espaço da variável é obtido a partir de uma função de interpolação. Existem diferentes tipos de função de interpolação. O tipo de função a ser empregado dependerá da variante do método do volume de controle que esteja sendo utilizada. Maliska (2004) apresenta uma descrição bastante completa dos diferentes tipos de interpolação disponíveis no método das coordenadas curvilíneas, para problema 1D, 2D e3D. Uma aplicação da interpolação nos diagramas de Voronoi pode ser estudada em Maliska (2004). Uma publicação disponível na internet, embora com uma terminologia mais matemática, é a apresentada por Mishev(_) para diagramas de Voronoi.

Nesta pesquisa foi usado o Método Baseado em Elementos. Neste método, a interpolação da variável primária é definida para cada elemento. Isto é, dentro de cada elemento pode ser empregada uma função de interpolação diferente. Neste trabalho de tese, foram empregadas as mesmas funções de interpolação para todos os elementos. Para representar as variações nas cargas de pressão e nas concentrações nos termos dispersivos, foram empregadas funções de interpolação linear para obter os valores nas interfaces dos volumes de controle. Para representar as concentrações nos termos advectivos da equação, foi utilizada uma função de interpolação exponencial, descrita em detalhe no Apêndice H. Esta função de interpolação tem sido empregada em problemas de fluxo bidimensional com resultados satisfatórios (Abbassi et al, 2003).

As propriedades nas interfaces são importantes para se obter uma discretização adequada. Sendo que a interface entre dois volumes de controle corresponde ao contato entre dois materiais com propriedades diferentes, é necessário também se definir a maneira como essa propriedade é calculada na interface. Existem basicamente três maneiras de se obter esse valor, através da média harmônica, da média linear (variação linear entre os nós vizinhos) e através da média integrada (no caso da propriedade depender da variável primária, a propriedade é integrada considerando a variação da variável primária no espaço). Neste trabalho de pesquisa optou-se por manter as mesmas funções de interpolação lineares acima mencionadas, e foram integradas ao longo do contorno do volume de controle. Desta forma, os valores no contorno resultam da integração da interpolação a partir dos valores nodais. Comparações de resultados empregando diferentes tipos de ponderação podem ser vistas em Brunone et al (2003) e Sasic et al (2004).

B.3. Condições de Contorno

Para o método centrado no vértice, as bordas do domínio do problema também coincidem com o contorno dos volumes de controle nelas localizados. As faces dos volumes de controle localizadas no contorno do domínio são tratadas da mesma maneira como são tratadas as outras faces localizadas dentro do domínio. Se o valor do fluxo no contorno é conhecido, basta somar esse valor à equação discretizada, da mesma forma como é tratado no MEF. Quando esse valor de fluxo não é conhecido, então uma discretização desse fluxo em termos dos valores nodais deverá ser adicionada à equação discretizada. Portanto condições tipo Dirichlet, Neuman, Superfície Livre ou Cauchy são facilmente incorporadas na formulação. Nos Apêndices C, D, E e F é mostrado o detalhe da incorporação das condições de contorno nos problemas de fluxo e transporte.

APÊNDICE C:
Solução Numérica – Equação de Fluxo na Matriz

A equação que descreve o fluxo de água na matriz foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice C é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é,

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q = \frac{\partial\theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{C1}$$

Os índices i, j variam de 1 a 3, e indicam as direções x_1,x_2 e x_3 do sistema de coordenadas.

C.1.
Construção do Volume de Controle

Para a discretização espacial do domínio das matrizes porosas foram empregados elementos tetraédricos. A construção dos volumes de controle foi feita a partir da geometria dos tetraedros. Nas Figuras C1 e C2 é apresentado o contorno do subvolume de controle para o nó i. O contorno é definido por planos internos localizados dentro do elemento e por planos externos localizados na superfície do elemento.

Os planos internos foram denominados S_{ij}, S_{ik} e S_{il}. O plano S_{ij} é delimitado pelos pontos (a,b,e,g), o plano S_{ik} pelos pontos (b,c,f,g) e o plano S_{il} pelos pontos (d,e,f,g).

Os pontos (a), (c), e (d) correspondem com o centro dos segmentos $\overline{Nói - Nój}$, $\overline{Nói - Nók}$ e $\overline{Nói - Nól}$, respectivamente. Os pontos (e) e (f) correspondem com o baricentro dos triângulos *Nóijl* e *Nóikl,* respectivamente. O ponto (g) corresponde com o baricentro do tetraedro.

Os planos externos foram denominados S_1, S_2 e S_3. O plano S_1 é delimitado pelos pontos (Nói,a,b,c), o plano S_2 pelos pontos (Nói,c,d,f) e o plano S_3 pelos pontos (Nói,a,d,e), como mostrado na Figura C2.

Nas Figuras C1 e C2 são também mostradas as componentes dos vetores normais para cada plano.

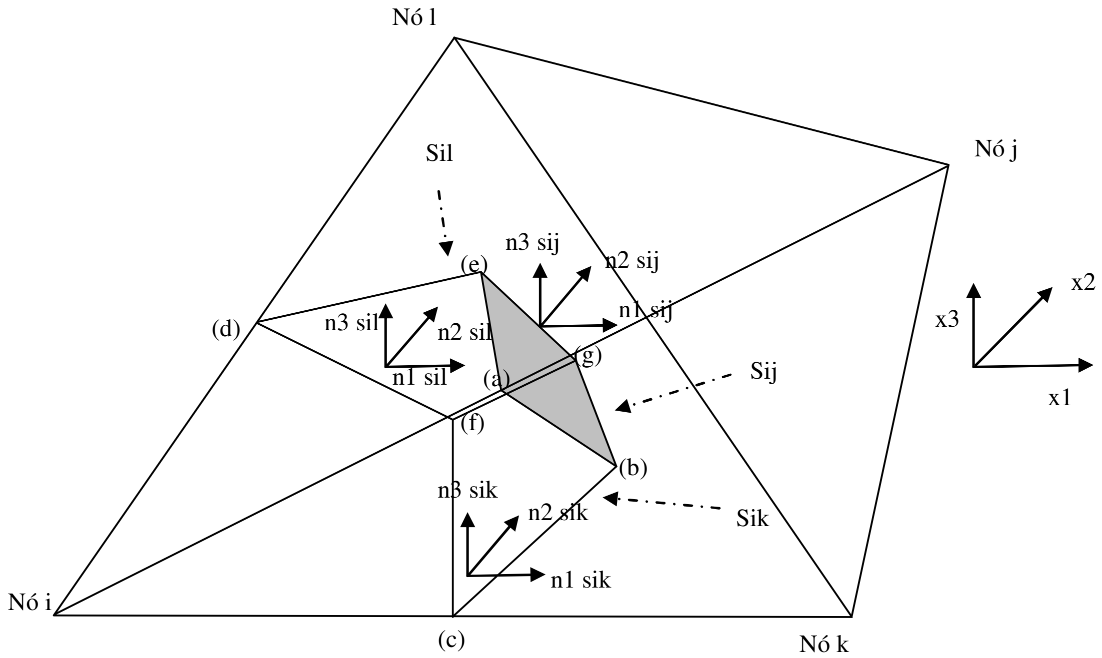

Figura C1. Subvolume de controle para o nó i, planos internos.

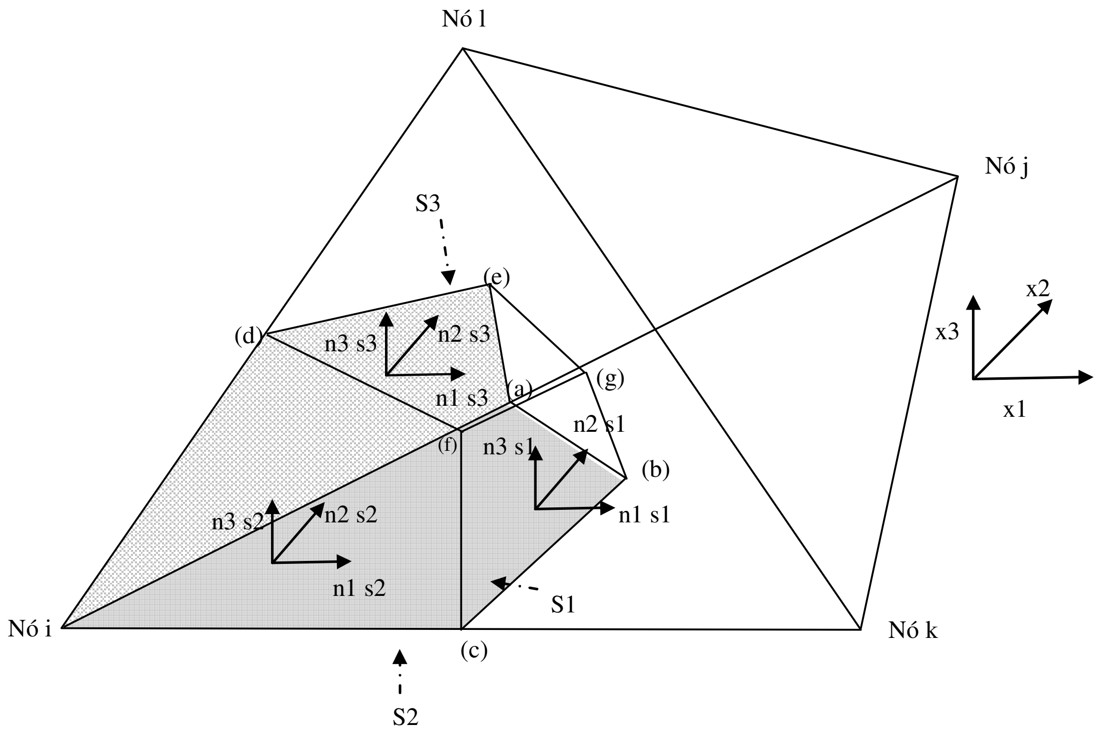

Figura C2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.

C.2.
Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação C1 no subvolume do nó i das Figuras C1 e C2.

A integração ponderada da Equação C1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_V W_1 \left[\frac{\partial}{\partial x_i}(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q - (\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t}) \right] dV = 0 \qquad \text{(C2)}$$

W_1 é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então,

$$\int_V \left[\frac{\partial}{\partial x_i}(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial(\psi + z)}{\partial x_j}) \pm Q - (\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t}) \right] dV = 0 \qquad \text{(C3)}$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura C1, a integral anterior é transformada para,

$$\begin{aligned}
&\int_V \left[\pm Q - (\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t}) \right] dV + \\
&\int_{Sij} \left[(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}(\psi + z))n_{isij}ds_{ij} + \right. \\
&\int_{Sik} \left[(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}(\psi + z))n_{isik}ds_{ik} + \right. \\
&\int_{Sil} \left[(k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}(\psi + z))n_{isil}ds_{il} = 0 \right.
\end{aligned} \qquad \text{(C4)}$$

Considerando que a carga total pode ser definida em qualquer ponto dentro do elemento a partir de interpolação linear dos valores nodais, obtém-se a seguinte expressão:

$$h_t = \psi + z \approx N_m(\psi_m^{'} + z_m) \qquad \text{(C5)}$$

Onde $(\psi_m^{'} + z_m)$ representam os valores das cargas de pressão e de elevação nos pontos nodais, e a variável $N_{m,}$ o valor da função de interpolação. Empregando C5, a equação C4 é transformada para

$$\int_V [\ \pm Q - (\frac{\partial \theta}{\partial t} + S_w S_s \frac{\partial \psi}{\partial t})\ ]dV +$$
$$\int_{Sij} [\ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_m + z_m)) n_{isij} ds_{ij} +$$
$$\int_{Sik} [\ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_m + z_m)) n_{isik} ds_{ik} + \qquad \text{(C6)}$$
$$\int_{Sil} [\ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_m + z_m)) n_{isil} ds_{il} = 0$$

Integrando C6 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os planos internos do subvolume de controle do nó i.

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} + F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} - A \psi'_m = Q_m + A z_m \qquad \text{(C7)}$$

(<u>Observação:</u> a partir deste ponto os índices i,j,k, são associados aos nós i,j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de C7 são detalhadas a seguir.

$$F_1 = \int_V dV = \frac{V_E}{4} \qquad \text{(C8)}$$

$$F_2 = \int_V [\ (S_w S_s)\ ]dV = (S_{wi}\ S_s) \frac{V_E}{4} \qquad \text{(C9)}$$

onde i indica nó i, V_E volume do elemento, S_w saturação e S_s armazenamento específico.

$$Q_m = \int_V [\ \pm Q\ ]dV = [\ \pm Q\ ] \frac{V_E}{4} \qquad \text{(C10)}$$

$$A = \iint_{Sij} [\ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isij} ds_{ij} + \iint_{Sik} [\ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isik} ds_{ik} + \iint_{Sil} [\ (k_{rw} k_{ij} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{isil} ds_{il} =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_i + K12_{S_n} c_i + K13_{S_n} d_i\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_i + K22_{S_n} c_i + K23_{S_n} d_i\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_i + K32_{S_n} c_i + K33_{S_n} d_i\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_j + K12_{S_n} c_j + K13_{S_n} d_j\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_j + K22_{S_n} c_j + K23_{S_n} d_j\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_j + K32_{S_n} c_j + K33_{S_n} d_j\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_k + K12_{S_n} c_k + K13_{S_n} d_k\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_k + K22_{S_n} c_k + K23_{S_n} d_k\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_k + K32_{S_n} c_k + K33_{S_n} d_k\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_l + K12_{S_n} c_l + K13_{S_n} d_l\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_l + K22_{S_n} c_l + K23_{S_n} d_l\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_l + K32_{S_n} c_l + K33_{S_n} d_l\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \tag{C11}$$

$$\psi'_m = \left[\psi'_i \quad \psi'_j \quad \psi'_k \quad \psi'_l\right] \tag{C12}$$

$$z_m = \left\lfloor z_i \quad z_j \quad z_k \quad z_l \right\rfloor \tag{C13}$$

Os valores S_n em C11 representam as áreas dos planos internos. O subíndice n assume valores n =1 no plano ij, n = 2 no plano ik, e n = 3 no plano il. O símbolo s_n, quando usado como subíndice em C11, refere-se aos valores relativos ao plano S_n correspondente.

As constantes b_i, b_j, b_k, b_l, c_i, c_j,, c_k, c_l, d_i, d_j,, d_k, e d_l em C11, correspondem às derivadas das funções de interpolação de cada nó em relação ao sistema de coordenadas. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$b_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

$$b_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

$$b_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

$$b_l = \frac{\partial N_l}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_l = \frac{\partial N_l}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_l = \frac{\partial N_l}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

(C14)

Os valores x_{1i}, x_{1j}, x_{1k}, x_{1l}, x_{2i}, x_{2j}, x_{2k}, x_{2l}, x_{3i}, x_{3j}, x_{3k} e x_{3l} em C14, representam as coordenadas dos pontos nodais, no sistema de coordenadas.

Os símbolos $K11_{S_n}$, $K12_{S_n}$, $K13_{S_n}, K21_{S_n}$, $K22_{S_n}$, $K23_{S_n}$, $K31_{S_n}$, $K32_{S_n}$, $K33_{S_n}$, em C11, representam os valores da condutividade hidráulica nos planos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação nodal em cada plano, como colocado na Equação C15.

$$kmn_{S_n} = \int_{S_n} \left(kmn_i N_i + kmn_j N_j + kmn_k N_k + kmn_l N_l \right) ds_n \qquad \text{(C15)}$$

Onde *m* e *n* assumen valores 1, 2 e 3 para representar as componentes do tensor de permeabilidade. A integração resultante para cada plano é:

$$kmn_{Sij} = \frac{13}{36}(kmn_i + kmn_j) + \frac{5}{36}(kmn_k + kmn_l) \qquad \text{(C16)}$$

$$kmn_{Sik} = \frac{13}{36}(kmn_i + kmn_k) + \frac{5}{36}(kmn_j + kmn_l) \qquad \text{(C17)}$$

$$kmn_{Sil} = \frac{13}{36}(kmn_i + kmn_l) + \frac{5}{36}(kmn_k + kmn_j) \qquad \text{(C18)}$$

As permeabilidades kmn_i, kmn_j, kmn_k e kmn_l representam os valores para cada nó. Esses valores são obtidos da seguinte forma.

$$kmn_{nó} = ksat_{nó} krw_{nó} kmnTensor \quad (C20)$$

O valor $kmnTensor$ corresponde ao valor da componente do tensor de anisotropia, e incorpora o efeito da transformação das coordenadas. O tensor de anisotropia no caso 3D é obtido da seguinte forma:

$$k11Tensor = K_1 a_{11} a_{11} + K_2 a_{12} a_{12} + K_3 a_{13} a_{13} \quad (C21)$$

$$k22Tensor = K_1 a_{12} a_{12} + K_2 a_{22} a_{22} + K_3 a_{23} a_{23} \quad (C22)$$

$$k33Tensor = K_1 a_{13} a_{13} + K_2 a_{23} a_{23} + K_3 a_{33} a_{33} \quad (C23)$$

$$k12Tensor = K_1 a_{11} a_{12} + K_2 a_{12} a_{22} + K_3 a_{13} a_{23} \quad (C24)$$

$$k13Tensor = K_1 a_{11} a_{13} + K_2 a_{12} a_{23} + K_3 a_{13} a_{33} \quad (C25)$$

$$k23Tensor = K_1 a_{12} a_{13} + K_2 a_{22} a_{23} + K_3 a_{23} a_{33} \quad (C26)$$

$$k21Tensor = k12Tensor \quad (C27)$$

$$k31Tensor = k13Tensor \quad (C28)$$

$$k32Tensor = k23Tensor \quad (C29)$$

Os valores a_{pq} indicam o cosseno do ângulo entre a direção principal do tensor de anisotropia (p) e o sistema global de coordenadas (q). Os valores K_1 , K_2 e K_3 são as componentes do tensor principal de anisotropia.

Os valores $Ksat_{nó}$ e $Krw_{nó}$ correspondem às permeabilidades saturada e relativa, respectivamente. Eles são avaliados para cada subvolume de controle.

C.3. Efeito do Contorno

Quando os planos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos dos fluxos nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. Na Figura C2 são mostrados os planos externos que podem coincidir com o contorno do domínio do problema. Os efeitos dos fluxos nesses planos são incorporados na Equação C7.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação C7 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação C30.

$$q_c = Q_{s1}S_1 + Q_{s2}S_2 + Q_{s3}S_3 \tag{C30}$$

onde Q_{s1}, Q_{s2}, e Q_{s3} representam as vazões por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e S_1 , S_2 e S_3 as áreas dos planos do contorno. A Equação C30 corresponde à condição de contorno do tipo Neuman.

- se o fluxo não for conhecido é o contorno corresponder com uma face de fluxo livre, então essa parcela do fluxo deverá ser acrescentada na Equação C7. Os planos no contorno são integrados da seguinte forma.

$$\begin{aligned}
&\int_{S1}[\ (k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m(\psi_m^{'} + z_m))n_{is1}ds_1 + \\
&\int_{S2}[\ (k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m(\psi_m^{'} + z_m))n_{is2}ds_2 + \\
&\int_{S3}[\ (k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m(\psi_m^{'} + z_m))n_{is3}ds_3 = 0
\end{aligned} \tag{C31}$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não aos nós).

Assim a integral resultante é,

$$A_c(\psi_m^{'} + z_m) \tag{C32}$$

onde:

$$A_c = \int_{S1}[\ (k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m)n_{is1}ds_1 + \int_{S2}[\ (k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m)n_{is2}ds_2 + \int_{S3}[\ (k_{rw}k_{ij}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m)n_{is3}ds_3 =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_i + K12_{S_n} c_i + K13_{S_n} d_i\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_i + K22_{S_n} c_i + K23_{S_n} d_i\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_i + K32_{S_n} c_i + K33_{S_n} d_i\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_j + K12_{S_n} c_j + K13_{S_n} d_j\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_j + K22_{S_n} c_j + K23_{S_n} d_j\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_j + K32_{S_n} c_j + K33_{S_n} d_j\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_k + K12_{S_n} c_k + K13_{S_n} d_k\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_k + K22_{S_n} c_k + K23_{S_n} d_k\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_k + K32_{S_n} c_k + K33_{S_n} d_k\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(K11_{S_n} b_l + K12_{S_n} c_l + K13_{S_n} d_l\right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_l + K22_{S_n} c_l + K23_{S_n} d_l\right) n_{2S_n} + \\ \left(K31_{S_n} b_l + K32_{S_n} c_l + K33_{S_n} d_l\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

(C33)

Os valores S_n em C33 representam as áreas dos planos externos. O subíndice n assume valores 1, 2 e 3. O símbolo s_n, quando usado como subíndice em C33, refere-se aos valores relativos ao plano S_n correspondente.

Os valores da permeabilidade nos planos externos são obtidos por integração, de maneira similar ao tratamento dos planos internos. Os valores resultantes são mostrados a seguir.

$$kmn_{S1} = \frac{11}{18}(kmn_i) + \frac{7}{36}(kmn_j + kmn_k) \quad \text{(C34)}$$

$$kmn_{S2} = \frac{11}{18}(kmn_i) + \frac{7}{36}(kmn_l + kmn_k) \quad \text{(C35)}$$

$$kmn_{S3} = \frac{11}{18}(kmn_i) + \frac{7}{36}(kmn_j + kmn_l) \quad \text{(C36)}$$

A Equação C32 e C33 corresponde à condição de contorno do tipo superfície livre.

C.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle do nó i é:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} + F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} - (A + A_c)\psi_m^{'} = Q_m + q_c + (A + A_c) z_m \tag{C37}$$

A matriz A_c só precisará ser avaliada quando algum plano externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

C.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em C37 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo.

A integração do termo contendo o teor de umidade volumétrico na Equação C37 é feita através do método de Célia et al (1990). Esse termo pode ser escrito da seguinte forma:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = F_1 \frac{(\theta_{t+1} - \theta_t)}{\Delta t} = F_1 C \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_{t+1}^{k})}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} \tag{C38}$$

onde t+1 e t indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo) respectivamente, e k+1 e k, iterações atual e prévia no método iterativo de Picard (Modificado), e C é a capacidade específica do solo.

O termo contendo o armazenamento específico na Equação C37 é discretizado da seguinte forma.

$$F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} = F_2 \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_t)}{\Delta t} \tag{C39}$$

Somando C38 e C39 obtém-se

$$(F_1 C + F_2) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - F_1 C \frac{\psi_{t+1}^{k}}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} - F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t} \tag{C40}$$

Incorporando C40 em C37 e simplificando termos, obtém-se então a equação discretizada final para o subvolume de controle do nó i.

$$
\begin{aligned}
&(F_1 C + F_2)\frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c)\psi_m^{'} = \\
&Q_m + q_c + (A + A_c) z_m + F_1 C \frac{\psi_{t+1}^{k}}{\Delta t} - F_1 \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} + F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t}
\end{aligned}
\tag{C41}
$$

Na Equação C41, os valores C, $\psi_{t+1}^{k+1}, \psi_{t+1}^{k}, \psi_t, \theta_{t+1}^{k}, \theta_t$ são grandezas relativas ao nó i, isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó i, é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$
\begin{aligned}
&\sum_{e=1}^{NE}\left[\ (F_{1e} C + F_{2e})\frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c)_e \psi_{me}^{'}\ \right] = \\
&\sum_{e=1}^{NE}\left[\ Q_{me} + q_{ce} + (A + A_c)_e z_{me} + F_{1e} C \frac{\psi_{t+1}^{k}}{\Delta t} - F_{1e} \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} + F_{2e} \frac{\psi_t}{\Delta t}\ \right]
\end{aligned}
\tag{C42}
$$

Os vetores $\psi_{me}^{'}$, z_{me} contêm os valores nodais das cargas de pressão e elevação, respectivamente, do nó i e de todos aqueles nós em conectividade com ele.

A Equação C42 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

APÊNDICE D:
Solução Numérica – Equação de Fluxo na Fratura

A equação que descreve o fluxo de água na fratura foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice D é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é

$$\frac{\partial}{\partial x_i}(2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f = 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf}S_{sf}\frac{\partial\psi_f}{\partial t}) \qquad \text{(D1)}$$

O índice *f* refere-se à fratura, e os contadores i, j assumem valores 1 e 2 e indicam as direções x_1 e x_2.

D.1.
Construção do Volume de Controle

Cada fratura foi modelada geometricamente como um plano no espaço tridimensional de coordenadas. Esses planos foram discretizados nesta tese a partir de elementos triangulares. Os nós destes elementos constituem pontos no espaço com coordenadas x,y e z. Para resolver a Equação D1 no plano da fratura (isto é, num sistema bidimensional), foi feita uma transformação de coordenadas do espaço tridimensional para o espaço do plano da fratura. Para realizar esta transformação foram definidos es eixos x1 e x2 do plano. Esses eixos foram definidos da seguinte maneira: o eixo x1 se fez coincidir com o rumo da fratura e foi sempre mantido no plano xy do espaço tridimensional de coordenadas, e o eixo x2 foi obtido através do produto vetorial entre o vetor normal ao plano e o eixo x1.

Os volumes de controle para cada nó foram construídos a partir dos elementos triangulares no sistema bidimensional. Na Figura D1 é mostrado um plano discretizado em quatro elementos triangulares e seis nós (apenas mostrados os nós i, j, k e 2). Nessa mesma figura é mostrada uma área sombreada que representa o volume de controle do nó i. Esse volume de controle está formado pela união das parcelas sombreadas em cada elemento, cada uma dessas parcelas é um subvolume de controle. No caso da Figura D1, são quatro as parcelas que conformam o volume de controle do nó i. O contorno de cada subvolume é definido por segmentos internos localizados dentro do elemento e por segmentos externos localizados no contorno do elemento. O subvolume no elemento E1 está delimitado pelos segmentos internos S1 e S2 e pelos segmentos externos Sb1 e Sb2. Para todos os elementos restantes existem os segmentos internos e externos correspondentes, no entanto são mostrados apenas os segmentos correspondentes ao elemento E1.

Os segmentos internos S1 e S2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos $\overline{Nói - Nój}$, $\overline{Nói - Nók}$ é o baricentro do triângulo, respectivamente. Os segmentos externos Sb1 e Sb2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos $\overline{Nói - Nój}$, $\overline{Nói - Nók}$ é o Nó i. Este mesmo procedimento foi empregado para construir os subvolumes de controle nos elementos restantes.

Na Figura D1 são também mostradas as componentes (no sistema bidimensional) dos vetores normais atuando (para fora) nos segmentos S1 e S2.

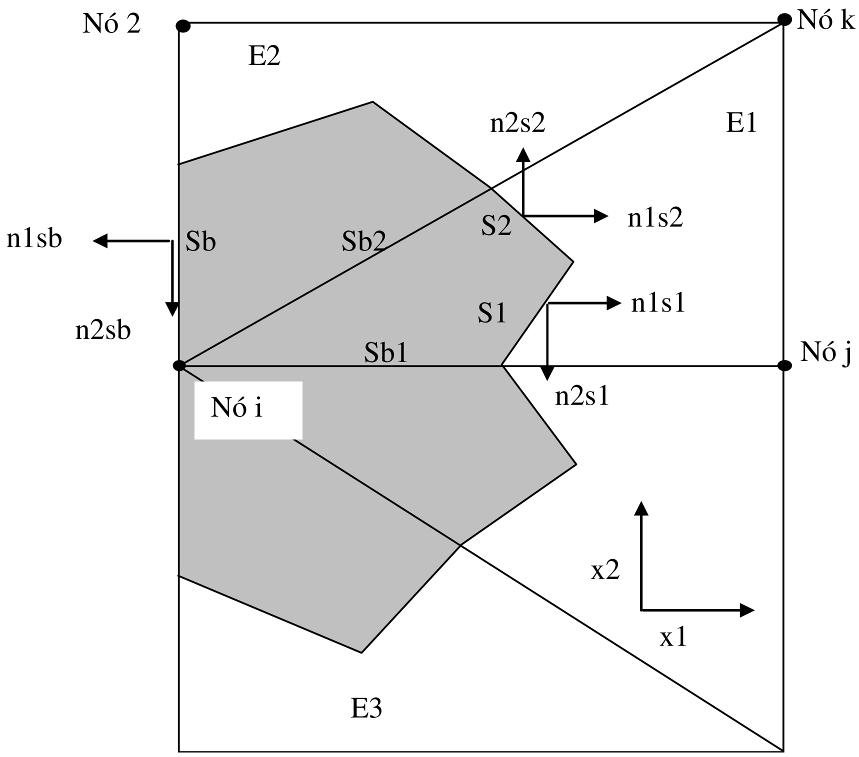

Figura D1. Volume de controle para o nó i.

D.2. Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação D1 no subvolume E1 do nó i da Figura D1.

A integração ponderada da Equação D1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_A W_1 [\ \frac{\partial}{\partial x_i}(2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f \\ - 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf}S_{sf}\frac{\partial\psi_f}{\partial t})\ ]dA = 0 \tag{D2}$$

W_1 é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então,

$$\int_A [\ \frac{\partial}{\partial x_i}(2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f \\ - 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf}S_{sf}\frac{\partial\psi_f}{\partial t})\ ]dA = 0 \tag{D3}$$

Substituindo A pela área do subvolume no elemento E1, a integral D3 resulta em:

$$\int_{AE1} [\ \frac{\partial}{\partial x_i}(2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial(\psi_f + z_f)}{\partial x_j}) + q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f \\ - 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf}S_{sf}\frac{\partial\psi_f}{\partial t})\ ]dA_{E1} = 0 \tag{D4}$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura D1, a integral anterior é transformada para:

$$\int_{AE1} [\ q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f - 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf}S_{sf}\frac{\partial\psi_f}{\partial t})\ ]dA_{E1} \\ + \int_{S1} [\ (2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial}{\partial x_j}(\psi_f + z_f))n_{is1}ds_1 \\ + \int_{S2} [\ (2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial}{\partial x_j}(\psi_f + z_f))n_{is2}ds_2 = 0 \tag{D5}$$

Em D5, os símbolos n_{is1} e n_{is2} representam as componentes dos vetores normais nas direções i = x1 e i = x2.

Considerando que a carga total pode ser definida em qualquer ponto dentro do elemento a partir de interpolação linear dos valores nodais, obtém-se a seguinte expressão:

$$h_t = \psi_f + z_f \approx N_m(\psi'_{fm} + z_{fm}) \tag{D6}$$

Onde $(\psi'_m + z_m)$ representam os valores das cargas de pressão e de elevação nos pontos nodais, e a variável N_m, o valor da função de interpolação. Empregando D6, a equação D5 é transformada para

$$\begin{aligned}&\int_{AE1}[\ q_{n/I+} - q_{n/I-} \pm 2bQ_f - 2b(\frac{\partial\theta}{\partial t} + S_{wf}S_{sf}\frac{\partial\psi_f}{\partial t})\ ]dA_{E1}\\ &+\int_{S1}[\ (2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m(\psi'_{fm} + z_{fm}))n_{is1}ds_1\\ &+\int_{S2}[\ (2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m(\psi'_{fm} + z_{fm}))n_{is2}ds_2 = 0\end{aligned} \tag{D7}$$

Integrando D7 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os segmentos internos do subvolume de controle.

$$F_1\frac{\partial\theta}{\partial t} + F_2\frac{\partial\psi}{\partial t} - A\psi'_{fm} = q + Q + Az_{fm} \tag{D8}$$

(Observação: a partir deste ponto os índices i,j,k, são associados aos nós i,j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de D8 são detalhadas a seguir

$$F_1 = \int_{AE1}[\ 2b\ ]dA_{E1} = 2b\frac{A_{E1}}{3} \tag{D9}$$

$$F_2 = \int_{AE1}[\ 2b(S_{wf}S_{sf})\ ]dA_{E1} = 2b(S_{wfi}\ S_{sf})\frac{A_{E1}}{3} \tag{D10}$$

onde i indica nó i, S_{wf} saturação e S_{sf} armazenamento específico

$$q = \int_{AE1}[\ q_{n/I+} - q_{n/I-}\ ]dA_{E1} = [\ q_{n/I+} - q_{n/I-}\ ]\frac{A_{E1}}{3} \tag{D11}$$

$$Q = \int_{AE1}[\ \pm 2bQ_f\ ]dA_{E1} = [\ \pm 2bQ_f\ ]\frac{A_{E1}}{3} \tag{D12}$$

$$A = \int_{S1} [\ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [\ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m) n_{is2} ds_2 =$$
$$= 2b \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{2} S_n \left[\left(K11_{S_n} b_i + K12_{S_n} c_i \right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_i + K22_{S_n} c_i \right) n_{2S_n} \right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_n \left[\left(K11_{S_n} b_j + K12_{S_n} c_j \right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_j + K22_{S_n} c_j \right) n_{2S_n} \right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_n \left[\left(K11_{S_n} b_k + K12_{S_n} c_k \right) n_{1S_n} + \left(K21_{S_n} b_k + K22_{S_n} c_k \right) n_{2S_n} \right] \end{bmatrix} \tag{D13}$$

$$\psi'_{fm} = \left[\psi'_i \quad \psi'_j \quad \psi'_k \right] \tag{D14}$$

$$z_{fm} = \left[z_i \quad z_j \quad z_k \right] \tag{D15}$$

Os valores S_n em D13 representam os comprimentos dos segmentos internos. O subíndice n assume valores n =1 no segmento S1, e n = 2 no segmento S2. O símbolo s_n, quando usado como subíndice em D13, refere-se aos valores relativos ao plano S_n correspondente.

As constantes b_i, b_j, b_k, c_i, c_j, e c_k em D13, correspondem às derivadas das funções de interpolação de cada nó em relação ao sistema de coordenadas x1-x2. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\begin{aligned} b_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{x_{2j} - x_{2k}}{2A_{E1}} \qquad & c_i &= \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{x_{1k} - x_{1j}}{2A_{E1}} \\ b_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{x_{2k} - x_{2i}}{2A_{E1}} \qquad & c_j &= \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1k}}{2A_{E1}} \\ b_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{x_{2i} - x_{2j}}{2A_{E1}} \qquad & c_k &= \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1i}}{2A_{E1}} \end{aligned} \tag{D16}$$

Os valores x_{1i}, x_{1j}, x_{1k}, x_{2i}, x_{2j}, x_{2k} em D16, representam as coordenadas dos pontos nodais no sistema de coordenadas do plano da fratura (bidimensional).

Os símbolos $K11_{S_n}$, $K12_{S_n}$, $K21_{S_n}$, $K22_{S_n}$ em D13, representam os valores da condutividade hidráulica nos planos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação nodal em cada segmento, como colocado na Equação D17.

$$kmn_{S_n} = \int_{S_n} \left(kmn_i N_i + kmn_j N_j + kmn_k N_k \right) ds_n \qquad \text{(D17)}$$

Onde *m* e *n* assumem valores 1 e 2 para representar as componentes do tensor de permeabilidade. A integração resultante para cada segmento é:

$$kmn_{S1} = \frac{5}{12}(kmn_i + kmn_j) + \frac{1}{6}kmn_k \qquad \text{(D18)}$$

$$kmn_{S2} = \frac{5}{12}(kmn_i + kmn_k) + \frac{1}{6}kmn_j \qquad \text{(D19)}$$

As permeabilidades kmn_i, kmn_j e kmn_k representam os valores para cada nó. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$kmn_{nó} = ksat_{nó} krwf_{nó} kmnTensor \qquad \text{(D20)}$$

O valor $kmnTensor$ corresponde ao valor da componente do tensor de anisotropia, e incorpora o efeito da transformação das coordenadas. O tensor de anisotropia no caso 2D é obtido da seguinte forma:

$$k11Tensor = K_1 \cos^2 \omega + K_2 sen^2 \omega \qquad \text{(D21)}$$

$$k22Tensor = K_1 sen^2 \omega + K_2 \cos^2 \omega \qquad \text{(D22)}$$

$$k12Tensor = (K_2 - K_1) \cos \omega \;\; sen \;\omega \qquad \text{(D23)}$$

$$k21Tensor = k12Tensor \qquad \text{(D24)}$$

O símbolo ω indica o ângulo entre a direção principal do tensor de anisotropia e o sistema de coordenadas bidimensional. Os valores K_1 e K_2 são as componentes do tensor principal de anisotropia.

Os valores $Ksat_{nó}$ e $Krwf_{nó}$ correspondem às permeabilidades saturada e relativa, respectivamente, e são avaliados para cada subvolume de controle.

D.3.
Efeito do Contorno

Quando os segmentos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos de fluxos nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. No caso da Figura D1, isto acontece para os subvolumes nos elementos E2 e E3. Nesta figura são mostradas as componentes do vetor normal (para fora) atuando no segmento externo (Sb) do Elemento E2. O segmento Sb é o segmento Sb2 correspondente do elemento E2. Os efeitos dos fluxos nesses contornos são incorporados na Equação D8.

Para manter a generalidade da formulação, são discretizados os segmentos Sb1 e Sb2 considerando que ambos coincidem com o contorno.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação D8 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação D25.

$$q_c = (Qc_1 S_{b1} + Qc_2 S_{b2})2b \qquad \text{(D25)}$$

onde Q_{c1} *e* Q_{c2} representam as vazões por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e S_{b1}, S_{b2} e 2b os comprimentos dos segmento mencionados e a abertura da fratura, respectivamente. A Equação D25 corresponde com a condição de contorno do tipo Neuman

- se o fluxo não for conhecido é o contorno corresponder com uma face de fluxo livre, então essa parcela de fluxo deverá ser acrescentada na Equação D8. Os segmentos no contorno são integrados da seguinte forma:

$$\begin{aligned} &\int_{Sb1} [\ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_{fm} + z_{fm})) n_{isb1} ds_{b1} \\ &+ \int_{Sb2} [\ (2bk_{rwf} k_{ijf} \frac{\partial}{\partial x_j} N_m (\psi'_{fm} + z_{fm})) n_{isb2} ds_{b2} \end{aligned} \qquad \text{(D26)}$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não os nós).

A integral resultante é:

$$A_c (\psi'_{fm} + z_{fm}) \qquad \text{(D27)}$$

onde:

$$A_c = \int_{Sb1}[\ (2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m)n_{isb1}ds_{b1} + \int_{Sb2}[\ (2bk_{rwf}k_{ijf}\frac{\partial}{\partial x_j}N_m)n_{isb2}ds_{b2} =$$

$$= 2b\begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{2} S_{bn}\left[\left(K11_{Sb_n}b_i + K12_{Sb_n}c_i\right)n_{1Sb_n} + \left(K21_{Sb_n}b_i + K22_{Sb_n}c_i\right)n_{2Sb_n}\right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_{bn}\left[\left(K11_{Sb_n}b_j + K12_{Sb_n}c_j\right)n_{1Sb_n} + \left(K21_{Sb_n}b_j + K22_{Sb_n}c_j\right)n_{2Sb_n}\right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_{bn}\left[\left(K11_{Sb_n}b_k + K12_{Sb_n}c_k\right)n_{1Sb_n} + \left(K21_{Sb_n}b_k + K22_{Sb_n}c_k\right)n_{2Sb_n}\right] \end{bmatrix}$$

(D28)

Os valores S_{bn} em D28 representam os comprimentos dos segmentos externos. O subíndice n assume valores 1 em Sb1 e 2 em Sb2. O símbolo s_{bn}, quando usado como subíndice em D28, refere-se aos valores relativos ao plano S_{bn} correspondente.

Os valores da permeabilidade nos segmentos externos são obtidos por integração, de maneira similar ao tratamento dos segmentos internos. Os valores resultantes são mostrados a seguir.

$$kmn_{Sb1} = \frac{3}{4}(kmn_i) + \frac{1}{4}kmn_j \qquad \text{(D29)}$$

$$kmn_{Sb2} = \frac{3}{4}(kmn_i) + \frac{1}{4}kmn_k \qquad \text{(D30)}$$

As Equações D27 e D28 correspondem à condição de contorno do tipo superfície livre.

D.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle (E1) do nó i é:

$$F_1\frac{\partial\theta}{\partial t} + F_2\frac{\partial\psi}{\partial t} - (A + A_c)\psi'_{fm} = q + Q + q_c + (A + A_c)z_{fm} \qquad \text{(D31)}$$

A matriz A_c só precisará ser avaliada quando algum segmento externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

D.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em D31 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo.

A integração do termo contendo o teor de umidade volumétrico na Equação D31 é feita através do método de Célia et al (1990). Esse termo pode ser escrito na seguinte forma:

$$F_1 \frac{\partial \theta}{\partial t} = F_1 \frac{(\theta_{t+1} - \theta_t)}{\Delta t} = F_1 C \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_{t+1}^{k})}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} \tag{D32}$$

onde t+1 e t indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e inicio do passo de tempo), respectivamente, e k+1 e k iterações atual e prévia no método iterativo de Picard (Modificado), e C é a capacidade específica da fratura.

O termo contendo o armazenamento específico na Equação D31 é discretizado na seguinte forma.

$$F_2 \frac{\partial \psi}{\partial t} = F_2 \frac{(\psi_{t+1}^{k+1} - \psi_t)}{\Delta t} \tag{D33}$$

Somando D32 e D33 obtém-se:

$$(F_1 C + F_2) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - F_1 C \frac{\psi_{t+1}^{k}}{\Delta t} + F_1 \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} - F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t} \tag{D34}$$

Incorporando D34 em D31 e simplificando termos, obtém-se então a equação discretizada final para o subvolume de controle do nó i.

$$\begin{aligned} &(F_1 C + F_2) \frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t} - (A + A_c)\psi'_{fm} = \\ &q + Q + q_c + (A + A_c) z_{fm} + F_1 C \frac{\psi_{t+1}^{k}}{\Delta t} - F_1 \frac{(\theta_{t+1}^{k} - \theta_t)}{\Delta t} + F_2 \frac{\psi_t}{\Delta t} \end{aligned} \tag{D35}$$

Na Equação D35, os valores C, ψ_{t+1}^{k+1}, ψ_{t+1}^{k}, ψ_t, θ_{t+1}^{k} e θ_t são grandezas relativas ao nó i, isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó i, é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\sum_{e=1}^{NE}[\ (F_{1e}C+F_{2e})\frac{\psi_{t+1}^{k+1}}{\Delta t}-(A+A_c)_e\psi'_{fme}\ ]=$$
$$\sum_{e=1}^{NE}[\ q_e+Q_e+q_{ce}+(A+A_c)_e z_{fme}+F_{1e}C\frac{\psi_{t+1}^{k}}{\Delta t}-F_{1e}\frac{(\theta_{t+1}^{k}-\theta_t)}{\Delta t}+F_{2e}\frac{\psi_t}{\Delta t}\ ] \tag{D36}$$

Os vetores ψ'_{fme} , z_{fme} contêm os valores nodais das cargas de pressão e elevação, respectivamente, do nó i e de todos aqueles nós em conectividade com ele.

A Equação D36 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

APÊNDICE E:
Solução Numérica – Equação de Transporte na Matriz

A equação que descreve o transporte de vírus na matriz foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice E é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é:

$$
\begin{aligned}
&[\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}]dxdydzdt = \\
&[\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j}-q_i C)-Q_\mu]dxdydzdt
\end{aligned}
\tag{E1}
$$

onde:

$$Q_\mu = (\theta C\mu_l + \rho_b S_{eq}\mu_{eq} + \rho_b S_{din}\mu_{din} + \rho_b S_{str}\mu_{str} + A_{aw}\Gamma\mu_{aw}) \tag{E2}$$

Os índices i, j variam de 1 a 3, e indicam as direções x_1, x_2 e x_3 do sistema de coordenadas.

E.1.
Construção do Volume de Controle

Para a discretização espacial do domínio das matrizes porosas foram empregados elementos tetraédricos. A construção dos volumes de controle foi feita a partir da geometria dos tetraedros. Nas Figuras E1 e E2 é apresentado o contorno do subvolume de controle para o nó i. O contorno é definido por planos internos localizados dentro do elemento e por planos externos localizados na superfície do elemento.

Os planos internos foram denominados S_{ij}, S_{ik} e S_{il}. O plano S_{ij} é delimitado pelos pontos (a,b,e,g), o plano S_{ik} pelos pontos (b,c,f,g) e o plano S_{il} pelos pontos (d,e,f,g), como mostrado na Figura E1.

Os pontos (a), (c), e (d) correspondem com o centro dos segmentos $\overline{Nói - Nój}$, $\overline{Nói - Nók}$ e $\overline{Nói - Nól}$, respectivamente. Os pontos (e) e (f) correspondem com o baricentro dos triângulos *Nóijl* e *Nóikl,* respectivamente. O ponto (g) corresponde com o baricentro do tetraedro.

Os planos externos foram denominados S_1, S_2 e S_3. O plano S_1 é delimitado pelos pontos (Nói,a,b,c), o plano S_2 pelos pontos (Nói,c,d,f) e o plano S_3 pelos pontos (Nói,a,d,e), como mostrado na Figura E2.

Nas Figuras E1 e E2 são também mostradas as componentes dos vetores normais para cada plano.

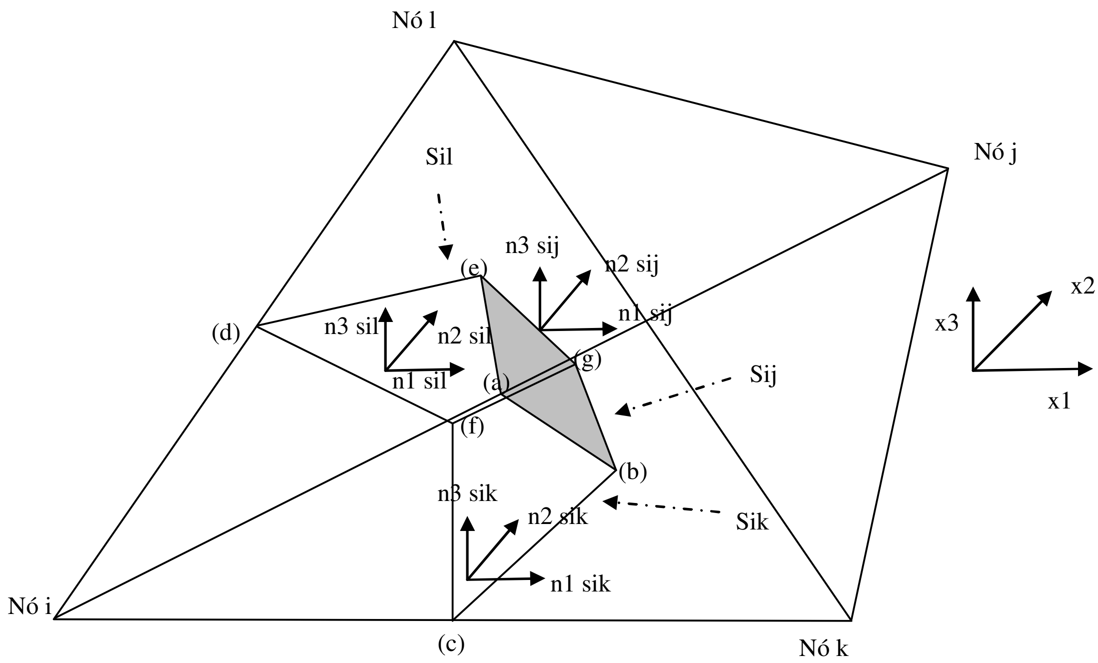

Figura E1. Subvolume de controle para o nó i, planos internos.

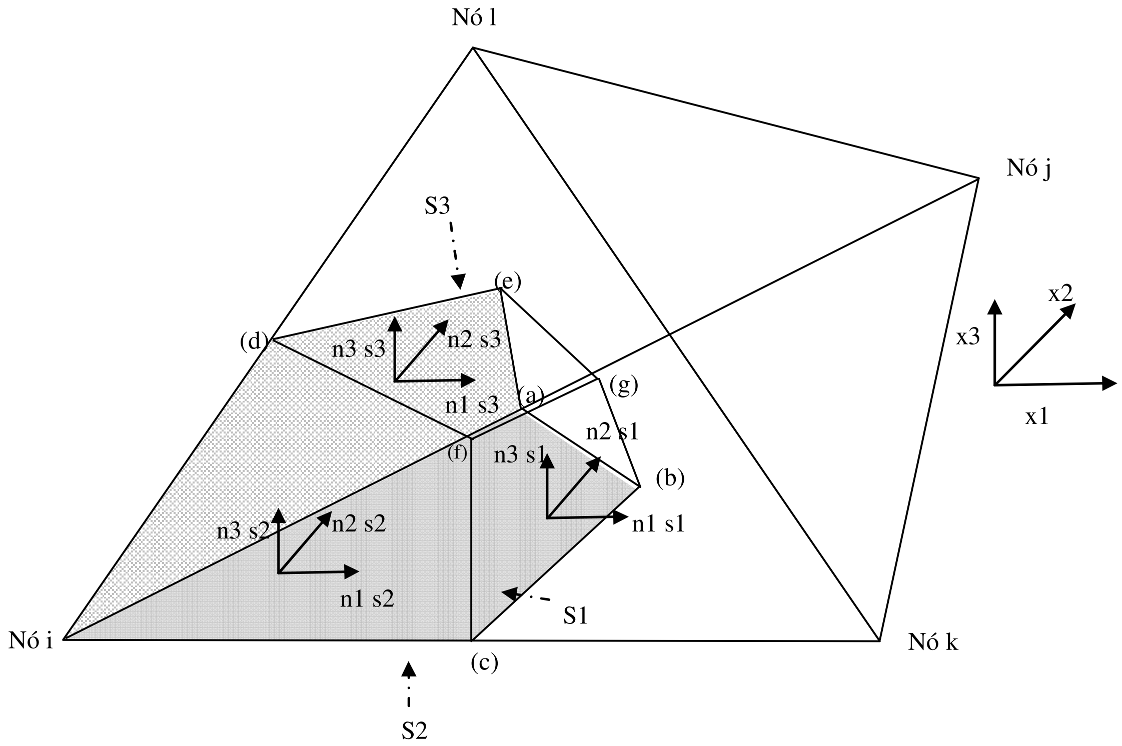

Figura E2. Subvolume de controle para o nó i, planos externos.

E.2.
Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação E1 no subvolume do nó i das Figuras E1 e E2.

A integração ponderada da Equação E1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_V W_1[\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}]dV = \int_V W_1[\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j}-q_i C)-Q_\mu]dV \quad \text{(E3)}$$

W_1 é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então,

$$\int_V [\frac{\partial(\theta C)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}]dV = \int_V [\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{ij}\frac{\partial C}{\partial x_j}-q_i C)-Q_\mu]dV \quad \text{(E4)}$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura E1, a integral anterior é transformada para,

$$\int_V [\frac{\partial(\theta C)}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{eq})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}]dV +$$

$$\int_V [Q_\mu]dV +$$

$$\int_{Sij} [-(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C)]n_{isij} ds_{ij} + \qquad \text{(E5)}$$

$$\int_{Sik} [-(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C)]n_{isik} ds_{ik} +$$

$$\int_{Sil} [-(\theta D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} - q_i C)]n_{isil} ds_{il} = 0$$

A concentração C da Equação E5 é substituída por uma combinação dos valores nodais. No caso dos termos dispersivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação linear do elemento. No caso dos termos advectivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação exponencial do elemento. Esta função de interpolação incorpora o efeito do sentido do fluxo. No Apêndice H é apresentada a descrição dessa função. Desta forma, as concentrações em E5 são:

Para os termos dispersivos:

$$C = C_d \approx N_{md}(C^{'}) \qquad \text{(E6)}$$

Para os termos advectivos:

$$C = C_a \approx N_{ma}(C^{'}) \qquad \text{(E7)}$$

Onde $(C^{'})$ representa os valores de concentração nos pontos nodais, a variável N_{md}, o valor da função de interpolação linear, e a variável N_{ma}, o valor da função de interpolação exponencial.

A concentração S_{eq} pode ser substituída por:

$$S_{eq} = K_d C \qquad \text{(E8)}$$

Empregando as Equações E6, E7 e E8, a Equação E5 é transformada para

$$
\begin{aligned}
&\int_V [\frac{\partial(\theta+\rho_b K_d)C}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}]dV + \\
&\int_V [Q_\mu]dV + \\
&\int_{Sij} [-\theta D_{ij}\frac{\partial(N_{md}C^{'})}{\partial x_j}]n_{isij}ds_{ij} + \int_{Sik} [-\theta D_{ij}\frac{\partial(N_{md}C^{'})}{\partial x_j}]n_{isik}ds_{ik} \\
&+\int_{Sil} [-\theta D_{ij}\frac{\partial(N_{md}C^{'})}{\partial x_j}]n_{isil}ds_{il} + \\
&\int_{Sij} [q_i(N_{ma}C^{'})]n_{isij}ds_{ij} + \int_{Sik} [q_i(N_{ma}C^{'})]n_{isik}ds_{ik} \\
&+\int_{Sil} [q_i(N_{ma}C^{'})]n_{isil}ds_{il} = 0
\end{aligned}
\tag{E9}
$$

Sendo :

$$Q_\mu = (\theta\mu_l + \rho_b K_d \mu_{eq})C + \rho_b S_{din}\mu_{din} + \rho_b S_{str}\mu_{str} + A_{aw}\Gamma\mu_{aw} \tag{E10}$$

Integrando E9 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os planos internos do subvolume de controle do nó i.

$$
\begin{aligned}
&F_1(\frac{\partial(\theta+\rho_b K_d)C}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} + \frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}) \\
&+(A_d + A_a)C^{'} + F_1 Q_\mu = 0
\end{aligned}
\tag{E11}
$$

(<u>Observação:</u> a partir deste ponto os índices i, j, k, são associados aos nós i, j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de E11 são detalhadas a seguir.

$$F_1 = \int_V dV = \frac{V_E}{4} \tag{E12}$$

Onde V_E indica o volume do elemento.

$$A_d = \int_{Sij} [-\theta D_{ij} \frac{\partial (N_{md})}{\partial x_j}] n_{isij} ds_{ij} + \int_{Sik} [-\theta D_{ij} \frac{\partial (N_{md})}{\partial x_j}] n_{isik} ds_{ik} + \int_{Sil} [-\theta D_{ij} \frac{\partial (N_{md})}{\partial x_j}] n_{isil} ds_{il} =$$

$$= - \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_i + \theta D12_{S_n} c_i + \theta D13_{S_n} d_i) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_i + \theta D22_{S_n} c_i + \theta D23_{S_n} d_i) n_{2S_n} \\ + (\theta D31_{S_n} b_i + \theta D32_{S_n} c_i + \theta D33_{S_n} d_i) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_j + \theta D12_{S_n} c_j + \theta D13_{S_n} d_j) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_j + \theta D22_{S_n} c_j + \theta D23_{S_n} d_j) n_{2S_n} \\ + (\theta D31_{S_n} b_j + \theta D32_{S_n} c_j + \theta D33_{S_n} d_j) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_k + \theta D12_{S_n} c_k + \theta D13_{S_n} d_k) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_k + \theta D22_{S_n} c_k + \theta D23_{S_n} d_k) n_{2S_n} \\ + (\theta D31_{S_n} b_k + \theta D32_{S_n} c_k + \theta D33_{S_n} d_k) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_l + \theta D12_{S_n} c_l + \theta D13_{S_n} d_l) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_l + \theta D22_{S_n} c_l + \theta D23_{S_n} d_l) n_{2S_n} \\ + (\theta D31_{S_n} b_l + \theta D32_{S_n} c_l + \theta D33_{S_n} d_l) n_{3S_n} \end{bmatrix} \end{bmatrix} \tag{E13}$$

$$A_a = \int_{Sij} [\ q_i (N_{ma})] n_{isij} ds_{ij} + \int_{Sik} [\ q_i (N_{ma})] n_{isik} ds_{ik} + \int_{Sil} [\ q_i (N_{ma})] n_{isil} ds_{il} =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}) n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{is_n} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}) n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{js_n} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}) n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{ks_n} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}) n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}) n_{2S_n} + \\ (q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{ls_n} \end{bmatrix} \tag{E14}$$

$$C' = \begin{bmatrix} C_i' & C_j' & C_k' & C_l' \end{bmatrix} \tag{E15}$$

Os valores S_n em E13 e E14 representam as áreas dos planos internos. O subíndice n assume valores $n = 1$ no plano ij, $n = 2$ no plano ik, e $n = 3$ no plano il. O símbolo s_n, quando usado como subíndice em E13 e E14, refere-se aos valores relativos ao plano S_n correspondente.

As constantes b_i, b_j, b_k, b_l, c_i, c_j, c_k, c_l, d_i, d_j, d_k, e d_l em E13, correspondem com as derivadas das funções de interpolação lineares de cada nó em relação ao sistema de coordenadas. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$b_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

$$b_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

$$b_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2l} & x_{3l} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2i} & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & 1 & x_{3l} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1i} & 1 & x_{3i} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1l} & x_{2l} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1i} & x_{2i} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

$$b_l = \frac{\partial N_l}{\partial x_1} = \frac{-\det\begin{vmatrix} 1 & x_{2i} & x_{3i} \\ 1 & x_{2j} & x_{3j} \\ 1 & x_{2k} & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad c_l = \frac{\partial N_l}{\partial x_2} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1i} & 1 & x_{3i} \\ x_{1j} & 1 & x_{3j} \\ x_{1k} & 1 & x_{3k} \end{vmatrix}}{6V_E} \qquad d_l = \frac{\partial N_l}{\partial x_3} = \frac{-\det\begin{vmatrix} x_{1i} & x_{2i} & 1 \\ x_{1j} & x_{2j} & 1 \\ x_{1k} & x_{2k} & 1 \end{vmatrix}}{6V_E}$$

(E16)

Os valores x_{1i}, x_{1j}, x_{1k}, x_{1l}, x_{2i}, x_{2j}, x_{2k}, x_{2l}, x_{3i}, x_{3j}, x_{3k} e x_{3l} em E16, representam as coordenadas dos pontos nodais no sistema de coordenadas.

Os símbolos $\theta D11_{S_n}$, $\theta D12_{S_n}$, $\theta D13_{S_n}$, $\theta D21_{S_n}$, $\theta D22_{S_n}$, $\theta D23_{S_n}$, $\theta D31_{S_n}$, $\theta D32_{S_n}$, $\theta D33_{S_n}$ em E13, representam os valores da dispersão hidrodinâmica nos planos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada plano, como colocado na Equação E17.

$$\theta Dmn_{S_n} = \int_{S_n} \left(\theta Dmn_i N_i + \theta Dmn_j N_j + \theta Dmn_k N_k + \theta Dmn_l N_l\right) ds_n \qquad \text{(E17)}$$

Onde *m* e *n* assumem valores 1, 2 e 3 para representar as componentes do tensor de dispersão. A integração resultante para cada plano é:

$$\theta Dmn_{Sij} = \frac{13}{36}(\theta Dmn_i + \theta Dmn_j) + \frac{5}{36}(\theta Dmn_k + \theta Dmn_l) \qquad \text{(E18)}$$

$$\theta Dmn_{Sik} = \frac{13}{36}(\theta Dmn_i + \theta Dmn_k) + \frac{5}{36}(\theta Dmn_j + \theta Dmn_l) \qquad \text{(E19)}$$

$$\theta Dmn_{Sil} = \frac{13}{36}(\theta Dmn_i + \theta Dmn_l) + \frac{5}{36}(\theta Dmn_k + \theta Dmn_j) \qquad \text{(E20)}$$

As dispersões θDmn_i, θDmn_j, θDmn_k *e* θDmn_l representam os valores nodais. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\theta D11 = \alpha_l \frac{q_{11}^{\;2}}{q} + \alpha_t \frac{q_{22}^{\;2}}{q} + \alpha_t \frac{q_{33}^{\;2}}{q} + \theta D_d \tau \qquad \text{(E21)}$$

$$\theta D22 = \alpha_l \frac{q_{22}^{\;2}}{q} + \alpha_t \frac{q_{11}^{\;2}}{q} + \alpha_t \frac{q_{33}^{\;2}}{q} + \theta D_d \tau \qquad \text{(E22)}$$

$$\theta D33 = \alpha_l \frac{q_{33}^{\;2}}{q} + \alpha_t \frac{q_{11}^{\;2}}{q} + \alpha_t \frac{q_{22}^{\;2}}{q} + \theta D_d \tau \qquad \text{(E23)}$$

$$\theta D12 = (\alpha_l - \alpha_t)\frac{q_{11}q_{22}}{q} \qquad \text{(E24)}$$

$$\theta D13 = (\alpha_l - \alpha_t)\frac{q_{11}q_{33}}{q} \qquad \text{(E25)}$$

$$\theta D23 = (\alpha_l - \alpha_t)\frac{q_{22}q_{33}}{q} \qquad \text{(E26)}$$

$$\tau = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \qquad \text{(E27)}$$

Sendo $\alpha_l e \alpha_t$ as dispersividades longitudinal e transversal, respectivamente. D_d é o coeficiente de difusão molecular, τ a tortuosidade e θ_s, o teor de umidade volumétrico saturado.

Os símbolos $q11_{S_n}$, $q12_{S_n}, q13_{S_n}$ $q21_{S_n}$, $q22_{S_n}, q23_{S_n}, q31_{S_n}, q32_{S_n}, q33_{S_n}$ em E14, representam as componentes direcionais da vazão específica do fluido nos planos internos S_{ij}, S_{ik} e S_{il}. Os valores foram obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada plano, como colocado na Equação E28.

$$qmn_{S_n} = \int_{S_n} \left(qmn_i N_i + qmn_j N_j + qmn_k N_k + qmn_l N_l\right) ds_n \qquad \text{(E28)}$$

Onde *m* e *n* assumem valores 1, 2 e 3 para representar as componentes direcionais do fluxo. A integração resultante para cada plano é:

$$qmn_{Sij} = \frac{13}{36}(qmn_i + qmn_j) + \frac{5}{36}(qmn_k + qmn_l) \qquad \text{(E29)}$$

$$qmn_{Sik} = \frac{13}{36}(qmn_i + qmn_k) + \frac{5}{36}(qmn_j + qmn_l) \qquad \text{(E30)}$$

$$qmn_{Sil} = \frac{13}{36}(qmn_i + qmn_l) + \frac{5}{36}(qmn_k + qmn_j) \tag{E31}$$

As vazões qmn_i, qmn_j, qmn_k *e* qmn_l representam os valores nodais. Esses valores são obtidos a partir da solução do problema de fluxo e são determinados para cada passo de tempo.

E.3.
Efeito do Contorno

Quando os planos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos dos fluxos de vírus nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. Na Figura E2 são mostrados os planos externos que podem coincidir com o contorno do domínio do problema. Os efeitos dos fluxos nesses contornos são incorporados na Equação E11.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação E11 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação E32.

$$q_c = (Q_{s1}S_1C_1 + Q_{s2}S_2C_2 + Q_{s3}S_3C_3) \tag{E32}$$

Onde Q_{s1}, Q_{s2}, *e* Q_{s3} representam as vazões de fluido por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e S_1, S_2 e S_3 as áreas dos planos do contorno. As grandezas C_1, C_2 e C_3 são os valores de concentração com que os vírus são injetados nos planos referidos. A Equação E32 corresponde à condição de contorno do tipo Neuman.

- se o fluxo não for conhecido é o contorno corresponder com uma face onde existe fluxo de vírus, então essa parcela do fluxo deverá ser acrescentada na Equação E11. Os planos no contorno são integrados da seguinte forma:

$$\int_{S1} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md}C^{'})}{\partial x_j}] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md}C^{'})}{\partial x_j}] n_{is2} ds_2$$
$$+ \int_{S3} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md}C^{'})}{\partial x_j}] n_{is3} ds_3 + \qquad \text{(E33)}$$
$$\int_{S1} [q_i (N_{ma} C^{'})] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [q_i (N_{ma} C^{'})] n_{is2} ds_2 + \int_{S3} [q_i (N_{ma} C^{'})] n_{is3} ds_3 = 0$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não aos nós).

A integral resultante é:

$$(A_{dc} + A_{ac}) \;\; C^{'} \qquad \text{(E34)}$$

onde

$$A_{dc} = \int_{S1} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{is2} ds_2 + \int_{S3} [-\theta D_{ij} \frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j}] n_{is3} ds_3 =$$
$$= -\begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_i + \theta D12_{S_n} c_i + \theta D13_{S_n} d_i) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_i + \theta D22_{S_n} c_i + \theta D23_{S_n} d_i) n_{2S_n} + \\ (\theta D31_{S_n} b_i + \theta D32_{S_n} c_i + \theta D33_{S_n} d_i) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_j + \theta D12_{S_n} c_j + \theta D13_{S_n} d_j) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_j + \theta D22_{S_n} c_j + \theta D23_{S_n} d_j) n_{2S_n} + \\ (\theta D31_{S_n} b_j + \theta D32_{S_n} c_j + \theta D33_{S_n} d_j) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_k + \theta D12_{S_n} c_k + \theta D13_{S_n} d_k) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_k + \theta D22_{S_n} c_k + \theta D23_{S_n} d_k) n_{2S_n} + \\ (\theta D31_{S_n} b_k + \theta D32_{S_n} c_k + \theta D33_{S_n} d_k) n_{3S_n} \end{bmatrix} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} (\theta D11_{S_n} b_l + \theta D12_{S_n} c_l + \theta D13_{S_n} d_l) n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_l + \theta D22_{S_n} c_l + \theta D23_{S_n} d_l) n_{2S_n} + \\ (\theta D31_{S_n} b_l + \theta D32_{S_n} c_l + \theta D33_{S_n} d_l) n_{3S_n} \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$
(E35)

$$A_{ac} = \int_{S1} [\ q_i(N_{ma})] n_{is1} ds_1 + \int_{S2} [\ q_i(N_{ma})] n_{is2} ds_2 + \int_{S3} [\ q_i(N_{ma})] n_{is3} ds_3 =$$

$$= \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}\right) n_{1S_n} + \left(q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}\right) n_{2S_n} + \\ \left(q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{is_n} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}\right) n_{1S_n} + \left(q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}\right) n_{2S_n} + \\ \left(q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{js_n} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}\right) n_{1S_n} + \left(q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}\right) n_{2S_n} + \\ \left(q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{ks_n} \\ \sum_{n=1}^{3} S_n \begin{bmatrix} \left(q11_{S_n} + q12_{S_n} + q13_{S_n}\right) n_{1S_n} + \left(q21_{S_n} + q22_{S_n} + q23_{S_n}\right) n_{2S_n} + \\ \left(q31_{S_n} + q32_{S_n} + q33_{S_n}\right) n_{3S_n} \end{bmatrix} N_{ls_n} \end{bmatrix}$$

(E36)

Os valores S_n em E35 e E36 representam as áreas dos planos externos. O subíndice n assume valores 1, 2 e 3. O símbolo s_n, quando usado como subíndice em E35 e E36, refere-se aos valores relativos ao plano S_n correspondente.

Os valores de dispersão e vazão nos planos externos são dados por:

$$\theta Dmn_{S1} = \frac{33}{54}(\theta Dmn_i) + \frac{21}{108}(\theta Dmn_j + \theta Dmn_k) \quad \text{(E37)}$$

$$\theta Dmn_{S2} = \frac{33}{54}(\theta Dmn_i) + \frac{21}{108}(\theta Dmn_l + \theta Dmn_k) \quad \text{(E38)}$$

$$\theta Dmn_{S3} = \frac{33}{54}(\theta Dmn_i) + \frac{21}{108}(\theta Dmn_j + \theta Dmn_l) \quad \text{(E39)}$$

$$qmn_{S1} = \frac{33}{54}(qmn_i) + \frac{21}{108}(qmn_j + qmn_k) \quad \text{(E40)}$$

$$qmn_{S2} = \frac{33}{54}(qmn_i) + \frac{21}{108}(qmn_l + qmn_k) \quad \text{(E41)}$$

$$qmn_{S3} = \frac{33}{54}(qmn_i) + \frac{21}{108}(qmn_j + qmn_l) \quad \text{(E42)}$$

As Equações E34 a E36 definem a discretização da condição de contorno no domínio. No caso de se considerar uma condição do tipo Cauchy, ambas as matrizes A_{dc} e A_{ac} devem ser avaliadas. No caso de se considerar uma condição de contorno do tipo gradiente nulo, somente a matriz A_{ac} deve se avaliar.

E.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

Incorporando E32 e E34 em E11 obtém-se a seguinte expressão:

$$F_1\left(\frac{\partial(\theta+\rho_b K_d)C}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}+\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}\right)$$
$$+(A_d+A_a+A_{dc}+A_{ac})C'+F_1 Q_\mu = q_c \tag{E43}$$

Considerando as concentrações sorvidas e filtradas dadas pelas equações E44 a E46, e acoplando junto à Equação E43 obtém-se a equação discretizada final.

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t}=(\theta C K_{att}\psi_{att}-S_{din}\rho_b K_{\det}-S_{din}\rho_b\mu_{din}) \tag{E44}$$

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t}=(\theta C K_{str}\psi_{str}-\rho_b S_{str}\mu_{str}) \tag{E45}$$

$$\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t}=(\theta C K_{aw}\psi_{aw}-A_{aw}\Gamma K_{daw}-A_{aw}\Gamma\mu_{aw}) \tag{E46}$$

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle do nó i é:

$$F_1\left(\frac{\partial(\theta+\rho_b K_d)C}{\partial t}\right)+F_1(\theta K_{att}\psi_{att}+\theta K_{str}\psi_{str}+\theta K_{aw}\psi_{aw})C+$$
$$(A_d+A_a+A_{dc}+A_{ac})C'=q_c+F_1(S_{din}\rho_b K_{\det})+F_1(A_{aw}\Gamma K_{daw}) \tag{E47}$$

As matrizes A_{dc} e A_{ac} só precisam ser avaliadas quando algum plano externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

E.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em E47 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo. A integração de E47 resulta em:

$$F_1\frac{(\theta+\rho_b K_d)_{t+1}C_{t+1}}{\Delta t}+F_1(\theta K_{att}\psi_{att}+\theta K_{str}\psi_{str}+\theta K_{aw}\psi_{aw})_{t+1}C_{t+1}+$$
$$(A_d+A_a+A_{dc}+A_{ac})_{t+1}C_{t+1}'=$$
$$q_c+F_1(S_{din}\rho_b K_{\det})_{t+1}+F_1(A_{aw}\Gamma K_{daw})_{t+1}+F_1\frac{(\theta+\rho_b K_d)_t C_t}{\Delta t} \tag{E48}$$

Onde t+1 e t indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo), respectivamente. Na Equação E48, os valores θ, K_d, K_{att}, K_{str}, K_{aw}, ψ_{att}, ψ_{str}, ψ_{aw}, A_{aw}, K_{det}, K_{daw}, S_{din} *e* Γ são grandezas relativas ao nó i, isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó i, é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\sum_{e=1}^{NE} [F_1 \frac{(\theta + \rho_b K_d)_{t+1,e} C_{t+1}}{\Delta t} + F_{1e}(\theta K_{att}\psi_{att} + \theta K_{str}\psi_{str} + \theta K_{aw}\psi_{aw})_{t+1,e} C_{t+1}]$$
$$+\sum_{e=1}^{NE} [(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1,e} C_{t+1,e}^{'}] = \qquad \text{(E49)}$$
$$\sum_{e=1}^{NE} [q_{ce} + F_{1e}(S_{din}\rho_b K_{\det})_{t+1,e} + F_{1e}(A_{aw}\Gamma K_{daw})_{t+1,e} + F_{1e}\frac{(\theta + \rho_b K_d)_{t,e} C_t}{\Delta t}]$$

O vetor $C_e^{'}$ contém os valores nodais das concentrações do nó i e de todos aqueles nós em conectividade com ele. A grandeza C (sem o subíndice “e”) em E49 é relativa ao nó i.

A Equação E49 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

APÊNDICE F:
Solução Numérica – Equação de Transporte na Fratura

A equação que descreve o transporte de vírus na fratura foi descrita no Apêndice A. Neste Apêndice F é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). A equação governante a ser resolvida é,

$$2b\left(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}\right)dxdzdt = \left[2b\frac{\partial}{\partial x_i}\left(\theta D_{fij}\frac{\partial C_f}{\partial x_j}-q_{fi}C_f\right)+\Omega_{n/I^+}-\Omega_{n/I^-}-2bQ_{\mu f}\right]dxdzdt \tag{F1}$$

onde,

$$Q_{\mu f}=(\theta C_f\mu_{lf}+S_{eqf}A_s\mu_{eqf}+S_{din\,f}A_s\mu_{din\,f}+S_{strf}A_s\mu_{strf}+A_{awf}\Gamma_f\mu_{awf}) \tag{F2}$$

O índice *f* refere-se à fratura, e os contadores i, j assumem valores 1 e 2 e indicam as direções x_1 e x_2.

F.1.
Construção do Volume de Controle

Cada fratura foi modelada geometricamente como um plano no espaço tridimensional de coordenadas. Esses planos foram discretizados nesta tese a partir de elementos triangulares. Os nós destes elementos constituem pontos no espaço com coordenadas x,y e z. Para resolver a Equação F1 no plano da fratura (isto é, num sistema bidimensional), foi feita uma transformação de coordenadas do espaço tridimensional para o espaço do plano da fratura. Para realizar esta transformação foram definidos es eixos x1 e x2 do plano. Esses eixos foram definidos da seguinte maneira: o eixo x1 se fez coincidir com o rumo da fratura e foi sempre mantido no plano xy do espaço tridimensional de coordenadas, e o eixo x2 foi obtido através do produto vetorial entre o vetor normal ao plano e o eixo x1.

Os volumes de controle para cada nó foram construídos a partir dos elementos triangulares no sistema bidimensional. Na Figura F1 é mostrado um plano discretizado em quatro elementos triangulares e seis nós (apenas mostrados os nós i, j, k e 2). Nessa mesma figura é mostrada uma área sombreada que representa o volume de controle do nó i. Esse volume de controle está formado pela união das parcelas sombreadas em cada elemento, cada uma dessas parcelas é um subvolume de controle. No caso da Figura F1, são quatro as parcelas que conformam o volume de controle do nó i. O contorno de cada subvolume é definido por segmentos internos localizados dentro do elemento e por segmentos externos localizados no contorno do elemento. O subvolume no elemento E1 está delimitado pelos segmentos internos S1 e S2 e pelos segmentos externos Sb1 e Sb2. Para todos os elementos restantes existem os segmentos internos e externos correspondentes, no entanto são mostrados apenas os segmentos correspondentes ao elemento E1.

Os segmentos internos S1 e S2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos $\overline{Nói - Nój}$, $\overline{Nói - Nók}$ é o baricentro do triângulo, respectivamente. Os segmentos externos Sb1 e Sb2 foram obtidos a partir da união dos pontos centrais dos segmentos $\overline{Nói - Nój}$, $\overline{Nói - Nók}$ é o Nó i. Este mesmo procedimento foi empregado para construir os subvolumes de controle nos elementos restantes.

Na Figura F1 são também mostradas as componentes (no sistema bidimensional) dos vetores normais atuando (para fora) nos segmentos S1 e S2.

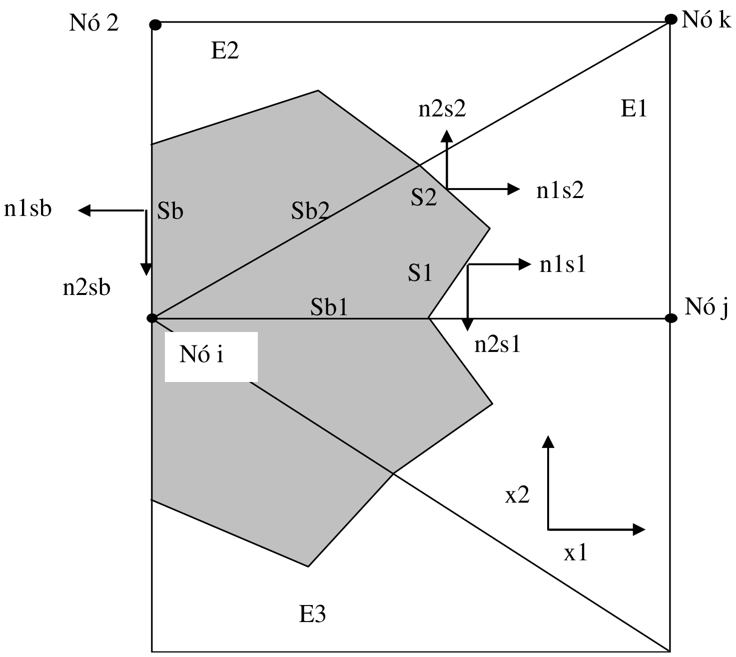

Figura F1. Volume de controle para o nó i.

F.2. Discretização Espacial

A variante do MVF empregada nesta tese é a baseada no vértice. A seguir é mostrada a integração da Equação F1 no subvolume E1 do nó i da Figura F1.

A integração ponderada da Equação F1 é colocada da seguinte forma:

$$\int_A W_1[2b(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}) \\ -2b\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{fij}\frac{\partial C_f}{\partial x_j}-q_{fi}C_f)-(\Omega_{n/I^+}-\Omega_{n/I^-})+2bQ_{\mu f}]dA=0 \qquad \text{(F3)}$$

W_1 é a função de ponderação com valor igual a 1. Resulta então:

$$\int_A [2b(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}) \\ -2b\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{fij}\frac{\partial C_f}{\partial x_j}-q_{fi}C_f)-(\Omega_{n/I^+}-\Omega_{n/I^-})+2bQ_{\mu f}]dA=0 \qquad \text{(F4)}$$

Substituindo A pela área do subvolume no elemento E1, a integral F4 resulta em:

$$\int_{AE1} [2b(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}) \\ -2b\frac{\partial}{\partial x_i}(\theta D_{fij}\frac{\partial C_f}{\partial x_j}-q_{fi}C_f)-(\Omega_{n/I^+}-\Omega_{n/I^-})+2bQ_{\mu f}]dA_{E1}=0 \qquad \text{(F5)}$$

Empregando o teorema do divergente, e as componentes dos vetores normais mostrados na Figura F1, a integral anterior é transformada em:

$$\int_{AE1} [2b(\frac{\partial(\theta C_f)}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{eqf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}+\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}+\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t})]dA_{E1}+ \\ \int_{AE1}[-(\Omega_{n/I^+}-\Omega_{n/I^-})+2bQ_{\mu f}]dA_{E1} \\ +\int_{S1}[-2b(\theta D_{fij}\frac{\partial C_f}{\partial x_j}-q_{fi}C_f)]n_{is1}ds_1 \\ +\int_{S2}[-2b(\theta D_{fij}\frac{\partial C_f}{\partial x_j}-q_{fi}C_f)]n_{is2}ds_2=0 \qquad \text{(F6)}$$

Em F6, os símbolos n_{is1} e n_{is2} representam as componentes dos vetores normais nas direções i = x1 e i = x2.

A concentração C da Equação F6 é substituída por uma combinação dos valores nodais. No caso dos termos dispersivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação linear do elemento. No caso dos termos advectivos, essa combinação foi feita a partir da função de interpolação exponencial do elemento. Esta função de interpolação incorpora o efeito do sentido do fluxo. No Apêndice H é apresentada a descrição dessa função. Desta forma, as concentrações em F6 são:

Para os termos dispersivos:

$$C = C_d \approx N_{md}(C^{'}) \tag{F7}$$

Para os termos advetivos:

$$C = C_a \approx N_{ma}(C^{'}) \tag{F8}$$

Onde $(C^{'})$ representa os valores de concentração nos pontos nodais, a variável N_{md}, o valor da função de interpolação linear, e a variável N_{ma}, o valor da função de interpolação exponencial.

A concentração S_{eq} pode ser substituída por:

$$S_{eq} = K_d C \tag{F9}$$

Empregando as Equações F7, F8 e F9, a Equação F6 é transformada em:

$$\begin{aligned}
&\int_{AE1} [2b(\frac{\partial(\theta + A_s K_{df})C_f}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t})]dA_{E1} + \\
&\int_{AE1} [-(\Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}) + 2bQ_{\mu f}]dA_{E1} \\
&+ \int_{S1} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md}C_f^{'})}{\partial x_j})]n_{is1}ds_1 \\
&+ \int_{S2} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial(N_{md}C_f^{'})}{\partial x_j})]n_{is2}ds_2 + \\
&\int_{S1} [2b \quad q_{fi}(N_{ma}C_f^{'})]n_{is1}ds_1 + \int_{S2} [2b \quad q_{fi}(N_{ma}C_f^{'})]n_{is2}ds_2 = 0
\end{aligned} \tag{F10}$$

Sendo:

$$Q_{\mu f} = (\theta\mu_{lf} + K_{df}A_s\mu_{eqf})C_f + S_{din\,f}A_s\mu_{din\,f} + S_{strf}A_s\mu_{strf} + A_{awf}\Gamma_f\mu_{awf} \tag{F11}$$

Integrando F10 e colocando o resultado na forma matricial, obtém-se a discretização espacial para os planos internos do subvolume de controle do nó i.

$$F_1\left(\frac{\partial(\theta + A_s K_{df})C_f}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}\right) + (A_d + A_a)C'_f + F_1 Q_{\mu f} = \Omega \tag{F12}$$

(<u>Observação:</u> a partir deste ponto os índices i, j, k, são associados aos nós i, j, k do elemento e não mais ao sistema de coordenadas).

As componentes de F12 são detalhadas a seguir

$$F_1 = \int_{AE1} [\ 2b\ ]dA_{E1} = 2b\frac{A_{E1}}{3} \tag{F13}$$

$$\Omega = \int_{AE1} [\ \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}\ ]dA_{E1} = [\ \Omega_{n/I^+} - \Omega_{n/I^-}\ ]\frac{A_{E1}}{3} \tag{F14}$$

$$A_d = \int_{S1} [-2b(\theta D_{fij}\frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j})]n_{is1}ds_1 + \int_{S2} [-2b(\theta D_{fij}\frac{\partial(N_{md})}{\partial x_j})]n_{is2}ds_2 =$$

$$= -2b\begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{2} S_n\left[(\theta D11_{S_n} b_i + \theta D12_{S_n} c_i)n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_i + \theta D22_{S_n} c_i)n_{2S_n}\right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_n\left[(\theta D11_{S_n} b_j + \theta D12_{S_n} c_j)n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_j + \theta D22_{S_n} c_j)n_{2S_n}\right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_n\left[(\theta D11_{S_n} b_k + \theta D12_{S_n} c_k)n_{1S_n} + (\theta D21_{S_n} b_k + \theta D22_{S_n} c_k)n_{2S_n}\right] \end{bmatrix} \tag{F15}$$

$$A_a = \int_{S1} [2b\ \ q_{fi}(N_{ma})]n_{is1}ds_1 + \int_{S2} [2b\ \ q_{fi}(N_{ma})]n_{is2}ds_2 =$$

$$= 2b\begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{2} S_n\left[(q11_{S_n} + q12_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n})n_{2S_n}\right]N_{is_n} \\ \sum_{n=1}^{2} S_n\left[(q11_{S_n} + q12_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n})n_{2S_n}\right]N_{js_n} \\ \sum_{n=1}^{2} S_n\left[(q11_{S_n} + q12_{S_n})n_{1S_n} + (q21_{S_n} + q22_{S_n})n_{2S_n}\right]N_{ks_n} \end{bmatrix} \tag{F16}$$

$$C'_f = \begin{bmatrix} C'_i & C'_j & C'_k \end{bmatrix} \tag{F17}$$

Os valores S_n em F15 e F16 representam os comprimentos dos segmentos internos. O subíndice n assume valores n =1no segmento S1 e n = 2 no segmento S2. O símbolo s_n, quando usado como subíndice em F15 e F16, refere-se aos valores relativos ao plano S_n correspondente.

As constantes b_i, b_j, b_k, c_i, c_j, e c_k em F15 correspondem às derivadas das funções de interpolação de cada nó em relação ao sistema de coordenadas x1-x2. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$b_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_1} = \frac{x_{2j} - x_{2k}}{2A_{E1}} \qquad c_i = \frac{\partial N_i}{\partial x_2} = \frac{x_{1k} - x_{1j}}{2A_{E1}}$$

$$b_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_1} = \frac{x_{2k} - x_{2i}}{2A_{E1}} \qquad c_j = \frac{\partial N_j}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1k}}{2A_{E1}} \tag{F18}$$

$$b_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_1} = \frac{x_{2i} - x_{2j}}{2A_{E1}} \qquad c_k = \frac{\partial N_k}{\partial x_2} = \frac{x_{1j} - x_{1i}}{2A_{E1}}$$

Os valores x_{1i}, x_{1j}, x_{1k}, x_{2i}, x_{2j}, x_{2k} em F18, representam as coordenadas dos pontos nodais no sistema de coordenadas do plano da fratura (bidimensional).

Os símbolos $\theta D11_{S_n}$, $\theta D12_{S_n}$, $\theta D21_{S_n}$, $\theta D22_{S_n}$ em F15, representam os valores da dispersão hidrodinâmica nos segmentos internos. Os valores são obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada segmento, como colocado na Equação F19.

$$\theta Dmn_{S_n} = \int_{S_n} \left(\theta Dmn_i N_i + \theta Dmn_j N_j + \theta Dmn_k N_k \right) ds_n \tag{F19}$$

Onde m e n assumem valores 1 e 2 para representar as componentes do tensor de dispersão. A integração resultante para cada plano é:

$$\theta Dmn_{S1} = \frac{5}{12}(\theta Dmn_i + \theta Dmn_j) + \frac{1}{6}\theta Dmn_k \tag{F20}$$

$$\theta Dmn_{S2} = \frac{5}{12}(\theta Dmn_i + \theta Dmn_k) + \frac{1}{6}\theta Dmn_j \tag{F21}$$

As dispersões θDmn_i, θDmn_j, e θDmn_k representam os valores nodais. Esses valores são obtidos da seguinte forma:

$$\theta D11 = \alpha_l \frac{{q_{11}}^2}{q} + \alpha_t \frac{{q_{22}}^2}{q} + \theta D_d \tau \tag{F22}$$

$$\theta D22 = \alpha_l \frac{{q_{22}}^2}{q} + \alpha_t \frac{{q_{11}}^2}{q} + \theta D_d \tau \tag{F23}$$

$$\theta D12 = \theta D21 = (\alpha_l - \alpha_t)\frac{q_{11} q_{22}}{q} \tag{F24}$$

$$\tau = \frac{\theta^{7/3}}{\theta_s^2} \tag{F25}$$

Sendo $\alpha_l e \alpha_t$ as dispersividades longitudinal e transversal, respectivamente. D_d é o coeficiente de difusão molecular, τ a tortuosidade e θ_s, o teor de umidade volumétrico saturado.

Os símbolos $q11_{S_n}$, $q12_{S_n}$, $q21_{S_n}$, $q22_{S_n}$ em F16, representam as componentes direcionais da vazão específica do fluido nos segmentos internos *S1 e S2*. Os valores foram obtidos a partir da integração da interpolação linear nodal em cada segmento, como colocado na Equação F26.

$$qmn_{S_n} = \int_{S_n} \left(qmn_i N_i + qmn_j N_j + qmn_k N_k \right) ds_n \tag{F26}$$

Onde *m* e *n* assumem valores 1 e 2 para representar as componentes direcionais do fluxo. A integração resultante para cada segmento é:

$$qmn_{S1} = \frac{5}{12}(qmn_i + qmn_j) + \frac{1}{6} qmn_k \tag{F27}$$

$$qmn_{S2} = \frac{5}{12}(qmn_i + qmn_k) + \frac{1}{6} qmn_j \tag{F28}$$

As vazões qmn_i, qmn_j e qmn_k representam os valores nodais. Esses valores são obtidos a partir da solução do problema de fluxo e são determinados para cada passo de tempo.

F.3.
Efeito do Contorno

Quando os segmentos externos do subvolume de controle coincidem com os contornos do domínio do problema, os efeitos de fluxos nesses contornos devem ser incorporados na equação discretizada do subvolume sob integração. No caso da Figura F,1 isto acontece para os subvolumes nos elementos E2 e E3. Nesta figura são mostradas as componentes do vetor normal (para fora) atuando no segmento externo (Sb) do Elemento E2. O segmento Sb é o segmento Sb2 correspondente do elemento E2. Os efeitos dos fluxos nesses contornos são incorporados na Equação F12.

Para manter a generalidade da formulação, são discretizados os segmentos Sb1 e Sb2 considerando que ambos coincidem com o contorno.

Existem duas possibilidades em relação ao fluxo no contorno:

- se o fluxo é conhecido, então basta acrescentar ao lado direito da Equação F12 uma parcela devida a esse fluxo. Essa parcela é dada pela Equação F29.

$$\Omega_c = (q_1 S_{b1} C_1 + q_2 S_{b2} C_2) 2b \tag{F29}$$

Onde Q_{c1} *e* Q_{c2} representam as vazões por unidade de área por unidade de tempo (que entram ou saem do domínio), e S_{b1}, S_{b2} e 2b os comprimentos dos segmentos mencionados e a abertura da fratura, respectivamente. As grandezas C_1 e C_2 são os valores de concentração com que os vírus são injetados nos segmentos referidos. A Equação F29 corresponde à condição de contorno do tipo Neuman.

- se o fluxo não for conhecido, é o contorno corresponder com uma face onde existe fluxo de vírus, então essa parcela do fluxo deverá ser acrescentada na Equação F12. Os segmentos no contorno são integrados da seguinte forma

$$\begin{aligned} &\int_{Sb1} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial (N_{md} C_f^{'})}{\partial x_j})] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{Sb2} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial (N_{md} C_f^{'})}{\partial x_j})] n_{isb2} ds_{b2} + \\ &\int_{Sb1} [2b \quad q_{fi} (N_{ma} C_f^{'})] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{Sb2} [2b \quad q_{fi} (N_{ma} C_f^{'})] n_{isb2} ds_{b2} = 0 \end{aligned} \tag{F30}$$

(Observação: nesta equação particularmente, os subíndices i, j referem-se ao sistema de coordenadas e não aos nós).

A integral resultante é:

$$(A_{dc} + A_{ac}) \quad C_f^{'} \tag{F31}$$

Onde:

$$\begin{aligned} A_{dc} &= \int_{Sb1} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial (N_{md})}{\partial x_j})] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{Sb2} [-2b(\theta D_{fij} \frac{\partial (N_{md})}{\partial x_j})] n_{isb2} ds_{b2} = \\ &= -2b \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{2} S_{bn} \left[\left(\theta D11_{Sb_n} b_i + \theta D12_{Sb_n} c_i \right) n_{1Sb_n} + \left(\theta D21_{Sb_n} b_i + \theta D22_{Sb_n} c_i \right) n_{2Sb_n} \right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_{bn} \left[\left(\theta D11_{Sb_n} b_j + \theta D12_{Sb_n} c_j \right) n_{1Sb_n} + \left(\theta D21_{Sb_n} b_j + \theta D22_{Sb_n} c_j \right) n_{2Sb_n} \right] \\ \sum_{n=1}^{2} S_{bn} \left[\left(\theta D11_{Sb_n} b_k + \theta D12_{Sb_n} c_k \right) n_{1Sb_n} + \left(\theta D21_{Sb_n} b_k + \theta D22_{Sb_n} c_k \right) n_{2Sb_n} \right] \end{bmatrix} \end{aligned} \tag{F32}$$

PUC-Rio - Certificação Digital Nº 0321281/CA

$$A_{ac} = \int_{Sb1} [2b \quad q_{fi}(N_{ma})] n_{isb1} ds_{b1} + \int_{Sb2} [2b \quad q_{fi}(N_{ma})] n_{isb2} ds_{b2} =$$

$$= 2b \begin{bmatrix} \sum_{n=1}^{2} S_{bn} \left[\left(q11_{Sb_n} + q12_{Sb_n} \right) n_{1Sb_n} + \left(q21_{Sb_n} + q22_{Sb_n} \right) n_{2Sb_n} \right] N_{isb_n} \\ \sum_{n=1}^{2} S_{bn} \left[\left(q11_{Sb_n} + q12_{Sb_n} \right) n_{1Sb_n} + \left(q21_{Sb_n} + q22_{Sb_n} \right) n_{2Sb_n} \right] N_{jsb_n} \\ \sum_{n=1}^{2} S_{bn} \left[\left(q11_{Sb_n} + q12_{Sb_n} \right) n_{1Sb_n} + \left(q21_{Sb_n} + q22_{Sb_n} \right) n_{2Sb_n} \right] N_{ksb_n} \end{bmatrix} \tag{F33}$$

Os valores S_{bn} em F32 e F33 representam os comprimentos dos segmentos externos. O subíndice n assume valores 1 em Sb1 e 2 em Sb2. O símbolo s_{bn}, quando usado como subíndice em F32 e F33, refere-se aos valores relativos ao plano S_{bn} correspondente.

Os valores de dispersão e vazão nos segmentos externos são dados por:

$$\theta Dmn_{Sb1} = \frac{3}{4}(\theta Dmn_i) + \frac{1}{4}(\theta Dmn_j) \tag{F34}$$

$$\theta Dmn_{Sb2} = \frac{3}{4}(\theta Dmn_i) + \frac{1}{4}(\theta Dmn_k) \tag{F35}$$

$$qmn_{Sb1} = \frac{3}{4}(qmn_i) + \frac{1}{4}(qmn_j) \tag{F36}$$

$$qmn_{Sb2} = \frac{3}{4}(qmn_i) + \frac{1}{4}(qmn_k) \tag{F37}$$

As Equações F31 a F33 definem a discretização da condição de contorno do domínio. No caso de se considerar uma condição do tipo Cauchy, ambas as matrizes A_{dc} e A_{ac} devem ser avaliadas. No caso de se considerar uma condição de contorno do tipo gradiente nulo, somente a matriz A_{ac} deve se avaliar.

F.4. Equação Resultante da Discretização Espacial

Incorporando F29 e F31 em F12 obtém-se a seguinte expressão:

$$F_1\left(\frac{\partial(\theta + A_s K_{df})C_f}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t} + \frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} + \frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}\right) +$$
$$(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})C_f^{'} + F_1 Q_{\mu f} = \Omega + \Omega_c \tag{F38}$$

Considerando as concentrações sorvidas e filtradas dadas pelas equações F39 a F41, e acoplando junto à Equação F38 obtém-se a equação discretizada final.

$$\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t} = (\theta C_f K_{attf}\psi_{attf} - S_{din\,f} A_s K_{\det f} - S_{din\,f} A_s \mu_{din\,f}) \tag{F39}$$

$$\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} = (\theta C_f K_{strf}\psi_{strf} - A_s S_{strf}\mu_{strf}) \tag{F40}$$

$$\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t} = (\theta C_f K_{awf}\psi_{awf} - A_{awf}\Gamma_f K_{dawf} - A_{awf}\Gamma_f \mu_{awf}) \tag{F41}$$

A equação resultante da discretização espacial para o subvolume de controle do nó i é:

$$\begin{aligned} &F_1\left(\frac{\partial(\theta + A_s K_{df})C_f}{\partial t}\right) + F_1(\theta K_{attf}\psi_{attf} + \theta K_{strf}\psi_{strf} + \theta K_{awf}\psi_{awf})C_f + \\ &(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})C_f^{'} = \Omega + \Omega_c + F_1(S_{din\,f} A_s K_{\det f}) + F_1(A_{awf}\Gamma_f K_{dawf}) \end{aligned} \tag{F42}$$

As matrizes A_{dc} e A_{ac} só precisam se avaliadas quando algum plano externo coincidir com o contorno do domínio do problema.

F.5. Discretização Temporal

Para realizar a integração no tempo, as derivadas temporais em F42 são substituídas por aproximações em diferenças finitas. Neste trabalho, a integração temporal é feita através da formulação totalmente implícita. Isto é, a integração é feita no final do passo de tempo. A integração de F42 resulta em:

$$\begin{aligned} &F_1\frac{(\theta + A_s K_{df})_{t+1} C_{f(t+1)}}{\Delta t} + F_1(\theta K_{attf}\psi_{attf} + \theta K_{strf}\psi_{strf} + \theta K_{awf}\psi_{awf})_{t+1} C_{f(t+1)} + \\ &(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1} C^{'}_{f(t+1)} = \\ &\Omega + \Omega_c + F_1(S_{din\,f} A_s K_{\det f})_{t+1} + F_1(A_{awf}\Gamma_f K_{dawf})_{t+1} + F_1\frac{(\theta + A_s K_{df})_t C_{f(t)}}{\Delta t} \end{aligned} \tag{F43}$$

Onde t+1 e t indicam passo de tempo atual e prévio (alternativamente, final e início do passo de tempo), respectivamente. Na Equação F43, os valores θ, A_s, K_{df}, K_{attf}, K_{strf}, K_{awf}, ψ_{attf}, ψ_{strf}, ψ_{awf}, A_{awf}, K_{detf}, K_{dawf}, S_{dinf} e Γ_f são grandezas relativas ao nó i, isto é, a formulação é condensada.

Para completar a integração do volume de controle do nó i, é feito o somatório das parcelas de cada subvolume de controle para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence. Esse somatório é mostrado a seguir.

$$\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e} \frac{(\theta + A_s K_{df})_{t+1,e} C_{f(t+1)}}{\Delta t} + F_{1e} (\theta K_{attf} \psi_{attf} + \theta K_{strf} \psi_{strf} + \theta K_{awf} \psi_{awf})_{t+1,e} C_{f(t+1)}]$$
$$+ \sum_{e=1}^{NE} [(A_d + A_a + A_{dc} + A_{ac})_{t+1,e} C'_{f(t+1),e}] =$$
$$\sum_{e=1}^{NE} [\Omega_e + \Omega_{ce} + F_{1e} (S_{din\,f} A_s K_{\det f})_{t+1,e} + F_{1e} (A_{awf} \Gamma_f K_{dawf})_{t+1,e} + F_{1e} \frac{(\theta + A_s K_{df})_{t,e} C_{f(t)}}{\Delta t}] \tag{F44}$$

O vetor C'_{fe} contém os valores nodais das concentrações do nó i e de todos aqueles nós em conectividade com ele. A grandeza C_f (sem o subíndice “e”) em F44 é relativa ao nó i. A Equação F44 é aplicada para cada nó dentro do domínio. Desta maneira é obtido o sistema de equações a ser resolvido.

APÊNDICE G:
Solução Numérica – Equações Complementares

As equações que descrevem a variação das concentrações sorvidas e filtradas, na matriz e na fratura, foram descritas no Apêndice A. Neste Apêndice G é mostrada a solução numérica através do Método dos Volumes Finitos (MVF). Cada equação é integrada para os subvolumes de controle do nó i, mostrados nas Figuras C1 e D1 dos Apêndices C e D, respectivamente. A somatória das parcelas de cada subvolume define a equação discretizada para o volume de controle.

G.1.
Equações da Matriz

As equações de continuidade para a matriz são:

$$\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} dxdydzdt = (\theta C K_{att}\psi_{att} - S_{din}\rho_b K_{\det} - S_{din}\rho_b \mu_{din}) dxdydzdt \quad \text{(G1)}$$

$$\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} dxdydzdt = (\theta C K_{str}\psi_{str} - \rho_b S_{str}\mu_{str}) dxdydzdt \quad \text{(G2)}$$

$$\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} dxdydzdt = (\theta C K_{aw}\psi_{aw} - A_{aw}\Gamma K_{daw} - A_{aw}\Gamma \mu_{aw}) dxdydzdt \quad \text{(G3)}$$

Integrando G1, G2 e G3 no subvolume de controle da Figura C1 através do esquema de resíduos ponderados, tem-se:

$$\int_V W_1 [\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} - (\theta C K_{att}\psi_{att} - S_{din}\rho_b K_{\det} - S_{din}\rho_b \mu_{din})] dV = 0 \quad \text{(G4)}$$

$$\int_V W_1 [\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} - (\theta C K_{str}\psi_{str} - \rho_b S_{str}\mu_{str})] dV = 0 \quad \text{(G5)}$$

$$\int_V W_1 [\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} - (\theta C K_{aw}\psi_{aw} - A_{aw}\Gamma K_{daw} - A_{aw}\Gamma \mu_{aw})] dV = 0 \quad \text{(G6)}$$

Para o fator de ponderação, $W_1 = 1$, as integrais resultantes são:

$$F_1 [\frac{\partial(\rho_b S_{din})}{\partial t} - (\theta C K_{att}\psi_{att} - S_{din}\rho_b K_{\det} - S_{din}\rho_b \mu_{din})] = 0 \quad \text{(G7)}$$

$$F_1[\frac{\partial(\rho_b S_{str})}{\partial t} - (\theta C K_{str}\psi_{str} - \rho_b S_{str}\mu_{str})] = 0 \tag{G8}$$

$$F_1[\frac{\partial(A_{aw}\Gamma)}{\partial t} - (\theta C K_{aw}\psi_{aw} - A_{aw}\Gamma K_{daw} - A_{aw}\Gamma\mu_{aw})] = 0 \tag{G9}$$

Onde $F_1 = \frac{V_E}{4}$, e V_E o volume do tetraedro. Isto é, o volume do subvolume de controle corresponde com a quarta parte do volume do elemento.

Substituindo os termos transientes em G7 a G9 por aproximações em diferenças finitas ascendentes, e somando os subvolumes de controle do nó i para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence, obtém-se a equação discretizada final para o volume de controle do nó i.

$$\begin{aligned}&\sum_{e=1}^{NE} F_{1e}\rho_{b,e}(\frac{1}{\Delta t} + K_{\det} + .\mu_{din})_e S_{din,(t+1)} = \\ &\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e}\frac{(\rho_{b,e}S_{din})_t}{\Delta t} + F_{1e}(\theta C K_{att,e}\psi_{att,e})_{t+1}]\end{aligned} \tag{G10}$$

$$\begin{aligned}&\sum_{e=1}^{NE} F_{1e}\rho_{be}(\frac{1}{\Delta t} + \mu_{str})_e S_{str,(t+1)} = \\ &\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e}\frac{(\rho_{b,e}S_{str})_t}{\Delta t} + F_{1e}(\theta C K_{str,e}\psi_{str,e})_{t+1}]\end{aligned} \tag{G11}$$

$$\begin{aligned}&\sum_{e=1}^{NE} F_{1e}A_{aw,(t+1)}(\frac{1}{\Delta t} + K_{daw} + \mu_{aw})_e\Gamma_{t+1} = \\ &\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e}\frac{(A_{aw}\Gamma)_t}{\Delta t} + F_{1e}(\theta C K_{aw,e}\psi_{aw,e})_{t+1}]\end{aligned} \tag{G12}$$

G.2.
Equações da Fratura

As equações de continuidade para a fratura são:

$$\begin{aligned}&2b\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t}dxdzdt = \\ &2b(\theta C_f K_{attf}\psi_{attf} - S_{din\,f}A_s K_{\det f} - S_{din\,f}A_s\mu_{din\,f})dxdzdt\end{aligned} \tag{G13}$$

$$2b\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t}dxdzdt = 2b(\theta C_f K_{strf}\psi_{strf} - A_s S_{strf}\mu_{strf})dxdzdt \tag{G14}$$

$$\begin{aligned}&2b\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t}dxdzdt = \\ &2b(\theta C_f K_{awf}\psi_{awf} - A_{awf}\Gamma_f K_{dawf} - A_{awf}\Gamma_f \mu_{awf})dxdzdt\end{aligned} \tag{G15}$$

Integrando G13, G14 e G15 no subvolume de controle E1 da Figura D1 através do esquema de resíduos ponderados, tem-se:

$$\int_A W_1[2b\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t} - 2b(\theta C_f K_{attf}\psi_{attf} - S_{din\,f}A_s K_{\det f} - S_{din\,f}A_s\mu_{din\,f})]dA = 0 \tag{G16}$$

$$\int_A W_1[2b\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} - 2b(\theta C_f K_{strf}\psi_{strf} - A_s S_{strf}\mu_{strf})]dA = 0 \tag{G17}$$

$$\int_A W_1[2b\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t} - 2b(\theta C_f K_{awf}\psi_{awf} - A_{awf}\Gamma_f K_{dawf} - A_{awf}\Gamma_f\mu_{awf})]dA = 0 \tag{G18}$$

Para o fator de ponderação, $W_1 = 1$, as integrais resultantes são:

$$F_1[\frac{\partial(A_s S_{din\,f})}{\partial t} - (\theta C_f K_{attf}\psi_{attf} - S_{din\,f}A_s K_{\det f} - S_{din\,f}A_s\mu_{din\,f})] = 0 \tag{G19}$$

$$F_1[\frac{\partial(A_s S_{strf})}{\partial t} - (\theta C_f K_{strf}\psi_{strf} - A_s S_{strf}\mu_{strf})] = 0 \tag{G20}$$

$$F_1[\frac{\partial(A_{awf}\Gamma_f)}{\partial t} - (\theta C_f K_{awf}\psi_{awf} - A_{awf}\Gamma_f K_{dawf} - A_{awf}\Gamma_f\mu_{awf})] = 0 \tag{G21}$$

Onde $F_1 = 2b\frac{A_E}{3}$, e A_E a área do elemento. Isto é, a área do subvolume de controle corresponde com um terço da área do elemento.

Substituindo os termos transientes em G19 a G21 por aproximações em diferenças finitas ascendentes, e somando os subvolumes de controle do nó i para todos os elementos (NE) aos quais ele pertence, obtém-se a equação discretizada final para o volume de controle do nó i.

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{se} (\frac{1}{\Delta t} + K_{\det f} + \mu_{din\, f})_e S_{din\, f,(t+1)} =$$
$$\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e} \frac{(A_{se} S_{din\, f})_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta C_f K_{attf,e} \psi_{attf,e})_{t+1}] \tag{G22}$$

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{se} (\frac{1}{\Delta t} + \mu_{strf})_e S_{strf,(t+1)} =$$
$$\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e} \frac{(A_{se} S_{strf})_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta C_f K_{strf} \psi_{strf})_{t+1}] \tag{G23}$$

$$\sum_{e=1}^{NE} F_{1e} A_{awf,(t+1)} (\frac{1}{\Delta t} + K_{dawf} + \mu_{awf})_e \Gamma_{f,(t+1)} =$$
$$\sum_{e=1}^{NE} [F_{1e} \frac{(A_{awf} \Gamma_f)_t}{\Delta t} + F_{1e} (\theta C_f K_{awf,e} \psi_{awf,e})_{t+1}] \tag{G24}$$

Todos os valores mostrados nas Equações G10 a G12 e G22 a G24 são relativos ao nó de integração (no caso do exemplo nó i). A formulação é condensada, e por isto não foram empregadas funções de interpolação nas integrações.

APÊNDICE H:
Função de Interpolação Exponencial

As equações diferenciais de continuidade respondem à descrição em termos matemáticos dos processos físicos envolvidos num determinado problema. Cada termo da equação diferencial pode ser interpretado desde o ponto de vista físico e desde o ponto de vista matemático. No caso da equação de continuidade para o problema de transporte de massa, os processos advectivos e dispersivos têm interpretação física e matemática. Desde o ponto de vista matemático, o termo dispersivo é do tipo elíptico e transmite as informações em todas as direções do domínio. O termo advectivo é do tipo parabólico e transmite as informações apenas no sentido do fluxo. Qualquer função de interpolação que pretenda representar a variação no espaço das grandezas transportadas por advecção e/ou dispersão, deve também ser capaz de reproduzir os comportamentos elípticos e parabólicos. Neste trabalho de tese, os termos dispersivos foram interpolados com funções lineares, e os termos advectivos com uma função exponencial.

A função de interpolação exponencial empregada nesta tese foi inicialmente proposta por Baliga e Patankar (1980) para estudar problemas de advecção e difusão em elementos finitos triangulares. No ano de 1986, Prakash apresentou uma versão modificada desta função ao incorporar o efeito dos termos fontes (Prakash,1986). No mesmo ano de 1986, LeDain Muir e Baliga apresentaram a extensão da formulação original para problemas tridimensionais com elementos tetraédricos. LeDain Muir e Baliga (1986) destacam que a função de interpolação exponencial não necessariamente garante continuidade C^0 nos contornos dos elementos (não garante continuidade da concentração por exemplo). Porém, esses autores também ressaltam que a função de interpolação e suas derivadas são continuas dentro do elemento e, portanto contínuas nos contornos dos volumes finitos. Na medida em que o número de Peclet diminui, o valor da função exponencial tende ao valor da função de interpolação linear. Isto é, a função de interpolação linear é um caso particular da função exponencial.

A seguir é descrita a mecânica da aplicação desta função para o caso bidimensional.

Morfologicamente a função exponencial apresenta o mesmo aspecto da função linear tradicionalmente empregada para interpolar em elementos triangulares. A diferença está nas coordenadas utilizadas na interpolação. Essas coordenadas resultam de transformações exponenciais das coordenadas do problema para um novo sistema de coordenadas paralelo ao sentido do fluxo. A interpolação de uma variável primária arbitraria (C) é dada pela seguinte expressão:

$$C = A\xi + BY + D \tag{H1}$$

Onde A, B e D são valores constantes e ξ e Y as coordenadas do ponto onde o valor de C será determinado. A maneira como as coordenadas ξ e Y são obtidas é explicada a seguir.

Considere o elemento triangular mostrado na Figura H1. Nessa figura é mostrado o sistema global de coordenadas definido pelos eixos X1 e X2. Dentro do elemento está localizado o ponto B, que corresponde ao baricentro, definido como o ponto de encontro das medianas (as linhas tracejadas). Vale ressaltar que as medianas correspondem com os contornos dos volumes de controle para cada nó dentro do elemento. Adicionalmente é mostrada a direção do fluxo (vetor $\vec{V}$). Esse vetor é a resultante do valor médio das velocidades nodais (no sistema global de coordenadas) calculada no baricentro.

$$\vec{V} = \left(\frac{v_{i,x1} + v_{j,x1} + v_{k,x1}}{3}\right)\vec{x_1} + \left(\frac{v_{i,x2} + v_{j,x2} + v_{k,x2}}{3}\right)\vec{x_2} = v_{x1}\,\vec{x_1} + v_{x2}\,\vec{x_2} \tag{H2}$$

Onde $\vec{x_1}$ e $\vec{x_2}$ são vetores unitários, e $v_{i,x1}, v_{j,x1}, v_{k,x1}$ $v_{i,x2}, v_{j,x2}, v_{k,x2}$ as componentes nodais da velocidade nas direções X1 e X2.

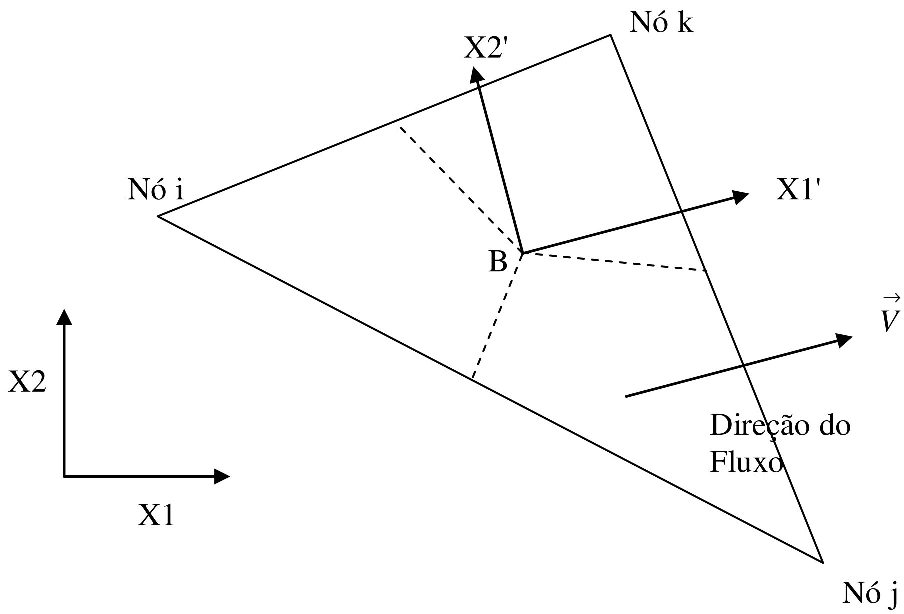

Figura H1. Sistemas de Coordenadas para a aplicação da função de interpolação exponencial.

Na mesma Figura H1 é mostrado um sistema local de coordenadas definido pelos eixos X1' e X2'. A origem desse novo sistema de coordenadas é feita coincidir com o baricentro do elemento, e a direção de X1' é escolhida de maneira tal que seja paralela à direção do vetor $\vec{V}$. Desta forma o eixo X1' coincide com a direção do fluxo. A direção do eixo X2' é obtida por ortogonalidade entre a normal ao plano do elemento e o eixo X1'. As coordenadas globais e o vetor de fluxo são transformados para este novo sistema de coordenadas.

O vetor de velocidade média do elemento, no novo sistema de coordenadas X1', X2' é dado por:

$$\vec{V_n} = (\sqrt{v_{x1}^2 + v_{x1}^2})\,\vec{x_1'} + (0)\,\vec{x_2'} = V_n\,\vec{x_1'} \qquad \text{(H3)}$$

Onde $\vec{x_1'}$ e $\vec{x_2'}$ são os vetores unitários no novo sistema de coordenadas e V_n velocidade resultante (módulo do vetor $\vec{V}$).

As coordenadas nodais são transformadas linearmente do sistema global X1, X2, para o sistema local X1', X2', obtendo-se assim as novas coordenadas $x1_i^{'}, x1_j^{'}, x1_k^{'}, x2_i^{'}, x2_j^{'}, x2_k^{'}$.

A partir das novas coordenadas no sistema local, são obtidos os valores máximo e mínimo no eixo X1'.

$$X_{\max} = Máximo(x1_i^{'}, x1_j^{'}, x1_k^{'}) \qquad \text{(H4)}$$

$$X_{\min} = Míninmo(x1_i^{'}, x1_j^{'}, x1_k^{'}) \qquad \text{(H5)}$$

Seguidamente é definido o valor do número de Peclet para o elemento.

$$P_e = \rho V_n \frac{(X_{\max} - X_{\min})}{D} \qquad \text{(H6)}$$

Onde ρ é a massa específica do fluido e D a dispersão. Deve ser dito que a formulação original foi proposta para problemas difusivos e não dispersivos, pelo que D representa originalmente o coeficiente de difusão.

Na formulação apresentada nesta pesquisa D corresponde à dispersão representativa na direção do fluxo (eixo X1'). O valor de D foi obtido a partir do tensor de dispersão médio (do elemento) da seguinte forma:

$$D = \sqrt{(D11_e + D12_e)^2 + (D21_e + D22_e)^2} \qquad \text{(H7)}$$

Onde $D11_e, D12_e, D21_e, D22_e$, são os valores (médios) do tensor de dispersão no baricentro do elemento. Esses valores foram obtidos por interpolação linear dos valores nodais (média aritmética).

A massa específica na Equação H6 surge na formulação original de Baliga e Patankar, devido à variável transportada estar referida à massa do material que a transporta. Nesta pesquisa, a variável transportada corresponde à concentração dos vírus, e é referida ao volume e não à massa do fluido. Por esse motivo o valor ρ empregado nesta tese é ρ = 1. O símbolo ρ é utilizado nas equações deste apêndice para manter a conformidade com a formulação original.

A partir do número de Peclet calculado, é feita uma nova transformação apenas das coordenadas do eixo X1'. Essa nova transformação é realizada com a função exponencial mostrada na Equação H8.

$$\xi = \frac{D}{\rho V_n}[Exp(P_e \frac{X - X_{\max}}{X_{\max} - X_{\min}}) - 1] \qquad \text{(H8)}$$

Com ξ e Y = X2' são finalmente definidos os valores das coordenadas a serem empregadas na Equação H1. A obtenção das constantes A, B e D da Equação H1 segue as mesmas regras da função de interpolação linear tradicional.

Para o caso de interpolação em tetraedros, a Equação H1 é modificada, se tornando:

$$C = A\xi + BY + DZ + E \qquad \text{(H9)}$$

Onde os valores ξ são obtidos com (H8) e os valores Y e Z representam as coordenadas nos eixos ortogonais com origem no baricentro do tetraedro (homologas ao eixo X2'). As constantes são determinadas a partir das novas coordenadas ξ ,Y e Z de maneira similar à função de interpolação linear.

A seguir é mostrada a aplicação da função exponencial para um caso bidimensional simples. Considere o triângulo da Figura H2, com o sistema de global de coordenadas X1 e X2. Para cada nó do elemento são mostradas as coordenadas no sistema global. Para efeitos da simplicidade, a direção do fluxo no baricentro coincide com a direção do eixo X1. O módulo do vetor de velocidade é considerado unitário $V_n = 1$ Desta forma, o novo sistema local de coordenadas X1'-X2' coincide com o sistema global.

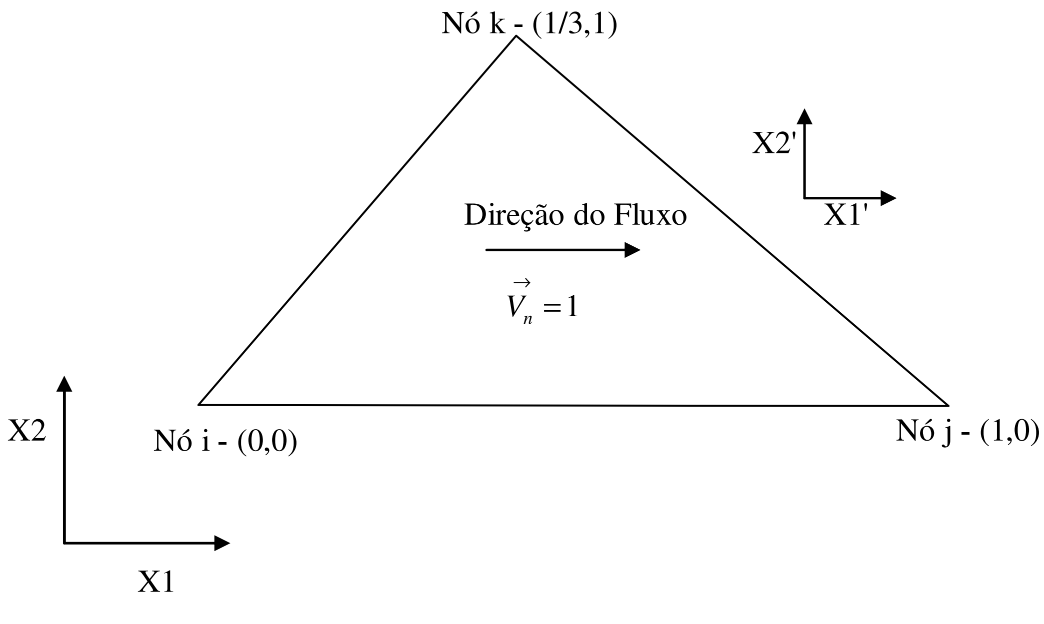

Figura H2. Exemplo de Aplicação.

Assim, as coordenadas nodais no novo sistema local são:

	Coord. X1	Coord. X2	Coord. X1'	Coord. X2'=Y
Nó i	0	0	-0,444	-0,333
Nó j	1	0	0,556	-0,333
Nó k	1/3	1	-0,111	0,667

Para estas coordenadas $xmax - xmin = 1{,}0$

A partir das coordenadas anteriores, foram avaliadas as funções de interpolação no baricentro do elemento para dois casos de número de Peclet.

$P_e = 0.0001$ (corresponde a D = 10000)

$P_e = 10000$ (corresponde a D = 0,0001)

Os valores das coordenadas ξ Y e das funções de interpolação nodais são mostrados a seguir.

	Coord. ξ para D = 10000	Coord. ξ para D = 0,0001	Coord. Y	Interpolação para Pe = 0.0001	Interpolação para Pe = 10000
Nó i	-1,000	-0,0001	-0,333	1/3	2/3
Nó j	0,000	0	-0,333	1/3	0
Nó k	-0,667	-0,0001	0,667	1/3	1/3

Dos resultados anteriores é possível concluir que:

Para números de Peclet baixos, isto é, para problemas de dispersão dominante, a função exponencial reproduz os mesmos valores que a função linear.

Para números de Peclet altos, isto é, problemas com advecção dominante, a função exponencial consegue reproduzir o efeito do sentido do fluxo. No caso do exemplo anterior, o valor no baricentro da variável interpolada é dado apenas pela combinação dos valores dos nós i e k. Isto é fisicamente correto uma vez que informação é transmitida no sentido do nó j. A informação do nó j não pode ser transmitida a montante.

Anexo 1:
Soluções Analíticas

São mostradas neste anexo, as soluções analíticas empregadas no Capítulo 5 para validar a solução numérica do programa VirTran-3D.

An.1.
Fluxo Saturado Unidimensional em Regime Transiente

Solução apresentada por Carslaw e Jaeger (1946) (apud Frind,1995) para condição de contorno do tipo Dirichlet.

$$\frac{u(x,t)}{u_o} = \left\{1 - \frac{x}{L}\right\} - \frac{2}{\pi}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n} sen\left\{\frac{n\pi x}{L}\right\}\exp\left\{\frac{-n^2\pi^2 Kt}{L^2 Ss}\right\} \qquad \text{(An.1)}$$

onde

u = carga de pressão (L)

u_o = carga de pressão imposta (L)

x = distância (L)

L = comprimento do domínio (L)

t = tempo (T)

K = permeabilidade saturada (L/T)

S_s = armazenamento específico (1/L)

An.2.
Transporte unidimensional de vírus no meio poroso saturado

Soluções apresentadas por Sim e Chrysikopoulos (1995) para condições de contorno do tipo Dirichlet e Neuman.

Para Condição de Dirichlet:

$$C(x,t) = C_0 Exp\left[\frac{Ux}{2D}\right]\left\{\int_0^t \mathrm{H}\left(Exp(-H\tau)\int_0^\tau \frac{xJ_0\left[2\sqrt{B\varsigma(\tau-\varsigma)}\right]}{2\sqrt{D\pi\varsigma^3}} Exp\left[\frac{-x^2}{4D\varsigma} + (H - A - \frac{U^2}{4D})\varsigma\right] d\varsigma \right) d\tau\right.$$

$$\left. + Exp(-Ht)\int_0^t \frac{xJ_0\left[2\sqrt{B\varsigma(t-\varsigma)}\right]}{2\sqrt{D\pi\varsigma^3}} Exp\left[\frac{-x^2}{4D\varsigma} + (H - A - \frac{U^2}{4D})\varsigma\right] d\varsigma \right\} \qquad \text{(An.2)}$$

Para Condição de Neuman:

$$C(x,t) = \frac{C_0 U}{\sqrt{D}} Exp\left[\frac{Ux}{2D}\right]\left\{\int_0^t\int_0^\tau H \quad Exp(-H\tau) J_0\left[2\sqrt{B\varsigma(\tau-\varsigma)}\right] * \right.$$

$$\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi\varsigma}} Exp\left[\frac{-x^2}{4D\varsigma} + \left(H - A - \frac{U^2}{4D}\right)\varsigma\right] - \frac{U}{2\sqrt{D}} Exp\left[\frac{Ux}{2D} + (H-A)\varsigma\right] Erfc\left[\frac{x}{2\sqrt{D\varsigma}} + \frac{U}{2}\sqrt{\frac{\varsigma}{D}}\right]\right\} d\varsigma d\tau$$

$$+ Exp(-Ht)\int_0^t J_0\left[2\sqrt{B\varsigma(\tau-\varsigma)}\right]\left\{\frac{1}{\sqrt{\pi\varsigma}} Exp\left[\frac{-x^2}{4D\varsigma} + \left(H - A - \frac{U^2}{4D}\right)\varsigma\right]\right.$$

$$\left.\left. - \frac{U}{2\sqrt{D}} Exp\left[\frac{Ux}{2D} + (H-A)\varsigma\right] Erfc\left[\frac{x}{2\sqrt{D\varsigma}} + \frac{U}{2}\sqrt{\frac{\varsigma}{D}}\right]\right\} d\varsigma \right\}$$

(An.3)

Onde

$$A = K_{att} + \mu_l \qquad \text{(An.4)}$$

$$B = \frac{K_{att} K_{\det}\theta}{\rho} \qquad \text{(An.5)}$$

$$H = \frac{K_{\det}\theta}{\rho} + \mu_{din} \qquad \text{(An.6)}$$

C = Concentração na fase líquida (vírus/L^3)

C_0 = Concentração na fase líquida imposta no contorno (vírus/L^3)

U = velocidade intersticial do fluido (L/T)

D = dispersão dos vírus (L^2/T)

K_{att} = taxa de adsorção (1/T)

K_{det} = taxa de desorção (1/T)

μ_l = taxa de inativação dos vírus na fase líquida (1/T)

μ_{din} = taxa de inativação dos vírus na fase sorvida (1/T)

θ = teor de umidade volumétrico saturado (L^3/L^3)

x = distância (L)

t = tempo (T)

J_0 = Função de Bessel do primeiro tipo de ordem zero.

An.3. Transporte unidimensional de colóides numa fratura saturada com abertura constante

Soluções apresentadas por Addel-Salam e Chrysikopoulos (1994) para condições de contorno do tipo Dirichlet e Neuman.

Para Condição de Dirichlet:

$$C(x,t)=\frac{C_o}{2}\left\{\begin{array}{l} Exp\left[\dfrac{Ux}{2D}(1-\xi)\right]Erfc\left[\dfrac{x-Ut\xi}{2\sqrt{Dt}}\right] \\ +Exp\left[\dfrac{Ux}{2D}(1+\xi)\right]Erfc\left[\dfrac{x+Ut\xi}{2\sqrt{Dt}}\right]\end{array}\right\} \qquad \text{(An.7)}$$

Para Condição de Neuman:

$$C(x,t)=C_0\left\{\begin{array}{l} \dfrac{1}{1+\xi}Exp\left[\dfrac{Ux}{2D}(1-\xi)\right]Erfc\left[\dfrac{x-Ut\xi}{2\sqrt{Dt}}\right] \\ +\dfrac{1}{1-\xi}Exp\left[\dfrac{Ux}{2D}(1+\xi)\right]Erfc\left[\dfrac{x+Ut\xi}{2\sqrt{Dt}}\right] \\ +\dfrac{Ub^2}{4Dk}Exp\left[\dfrac{Ux}{D}-\dfrac{2Ukt}{b^2}\right]Erfc\left[\dfrac{x+Ut\xi}{2\sqrt{Dt}}\right]\end{array}\right\} \qquad \text{(An.8)}$$

Onde:

$$\xi=(1+\frac{8kD}{Ub^2})^{1/2} \qquad \text{(An.9)}$$

C = Concentração na fase líquida (# colóides/L^3)

C_0 = Concentração na fase líquida imposta no contorno (# colóides/L^3)

U = velocidade intersticial do fluido (L/T)

D = dispersão dos colóides (L^2/T)

k = coeficiente de deposição na fratura (L)

b = abertura da fratura (L)

x = distância (L)

t = tempo (T)