

## 4 Implementação e validação numérica

Na seção anterior procurou-se mostrar os algoritmos que serão utilizados na simulação do problema de fluxo e transporte do NAPL no meio não saturado.

Para a modelagem do problema programou-se o algoritmo da solução no MATLAB. O programa desenvolvido resolve numericamente, pelo método dos volumes finitos, as equações antes mencionadas.

As hipóteses assumidas neste modelo são:

- Meio poroso rígido, homogêneo e isotrópico.
- Conteúdo de água (saturação residual) constante.
- A presença do ar no subsolo é levada em conta (fluxo não saturado)
- Portanto, somente o NAPL está sujeito ao fluxo transiente no sistema trifásico.
- Fluxo bidimensional, transiente.
- Fluido incompressível.
- O fluxo pode ocorrer no plano vertical, plano horizontal ou em regiões tridimensionais que tenham simetria radial em relação ao eixo vertical.
- Este programa utiliza elementos quadrados.
- O modelo de propriedades hidráulicas implementado no programa é o modelo de Brooks and Corey.
- Os parâmetros utilizados foram obtidos de estudos anteriores realizados na PUC-Rio na dissertação de Guilherme Barros de Castro Filho.

A figura 10 apresenta um fluxograma do programa implementado.

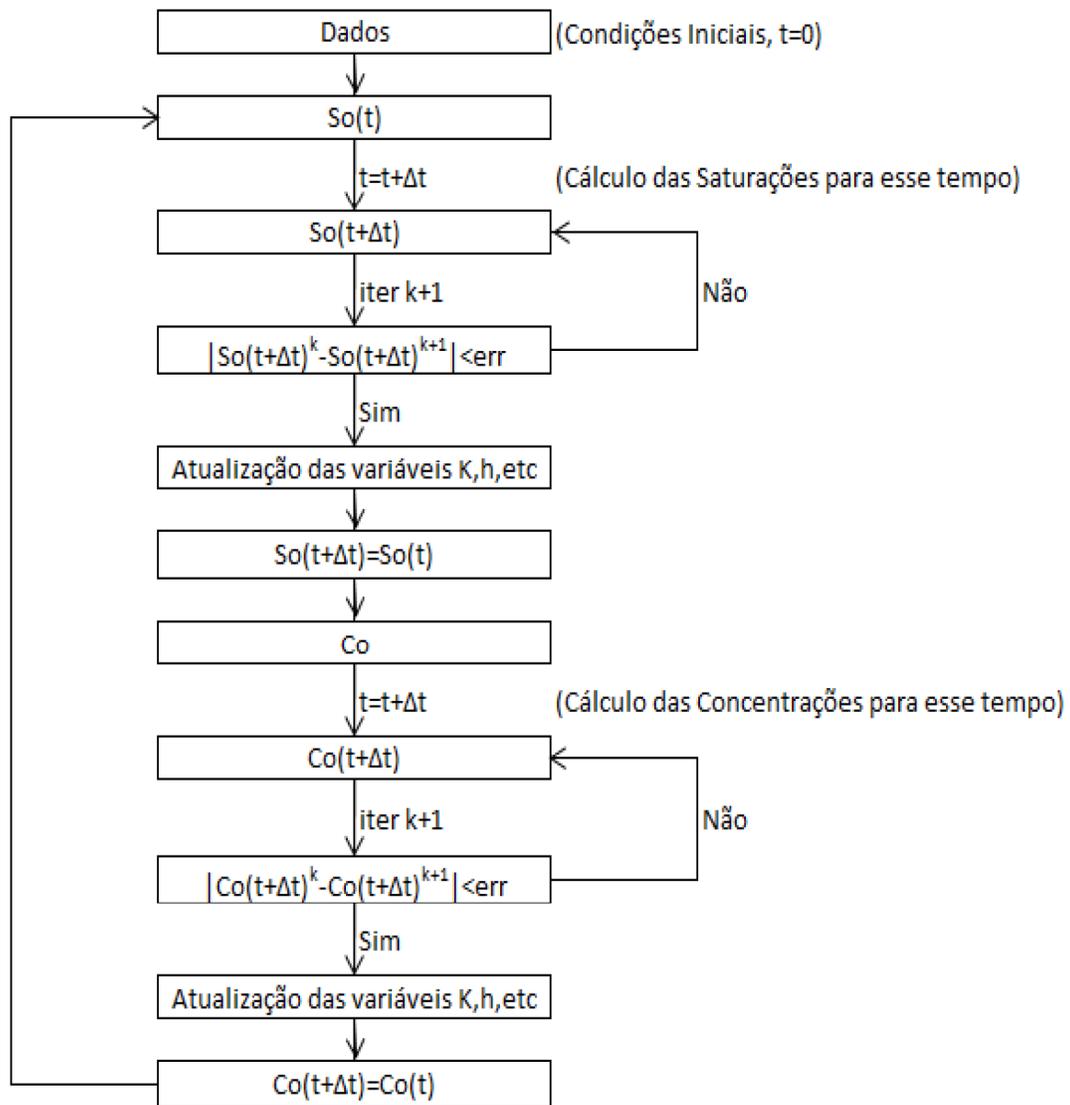


Figura 10 - Fluxograma.

O programa foi desenvolvido em etapas que se descrevem a continuação:

#### 4.1. Etapa 1

Para desenvolver o programa primeiro se fez um modelo de infiltração unidimensional sem considerar pressões capilares na zona não saturada do solo resolvendo a equação de Richards usando o método dos volumes finitos (implícito convencional) implementado no MatLab.

#### 4.2. Etapa 2

Na etapa 2 é implementado o programa da etapa um, considerando pressões capilares e é validado usando o HYDRUS. Utilizou-se também o modelo de Brooks and Corey.

Então a primeira validação será do fluxo unidimensional na zona vadosa:

Dados:

Qr=0.027;	Conteúdo residual de água
Qs=0.434;	Conteúdo saturado de água
alfa=8.97;	Inverso da pressão de entrada do ar [m <sup>-1</sup> ]
n=0.22;	Índice de distribuição do tamanho dos poros
l=1;	Parâmetro de conectividade dos poros
Ks=3.66667*10 <sup>-6</sup> ;	Permeabilidade saturada [m/s]
L=1;	Espessura da camada [m]
T=50000;	Tempo da simulação [s]

Condições Iniciais:

Carga inicial -5m em todo o perfil e no topo -1m.

Condições de Contorno:

Carga na base -5m.

Carga no topo -1m.

Modelo brooks & corey

Material LOAM

Boundary conditions:

Upper: Constant Pressure Head

Lower: Constant Pressure Head

Discretização no espaço: 100 elementos

$h(x,t)$

Resultados no hydrus

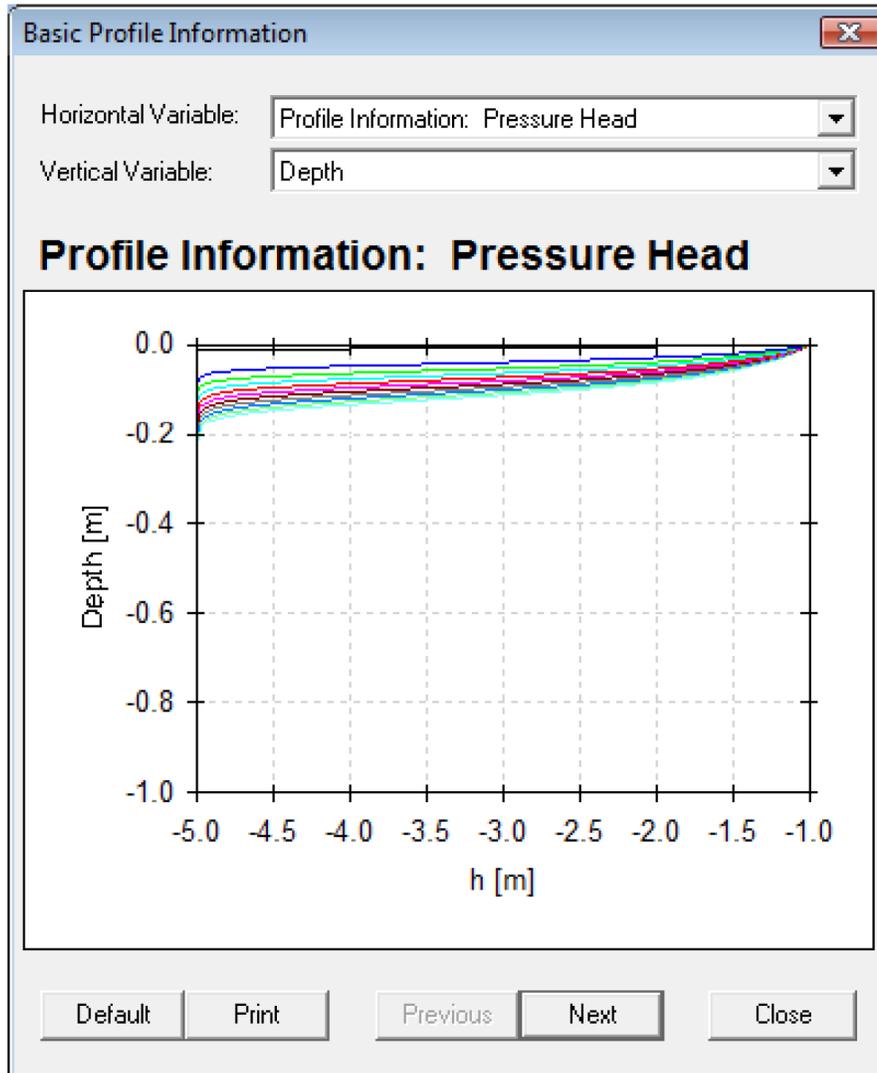


Figura 11 - Resultados da variação da carga de pressão ao longo do tempo usando o programa HYDRUS 1D.

## Resultados no matlab

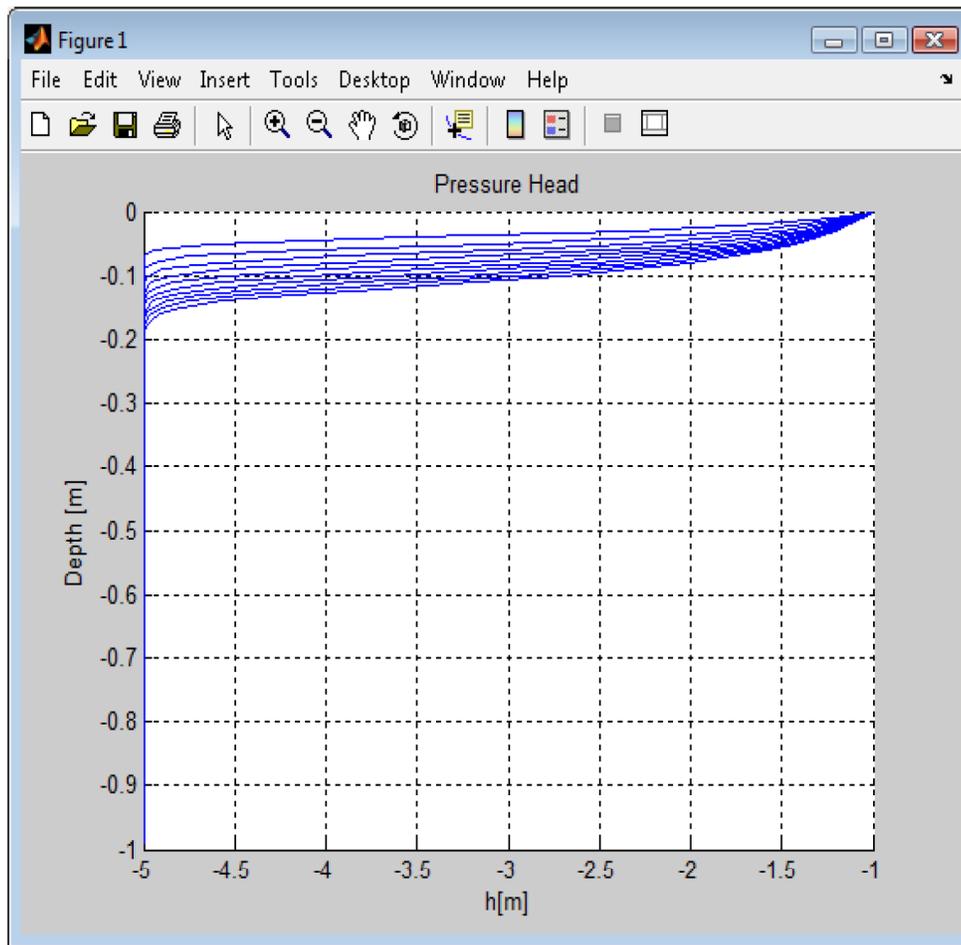


Figura 12 - Resultados da variação da carga de pressão ao longo do tempo usando o programa implementado no MATLAB

### **Comparação dos resultados do HYDRUS com os resultados do programa feito em MATLAB**

Nas figuras a continuação se mostra a comparação dos resultados obtidos no Hydrus com os resultados do programa feito em MatLab das pressões para cada tempo de observação ao longo da camada do solo.

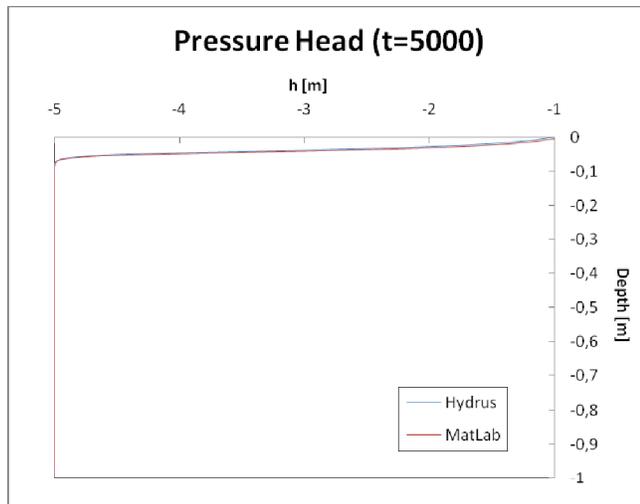


Figura 13 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo t=5000s

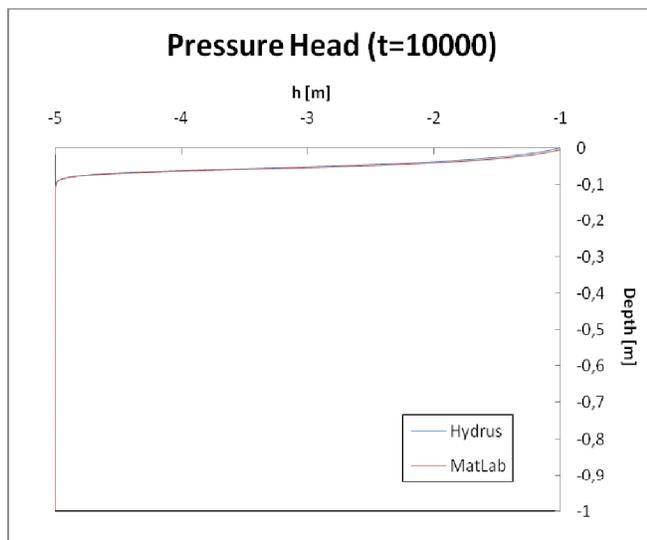


Figura 14 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo t=10000s

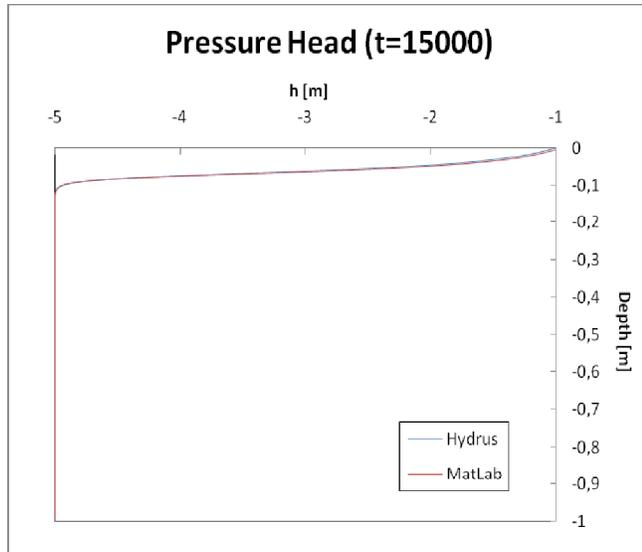


Figura 15 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo  $t=15000$ s

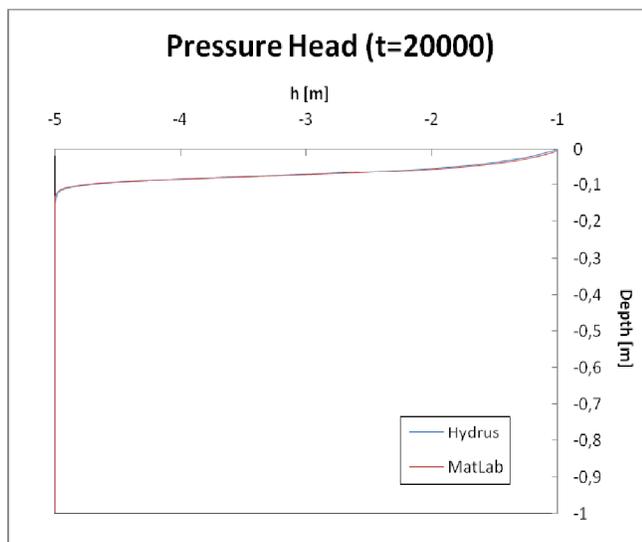


Figura 16 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo  $t=20000$ s

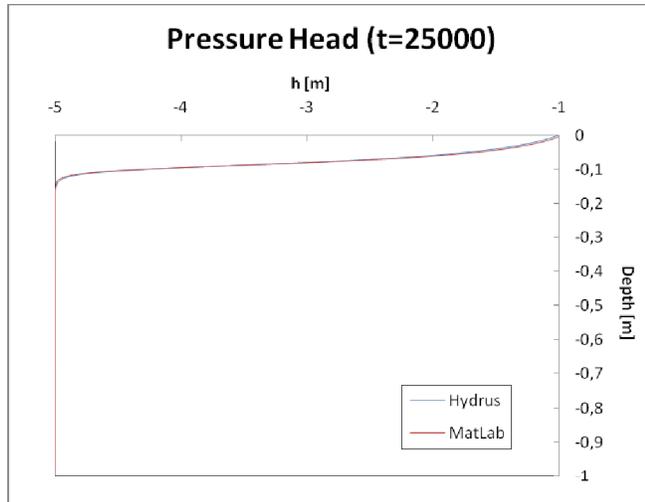


Figura 17 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo  $t=25000$ s

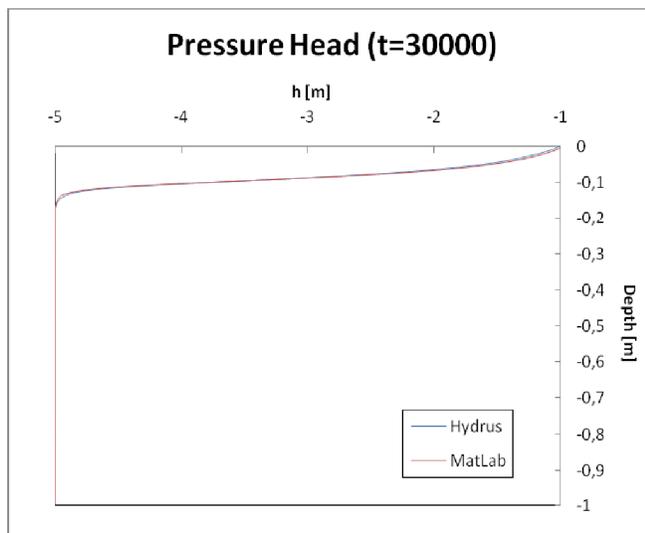


Figura 18 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo  $t=30000$ s

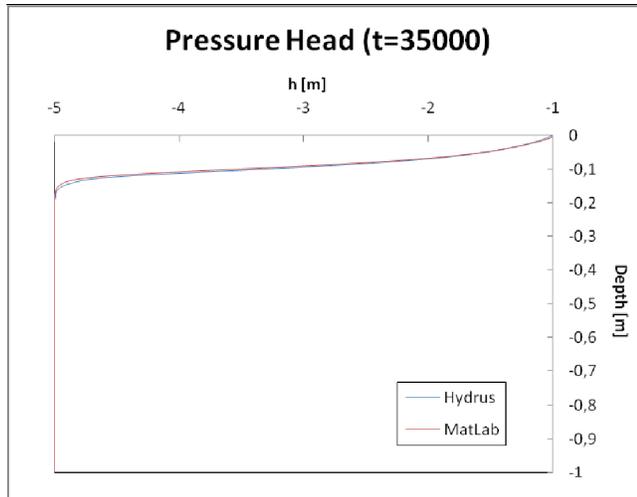


Figura 19 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo t=35000s

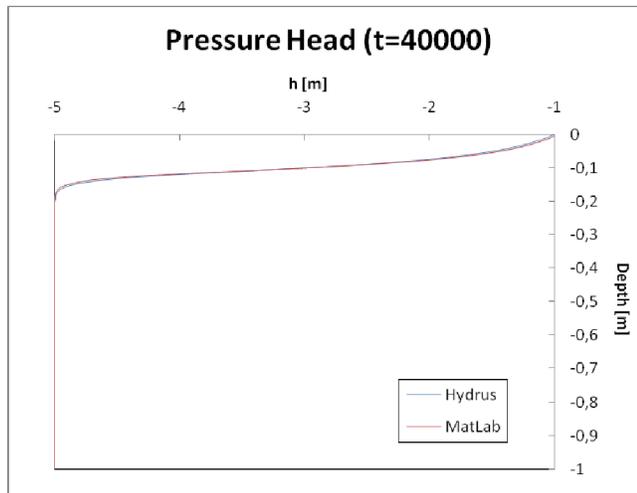


Figura 20 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo t=40000s

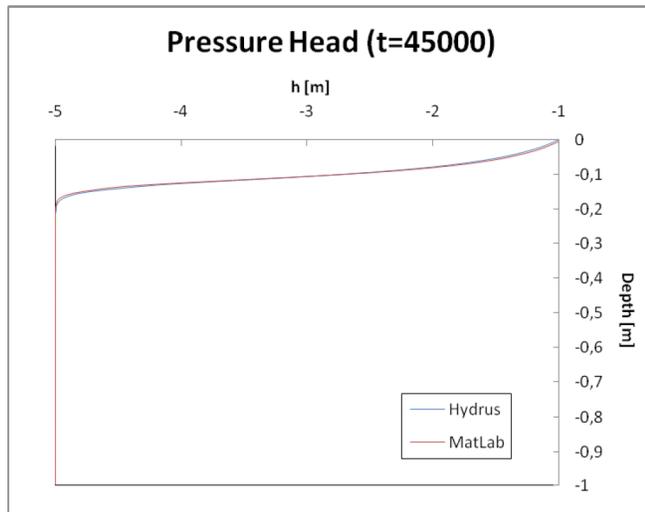


Figura 21 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo  $t=45000$ s

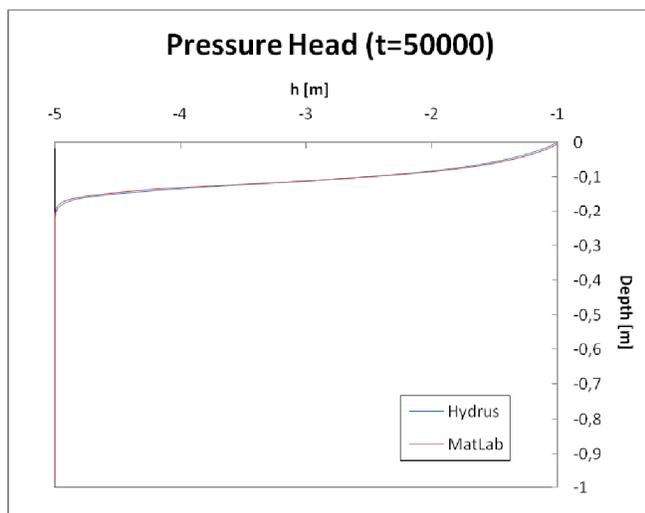


Figura 22 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo  $t=50000$ s

Na tabela embaixo se apresentam resultados numéricos das pressões finais.

t=50000					
Hydrus			MatLab		
x	Elemento	h	x	Elemento	h
-0,005	100	-1	-0,005	100	-1
-0,015	99	-1,058	-0,015	99	-1,0567
-0,025	98	-1,125	-0,025	98	-1,1242
-0,035	97	-1,205	-0,035	97	-1,2053
-0,045	96	-1,301	-0,045	96	-1,3037
-0,055	95	-1,414	-0,055	95	-1,4246
-0,065	94	-1,551	-0,065	94	-1,575
-0,075	93	-1,721	-0,075	93	-1,7646
-0,085	92	-1,93	-0,085	92	-2,006
-0,095	91	-2,196	-0,095	91	-2,3143
-0,105	90	-2,518	-0,105	90	-2,7036
-0,115	89	-2,924	-0,115	89	-3,1755
-0,125	88	-3,378	-0,125	88	-3,697
-0,135	87	-3,851	-0,135	87	-4,1885
-0,145	86	-4,291	-0,145	86	-4,5621
-0,155	85	-4,613	-0,155	85	-4,7908
-0,165	84	-4,808	-0,165	84	-4,9086
-0,175	83	-4,905	-0,175	83	-4,9626
-0,185	82	-4,956	-0,185	82	-4,9854
-0,195	81	-4,98	-0,195	81	-4,9946
-0,205	80	-4,991	-0,205	80	-4,998
-0,215	79	-4,996	-0,215	79	-4,9993
-0,225	78	-4,999	-0,225	78	-4,9998
-0,235	77	-5	-0,235	77	-4,9999
-0,245	76	-5	-0,245	76	-5
-0,255	75	-5	-0,255	75	-5
-0,265	74	-5	-0,265	74	-5
-0,275	73	-5	-0,275	73	-5
-0,285	72	-5	-0,285	72	-5
-0,295	71	-5	-0,295	71	-5
-0,305	70	-5	-0,305	70	-5
-0,955	5	-5	-0,955	5	-5
-0,965	4	-5	-0,965	4	-5
-0,975	3	-5	-0,975	3	-5
-0,985	2	-5	-0,985	2	-5
-0,995	1	-5	-0,995	1	-5

Tabela 1 Comparação dos resultados das pressões finais usando os dois programas.

O Hydrus usa o método dos elementos finitos enquanto no MatLab se usou o método dos volumes finitos.

Os resultados obtidos com a simulação feita no MatLab são bastante parecidos com os resultados no Hydrus, isto se mostra tanto nas figuras quanto na tabela de comparação. Esses resultados validam as implementações computacionais da equação de fluxo unidimensional não saturado.

### **4.3. Etapa 3**

Extensão do programa para fluxo de NAPL em um sistema trifásico, considerando pressões capilares e um teor de água tem valor constante igual ao teor residual.

Ainda nesta etapa o programa só trabalha unidimensionalmente.

### **4.4. Etapa 4**

Programou-se um modelo de infiltração bidimensional de NAPL na zona não saturada do solo usando o método dos volumes finitos (explícito) no MatLab considerando o modelo de Brooks e Corey-Burdine. Para validar o programa se contrastou os resultados, que serão apresentados em detalhe no capítulo que segue, com o ensaio de aquário realizado por uma equipe da PUC-Rio.

Com o objetivo de analisar o comportamento da gasolina ao infiltrar na zona não saturada do solo, simularam-se vazamentos deste fluido através de ensaios de aquário em laboratório.

Para representar o meio poroso, foi utilizado um material granular inerte (esferas de vidro) por este não influenciar quimicamente nos resultados dos ensaios de coluna realizados em laboratório.

Este fato é uma vantagem, uma vez que não são necessários parâmetros para considerar a interação solo-contaminante, facilitando a simulação dos ensaios com o modelo e a sua interpretação.

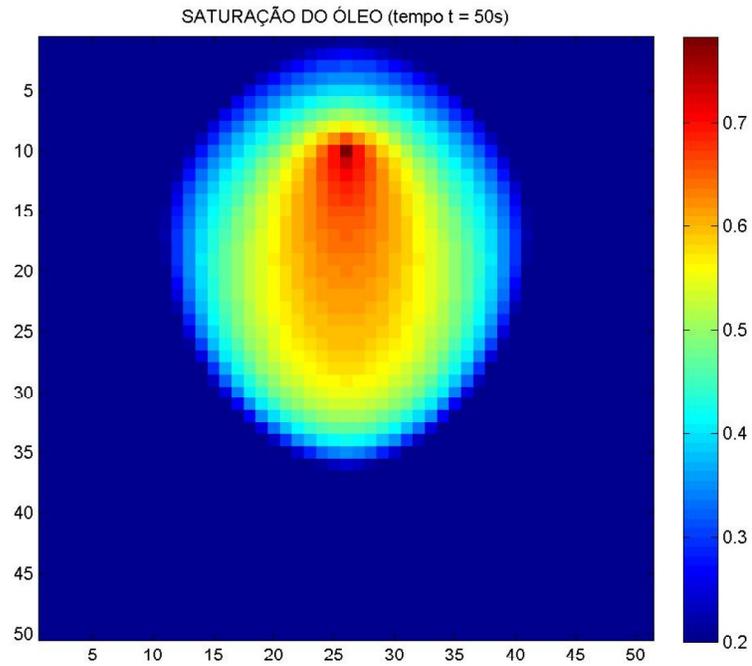


Figura 23 - Saturação do NAPL na camada do solo após um tempo de 50 segundos de iniciado o vazamento modelado no MatLab

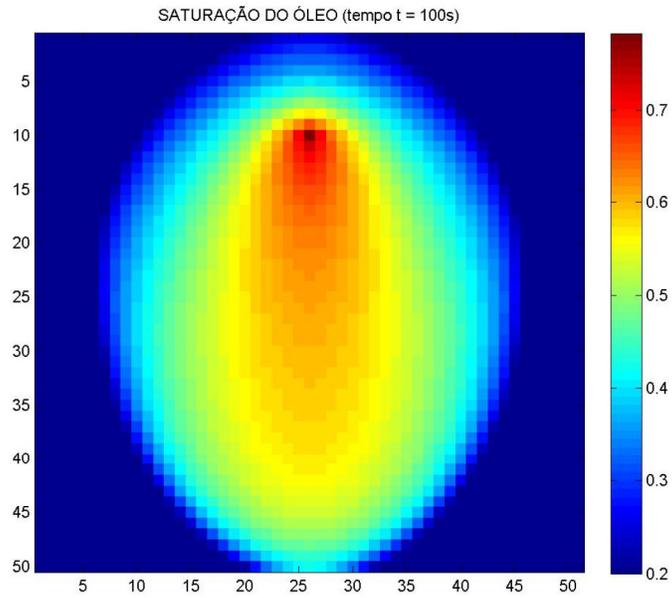


Figura 24- Saturação do NAPL na camada do solo após um tempo de 100 segundos de iniciado o vazamento modelado no MatLab.

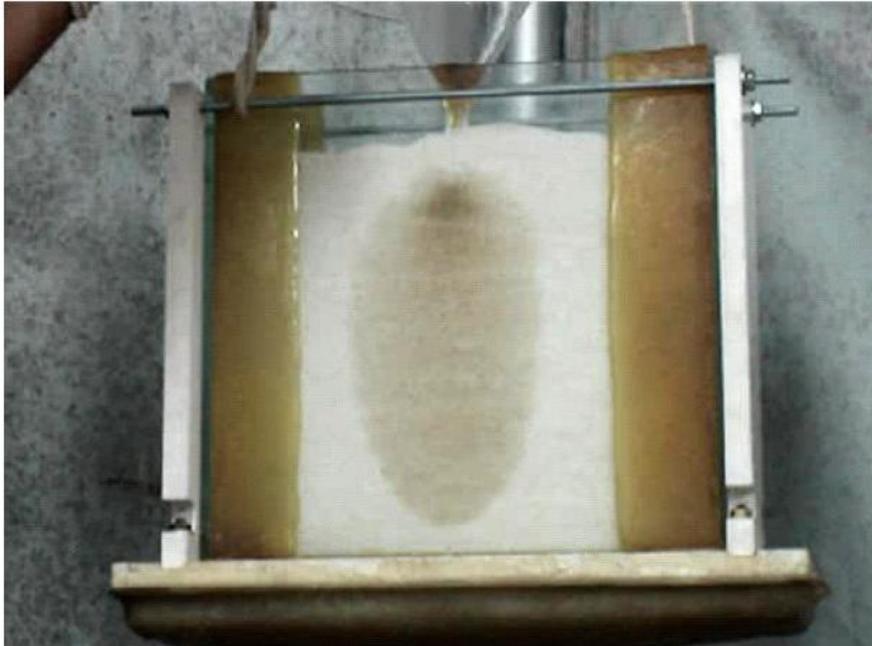


Figura 25 – Ensaio de aquírio.



Figura 26 - Saturação do NAPL na camada do solo (esferas de vidro).

A Figura 22 apresenta os resultados da saturação de um vazamento do NAPL em um solo não saturado após 100 segundos. Estes resultados são contrastados com os do ensaio do laboratório cujo resultado se vê na Figura 24. A comparação das figuras valida a implementação da equação de fluxo trifásico bidimensional não saturado.

Para o caso tridimensional não se fez a implementação porque ao tratar-se de um solo isotrópico homogêneo o comportamento é o mesmo em qualquer seção transversal do solo (o bulbo de saturação tem um comportamento de simetria radial).

#### **4.5. Etapa 5**

Nesta etapa se implementou o transporte de contaminantes usando os dados do programa anterior, primeiramente resolveu-se o caso unidimensional cujos resultados serão apresentados no capítulo seguinte.