

SIMULAÇÃO NUMÉRICA DO MOVIMENTO DE ÁGUA E SOLUTOS EM SOLOS NÃO SATURADOS

ÂNGELO ANTÔNIO CAMPOS

Dissertação apresentada à Universidade Federal do Espírito Santo, como parte das exigências do Programa de Pós-Graduação em Produção Vegetal, para obtenção do título de Mestre em Produção Vegetal.

Aprovada: 30 de março de 2007

Prof. Dr. João Batista Pavesi Simão
Escola Agrotécnica Federal de Alegre
- EAFA -ES

Prof. Dr. Julião Soares de Souza Lima
Centro de Ciências Agrárias – UFES

Prof. Dr. Alexandre Cândido Xavier
Centro de Ciências Agrárias – UFES

Prof. Dr. Renato Ribeiro Passos
Centro de Ciências Agrárias – UFES
(Co-orientador)

Prof. Dr. Paulo César Oliveira
Centro de Ciências Agrárias – UFES
(Orientador)

DEDICO.

À minha grande Família...

...minha mãe Vitória Gomes Campos...

...minha irmã Heloisa Helena...

...meu irmão Eduardo Luis...

...minha cunhada Regina Silveira...

...meu cunhado Vicente dos Santos...

*...que sempre acreditaram em mim, me apoiando e incentivando
através de gestos de amor e carinho que fizeram parte
dessa importante etapa de minha vida...*

Essa conquista também é de vocês!!!

***“Não há garantia de que a Pesquisa resolverá todos os
Problemas, mas nenhum Problema será resolvido sem pesquisa.”***

Anthony H. Purcell

AGRADECIMENTOS

A Deus, por ter me proporcionado saúde e disposição para driblar os momentos difíceis da caminhada até aqui.

A minha mãe Vitória Gomes Campos, que lutou bastante para que um dia pudesse ver seu filho realizar um sonho tão desejado.

A meus irmãos que sempre estiveram ao meu lado, em especial ao Eduardo e à sua esposa Regina, por participarem tão diretamente dessa minha conquista.

Ao Professor Dr. Paulo César Oliveira, pela orientação deste trabalho, pela amizade, pela paciência, pela confiança depositada, pelos exemplos positivos de ser humano, de pesquisador e de conduta ética e dedicação.

Ao professor Dr. Renato Ribeiro Passos, pela Co-orientação, pela amizade e sabedoria compartilhada.

Aos professores, membros da Banca examinadora, Prof. Dr. Antonio Aparecido Martinez, Prof. Dr. Alexandre Cândido Xavier, Prof. Dr. Julião Soares de Souza Lima, pelos ensinamentos, sugestões, discussões e críticas que contribuíram para o enriquecimento do trabalho.

Aos amigos da Pós-graduação em Produção Vegetal, em especial Pedro Quarto Junior, Regina Gonçalves de Oliveira, Rosemberg Bragança, pelas horas de estudo e trabalho em conjunto, que contribuiu para nossa meta final.

Aos amigos Valério Raymundo e José Arnaldo Moraes pela paciência, pela amizade e pela mão estendida nos piores momentos.

A Secretária Municipal de Meio Ambiente de Cachoeiro de Itapemirim, Horlandezan B.N. Bragança, pela confiança e disponibilidade das informações necessárias.

Ao Centro de Ciências Agrárias da Universidade Federal do Espírito Santo (CCA-UFES), por me proporcionar a oportunidade de concluir os cursos de Graduação e de Mestrado nesta conceituada instituição.

Aos empresários do setor de Mármore e Granitos pela cooperação e disponibilidade.

A todas aquelas pessoas que direta ou indiretamente contribuíram para que este trabalho fosse concluído.

A FAPES, Fundação de Apoio à Ciência e Tecnologia do Espírito Santo, pelo apoio financeiro à pesquisa.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	vii
LISTA DE SÍMBOLOS	viii
RESUMO	ix
ABSTRACT	xi
1. INTRODUÇÃO	1
2. REVISÃO DE LITERATURA	5
2.1. Aspectos físicos do solo	5
2.1.1. Porosidade do solo.....	7
2.1.2. Textura do solo.....	10
2.1.3. Estrutura do solo.....	10
2.2. Relação entre condutividade hidráulica, umidade e potencial mátrico da água no solo.....	11
2.3. Movimento de água e solutos no solo	13
2.4. Simulação numérica no processo de infiltração.....	16
3. MATERIAL E MÉTODOS.....	18
3.1.Caracterização do ambiente e coleta de amostras.....	18
3.2. Desenvolvimento numérico do esquema Flux-Spline.....	19
3.2.1. Condição de Continuidade da Variável Dependente.....	22
3.2.2. Esquema Flux- Spline para Convecção-Difusão.....	27
4. RESULTADOS E DISCUSSÃO.....	30
4.1. Análises laboratoriais.....	30
4.2. Problema teste computacional.....	32
4.3. Programa construído.....	35
5. CONCLUSÕES	44

6. REFERÊNCIAS	45
ANEXOS.....	50
ANEXO A - Área referente ao fundo do depósito temporário, localização da coleta a amostra T ₁	51
ANEXO B - Coleta de amostra indeformada T ₂ do fundo do depósito temporário.....	52
ANEXO C -Foto da parede lateral do depósito temporário, coleta da amostra indeformada T ₃	53
ANEXO D – Coleta da amostra indeformada T ₄ utilizada como solo testemunha.....	54
ANEXO E - Foto da parede lateral do depósito temporário, coleta da amostra indeformada J ₁	55
ANEXO F - Foto da parede lateral do depósito temporário, coleta da amostra indeformada J ₂	56
ANEXO G - Resultados das análises das amostras de solo coletadas.....	57
ANEXO H - Resultados dos Testes de Solubilização e Lixiviação.....	58

LISTA DE FIGURAS

Figura 1. Discretização unidimensional para volumes finitos.....	20
Figura 2. Gráfico do comportamento da umidade no solo para 5; 10; 20 e 100 volumes de controles.....	33
Figura 3. Gráfico do comportamento da concentração do soluto no solo para 5; 10; 20 e 100 volumes de controles.....	34

LISTA DE SÍMBOLOS

AP	coeficiente da equação de discretização
AIP	coeficiente da equação de discretização
AIM	coeficiente da equação de discretização
BJX	coeficiente da equação de discretização do fluxo total JX
CJX	coeficientes da equação de discretização do fluxo total JX
DJX	coeficientes da equação de discretização do fluxo total JX
Jx	fluxo total na direção X
L	comprimento característico
P	número de Péclet
U	umidade
U _o	umidade inicial
U _{sat}	umidade de saturação

CAMPOS, Ângelo Antonio, M.Sc., Universidade Federal do Espírito Santo, março de 2007. **Simulação numérica do movimento de água e solutos em solos não saturados**. Orientador: Prof. Dr. Paulo César Oliveira. Co-orientador: Prof. Dr. Renato Ribeiro Passos.

RESUMO - O interesse em estudar problemas de escoamento subterrâneo e transporte de solutos em solos não saturados tem aumentado significativamente nos últimos anos, principalmente por causa da preocupação crescente com a qualidade do solo e do meio ambiente em geral. Fertilizantes aplicados em terras agrícolas movem-se abaixo da zona radicular das plantas e podem contaminar lençóis de água subterrâneos e aquíferos. Um dos desafios mais significativos da agricultura atual é o aumento da competitividade associada à preservação do meio ambiente, permitindo benefícios sustentáveis nas explorações agrícolas. O impacto de contaminantes na qualidade da água subterrânea tem sido objeto de pesquisa e de saúde pública, especialmente em regiões onde ela é a principal fonte de água potável. Os modelos matemáticos surgem como ferramenta útil na predição de quanto e quando se deve proceder a irrigação e o comportamento dos solutos no solo. Devido à complexidade envolvida nestes fenômenos físicos, utiliza-se atualmente ao lado do trabalho experimental, a simulação numérica como ferramenta de previsão. A simulação numérica do problema de infiltração de água e solutos em solo não saturado é de grande importância, pois o crescimento da produção agrícola exige transformações com inovações tecnológicas que permitam a melhoria da produtividade das culturas. Para simular o transporte transiente de fertilizantes, defensivos, herbicidas e poluentes num solo agrícola não saturado é necessária a solução de duas equações diferenciais não lineares. Uma delas é a equação de Richards, que governa o movimento de água no solo e, após a sua solução para um determinado tempo, os resultados obtidos para umidade, são empregados para a solução da outra equação que trata do transporte de um determinado soluto em particular. Este trabalho teve por objetivo, resolver o modelo proposto de infiltração de água e soluto no solo pelo método de volumes finitos, utilizando-se programação FORTRAN 90, para tratar o caso da não linearidade da movimentação da água e um determinado soluto em solos não saturados. Dentre os solutos analisados, utilizamos amostras de lama abrasiva provenientes das serrarias e politrizes das empresas de mármore e granitos do município de Cachoeiro de Itapemirim, onde foram realizados vários ensaios e análises, para alimentar o

programa e avaliar se o material em questão é um contaminante em potencial do solo. O método proposto mostrou-se adequado para resolver problemas de infiltração de água e transporte de solutos em solos não saturados.

Palavras-chave: convecção-difusão, dinâmica de água em solo não saturado, simulação numérica, transporte de solutos em solo.

CAMPOS, Ângelo Antonio, M.Sc., Universidade Federal do Espírito Santo, march of 2007. **Numerical simulation of the water movement and solutes in soil unsaturated**. Advisor: Prof. Dr. Paulo César Oliveira. Co-advisor: Prof. Dr. Renato Ribeiro Passos.

ABSTRACT - The interest in studying problems of underground drainage and solutes transport not in soils saturated it has been increasing significantly in the last years, mainly because of the growing concern with the quality of the soil and of the environment in general. Applied fertilizers in agricultural lands move below the zone radicular of the plants and they can contaminate underground water tables and aquíferos. One of the most significant challenges of the current agriculture is the increase of the competitiveness associated to the preservation of the environment, allowing maintainable benefits in the agricultural explorations. The impact of pollutants in the quality of the underground water has been research object and of public health, especially in areas where she is to main source of drinking water. The mathematical models appear as useful tool in the prediction of as and when she should proceed the irrigation and the behavior of the solutos in solo. Devido to the complexity involved in these physical phenomena, it is used now beside the experimental work, the numeric simulation as forecast tool. The numeric simulation of the problem of infiltration of water and solutos in soil not saturated it is of great importance, because the growth of the agricultural production demands transformations with technological innovations that allow the improvement of the productivity of the cultures. To simulate the transport transiente of fertilizers, defensive, herbicidas and pollutant in an agricultural soil not saturated it is necessary the solution of two equations you not differentiate lineal. One of them is the equation of Richards, that governs the movement of water in the soil and, after your solution for a certain time, the results obtained for humidity, they are used for the solution of the other equation that treats of the transport of a certain soluto in matter. This work had for objective, to solve the proposed model of infiltration of water and soluto in the soil for the method of finite volumes, being used programming FORTRAN 90, to treat the case of the non linearidade of the movement of the water and a certain soluto not in soils saturated. Among the analyzed solutos, we used samples of abrasive mud coming of the sawmills and politrizes of the companies of marbles and granites of the municipal district of Cachoeiro of Itapemirim, where several rehearsals and analyses were accomplished, to feed the program and to evaluate the material in subject it is a

pollutant in potential of the soil. The proposed method was shown appropriate to solve problems of infiltration of water and solutes transport not in soils saturated.

Keywords: convection-diffusion, water dynamics in unsaturated soil, numerical simulation, solutes transport in soil.

1. INTRODUÇÃO

O estudo do solo tornou-se tarefa fundamental para a comunidade científica, pois, apesar 75% do nosso planeta ser composto por água, é em terra firme que se desenvolve a grande diversidade de vida e a maior parte do processo produtivo da humanidade (CAMPOS,1998).

Sendo o solo o principal meio de proteção das águas subterrâneas, atuando como um filtro capaz de depurar e imobilizar parte das impurezas nele introduzidas, a alteração de sua qualidade torna-se extremamente relevante, já que a qualidade de água disponível no planeta tem-se tornado cada vez mais limitada (CETESB,2001). A água subterrânea, segundo a Associação Brasileira de Normas Técnicas, é a água que ocupa a zona saturada do subsolo ou em um sentido mais amplo, é toda a água situada abaixo da superfície do solo, na litosfera (ABNT,1993). Nesse cenário, a água subterrânea vem assumindo importância relevante como fonte de abastecimento doméstico, industrial e agrícola, sendo mais da metade da água de abastecimento no Brasil proveniente das reservas subterrâneas.

Proteger a qualidade da água significa proteger também a qualidade do solo. Com o desenvolvimento industrial ocorrido na segunda metade do século XX, numa época anterior ao advento da gestão ambiental, em que não se adotavam medidas preventivas, a desenfreada exploração econômica do solo, assim como sua utilização como depósitos de rejeitos, fez perecer a idéia de um desenvolvimento sustentável, proporcionando danosos impactos ambientais.

A área contaminada, de acordo com a Companhia de Tecnologia e Saneamento Ambiental (CETESB,2004) é local onde há comprovadamente poluição ou contaminação, causada pela introdução de substâncias ou resíduos que nele tenham sido depositados, acumulados, armazenados, enterrados ou infiltrados, de forma planejada ou acidental.

Nessas áreas, os poluentes ou contaminantes podem se concentrar no ar, nas águas superficiais, no solo ou nas águas subterrâneas, podendo ainda ser transportados, propagando-se por diversas vias, o que dificulta diagnosticar sua proveniência e determinar de que maneira sua atuação será prejudicial.

A interação solo-agua-contaminante é bastante complexa, já que são muitos os fenômenos físicos, químicos e biológicos que podem ocorrer simultaneamente. A qualidade do solo pode ser alterada devido a fatores como acúmulo de defensivos agrícolas e fertilizantes, vazamento de produtos químicos e disposição de resíduos sólidos urbanos, industriais, materiais tóxicos e radioativos. Até mesmo os contaminantes em suspensão no ar, oriundos das descargas de escapamentos de veículos, de chaminés e da volatilização dos compostos em superfície, são dissolvidos pela água da chuva e infiltram-se nos solos, contaminando-os.

Entender a dinâmica dessas contaminações é fundamental para orientar as atividades de prospecção e diagnósticos dos impactos gerados pelos solutos lixiviados, bem como para desenvolver uma técnica de remediação econômica e ambientalmente viável. Dessa forma, o desenvolvimento de modelos computacionais, capazes de prever o movimento de poluentes no meio poroso, tornou-se essencial. Como o crescimento da produção agrícola exige transformações com inovações tecnológicas que permitam a melhoria da produtividade das culturas, neste contexto, é conveniente avaliar e adequar cada um dos fatores que compõem o sistema de produção, inclusive o manejo da água de irrigação. Os modelos matemáticos surgem como ferramenta útil, possíveis de serem aplicados na definição de quanto e quando se deve proceder a irrigação, racionalizando a operação e tornando-a mais eficiente em seus vários aspectos.

Inúmeros pesquisadores têm estudado diferentes modelos matemáticos, propiciando diversas soluções numéricas, analíticas e, mais freqüentemente, soluções híbridas numérico-analíticas.

A modelagem constitui-se, numa tentativa, aproximada de representar um fenômeno da natureza. Antes que um modelo seja aplicado a um sistema real, necessita ser validado, para que seja assegurado que ele, realmente, represente o processo físico que, supostamente, deveria estar simulado. Esta tarefa é feita comparando o resultado do modelo com observações de campo e de laboratório, sendo que esta comparação não precisa fornecer aderências exatas, mas

evidências de que os processos físicos, químicos e bioquímicos estão adequadamente representados e incorporados no modelo.

Apoiado na tecnologia da informática, este estudo buscou analisar a infiltração de água e solutos em solos não saturados por meio de simulação numérica.

A simulação numérica aplicada para estudo do problema de infiltração de água e solutos em solo não saturado é de grande importância, devido a suas implicações na produção de alimentos, no processo erosivo de solos e em sua possível contaminação. Devido à complexidade envolvida neste fenômeno físico, utiliza-se atualmente ao lado do trabalho experimental, a simulação numérica como ferramenta de previsão. Para simular o transporte transiente de fertilizantes, defensivos, herbicidas e poluentes num solo agrícola não saturado, é necessária a resolução de duas equações diferenciais parciais não lineares. Uma delas é a equação de Richards, que governa o movimento transiente de água no solo. Após sua solução para um determinado tempo, os resultados obtidos para umidade são empregados para a solução de outra equação que trata do transporte de um determinado soluto em particular. Assim, um esquema de discretização com precisão adequada é necessário para que os erros numéricos cometidos na solução da equação de Richards, não comprometam a precisão final da solução do sistema de equações ao longo da variável tempo. O método de volumes finitos, aqui empregado, é utilizado por grande parte da literatura de simulação numérica, podendo-se citar sua aplicação em problemas envolvendo escoamento de fluidos, mudança de fase, propagação de ondas sísmicas e escoamento em meios porosos. Os trabalhos de Varejão (1979), Nieckele (1985), Patankar (1980), Oliveira (1997) e Oliveira (1999) demonstram toda a versatilidade e potencial deste método em problemas governados por sistemas de equações diferenciais parciais de extrema complexidade.

Dentre os esquemas de discretização usados em volumes finitos para difusão pura, o esquema de Diferença Central, descrito em Patankar (1980), ocupa lugar de destaque na comunidade de simulação numérica, devido à sua simplicidade e bons resultados para este tipo de fenômeno. A fim de reduzir esforço computacional, Varejão (1979) demonstrou que, admitir uma variação linear do fluxo total da variável dependente transportada dentro de cada volume de controle, gera

um perfil interpolante denominado “Flux-Spline”, que produz para os problemas testes usados ao longo do seu trabalho, tanto para difusão pura como convecção-difusão e escoamentos, erros expressivamente menores que aqueles verificados sob os esquemas de Diferença Central (difusão) e Exponencial ou “Power-Law”, no caso de convecção-difusão.

Este trabalho teve por objetivo, o desenvolvimento e aplicação do método de discretização por volumes finitos, utilizando-se o esquema “Flux-Spline” para tratar especificamente, o caso não linear de movimentação de água e um determinado soluto qualquer, em solo hidraulicamente homogêneo não saturado através da solução das duas equações de transporte.

2. REVISÃO DE LITERATURA

2.1. Aspectos físicos do solo

O termo solo refere-se à camada particulada da superfície terrestre sujeita às intempéries. É formado, inicialmente, pela desintegração e decomposição de rochas, através de processos químicos e físicos influenciados pela atividade e acumulação de resíduos de inúmeras espécies de organismos, de dimensões microscópicas e macroscópicas. Dentre as ações físicas das intempéries que provocam a desintegração de rochas em pequenos fragmentos, destacam-se a expansão e a contração, causadas pela alternância entre aquecimento e esfriamento, estresses resultantes do congelamento e descongelamento da água, penetração de raízes e atrito causado pelo escoamento de partículas abrasivas carregadas pela movimentação de gelo, água e vento (NAIME,2001).

A formação do solo é um processo contínuo que vai além da desintegração de rochas e minerais. Durante o seu desenvolvimento, suas características originais continuam a se modificar pela formação de minerais secundários. O crescimento de organismos, por outro lado contribui com substâncias orgânicas diversas que provocam uma série de reações físico-químicas e bioquímicas, além daquelas que ocorrem com o material mineral de origem. O processo de desenvolvimento do solo culmina com a formação do perfil do solo. Os primeiros pedologistas, com formação em Geologia, definiram o solo como um conjunto de partículas de rochas com uma certa quantidade de matéria orgânica produzida pela decomposição de plantas e descreveram o solo da seguinte maneira: “rochas que foram reduzidas a minúsculos fragmentos alterados quimicamente junto com restos de planta e animais que viveram acima e abaixo da superfície do solo”. A definição proposta por Joffre (1949) incorpora as características físicas, os constituintes químicos e biológicos e a morfologia do solo: “o solo é um corpo natural constituído de animais, matéria orgânica e mineral diferenciado em horizontes de profundidades variáveis distintos

uns dos outros em morfologia, constituição física, propriedades químicas e biológicas”.

O solo é constituído de um sistema composto por três fases: sólida, líquida e gasosa. A fase sólida é formada por matéria inorgânica e matéria orgânica. A fase líquida é formada pela solução do solo ou água do solo e compõem-se de água, sais dissolvidos e matéria coloidal em suspensão. A fase gasosa é o próprio ar do solo, assim denominado porque sua composição difere do ar atmosférico quanto à proporção percentual de seus elementos (NAIME, 2001).

As ações de vários processos químicos, físicos e biológicos sobre os materiais geológicos conferem características que conhecemos como solos. Estas alterações, que afetam a parte superior das rochas expostas ao tempo, podem ser vistas como uma seqüência de camadas, tecnicamente chamadas de horizontes, com diferentes cores, composições e estrutura, denominada perfil do solo.

O perfil do solo compreende seus horizontes em uma seção vertical, a partir da matéria orgânica na superfície, passando pelos horizontes do solo até as camadas inferiores que influenciam a gênese ou o comportamento do solo. Este conceito de perfil do solo é uma visão simples, uma vez que a variabilidade espacial do solo ocorre nas três dimensões. Desta forma para efeito de classificação e mapeamento, os pedologistas adotaram um conceito de um volume de solo, um corpo tridimensional denominado pedon. Um pedon é descrito como a quantidade mínima de um material que pode logicamente ser chamado de “um solo”, podendo seu tamanho variar de 1 a 10m² (KUTÍLEK & NIELSEN, 1994). Como o solo é razoavelmente variável em composição e aparência, um conjunto de características comuns permite que o número de pedons sejam agrupados em um polipedon, caracterizando o tipo de solo de uma área. Para fins práticos, na literatura, os pedons são descritos no perfil de uma trincheira cuja dimensão lateral varia de 1 a 1,5m e sua profundidade é determinada pelo horizonte do solo.

Horizonte é uma camada de um perfil do solo, aproximadamente paralela à superfície da Terra, que possui características pedológicas homogêneas. Os horizontes de um perfil de solo são a expressão morfológica dos processos que o formaram e podem ser distinguidos uns dos outros através de sua constituição física, de suas propriedades químicas e de suas características biológicas. Os limites vertical e horizontal dos horizontes definem-se quando estes atributos são significativamente diferentes em aparência ou quantidade.

Características físicas do solo, como granulometria, grau de compactação, quantidade de matéria orgânica e distribuição de raízes determinam os processos hidrológicos que nele ocorrem. Dentre estes processos, (KUTÍLEK & NIELSEN, 1994) destacaram como os mais importantes: infiltração; redistribuição de água, seguida de infiltração; drenagem para a camada de solo saturado próxima a superfície; evaporação do solo descoberto e evapotranspiração de um solo com cobertura vegetal. Com exceção da infiltração, todos os processos citados provocam perda de água em todo volume de solo ou pelo menos em uma camada particular, geralmente a superficial, quando um fluxo unidimensional na direção vertical é considerado. Quando fluxos bi e tridimensionais são considerados devido às circunstâncias de campo, fluxos horizontais sub-superficiais, podem participar do balanço hídrico em um perfil de solo.

2.1.1. Porosidade do solo

A porosidade pode ser definida como sendo a porção de volume do solo não ocupada por partículas sólidas, incluindo todo espaço poroso ocupado por água e ar. Todo solo possui poros, mas sua quantidade, tamanho, distribuição e continuidade são variáveis conforme o solo. Podem ser feitas algumas observações da presença dos poros, seja através de lupa, seja acondicionando água e observar como esta se infiltra, com maior ou menor rapidez. Existe uma grande variação nos valores encontrados na porosidade dos diferentes solos, em função da textura do solo, da estrutura do solo e da matéria orgânica, que contribui para obtenção de valores mais elevados. Solos arenosos apresentam menor porosidade, uma vez que as suas partículas, grosseiras, tendem a se arranjar numa forma piramidal, que apresenta menor espaço entre as partículas. Já os solos argilosos apresentam, em geral, maiores porosidades porque suas partículas finas tendem a assumir um arranjo mais espaçado e, além disso, formam agregados que aumentam sua porosidade. A porosidade está relacionada a uma série de características importantes do solo, tais como o movimento e retenção da umidade, arejamento, reações do solo, movimento de água relacionada à erosão, manejo do solo, dentre outros (RESENDE, 2000).

A importância dos macroporos nos processos que ocorrem no sistema solo-planta-raízes tem motivado pesquisadores a descrever tamanhos e formas

(PERRET et al., 1999). A definição de macroporo pode parecer simples. Entretanto, se considerarmos a complexidade de um macroporo, sua definição se torna nebulosa e ambígua. Não há consenso entre os pesquisadores quanto à definição das faixas de tamanho de poros em função de sua dimensão. Para classificar os poros, a grandeza utilizada é o diâmetro do cilindro equivalente, derivado da área da seção transversal assumida como sendo circular. Perret et al., (1999), estudaram e caracterizaram as forma e parâmetros tridimensionais de redes de macroporos com o auxílio de programa de computador a fim de descreverem a geometria do macroporo.

Em um meio poroso, uma rede é um conjunto de macroporos que estejam interconectados de tal modo que exista uma passagem de qualquer parte para quaisquer outras partes. Deste modo, o conceito de macroporos demanda uma abordagem tri-dimensional. Um ramo é uma porção da rede de macroporos que conecta um poro com o restante da rede. Tortuosidade τ é um dos parâmetros tri-dimensionais mais significativos de uma estrutura porosa, pode ser facilmente relacionada com a condutividade de um meio poroso uma vez que ela indica a resistência ao fluxo devido ao maior comprimento do caminho percorrido. Richther (1987) definiu o termo continuidade porosa como o inverso da tortuosidade.

Os poros grandes têm papel importante na penetração de raízes, gases e água no volume do solo. Quanto maior a densidade de macroporos, mais as raízes podem explorar o solo. Similarmente, quanto mais contínuos forem os macroporos, mais livremente os gases podem realizar trocas com a atmosfera. Macroporos contínuos também têm efeito direto sobre a infiltração de água e o transporte de soluto no solo.

A lixiviação é o processo pelo qual os poluentes infiltram no solo, transportados pela água. Em regiões onde o solo é arenoso e permeável, a lixiviação é mais intensa que o escoamento superficial. O volume de água e solutos transportados através do solo depende de vários fatores: da capacidade de absorção do solo, da quantidade de água aplicada ou infiltrante; da presença de macroporos; da quantidade de matéria orgânica presente no solo; da solubilidade das substâncias presentes e da permeabilidade do solo.

Se uma porção pequena do volume de solo está envolvida no fluxo através dos macroporos, a velocidade com que a água se move e a profundidade de penetração são muito maiores do que na situação em que todo o volume do solo

está envolvido no processo de fluxo. Consequentemente, o volume de solo e tempo de contato com o soluto dissolvido são reduzidos. Quando um solo seco recebe uma precipitação intensa, a contribuição relativa dos macroporos à infiltração é mais significativa. A maior parte dos percolados adicionais são armazenados na zona radicular e são transpirados. Uma pequena quantidade atinge águas subterrâneas durante a época de crescimento da cultura (NAIME, 2001).

Não há um perfeito entendimento dos fatores que influenciam a quantidade de um soluto adsorvido, que move para o subsolo através de macroporos, logo após a aplicação atingindo o lençol freático (SHIPITALO et al.,2000).

Devido à imprópria disposição de resíduos sólidos, líquidos e gasosos no ambiente e em áreas do subsolo, muito aquíferos estão se tornando contaminados. A qualidade da água subterrânea vem declinando muito lentamente, mas com certeza em todos os lugares. O solo, atua como um filtro, sendo capaz de, muitas vezes, reter as impurezas que nele são introduzidas. Conhecer a capacidade do solo para retenção de poluentes, bem como sua formação, características essenciais e, assim, fazer um bom uso deste, proporcionando técnicas de proteção ao solo, às águas subterrâneas e, conseqüentemente ao ambiente, torna-se tarefa fundamental numa época em que tanto se fala da escassez dos nossos recursos naturais. A infiltração é o processo pelo qual a água atravessa a superfície do solo. A modelagem deste processo é de grande importância prática, pois a taxa de infiltração da água no solo é um dos fatores que mais influencia o escoamento superficial, responsável por processos indesejáveis, como a erosão e as inundações. A infiltração determina o balanço de água na zona radicular e, por isso, o conhecimento deste processo e suas relações com as propriedades do solo é de fundamental importância para o eficiente manejo do solo e da água. O conhecimento do processo de infiltração também fornece subsídios para o dimensionamento de reservatórios, estruturas de controle de erosão e de inundações, canais e sistemas de irrigação e drenagem (PRUSK et al.,2003).

Uma vez penetrado no subsolo, o contaminante torna-se suscetível a uma variedade de processos geoquímicos e biológicos, que determinam sua mobilização ou mesmo transformação no meio poroso. Estes processos estão intrinsecamente relacionados a inúmeras variáveis, tornando a pratica de remediação dos aquíferos uma tarefa complexa, muitas vezes custosa e dispendiosa (NOBRE et al., 2005). Em

face do exposto, mais importante do que as técnicas de remediação, é o estudo de técnicas que sejam capazes de evitar a exposição do solo à contaminação.

2.1.2. Textura do solo

O termo textura se refere à proporção das frações de areia, silte e argila no solo. Cada solo recebe uma designação quanto à sua textura, designação esta que nos dá a idéia do tamanho das partículas mais frequentes. A textura é uma característica de grande importância para os solos, já que grande parte das reações que ocorrem no sistema solo-agua-planta, são fenômenos de superfícies, que tem sua magnitude dependente do tamanho das partículas envolvidas. A análise e a determinação da distribuição das partículas, de uma amostra de solo quanto ao seu tamanho é denominada análise granulométrica ou textural (RESENDE.,2000).

A proporção de partículas grosseiras, media e finas que são denominadas de areia, silte ou limo e argila, determinam combinações que são utilizadas para classificar o solo segundo sua textura. A determinação do tamanho das é feita em laboratório e é denominada de análise mecânica do solo. Denominaram-se de areia as partículas de diâmetro entre 2 e 0,02 mm, de silte ou limo as partículas de diâmetro entre 0,02 e 0,002 mm de diâmetro, e de argila as de diâmetro menor que 0,002 mm (REICHARDT, 1990).

2.1.3. Estrutura do solo

A estrutura do solo refere-se ao arranjo das partículas e à adesão das partículas menores na formação de maiores denominadas agregados. Na proximidade da superfície, a estrutura do solo é afetada pelo preparo do solo e, nos horizontes mais profundos, ela é típica para cada solo. O conceito de estrutura é bastante qualitativo e descritivo, não havendo meio prático de se medir e dar um número à estrutura de um solo. Fala-se, portanto, em solo bem estruturado ou solo mal estruturado, sendo considerada boa a estrutura com bastantes agregados, de forma granular, que se esboroa com relativa facilidade quando úmida. Esta boa estrutura melhora a permeabilidade do solo à água, das melhores condições de aeração e penetração de raízes. Solo sem estrutura é massivo, pesado para ser trabalhado, com problemas de penetração de água e de raízes.

A estrutura do solo, ao contrario da textura, pode ser modificada. Ela pode ser mantida ou mesmo trabalhada com praticas agrícolas adequadas, tais como a

rotação de culturas, cultivo apropriado e incorporação de matéria orgânica. Ciclos de secamento e de molhamento melhoram a estrutura do solo. A umidade do solo no momento do seu preparo é importante, pois solos preparados quando muito úmidos ou muito secos, perdem estrutura (REICHARDT, 1990).

2.2. Relação entre condutividade hidráulica, umidade e potencial matrico da água

Segundo Reichardt (1975), para um solo saturado, no qual todos os poros estão cheios de água, não existe capilaridade e a adsorção também é nula. Nestas condições, o componente mátrico do potencial da água é nulo. Com a saída de água, o solo vai-se tornando não -saturado e o ar substitui a água inicialmente nos poros maiores, onde aparecem meniscos (interfaces água/ ar) e começa a atuar a capilaridade. Como consequência, o componente mátrico torna-se cada vez mais negativo.

O componente mátrico do potencial da água de um solo é, portanto, em função de sua umidade. Para valores de umidade relativamente altos, a capilaridade é o principal fenômeno que determina o potencial mátrico. Por isso, nestas condições, o arranjo poroso determinado pela estrutura, textura, natureza das partículas, entre outras, é de enorme importância. A compactação, por exemplo, afeta os arranjos porosos, interferindo no valor de potencial mátrico. Para valores de umidade relativamente baixos, a água apresenta-se sob a forma de filmes, cobrindo as partículas de solo e o fenômeno de capilaridade deixa de ter importância. Nesta condição, a adsorção é importantíssima (REICHARDT, 1990).

Se o arranjo poroso permanecer o mesmo, a relação entre o potencial mátrico e a umidade, que é uma característica física do solo, também permanece. Esta relação é denominada curva característica ou curva de retenção da água no solo (REICHARDT, 1978).

A condutividade hidráulica (K) é uma propriedade que depende dos atributos do solo e daqueles relacionados à fluidez da água. As características do solo que afetam a condutividade são a porosidade total dos poros no solo. As características do fluido que afetam são a sua densidade e viscosidade (HILLEL, 1982).

A condutividade hidráulica é tanto maior quanto mais úmidos o solo, atingindo seu valor Máximo quando o solo esta saturado. O valor de K decresce

bruscamente com a redução de umidade, sendo K uma função exponencial de umidade (REICHARDT, 1978).

Avaliando as propriedades físicas e hidráulicas em um solo vulcânico, Ciollaro & Romano (1995) obtiveram curvas de condutividade em função da umidade que apresentaram variabilidade menor que a comumente reportada pela literatura. Explicaram, assim, que a condutividade hidráulica do solo saturado é determinada pela presença de poros grandes e, portanto, depende principalmente da estrutura do solo, enquanto a condutividade não-saturada é influenciada pela textura do solo. Conseqüentemente, pequenas mudanças no potencial mátrico que ocorrem próximo à podem causar uma variação considerável na condutividade hidráulica.

Segundo Martins & Coelho (1980), as modificações na porosidade, ocasionadas por pressões exercidas pelo pastejo, influem negativamente na condutividade hidráulica do solo. Essa influencia ocorre não somente em superfície, mas também em profundidades maiores. Costa & Libardi (1999), trabalhando em uma terra roxa estruturada latossolica, a aproximadamente 0,40 m de profundidade, verificaram que este apresentava características gerais de estrutura mais endurecidas, o que determinava maiores valores de condutividade hidráulica na capacidade de campo quando comparados com valores a profundidades de 0,90 m a 2,40 m.

Os perfis de umidade e de potencial mátrico, em função do tempo, obtidos em experimentos de drenagem interna, mostram claramente a existência de um ponto de inflexão que marca a transição das fases de drenagem rápida para a lenta. Os horizontes superficiais, mais condicionantes para a exploração agrícola e conservação do solo, apresentam elevados valores de condutividade hidráulica em comparação com horizontes de estruturas maciças, coesas e com poros visíveis (NETO et al., 2000).

2.3. Movimento de água e solutos no solo

A atual intensificação do uso das terras para fins agrícolas tem despertado grande preocupação devida, principalmente, aos impactos que vem causando ao ambiente, sobretudo no que diz respeito à sua contaminação por substâncias químicas. Aplicados com o objetivo de aumentar produtividade, esses produtos

interagem com o solo e com a água, por meio de diversos processos e, uma vez aplicados ao solo, podem ser transportados de dois modos: pela água da chuva ou irrigação, sobre a superfície do solo, juntamente com a água de escoamento superficial, e através do perfil do solo com a água infiltrada (PIFFER, 1989); assim, o transporte de solutos no solo constitui o principal veículo de contaminação das águas subterrâneas e superficiais.

Atualmente, a ciência tem razoável domínio sobre os estudos de solos saturados. Uma das fronteiras do conhecimento está no estudo da região não-saturada do solo, horizonte agricultável na maioria das culturas. Esta região apresenta enorme complexidade por ser um meio anisotrópico com umidade e concentração variáveis no tempo e no espaço, além das reações químicas e dos processos biológicos que nela ocorrem. A solução para um problema como este, evidentemente, não será encontrada em apenas uma área do conhecimento científico.

“Mais recentemente, o intenso interesse pela contaminação química do lençol freático tem ampliado largamente o leque de aplicações do transporte de solutos além do campo da agricultura. Hoje, muitas disciplinas, como Ciência do Solo, Hidrologia, Ciência da Planta, Engenharia Civil e Ambiental, só para citar algumas, possuem áreas de pesquisa que requerem o entendimento do transporte de solutos no solo (JURY & ROUTH, 1990)”.

O conhecimento dos mecanismos do movimento no solo é de grande interesse para as atividades agrícolas e florestais, na otimização da aplicação de adubos, previsão do equilíbrio de nutrientes e cálculo do nível de fertilidade do solo. O movimento da água no solo pode ocorrer por influências de diferentes forças. Em solos muito saturados e com presença de pequenos canais a água pode escoar com certa facilidade, movimentada basicamente pelas forças gravitacionais. Para solos apenas saturados a tensão superficial da água contida nesses pequenos canais poderá exceder a força gravitacional e provocar movimentos ascendentes. Em solos não saturados as forças e a tensão superficial não são significativas para o movimento da água, porque não há massa suficiente para preencher os canais. A água acaba então absorvida pelas partículas de solo e também passando de partícula a partícula, devida à diferença de teor de umidade entre elas. Esse processo é chamado de difusão. O potencial matricial é o resultado da ação das forças capilares e de adsorção, devido à interação entre a água e as partículas

sólidas, que é função da matriz do solo. Estas forças atraem e fixam a água no solo, diminuindo sua energia potencial com relação à água livre. São fenômenos capilares que resultam da tensão superficial da água e de seu ângulo entre a unidade volumétrica e o potencial matricial, características determinadas pela textura e estrutura do solo (REICHARDT, 1990).

Para altos valores de umidade, nos quais fenômenos capilares são de importância na determinação de potencial matricial, a curva característica depende da geometria da amostra, isto é, do arranjo e das dimensões dos poros. Ele passa, então a ser uma função da densidade global do solo e da porosidade. Para baixos teores de umidade, o potencial matricial praticamente independe de fatores geométricos, sendo a densidade global e a porosidade de pouca importância em sua determinação (REICHARDT, 1990). As curvas de retenção são de grande utilidade para estimar valores de potencial matricial através de dados do teor de umidade. Como a curva é uma característica do solo, ela é determinada uma vez apenas, e sempre que se precisar de valores de potencial matricial determina-se a umidade do solo através da curva, estima-se o valor do potencial matricial. Variações de densidade global e de textura de um horizonte para outro, dentro do mesmo perfil de solo, podem determinar a necessidade do uso de curvas distintas de retenção de água para cada horizonte (REICHARDT, 1990). O gradiente matricial, ao contrario do gravitacional e do de pressão, não é constante. O comportamento do potencial matricial depende da umidade do solo e, por isso, o gradiente matricial depende da distribuição da umidade no perfil do solo (REICHARDT, 1990).

A modelagem do movimento de água e solutos no solo é importante para a compreensão de formas para reduzir a poluição das águas superficiais e subterrâneas (ROGERS, 1994). A possibilidade de se prever o movimento de solutos no solo e no escoamento superficial, por meio de modelos computacionais baseados na equação de transporte difusivo-convectivo, permite uma extraordinária economia de tempo e de recursos financeiros, os quais seriam gastos em estudos experimentais. Entretanto, a aplicação desses modelos de simulação para diversas condições precisa ser pesquisada, comparando-se os resultados simulados com aqueles observados em experimentos de campo (CLEMENTE et al., 1993; WALLACH & SHABTAI, 1993).

Segundo Govindaraju, (1996) os modelos para simulação do transporte de solutos pelo escoamento superficial negligenciam a parcela de produto químico, que,

adsorvido às partículas do solo, é transportado como consequência do processo erosivo. A inclusão deste processo físico resulta em melhorias na predição das perdas de solutos, pelo escoamento superficial.

O desenvolvimento de modelos matemáticos para se descrever, com precisão, o transporte de água e solutos, é bastante difícil. As equações que descrevem esses processos, em condições reais de campo, apresentam grande complexidade (COX et al., 1994); no entanto Kinouchi et al., (1991) e Wallach & Shabtai (1993) consideram que a evolução dos recursos computacionais, aliadas às técnicas numéricas, tem facilitado a modelagem do transporte de solutos, tornando possível integrar-se os múltiplos processos que determinam as mudanças na concentração dos solutos presentes no solo, no tempo e no espaço, o que permite melhor entendimento do comportamento dos processos associados ao transporte e à transformação dos solutos no solo. No Brasil, os poucos estudos realizados limitam-se à determinação do poder residual e à movimentação e degradação de fertilizantes, metais pesados, nutrientes e de compostos orgânicos no solo.

O transporte subterrâneo de contaminantes tem sido um dos mais importantes tópicos de pesquisa na hidrologia e na engenharia nas últimas décadas (BEAR, 1972; GELHAR, 1993; DOMENICO & SCHWARTZ, 1998; FETTER, 1999). Visando atenuar possíveis impactos, social e ecológico, muita atenção tem sido dada, atualmente a problema de migração de contaminantes no solo. Simular a migração de contaminantes no solo através de soluções puramente analíticas é bastante relevante, já que são usualmente derivadas de princípios físicos básicos, não sendo afetadas por dispersões numéricas e erros de truncamentos que ocorrem nas soluções numéricas (ZHENG & BENNET, 1995). Utilizando-se soluções analíticas, pode-se entender melhor o mecanismo de transporte de contaminante, prever seu movimento, medir campos de parâmetros relativos ao transporte do soluto e verificar os resultados de modelos numéricos (PARK & ZHAN, 2001).

Quando a equação de dispersão é sujeita a sorção ou decaimento não lineares, a equação diferencial não linear governante tem sido, tradicionalmente, resolvida numericamente, sendo a resolução puramente analítica mais difícil.

2.4. Simulação numérica no processo de infiltração

A simulação numérica do problema de infiltração de água e solutos em solo não saturado é de grande importância, devido a suas implicações na produção de

alimentos, no processo erosivo de solos e em sua possível contaminação. Devido à complexidade envolvida neste fenômeno físico, utiliza-se atualmente, ao lado do trabalho experimental, a simulação numérica como ferramenta de previsão. Para simular-se o transporte transiente de fertilizantes, defensivos, herbicidas e poluentes num solo agrícola não saturado, é necessária a resolução de duas equações diferenciais parciais não lineares. Uma delas é a equação de Richards, que governa o movimento transiente de água no solo. Após sua solução para um determinado tempo, os resultados obtidos para umidade, são empregados para a solução da outra equação, que trata do transporte de um determinado soluto em particular. Assim, um esquema de discretização com precisão adequada é necessário para que os erros numéricos cometidos na solução da equação de Richards, não comprometam a precisão final da solução do sistema de equações ao longo da variável tempo. O método de volumes finitos, aqui empregado, é utilizado por grande parte da literatura de simulação numérica, podendo-se citar sua aplicação em problemas envolvendo escoamento de fluidos, mudança de fase, propagação de ondas sísmicas e escoamento em meios porosos. Os trabalhos de Varejão (1979), Nieckele (1985), Patankar (1980) e Oliveira (1997) e Oliveira (1999) demonstram toda a versatilidade e potencial deste método em problemas governados por sistemas de equações diferenciais parciais de extrema complexidade.

Dentre os esquemas de discretização usados em volumes finitos para difusão pura, o esquema de Diferença Central descrito em Patankar (1980), ocupa lugar de destaque na comunidade de simulação numérica, devido à sua simplicidade e bons resultados para este tipo de fenômeno. A fim de reduzir esforço computacional, Varejão (1979) demonstrou que, admitir uma variação linear do fluxo total da variável dependente transportada dentro de cada volume de controle, gera um perfil interpolante denominado Flux-Spline, que produz para os problemas testes usados ao longo do seu trabalho, tanto para difusão pura como convecção-difusão e escoamentos, erros expressivamente menores que aqueles verificados sob os esquemas de Diferença Central (difusão) e Exponencial ou Power-Law, no caso de convecção-difusão.

3. MATERIAL E MÉTODOS

3.1. Caracterização dos ambientes experimentais

Para testar o modelo desenvolvido, foram coletadas 12 amostras de solo devidamente georeferenciadas, na profundidade de 20 cm nos reservatórios das empresas a seguir:

- Mineração Três Corações Ltda, localizada na fazenda Tijuca no município de Cachoeiro de Itapemirim –ES, obtendo as amostras T₁, T₂, T₃, T₄
- Jaciguá Mármore e Granitos Ltda, localizada no distrito de Santa Rosa no município de Cachoeiro de Itapemirim – ES, obtendo as amostras J₁, J₂, J₃, J₄
- São Joaquim depósito de Mármore e Granitos Ltda, localizado no distrito de São Joaquim no município de Cachoeiro de Itapemirim – ES, obtendo as amostras A₁, A₂, A₃, A₄.

O solo coletado apresenta caráter argiloso, predominantemente vermelho com ocorrência de amarelos.

A retirada das amostras para análise físico-químicas condutividade foi realizada com o auxílio de um trado manual de aço inoxidável, utilizando a ponteira em rosca, recomendada para o tipo de solo. O amostrador de Uhland do solo foi utilizado na superfície do solo de cada ponto amostrado para retirada de amostras indeformadas. Os anéis foram acondicionados em recipientes de alumínio com tampa, catalogados, acondicionados em caixa de isopor à temperatura ambiente e enviados para análise no Laboratório de Água e Solo da Universidade Federal de Viçosa (UFV), e em seguida submetidos às análises, segundo metodologia descrita no manual de métodos e análise de solo (EMBRAPA, 1997).

As análises para os parâmetros físico-químicos foram executadas obedecendo as Normas Brasileira Regulamentadora- (NBR) 10005, 10006 e 10007, que trata da coleta, lixiviação e solubilização do solo. O parâmetro mais importante nestas análises é o coeficiente de condutividade hidráulica, que representa a

velocidade de infiltração de água em um meio poroso, no caso, o solo saturado dos reservatórios.

As amostras T_1 e T_2 , são referentes ao fundo do depósito temporário da Mineração Três Corações, a mostra T_3 , refere-se à parede lateral do depósito. Não existem dados referentes às propriedades físico-químicas do solo do local, antes da implantação do reservatório o que impediria a avaliação quantitativa do impacto dos resíduos sobre o solo ao longo do tempo em que este reservatório está sendo utilizado. Para isto retirou-se uma amostra de solo T_4 ao redor do reservatório para ser usada como referência.

Tal reservatório foi esvaziado de seu conteúdo em fevereiro de 2007. tal esvaziamento é feito anualmente e ao longo dos últimos doze anos de uso como depósito de resíduos de mármore e granito, constituindo-se, portanto, em caso relevante para verificação do impacto dos resíduos sobre o solo do local.

As amostras J_1 e J_2 , são referentes à parede lateral inferior e superior do depósito temporário, respectivamente e as mostras J_3 e J_4 , serviram como testemunhas do solo a montante e a jusante do depósito temporário, respectivamente.

As amostras A_1 e A_2 , são referentes ao fundo da trincheira a jusante e a montante do aterro industrial, respectivamente a mostra A_3 , é referente a testemunha lateral do vale do aterro e a amostra A_4 , refere-se a testemunha do solo a jusante respectivamente. Os valores obtidos para as amostras de solo no laboratório são apresentados no.

3.2. Desenvolvimento numérico do esquema Flux-Spline

A seguir, será conduzida para difusão pura, a derivação do esquema Flux-Spline utilizando-se o método de discretização de volumes finitos.

A equação diferencial para o transporte difusivo de um escalar θ em regime permanente é:

$$\nabla \cdot \vec{J}^\theta = S^\theta \quad (1)$$

Em que o vetor fluxo difusivo da variável dependente adimensional θ é $\vec{J}^\theta = -\Gamma^\theta \cdot \nabla \theta$ e o termo fonte linearizado como em Patankar (1980) é

$S^\theta = S_c^\theta + S_p^\theta \cdot \theta$. A equação (1), num caso unidimensional em coordenadas cartesianas X , pode ser colocada na forma como mostrado na Figura 1:

$$\frac{\partial}{\partial X} JX^\theta = S^\theta \quad (2)$$

O fluxo difusivo na direção X da variável dependente θ é:

$$JX^\theta = -\Gamma^\theta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial X} \quad (3)$$

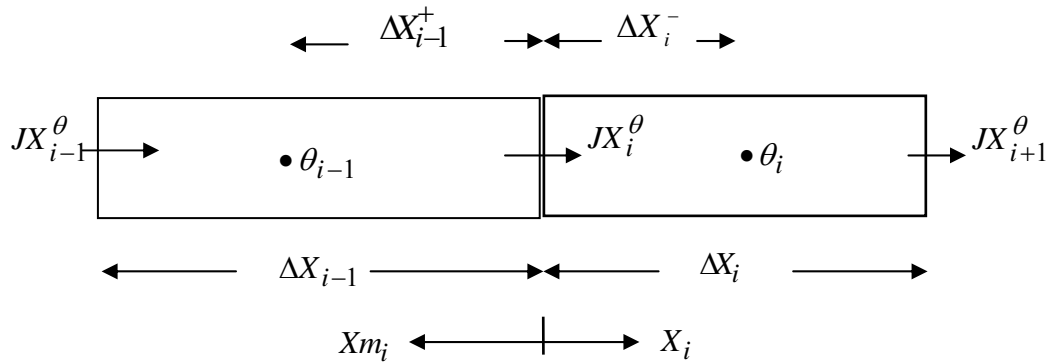


Figura 1. Discretização unidimensional para volumes finitos.

Em que Γ^θ é o coeficiente de difusão, propriedade do meio, através do qual, a variável θ é transportada por difusão devido ao gradiente.

Integrando a equação de governo (2) segundo o método dos volumes finitos, sob as hipóteses de termo fonte S^θ constante em cada volume de controle de comprimento ΔX_i e fluxos distribuídos uniformemente nas interfaces dos volumes de controle, obtêm-se de acordo com Patankar (1980) a expressão:

$$JX_{i+1}^\theta - JX_i^\theta = (S_c^\theta + S_p^\theta \cdot \theta_i) \cdot \Delta X_i \quad (4)$$

Como preconizado por Varejão (1979) em seu esquema Flux-Spline, assume-se que o fluxo JX^θ possa variar linearmente na direção X ao longo de cada volume de controle. Desta forma, leva-se em consideração a presença de termos fonte dentro do volume de controle e obtêm-se então, a seguinte expressão para o volume de controle i :

$$JX^\theta = AX_i^\theta \cdot \frac{X_i}{\Delta X_i} + BX_i^\theta \quad (5)$$

Em que:

$$BX_i = JX_i^\theta \text{ e } AX_i^\theta = (JX_{i+1}^\theta - JX_i^\theta) \quad (6)$$

Para o volume de controle (i-1) mostrado na Figura 10, sob a coordenada X_{m_i} :

$$JX_m^\theta = AX_m_i^\theta \cdot \frac{X_{m_i}}{\Delta X_{i-1}} + BX_m_i^\theta \quad (7)$$

Em que:

$$BX_m_i = -JX_i^\theta \quad \text{e} \quad AX_m_i^\theta = JX_i^\theta - JX_{i-1}^\theta \quad (8)$$

Igualando-se as equações (3) e (5) obtém-se para a variável θ , num volume de controle i:

$$-\Gamma_i^\theta \cdot \frac{d\theta}{dX_i} = AX_i^\theta \cdot \frac{X_i}{\Delta X_i} + BX_i^\theta \quad (9)$$

Utilizando-se a equação (9) com a difusividade Γ^θ constante no volume de controle i, obtém-se após integração, uma dependência parabólica entre θ e X_i do tipo:

$$-\Gamma_i^\theta \cdot \theta = \frac{1}{2} \cdot AX_i^\theta \cdot \frac{X_i^2}{\Delta X_i} + BX_i^\theta \cdot X_i + C_{vci}^\theta \quad (10)$$

A mesma relação se aplica ao volume de controle (i-1) sendo as constantes C_{vc}^θ calculadas usando-se o θ_i conhecido em cada volume de controle.

Como na interface dos volumes de controle é necessária a continuidade da variável dependente θ , a equação (10) é utilizada para gerar a expressão do fluxo através da interface em dois volumes de controle adjacentes.

$$\theta = \left(\frac{JX_{i+1} - JX_i}{\Delta x_i} \right) \cdot \frac{1}{\Gamma_i} \cdot \frac{X_i^2}{2} - \frac{JX_i}{\Gamma_i} \cdot x + C_i \quad (11)$$

A localização de θ_i no centro geométrico do volume de controle i Patanka, (1980), é adotada devido aos resultados apresentados por essa disposição em Nieckele, (1985).

Assim:

$$\theta = \theta_i \quad \text{em} \quad X_i = \frac{\Delta X_i}{2} \quad (12)$$

o calculo da constante de integração da equação (11) usando-se a equação (12) faz com que o perfil interpolante de θ assuma a forma:

$$\theta = \theta_i - (JX_{i+1} - JX_i) \cdot \left(\frac{\Delta X_i}{\Gamma_i} \right) \cdot \frac{1}{2} \cdot \left[\left(\frac{X_i}{\Delta X_i} \right)^2 - \frac{1}{4} \right] - JX_i \cdot \left(\frac{\Delta X_i}{\Gamma_i} \right) \cdot \left[\left(\frac{\Delta X_i}{\Gamma_i} \right) - \frac{1}{2} \right] \quad (13)$$

Essa equação fornece a distribuição da variável dependente θ ao longo do volume de controle i , se a malha, o campo J e a distribuição de Γ são conhecidos.

No método de volumes de controle, a equação de governo é satisfeita para cada volume discreto (e portanto para todo o domínio), e assim o termo $(JX_{i+1} - JX_i)$, no caso unidimensional representa a presença do termo fonte S_i^θ .

Como o objetivo do método numérico é a obtenção da solução aproximada da equação de governo para todo o domínio, e o perfil interpolante acima deduzido, é válido apenas para o volume de controle i , é necessário para acoplá-lo aos demais, impor-se a chamada Condição de Continuidade de θ .

3.2.1. Condição de Continuidade da Variável Dependente

Devendo-se garantir nas interfaces por imposição física, que a variável dependente θ , com os fluxos J , assumam um valor único.

Para cada volume de controle i isso se traduziria em impor a montante:

$$\theta(X_i = 0) = \theta(X_{i-1} = \Delta X_{i-1}) \quad (14)$$

Para simplificar usa-se:

$$\theta(X_i = 0) = \theta_i^- \quad (15)$$

$$\theta(X_{i-1} = \Delta X_{i-1}) = \theta_{i-1}^+ \quad (16)$$

E assim a condição de continuidade será expressa por:

$$\theta_i^- = \theta_{i-1}^+ \quad (17)$$

Aplicando-se ao perfil interpolante para θ as condições (15) e (16), obtém-se:

$$\theta_i^- = \theta_i + \frac{3}{8} \cdot JX_i \cdot \frac{\Delta X_i}{\Gamma_i} + \frac{1}{8} \cdot JX_{i+1} \cdot \frac{\Delta X_i}{\Gamma_i} \quad (18)$$

$$\theta_{i-1}^+ = \theta_{i-1} - \frac{1}{8} \cdot JX_{i-1} \cdot \frac{\Delta X_{i-1}}{\Gamma_{i-1}} - \frac{3}{8} \cdot JX_i \cdot \frac{\Delta X_{i-1}}{\Gamma_i} \quad (19)$$

Levando estas expressões a (17) obtém-se uma equação para os fluxos, que como anteriormente esperado, fornece um relacionamento entre os fluxos J , a malha, o coeficiente de difusão e a variável dependente.

$$\left(\frac{1}{8} \cdot \frac{\Delta X_{i-1}}{\Gamma_{i-1}}\right) \cdot JX_{i-1} + \left(\frac{3}{8} \cdot \frac{\Delta X_{i-1}}{\Gamma_{i-1}}\right) JX_i + \left(\frac{1}{8} \cdot \frac{\Delta X_i}{\Gamma_i}\right) \cdot JX_{i+1} = \theta_{i-1} - \theta_i \quad (20)$$

Esta equação expõe à primeira vista, uma dificuldade adicional característica do esquema, que seria a resolução de matrizes tridiagonais de fluxo.

Para um dado campo de θ , possuindo-se a distribuição de Γ ao longo do domínio e as características da malha pode-se calcular os fluxos de duas formas: A primeira através de uma matriz tridiagonal, usando-se o algoritmo TDMA, como proposto por Varejão (1979), e a segunda de forma explícita, ambas dentro de um processo seqüencial e iterativo.

A expressão para o fluxo difusivo JX_i^θ é:

$$JX_i^\theta = DJX_i^\theta \cdot (\theta_{i-1} - \theta_i) + JhatX_i^\theta \quad (21)$$

Em que:

$$DJX_i^\theta = \left(\frac{\Delta X_i^-}{\Gamma_i^\theta} + \frac{\Delta X_{i-1}^+}{\Gamma_{i-1}^\theta} \right)^{-1} \quad (22)$$

$$JhatX_i^\theta = BJX_i^\theta \cdot (JX_i^\theta - JX_{i+1}^\theta) + CJX_i^\theta \cdot (JX_i^\theta - JX_{i-1}^\theta) \quad (23)$$

$$BJX_i^\theta = \frac{1}{2} \cdot \frac{(\Delta X_i^-)^2}{\Delta X_i} \cdot \frac{DJX_i^\theta}{\Gamma_i^\theta} \quad (24)$$

$$CJX_i^\theta = \frac{1}{2} \cdot \frac{(\Delta X_{i-1}^+)^2}{\Delta X_{i-1}} \cdot \frac{DJX_i^\theta}{\Gamma_{i-1}^\theta} \quad (25)$$

Notou-se que, no caso do esquema de diferença central, o fluxo constante dentro de cada volume de controle, $JhatX_i^\theta$, é igual à zero.

Para casos transientes, será empregada a discretização totalmente implícita no tempo, proposta por Patankar (1980). Para um caso transiente unidimensional, a equação de governo para o transporte de um escalar θ é:

$$\frac{\partial \theta}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial X} JX^\theta = S^\theta \quad (26)$$

Integrada ao longo do espaço X e tempo τ como em (4), fornece com a utilização de (21) a equação de discretização da variável dependente θ num caso puramente difusivo:

$$AIP_i^\theta \cdot \theta_i = AIM_i^\theta \cdot \theta_{i-1} + AIP_i^\theta \cdot \theta_{i+1} + Sc_i^\theta \cdot \Delta X_i + Ssp_i^\theta + \theta_i^{\text{old}} \cdot \frac{\Delta X_i}{\Delta \tau} \quad (27)$$

Para um volume de controle i , θ_i é o valor da variável no tempo atual, θ_i^{old} é o valor conhecido da variável no tempo anterior e $\Delta \tau$ é o intervalo de tempo adimensional utilizado. A matriz do sistema de equações gerado pela equação (17) é tridiagonal, podendo ser resolvido por eliminação gaussiana. Os demais termos são:

$$AIP_i^\theta = DJX_{i+1}^\theta \quad (28)$$

$$AIM_i^\theta = DJX_i^\theta \quad (29)$$

$$AP_i^\theta = AIM_i^\theta + AIP_i^\theta + \frac{\Delta X_i}{\Delta \tau} - Sp_i^\theta \cdot \Delta X_i \quad (30)$$

$$Ssp_i^\theta = JhatX_i^\theta - JhatX_{i+1}^\theta \quad (31)$$

A equação adimensional que governa o fenômeno de transporte de água e solutos em solos não saturados será apresentada a seguir com a derivação de sua forma adimensional.

A equação de governo para infiltração unidimensional de água em solo não saturado é a chamada equação de Richards:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \nabla \cdot \vec{q} = 0 \quad (32)$$

Em que U é a umidade do solo em $\left[m^3_{H_2O} \cdot m^{-3}_{\text{solo}} \right]$ e $\vec{q} = -\kappa^U \cdot \nabla H_T \left[m \cdot s^{-1} \right]$ é o fluxo total de água no solo. O potencial total H_T atuando sobre a água do solo, é a soma do potencial mátrico $h[m]$ mais o potencial gravitacional $z[m]$ e portanto, $H_T = h + z \left[m \right]$.

Na direção z , o sentido positivo foi arbitrado seguindo-se a gravidade e desta forma o fluxo total descrito pela chamada equação de Buckingham-Darcy é no caso unidimensional:

$$q_z = -\kappa^U \left(\frac{\partial h}{\partial z} + 1 \right) \left[m \cdot s^{-1} \right] \quad (33)$$

Em que $\kappa^U \left[m \cdot s^{-1} \right]$ é a condutividade hidráulica do solo não saturado com h , obtido da curva de retenção de um solo hidraulicamente homogêneo (PREVEDELLO, 1996) usando-se o modelo de Van Genuchten (1980). Para o caso unidimensional, obtém-se então, a seguinte equação de governo:

$$\frac{\partial U}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial z} \left[\kappa^U - \kappa^U \cdot \frac{\partial h}{\partial z} \right] = 0 \quad \left[m_{H_2O}^3 \cdot m_{solo}^{-3} \cdot s^{-1} \right] \quad (34)$$

Empregar-se-á como referência para adimensionalização, as propriedades de solo hidraulicamente homogêneo, saturado, admitindo-se que tais propriedades sejam somente funções da umidade em base volumétrica U no domínio de cálculo $0 \leq z \leq L_C$.

A umidade segundo Prevedello (1996) é normalizada por $\theta = \frac{U - U_o}{U_{sat} - U_o}$

onde U_o e U_{sat} são respectivamente a umidade residual e a umidade de saturação do solo, definidas no modelo de Van Genuchten (1980). O potencial mátrico adimensionalizado por um potencial de referência h_{ref} calculado para uma umidade

θ_{ref} é:

$$H = 1 - \frac{h}{h_{ref}}, \text{ o que, pelo modelo adotado, fica na forma: } H = 1 - \left[\frac{\theta^{\left(\frac{-1}{m}\right)} - 1}{\theta_{ref}^{\left(\frac{-1}{m}\right)} - 1} \right]^{\left(\frac{1}{n}\right)}.$$

Para a adimensionalização do tempo, $\tau = \frac{\kappa_{sat}^U \cdot t}{L_c \cdot \delta^U}$ onde, κ_{sat}^U é a condutividade hidráulica na condição de saturação em $[m \cdot s^{-1}]$ e $\delta^U = U_{sat} - U_o$.

Para o espaço temos, $Z = \frac{z}{L_c}$ e a condutividade hidráulica adimensional é $K = \frac{\kappa^U}{\kappa_{sat}^U}$.

A substituição das expressões acima em (34) fornece a equação de governo adimensionalizada na forma:

$$\left(\frac{\partial \theta}{\partial H} \right) \frac{\partial H}{\partial \tau} + \frac{\partial}{\partial Z} \left[\left(\frac{K}{H} \right) \cdot H - \left(\frac{K \cdot h_{ref}}{L_c} \right) \cdot \frac{\partial H}{\partial Z} \right] = 0 \quad (35)$$

O coeficiente de difusão da equação de transporte de umidade θ é expresso por $\Gamma^H = \frac{K \cdot h_{ref}}{L_c}$ e $\frac{\partial \theta}{\partial H}$, e constituiu a função capacidade hídrica.

Notou-se que, devido à presença do termo gravitacional tem-se para o transporte de umidade, uma equação diferencial envolvendo convecção e difusão ao mesmo tempo.

O termo convectivo é representado por $\left(\frac{K}{H} \right) \cdot H$, onde $\left(\frac{K}{H} \right)$ é análogo a um campo de velocidade dependente do valor da umidade θ presente num volume de controle, num determinado instante do tempo.

Usou-se usado para a simulação do movimento de solutos, o modelo de convecção-dispersão descrito em Jury et al. (1991). A equação diferencial para o transporte dos solutos, na sua forma adimensional, sob o modelo de isoterma de adsorção linear é:

$$\frac{\partial}{\partial \tau} (\theta \cdot C) + \frac{\partial}{\partial Z} \left[JZ^H \cdot C - \left(\frac{D_e^C}{\kappa_{sat}^U \cdot L_c} \right) \cdot \frac{\partial C}{\partial Z} \right] = -\psi \cdot \frac{\partial C}{\partial \tau}$$

Em que:

$C = \frac{c}{c_{ref}}$, onde c_{ref} é uma concentração de referência, $\psi = \frac{U_o + \rho_b \cdot K_d}{\delta^U}$, é o termo

contendo os parâmetros de retardamento, D_e^C é o coeficiente de difusão-dispersão

efetivo e $JZ^H = K - \left(\frac{K \cdot h_{ref}}{L_c} \right) \cdot \frac{\partial H}{\partial Z}$, o fluxo total de umidade θ , obtido quando da solução da equação (35) e responsável pela parte convectiva da equação de transporte de soluto.

O fenômeno de transporte de água no solo ao se aproximar da condição de saturação num determinado ponto, exibe um comportamento puramente convectivo, onde o termo difusivo se torna desprezível na presença do termo gravitacional. Assim, é necessário obter-se um esquema de discretização adequado para convecção-difusão. Os esquemas de discretização utilizados para difusão pura têm um desempenho limitado pelo número de Peclet, parâmetro adimensional que mensura a razão entre o transporte convectivo e o transporte difusivo na célula ou volume de controle. Números de Peclet acima de 2, como mostrado em Patankar (1980) produzem resultados físicos irreais, quando se utiliza o esquema de diferença central ou outros, deduzidos para situações puramente difusivas.

3.2.2. Esquema Flux- Spline para Convecção-Difusão

De forma geral a equação de governo para convecção-difusão de um escalar θ é:

$$\frac{\partial}{\partial \tau}(\rho \cdot \theta) + \frac{\partial}{\partial X} \left(\rho \cdot U^\theta \cdot \theta - \Gamma^\theta \cdot \frac{\partial \theta}{\partial X} \right) = S^\theta \quad (36)$$

Aplicou-se o mesmo procedimento de derivação do esquema de discretização empregado para difusão pura obtém-se a expressão para o fluxo através de uma interface:

$$JX_i^\theta = DJX_i^\theta \cdot \left(e^{P_{i-1}^+} \cdot \theta_{i-1} - e^{-P_i^-} \cdot \theta_i \right) + JhatX_i^\theta \quad (37)$$

Em que:

$$DJX_i^\theta = \left(\frac{1}{A(-P_i^-)} \cdot \frac{\Delta X_i^-}{\Gamma_i^\theta} + \frac{1}{A(P_{i-1}^+)} \cdot \frac{\Delta X_{i-1}^+}{\Gamma_{i-1}^\theta} \right)^{-1} \quad (38)$$

$$\begin{aligned} \text{JhatX}_i^\theta = & \text{BJX}_i^\theta \cdot \left[\left(\text{JX}_i^\theta - \text{JX}_{i+1}^\theta \right) + \left(\rho U_{i+1}^\theta - \rho U_i^\theta \right) \cdot \theta_i \right] + \\ & \text{CJX}_i^\theta \cdot \left[\left(\text{JX}_i^\theta - \text{JX}_{i-1}^\theta \right) + \left(\rho U_{i-1}^\theta - \rho U_i^\theta \right) \cdot \theta_{i-1} \right] \end{aligned} \quad (39)$$

$$\text{BJX}_i^\theta = G\left(-P_i^-\right) \cdot \frac{\left(\Delta X_i^-\right)^2}{\Delta X_i} \cdot \frac{\text{DJX}_i^\theta}{\Gamma_i^\theta} \quad (40)$$

$$\text{CJX}_i^\theta = G\left(P_{i-1}^+\right) \cdot \frac{\left(\Delta X_{i-1}^+\right)^2}{\Delta X_{i-1}} \cdot \frac{\text{DJX}_i^\theta}{\Gamma_{i-1}^\theta} \quad (41)$$

Onde:

$$A(P) = \frac{P}{e^P - 1} \quad (42)$$

$$G(P) = \frac{e^P \cdot (P-1) + 1}{P^2} \quad (43)$$

O vetor ρU_i^θ é armazenado nas faces dos volumes de controle assim como o fluxo total, enquanto que os Γ_i^θ são calculados tomando-se o valor da variável θ no centro do volume de controle. Os números de Peclet são então definidos por:

$$P_i^- = \frac{\rho U_i^\theta \cdot \Delta X_i^-}{\Gamma_i^\theta} \quad (44)$$

$$P_{i-1}^+ = \frac{\rho U_i^\theta \cdot \Delta X_{i-1}^+}{\Gamma_{i-1}^\theta} \quad (45)$$

Assim, os coeficientes de influência para convecção-difusão ficam na forma:

$$\text{AIP}_i^\theta = e^{-P_{i+1}^-} \cdot \text{DJX}_{i+1}^\theta \quad (46)$$

$$\text{AIM}_i^\theta = e^{P_{i-1}^+} \cdot \text{DJX}_i^\theta \quad (47)$$

$$\text{AP}_i^\theta = \text{AIM}_i^\theta + \text{AIP}_i^\theta + \rho_i^{old} \cdot \frac{\Delta X_i}{\Delta \tau} + \left(\rho U_{i+1}^\theta - \rho U_i^\theta \right) - S p_i^\theta \cdot \Delta X_i \quad (48)$$

A equação de governo discretizada fica na forma :

$$AP_i^\theta \cdot \theta_i = AIM_i^\theta \cdot \theta_{i-1} + AIP_i^\theta \cdot \theta_{i+1} + \rho_i^{old} \cdot \theta_i^{old} \cdot \frac{\Delta X_i}{\Delta \tau} + Sc_i^\theta \cdot \Delta X_i + Ssp_i^\theta$$

Usou-se método de solução iterativo (Gauss-Seidel) juntamente com o procedimento de eliminação gaussiana, para resolver-se o sistema de equações algébricas. Note-se que, se o campo de velocidade é nulo, recuperam-se as equações para difusão pura.

4. RESULTADOS E DISCUSSÃO

4.1. Análises laboratoriais

Os resultados de todas as amostras de solo para a determinação do coeficiente de Condutividade Hidráulica saturada K_0 se mostraram tão baixos, que foram considerados nulos, (Anexo G).

Isto significa na prática, que o fundo destes depósitos, submetidos ao mesmo tipo de utilização e manejo, ou seja, depósito e armazenamento de resíduos de alta densidade, como os referentes a mármore e granito, utilizados por longo período de tempo, não permitem a passagem da água presente na lama dos resíduos gerados no corte e usinagem de mármore e granito.

A causa física deste resultado é que depósitos escavados diretamente no solo sofrem um isolamento hidráulico natural do seu fundo, ou seja, o fluxo de água e dos solutos com o passar do tempo se tornam mais lento, devido às partículas produzidas no processo produtivos serem muito finas contribuindo para promover selagem dos macros e microporos do solo do fundo do reservatório e devido à compactação provocada por máquinas pesadas no processo de movimentação dos resíduos armazenados no tanque ao longo dos anos de uso..

Note-se que esta água é o veículo de transporte de eventuais contaminantes do solo abaixo e ao redor do reservatório em questão. Observando-se os valores de condutividade hidráulica saturada, obtidos das amostras T_3 e da testemunha T_4 que representa o solo em torno do reservatório, observar-se-ão valores que atestam uma permeabilidade das paredes do reservatório, de mesma ordem daquela presente no solo em torno do tanque. Isto mostra a pouca influência dos resíduos de mármore e granito, sobre este parâmetro físico nas paredes laterais dos reservatórios.

A causa é o fato das paredes laterais não terem sobre si, a mesma carga hidráulica aplicada pelos resíduos ao fundo do reservatório e a mesma compactação

oriunda do trânsito de máquinas para carga e descarga do reservatório ao longo do tempo de utilização do mesmo.

Com relação às amostras J_1 , J_2 , J_3 e J_4 observam-se valores de condutividade hidráulica ao redor do tanque J_3 e J_4 em área submetida à movimentação de máquinas, menores que aqueles verificados em sua lateral (J_1 e J_2) também devido à compactação oriunda de trânsito de máquinas. Este tanque estava cheio, em processo de envelopamento, utilizando-se solo compactado para a selagem da face superior do tanque.

Como os valores de condutividade hidráulica em J_1 e J_2 , são aproximadamente iguais, os resíduos mesmo com cargas hidráulicas diferentes (cotas diferentes) não possuem ação sobre este parâmetro físico nas laterais do depósito. O valor de condutividade hidráulica encontrado em J_3 é menor que aqueles encontrados nas laterais do tanque, porque se trata como colocado anteriormente, de solo submetido a tráfego intenso de máquinas e equipamentos ao longo do tempo de operação da referida empresa. A amostra J_4 é de outro solo testemunha em torno do reservatório, não submetida ao mesmo tráfego da amostra anterior J_3 , possuindo, portanto maior permeabilidade. Não foi possível retirar amostras do fundo do reservatório, pois nesta empresa, como dito anteriormente, o mesmo se encontra completamente lotado.

A amostra A_1 , localizada na trincheira aberta na base do aterro, onde não se teve um tráfego de máquinas tão intenso como na amostra A_2 , localizada na mesma trincheira a (entrada do aterro) possui condutividade hidráulica, cerca de quatro vezes maior que A_2 .

As amostras A_3 e A_4 são testemunhas do solo em torno deste aterro, a montante e a jusante respectivamente.

Pelo fato do valor da condutividade hidráulica de A_3 ser menor que aqueles encontrados no solo da trincheira abaixo do aterro, conclui-se que o solo do aterro no centro do vale (oriundo de deposição de sedimentos) possui características físicas totalmente diferentes das laterais do vale (solo predominantemente argiloso).

A amostra A_4 retirada à jusante do aterro mostra valor de condutividade hidráulica da mesma ordem do solo da trincheira aberta no fundo do reservatório, sem a presença da carga hidráulica dos resíduos, ou seja, este aterro gerará um fluxo de água e daí de eventuais contaminantes, por suas laterais, menor que aquele a ser gerado no fundo, devido às características próprias do solo em torno do aterro.

Note que neste caso, o aterro não apresenta características ideais de vedação por não ter sofrido o mesmo processo de compactação da base como nos depósitos já mencionados.

4.2. Problema teste computacional

Problema teste

Como um primeiro teste deste esquema, na solução do transporte de solutos em solo não saturado, assumir-se-á por questão de simplicidade que, a condutividade hidráulica e sua curva de retenção sigam o modelo de Van Genuchten (1980). O equacionamento anteriormente descrito por meio das equações diferenciais, discretizadas pelo esquema aqui proposto, será usado para a simulação de infiltração vertical unidimensional de água e soluto, em um solo hidraulicamente homogêneo não saturado, ao longo de um espaço de tempo de 24 horas, dividido em 150 intervalos. O domínio de cálculo em Z é feito igual a 1,0 para $L_c = 1,0 [m]$.

Os coeficientes do modelo de Van Genuchten (1980) para a curva de retenção são $n = 3,969$ e $\alpha = 0,014 [cm^{-1}]$. Para o cálculo da condutividade hidráulica K^θ , usou-se $m = 0,25$ e $\kappa_{sat}^U = 0,5 [\frac{cm}{hr}]$. Para os parâmetros de retardamento, foram utilizados:

$K_d = 2,5 [\frac{cm^3}{g}]$ e $\rho_b = 1,5 [\frac{g}{cm^3}]$. Foram usadas quatro malhas para o espaço (5,

10, 20 e 100 volumes de controle) para avaliar o desempenho do esquema. As

umidades de referência são $U_{sat} = 0,45 [\frac{m_{H20}^3}{m_{solo}^3}]$ e $U_o = 0,10 [\frac{m_{H20}^3}{m_{solo}^3}]$. O coeficiente

efetivo de difusão D_e^C considerando a porosidade aproximadamente igual à

umidade de saturação é calculado usando-se $\lambda = 1,5 [cm]$ e $D_o = \frac{1,0}{24} [\frac{cm^2}{hora}]$ pela

$$\text{expressão: } D_e^C = \frac{\lambda \cdot |JZ^H|}{U} + \frac{U^{\frac{10}{3}} \cdot D_o}{U_{sat}^2}.$$

Os resultados obtidos para umidade depois de um dia de infiltração, foram plotados na Figura 2 e mostram o comportamento das soluções para as diferentes malhas. As condições iniciais e de contorno para umidade e concentração são:

$$\theta(Z, \tau = 0) = 0,05, \quad C(Z, \tau = 0) = 0,00, \quad \theta(Z = 0, \tau > 0) = 1,0, \quad C(Z = 0, \tau > 0) = 1,0,$$

$$\frac{\partial \theta}{\partial Z}(Z = 1, \tau > 0) = 0,0 \quad \text{e} \quad \frac{\partial C}{\partial Z}(Z = 1, \tau > 0) = 0,0$$

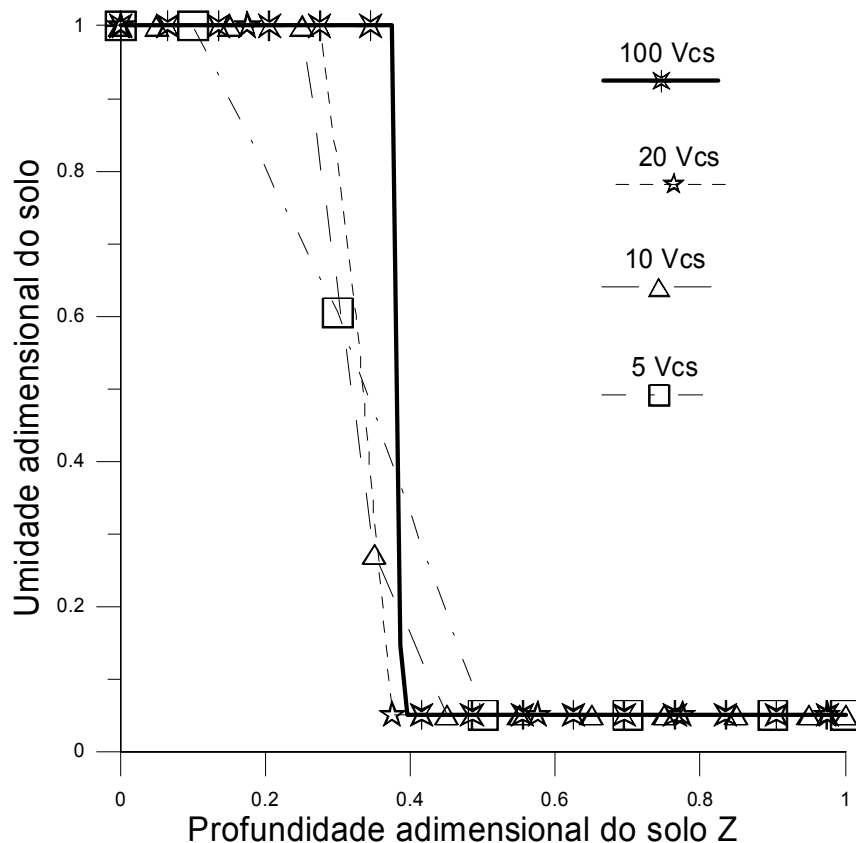


Figura 2- Gráfico do comportamento da umidade no solo para 5, 10, 20, 100 volumes de controles.

O esquema de discretização se comportou de forma adequada em termos de convergência e estabilidade, sendo necessário, porém, um forte fator de relaxação (igual a 0,4) definido por experimentos numéricos. Este valor pode ser usado para mensurar a grande dificuldade envolvida em termos do tratamento das não linearidades presentes na equação de Richards. Em problemas complexos como escoamentos, onde é necessária a resolução das equações de Navier-Stokes, é suficiente, na maioria dos casos, o valor 0,7 (REICHARDT, 1990).

O transporte de umidade em solo não saturado, possui forte não linearidade devido ao comportamento exponencial da função capacidade hídrica, da curva de

retenção e da condutividade hidráulica K^θ . Para o caso aqui abordado, K^θ tem um comportamento que se aproxima de um degrau. É próxima de zero, para valores de umidade até um pouco abaixo da saturação, saltando para um, na iminência de saturação. Assim, quando a umidade θ atinge um determinado ponto da malha, precisa saturar este volume de controle, para atingir outro adjacente, até então bloqueado pelo baixo valor de condutividade hidráulica.

É por causa deste comportamento de K^θ , que se manifesta a solução encontrada de uma frente de molhamento em degrau. A dificuldade na solução do sistema de equações diferenciais, é portanto, a obtenção de resultados de umidade adequados, ou seja, encontrar-se a frente de molhamento através do refinamento da malha. Neste caso, uma malha de 150 volumes de controle, gera a mesma solução encontrada para 100 volumes de controle, podendo-se então, tomá-la como solução independente da malha.

O comportamento da solução para o transporte de soluto está plotado na Figura 3.

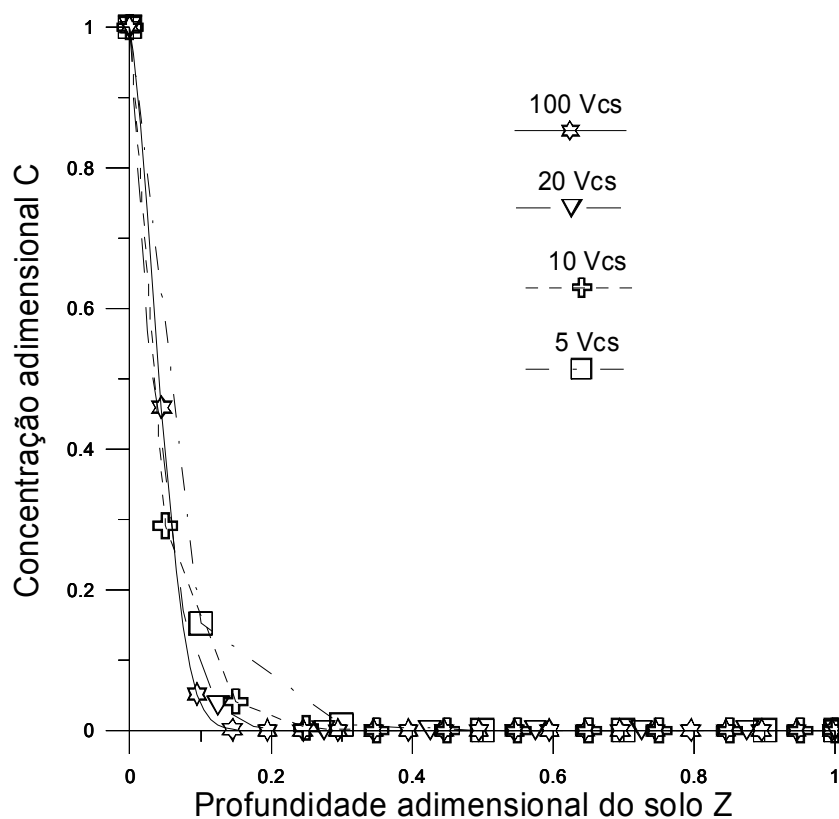


Figura 3- Gráfico do comportamento da concentração de soluto no solo para 5,10, 20 e 100 volumes de controles.

Nota-se que, a partir de vinte volumes de controle atinge-se praticamente uma solução independente da malha, descrita aqui pelo resultado com cem volumes de controle. Isto mostra um comportamento numérico, onde as não linearidades presentes na solução para a umidade, têm pouca influência na solução para os solutos. Atinge-se uma solução numérica de forma mais rápida que no transporte de umidade, ou seja, podem-se usar malhas menos refinadas para a obtenção do deslocamento dos solutos, sem prejuízo para o sistema de equações diferenciais.

Em caso de problemas mais complexos, onde tenhamos por exemplo, multidimensionalidade, presença de vários solutos e reações químicas, esta característica da equação de soluto, permitirá em sua solução, malhas menos refinadas e portanto menos trabalho computacional.

O método e esquema aqui apresentados, possuem fácil extensão a problemas multidimensionais como descrito na literatura e podem ser empregados também, na solução dos sistemas de equações diferenciais que governam o transporte de calor e massa acima do solo, de forma a tratar-se adequadamente o cálculo conjunto de evapotranspiração e movimentação de água e solutos no solo.

4.3. Programa construído

```

C          PROGRAMA convecção 1D.for
c
c
c
c  Projeto FAPES - Simulação Numérica de infiltração de solutos provenientes de
c
c          resíduos de mármore e granito
c
c
c
c  Modelo unidim. transiente para equação de Richards -> para movimento de H2O , H(l,1)
c
c          e soluto -> H(l,2), em solo não saturado
c
c          Abordagem por Convecção-difusão
c
c  Potencial matricial e condutividade hidráulica sob o modelo de Van Genuchten
c
c          Modelo de convecção-dispersão para o soluto
c
c
c          Discretização de primeira ordem no tempo
C
c
c          alegre 15 de novembro de 2005
c
C
c
c
c           $H = ( 1 - h/h_{ref} )$ 
c

```

```

C
C          U = (u-ur)/(usat-ur)
C
C          C = c / cmax
C
C
C Este compilador sofre com problema de erros de precisão -> truncamento
C e arredondamento. Observe que para emek a partir de 1/4 não se consegue obter
C o resíduo da ordem de 0,00001.
C
C
C Está sendo usado um eme para K diferente do eme para a curva de retenção
C
C          veja HM1.GRF
C
C*****
C          ***** PROGRAMA PRINCIPAL *****
C          IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
C          OPEN(UNIT=10,FILE='U11.DAT')
C          OPEN(UNIT=11,FILE='C11.DAT')
C          CALL INPUT
C          CALL ENERGIA
C          CALL OUTPUT
C          STOP
C          END
C*****
C          SUBROUTINE ENERGIA
C          INCLUDE'COMUC.FOR'
C          DO KT=2,NTAL+1
C          DO NF=1,2
C          CALL ARGT
C          CALL COEF
C          CALL FLUX
C          ENDDO
C          ENDDO
C          RETURN
C          END
C*****
C          SUBROUTINE INPUT
C          INCLUDE'COMUC.FOR'
C          malha do espaço
C          write(*,*) NPX, NTAL e coef. de relax. alfa'
C          read(*,*)npx,ntal,alfa
C          npx=20
C          malha do tempo
C          ntal=150
C          coef. de relaxação
C          alfa=0.40
C          Peclet máximo
C          PMAX=200
C          forneça tipo de solo usando curva de retenção modelo de Van Genuchten ->
C          AVG=0.014
C          ENE=3.969
C          EME=1.0-1.0/ENE
C          eme para k no modelo de genuchten para obter-se ordem de Naime -> K = Fi**20
C          EMEK=1.0/4.0
C          *****
C          cond. hid. saturada em [cm/hora]
C          CONSAT=0.5
C          umidades em m3deH2Oporm3desolo para o cálculo de deldu, Prev. e Balena rbcS-24, 2000

```


- c latosolo
USAT=0.737
UR=0.278
DELDU=USAT-UR
- c parâmetros de transporte de concentração
- c densidade do solo [grama/cm3]
ROB=1.50
- c declividade da isoterma de adsorção -> modelo linear [cm3/grama]
CAD=2.5
- c termo de retardamento adimensional -> observe que delay é sempre diferente de zero
- c mesmo com cad igual a zero
DELAY=(ROB*CAD+UR)/DELDU
- c coeficiente de difusão -> $D_0 = 1,00 \text{ [cm}^2/\text{dia]}/24 = 1,00/24 \text{ [cm}^2/\text{hora]}$
D0=1.00/24.00
- c porosidade do solo [m3/m3]
POR=0.50
- c coeficiente de dispersividade [cm]
XLAMB=1.50
- c comprimento de referência -> profundidade do solo em centímetros -> um metro
ELECE=100.00
- c espessura em centímetros da lâmina água em z=zero
elea=10.00
- c umidade adimensional de referência -> um milésimo do domínio de zero a 1
UREF=0.001
DEN=UREF**(-1.0/EME)-1.0
HDR=((UREF**(-1.0/EME)-1)**(1.0/ENE))/AVG
write(*,*)'hdr=',hdr
read(*,*)
- c tempo de infiltração em (horas*número de dias)
DT=(24.00)*5
- c cálculo do domínio de tempo adimensional
DOMT=DT*CONSAT/ELECE/DELDU
DTAL=DOMT/NTAL
- c definição da malha em X adimensional -> (espessura de solo= 1 metro) / (elece=um metro)
DOMX=1.00
DELTAX=DOMX/NPX
- C CONTROLE DO SOLVER PARA ESCALAR PHI - > índice do último volume de controle
IFIN=NPX+1
- C MALHA REGULAR -> coeficientes da geometria da malha são constantes
DO I=2,IFIN
DX(I)=DELTAX
FXP(I)=1.00
FXN(I)=1.00
ENDDO
- c cond. inicial do solo em termos adimensionais -> $U=(u-ur)/(usat-ur)$ ->U0=5%
U0=0.05
- c cond. inicial do solo em termos adimensionais para concentração
C0=0.00
- c Condições iniciais para umidade e concentração
DO I=2,IFIN
HOLD(I,1)=1.0-((U0**(-1.0/EME)-1.0)/DEN)**(1.0/ENE)
HOLD(I,2)=0.00000
ENDDO
- c contorno-> solo saturado em Z=0 na sup do solo para todos os tempos
H(1,1)=1.00
- c cond. de concentração máxima no topo da coluna de solo
H(1,2)=1.00
- c solo com U0=5% de umidade na base da coluna
H(IFIN+1,1)=1.0-((U0**(-1.0/EME)-1.0)/DEN)**(1.0/ENE)
- c concentração zero na base da coluna

```

H(IFIN+1,2)=0.0
c  inicialização do domínio para o tempo kt=2 chutando u = 5 % e C=30%
DO I=2,IFIN
  Uchut=0.05
  H(I,1)=1.0-((Uchut**(-1.0/EME)-1.0)/DEN)**(1.0/ENE)
  H(I,2)=0.30
ENDDO
c  Propriedades nos contornos para evitar divisão por zero
  GAMA(1)=1.0
  GAMA(IFIN+1)=1.0
  do i=1,ifin+1
    write(*,*)H1-2('i,')=,h(i,1),h(i,2)
  enddo
  read(*,*)
  RETURN
END
c  *****
SUBROUTINE ARGT
INCLUDE'COMUC.FOR'
c  coef. de difusão gama do pot. mátrico H(I,1) no meio do vol. de controle
c      gama(i,1)=K(i)*hdr/elece
IF(NF.EQ.1)THEN
  DO I=2,IFIN
    Hm=H(I,1)
c  na base da coluna a umidade é inicialmente governada por difusão
    if(i.eq.ifin)Hm=H(ifin+1,1)
    UMIDm=(1.0+DEN*((1.0-Hm)**ENE))**(-EME)
c  condutividade hidráulica calculada no meio do volume de controle
    CONDM=sqrt(UMIDm)*(1.0-(1.0-UMIDm**(1.0/EMEK))**EMEK)**2.0
c  gama(i) constante no volume de controle = k(i)*(hdr/elece)
    GAMA(I)=CONDM*(HDR/ELECE)
c  o ponto onde H(I,1) é armazenado está centralizado no volume de controle logo:
    DXGAMP(I)=DX(I)/GAMA(I)/2.0
    DXGAMN(I)=DXGAMP(I)
  ENDDO
c  cálculo do rou nas interfaces para transporte convectivo de H
c  em x=0 início do domínio
  Hf=H(1,1)
  UMIDf=(1.0+DEN*(1.0-Hf)**ENE)**(-EME)
  CONDF=sqrt(UMIDf)*(1.0-(1.0-UMIDf**(1.0/EMEK))**EMEK)**2.0
c  calculo de rou na face i=2
  ROU(2)=CONDF*(1.0+1.0*(elea/elece))/(H(2,1)+1.0E-8)
c  Cálculo dos Ks nas interfaces com abordagem puramente convectiva -> pe=infinito
  DO I=3,IFIN
    Hf=H(I-1,1)
    UMIDf=(1.0+DEN*(1.0-Hf)**ENE)**(-EME)
    CONDF=sqrt(UMIDf)*(1.0-(1.0-UMIDf**(1.0/EMEK))**EMEK)**2.0
    IF(H(I-1,1).GT.0.99999)THEN
      DCIMA=1.0
    ELSE
      DCIMA=0.0
    ENDIF
    ROU(I)=CONDF*(1.0+dcima*(elea/elece))/(H(I,1)+1.0E-8)
  ENDDO
c  cálc de rou em ifin+1 -> final do domínio
  Hf=H(IFIN+1,1)
  UMIDf=(1.0+DEN*(1.0-Hf)**ENE)**(-EME)
  CONDF=sqrt(UMIDf)*(1.0-(1.0-UMIDf**(1.0/EMEK))**EMEK)**2.0
  IF(H(IFIN,1).GT.0.99999)THEN
    DCIMA=1.0
  
```

```

ELSE
DCIMA=0.0
ENDIF
ROU(IFIN+1)=CONDF*(1.0+dcima*(elea/elece))/(H(IFIN+1,1)+1.0E-8)
ENDIF
c  variável concentração
IF(NF.EQ.2)THEN
c  cálculo de gama de C
DO I=2,IFIN
Hm=H(I,1)
c  na base da coluna a concentração é governada inicialmente por difusão
if(i.eq.ifin)Hm=H(Ifin+1,1)
Um=(1.0+DEN*((1.0-Hm)**ENE))**(-EME)
Fm=abs(FX(I,1)+FX(I+1,1))/2.0
c  difusividade efetiva do soluto sob o modelo CDE em cm2/hora ??????verifique unidades
DE=(Um**(10.0/3.0))*(D0/(POR**2.0))+(XLAMB*CONSAT/Um)*Fm
GAMA(I)=DE/ELECE/CONSAT
DXGAMP(I)=DX(I)/GAMA(I)/2.0
DXGAMN(I)=DXGAMP(I)
ENDDO
c  cálculo de rou nas faces para o transporte convectivo de soluto
DO I=2,IFIN+1
ROU(I)=FX(I,1)
ENDDO
ENDIF
RETURN
END
c*****
SUBROUTINE COEF
INCLUDE'COMUC.FOR'
C  COEFICIENTES AUXILIARES
C  DIRECAO X
DO I=2,IFIN+1
RENX=ROU(I)*DXGAMN(I)
REPX=ROU(I)*DXGAMP(I-1)
IF((RENX.NE.0).OR.(REPX.NE.0))THEN
DJX(I)=ROU(I)/(RENX/AA(-RENX)+REPX/AA(REPX))
BJX(I)=RENX*Q(-RENX)/(RENX+REPX*AA(-RENX)/AA(REPX))/(1+FXP(I))
CJX(I)=REPX*Q(REPX)/(REPX+RENX*AA(REPX)/AA(-RENX))/(1+FXN(I-1))
ELSE
c  limites para o caso difusivo
DJX(I)=1.0/(DXGAMN(I)+DXGAMP(I-1))
BJX(I)=DJX(I)*0.5*DXGAMN(I)/(1.0+FXP(I))
CJX(I)=DJX(I)*0.5*DXGAMP(I-1)/(1+FXN(I-1))
ENDIF
ENDDO
C  COEFICIENTES PRINCIPAIS
C  DIRECAO X
DO I=2,IFIN
RENX=ROU(I+1)*DXGAMN(I+1)
AIP(I)=DJX(I+1)*EXP(-RENX)
REPX=ROU(I)*DXGAMP(I-1)
AIM(I)= DJX(I)*EXP(+REPX)
c  cálculo de ap(i) para cada variável NF
IF(NF.EQ.1)THEN
c  a cap. hídrica é função do potencial matricial atual
Hm=H(I,1)
DENOM=(1.0+DEN*((1.0-Hm)**ENE))**(1.0+EME)
CAPH=EME*ENE*DEN*((1.0-Hm)**(ENE-1.0))/DENOM
c  tdcMU é o termo devido à conservação de massa

```

```

c  observe que no caso de H -> ro = 1.0 mas d(ro*U)= rou(i+1)-rou(i) não é igual a zero
c  daí como não temos uma equação de conservação de massa para H, surge o termo fonte devido
c  a variação do campo de K tomado como campo de "U"
tdcmU=ROU(I+1)-ROU(I)
APm=DX(I)/DTAL
Rozero=1.0
AP(I)= AIM(I) + AIP(I) + CAPH*(Rozero*APm) + tdcuU
ENDIF
IF(NF.EQ.2)THEN
APm=DX(I)/DTAL
Hv=HOLD(I,1)
Uold=(1.0+DEN*((1.0-Hv)**ENE))**(-EME)
APzero=Uold*APm
SPtrans=DELAY*APm
c  observe que aqui também se faz presente uma fonte de massa de soluto
c  devido a variação do campo de umidade
tdcmS=ROU(I+1)-ROU(I)
AP(I)=AIM(I) + AIP(I)
AP(I)=AP(I) + APzero + SPtrans + tdcuS
ENDIF
ENDDO
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE FLUX
INCLUDE'COMUC.FOR'
TOL=0
IT=0
DO WHILE(TOL.EQ.0)
resf=0.0
DO I=2,IFIN+1
REPX=ROU(I)*DXGAMP(I-1)
RENX=ROU(I)*DXGAMN(I)
FX(I,NF)=DJX(I)*(EXP(REPX)*H(I-1,NF)-EXP(-RENX)*H(I,NF))+FHATX(I)
ENDDO
c  checando o resíduo numérico
DO I=2,IFIN
APm=DX(I)/DTAL
DIVF=FX(I+1,NF)-FX(I,NF)
c  resíduo do potencial matricial
IF(NF.EQ.1)THEN
Hm=H(I,1)
DENOM=(1.0+DEN*(1.0-Hm)**ENE)**(1.0+EME)
CAPH=EME*ENE*DEN*((1.0-Hm)**(ENE-1.0))/DENOM
STRANS=(H(I,1)-HOLD(I,1))*CAPH*APm
ENDIF
c  resíduo de concentração
IF(NF.EQ.2)THEN
Hm=H(I,1)
Um=(1.0+DEN*((1.0-Hm)**ENE))**(-EME)
Hv=HOLD(I,1)
Uold=(1.0+DEN*((1.0-Hv)**ENE))**(-EME)
STRANS=((Delay+Um)*H(I,2)-(Delay+Uold)*HOLD(I,2))*APm
ENDIF
c  DIVERG representa o resíduo numérico da equação de conservacao
DIVERG=STRANS+DIVF
IF(abs(diverg).GT.RESF)RESF=ABS(diverg)
ENDDO
IT=IT+1
c  IF(NF.EQ.1)write(*,*)'resf( nf =',nf,kt,')=',resf,IT

```

```

c  cálculo de fhatx
DO I=2,IFIN+1
  FHATX(I)=BJX(I)*(FX(I,NF)-FX(I+1,NF) + H(I,NF)*(ROU(I+1)-ROU(I)))
!   +CJX(I)*(FX(I,NF)-FX(I-1,NF) +H(I-1,NF)*(ROU(I-1)-ROU(I)))
  fhatx(i)=0.0
ENDDO

c  cálculo do termo fonte con(i)
DO I=2,IFIN
  APm=DX(I)/DTAL
  DIVHAT= FHATX(I+1)-FHATX(I)
c  fonte transiente para H
  IF(NF.EQ.1)THEN
c  cap. hid. calculada no tempo atual
  Hm=H(I,1)
  DENOM=(1+DEN*(1-Hm)**ENE)**(1+EME)
  CAPH=EME*ENE*DEN*((1-Hm)**(ENE-1))/DENOM
  STRANS=CAPH*HOLD(I,1)*APm
  ENDIF
c  fonte transiente para C
  IF(NF.EQ.2)THEN
  Hv=HOLD(I,1)
  Uold=(1.0+DEN*((1.0-Hv)**ENE))**(-EME)
  STRANS=HOLD(I,2)*(DELAY+Uold)*APm
  ENDIF
c  relaxação
  AP(I)=AP(I)/ALFA
c  vetor dos termos fonte
  CON(I)= STRANS - DIVHAT + AP(I)*(1-ALFA)*H(I,NF)
ENDDO

c  cálculo da variável H por eliminação gaussiana
c  transformando de H(I) para PH(I)
DO I=1,IFIN+1
  PH(I)=H(I,NF)
ENDDO

c  chamando o solver para o cálculo dos ph(i)
CALL ADI

c  transformando de PH(I) para H(I)
DO I=1,IFIN+1
  AP(I)=AP(I)*ALFA
  H(I,NF)=PH(I)
  if(H(I,NF).gt.1.0)H(I,NF)=1.0
  if(H(I,NF).lt.0.0)H(I,NF)=0.0
ENDDO

c  impondo as condições de contorno na base da coluna
c  condição de drenagem livre em Z=1
if(nf.eq.1)H(IFIN+1,1)=H(IFIN,1)
c  condição de drenagem livre do soluto em Z=1
if(nf.eq.2)H(IFIN+1,2)=H(IFIN,2)
c  verificação de convergência
crit=1.0e-5
if(resf.gt.crit)then
c  calculando gama e rou para a próxima iteração
CALL ARGV
c  calc. dos novos coeficientes
CALL COEF
  else
c
  if(nf.eq.1)THEN
  DO I=2,IFIN+1
c  write(*,*)'fx(',i,nf,')=',fx(i,nf)

```

```

ENDDO
DO I=2,IFIN
HM=H(I,1)
UM=(1.0+(UREF**(-1/EME)-1.0)*(1.0-HM)**ENE)**(-EME)
U100=UM*100
c  WRITE(*,*)'U(I,KT,')=',U100,KT
ENDDO
read(*,*)
ENDIF

c
tol=1.0
IF(NF.EQ.2)THEN
DO I=1,IFIN+1
HM=H(I,1)
UM=(1.0+(UREF**(-1/EME)-1.0)*(1.0-HM)**ENE)**(-EME)
U100=UM*100
C100=H(I,2)*100
WRITE(*,*)'U-C(I,KT,')=',U100,C100
ENDDO
read(*,*)
ENDIF
endif

ENDDO
c  armazenando os novos hold
DO I=2,IFIN
HOLD(I,NF)=H(I,NF)
ENDDO
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE ADI
INCLUDE'COMUC.FOR'
REAL*8 A(150),B(150),C(150),F(150),TK(150)
N=IFIN-1
DO I=2,IFIN
A(I-1)=AIM(I)*(-1.0)
C(I-1)=AIP(I)*(-1.0)
B(I-1)=AP(I)
F(I-1)=CON(I)
IF(I.EQ.2)F(1)=F(1)+AIM(2)*PH(1)
IF(I.EQ.IFIN)F(N)=F(N)+AIP(IFIN)*PH(IFIN+1)
ENDDO
do i=1,npx
a(i)=a(i)/b(i)
c(i)=c(i)/b(i)
f(i)=f(i)/b(i)
b(i)=1.0
enddo
c  algoritmo de thomas
CALL TDMA(A,B,C,F,N,TK)
DO I=2,IFIN
PH(I)=TK(I-1)
ENDDO
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE TDMA(A,B,C,F,N,TK)
INCLUDE'COMUC.FOR'
REAL*8 A(150),B(150),C(150),F(150),TK(150)
DO KI=2,N

```

```

DK=A(KI)/B(KI-1)
B(KI)=B(KI)-C(KI-1)*DK
F(KI)=F(KI)-F(KI-1)*DK
ENDDO
TK(N)=F(N)/B(N)
DO KI=1,N-1
JK=N-KI
TK(JK)=(F(JK)-C(JK)*TK(JK+1))/B(JK)
ENDDO
RETURN
END
C*****
C declarando as funções A(p) e Q(p)
FUNCTION AA(YY)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
IF(ABS(YY).LE.1.0E-7)THEN
AA=1.00
ELSE
AA=YY/(EXP(YY)-1.0)
ENDIF
RETURN
END
FUNCTION Q(ZZ)
IMPLICIT REAL*8(A-H,O-Z)
IF(ABS(ZZ).LE.1.0E-7)THEN
Q=0.50
ELSE
Q=(EXP(ZZ)*(ZZ-1.0)+1.0)/(ZZ*(EXP(ZZ)-1.0))
ENDIF
RETURN
END
C*****
SUBROUTINE OUTPUT
INCLUDE'COMUC.FOR'
read(*,*)
DO I=1,IFIN+1
HM=H(I,1)
UM=(1.0+(UREF**(-1/EME)-1.0)*(1.0-HM)**ENE)**(-EME)
U100=UM*100
C100=H(I,2)*100
WRITE(*,*)U-C('I,KT,')=,U100,C100
read(*,*)
ENDDO
c
X(1)=0
X(IFIN+1)=domx
DXS2=0.5*DOMX/npX
DO I=2,IFIN
X(I)=(2*I-3)*DXS2
ENDDO
c impressão da umidade U(I) e concentração C(I)
DO I=1,IFIN+1
Hm=H(I,1)
UMID=(1.0+(UREF**(-1/EME)-1.0)*(1.0-Hm)**ENE)**(-EME)
WRITE(10,100)x(i),UMID
WRITE(11,100)x(i),H(I,2)
100 FORMAT(1X,F15.7,1X,F15.7)
ENDDO
CLOSE(10,STATUS='KEEP')
CLOSE(11,STATUS='KEEP')

```

5. CONCLUSÕES

Não foram encontrados indícios significativos de substâncias orgânicas (grupo dos fenóis) que tornassem tais resíduos merecedores de tratamento químico. Os resultados das análises confirmam que para os referidos depósitos de resíduos de mármore e granito, o solo, apresentou valores de concentração dos solutos tanto lixiviados quanto solubilizado, abaixo do que exigido pelas Normas Brasileiras Regulamentadoras (NBR) 10005 e 10006. Entretanto, recomenda-se que tais reservatórios sejam implantados em áreas afastadas de mananciais por causa de um possível rompimento de suas paredes de contenção e conseqüente risco de assoreamento.

Na parte computacional, o esquema de discretização aqui desenvolvido possui um bom comportamento numérico em termos de estabilidade e convergência, necessitando, porém para a solução da equação de Richards, onde a função condutividade hidráulica é marcadamente não linear, comprovando o resultado das análises de laboratório. Os resultados obtidos para o transporte de umidade, mostraram que, para a obtenção da posição da frente de molhamento, são necessárias malhas mais refinadas que aquelas empregadas na solução da equação de transporte de solutos.

É possível em trabalhos futuros, se constatar que, aterros que recebam resíduos do tipo aqui abordado, com baixa umidade porcentual, mas que tenham sofrido um processo de secagem, por exemplo, em filtro-prensa, não necessitem de elevados níveis de compactação de fundo e isolamento das laterais, tendo-se em mente, que a superfície gerada pelos resíduos finos desidratados, possui naturalmente, uma condutividade hidráulica próxima de zero. Tal afirmativa só poderá ser confirmada após os devidos testes.

6. REFERÊNCIAS

ABNT- Associação Brasileira de Normas Técnicas, 1993, NBR 9896- **Glossário de poluição das águas**, Rio de Janeiro.

BEAR, J. **Dynamics of fluids in porous media**, American Elsevier, New York, NY. 1972.

BOUMA, J.; Hoosbeek, M.R.; **The contribution and importance of soil scientists in interdisciplinary studies dealing with land**. In: WAGENET, R.J.; BOUMA, J. The role of soil science in interdisciplinary research. Madison, **SSSA Special Publication** n.45, Cap.1. 1996.

CALIJURY, M.C.; OLIVEIRA, H.T. ;**Manejo da qualidade da água: uma abordagem metodológica**. In: CASTELLANO, E.G.; CHAUDHRY, F.Z. **Desenvolvimento sustentado: problemas e estratégias**. São Carlos: EESC-USP, Cap.4. 2000.

CAMPOS, Solos. **Revista Ação Ambiental**, V. 1, nº 2. 1998

CETESB- Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 2001, **Índice e padrões de qualidade**, disponível em <http://www.cetesb.sp.gov.br>, acessada em fevereiro de 2007.

CETESB- Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental, 2004, **Relatório de qualidade de águas subterrâneas**, disponível em <http://www.cetesb.sp.gov.br>, acessada em fevereiro de 2007.

CIORALLO, G.; ROMANO, N. **Spatial variability of the hydraulic properties of a volcanic soil**. Geoderma, v.65 , p.223-282. 1995.

CLEMENTE, R.S.; PRASHER, S.O.; BARRINGTON, S.F. **PESTFADE, a new pesticide fate and transporte model: odel development and verication**. Transaction of the ASAE, St. Joseph, v.36, n.2,p.357-367. 1993.

COSTA, A.C.S.; LIBARDI, P.L. **Caracterização físico-hídrica de um perfil de terra roxa estruturada latossolica pelo método do perfil instantâneo**. Rev. Brás. Ci. Solo, Viçosa, v.23, p.669-677. 1999.

COX, C.L.; JONES, W.F.; QUISENBERRY, V.L.; YO, F. **One-dimensional infiltration With moving finite elements and improved soil water diffusivity.** Water resources research, Washington, DC, v.30, n.5, p.1431-1438, 1994.

CRESTANA, S.; POSADAS, A.N. **Dinâmica da água e de solutos na região não-saturada do solo: modelagem da dinâmica da água e de solutos no solo.** In: CRESTANA, S. et al. **Instrumentação agropecuária: contribuições no limiar do novo século.** Brasília: EMBRAPA-SPI, Cap.7. 1996b.

CRESTANA, S.; VAZ, C.M.P.; **A instrumentação como uma ferramenta de pesquisa em conservação e manejo do solo.** Congresso Brasileiro de Ciência do Solo, 26, Rio de Janeiro-RJ, Jul. 25p. 1997.

CRESTANA, S. ;**Harmonia e respeito entre homens e natureza: uma questão de vida – a contribuição da agricultura.** In: CASTELLANO, E.G.; CHAUDHRY, F.Z. **Desenvolvimento sustentado: problemas e estratégias.** São Carlos: EESC-USP, Cap.9. 2000.

DOMENICO, P.A.; SCHWARTZ, T.W., **Physical and chemical. Hydrogeology,** John Wiley, New York. 1998.

EMBRAPA, **Manual de métodos de análise de solo,** 1997.

FETTER, C.W. **Contaminant hydrogeology,** 2°-Prentice-Hall, Upper Saddle River, NJ, USA, p.501.

GELHAR, L.G. **Stochastic subsurface hydrology.** Englewood Cliffs, NJ: Prentice-Hall. 1993.

GUVINDARAJU, R.S. **Modeling overland flow contamination by chemicals mixed in shallow soil horizons under variable source area hydrology.** Water resources research, Washington, DC, v.32, n.3, p.753-758, 1996.

HARTEMINK, A.E.; MCBRATNEY, A.B.; CATTLE, J.A. **Developments and trends in soil science:** 100 volumes of Geoderma (1967-2001). Geoderma, v.100, p.217-268. 2001.

HILLEL, D. **Introduction in soil physics.** Orlando, Academic Press, 364p. 1982.

JOFFRE, J.S. (1949). **Pedology.** New Brunswick, **Pedology Publications.**

JURY, W. A.; GARDNER, W. R.; GARDNER, W.H.; **Soil Physics;** John Wiley & Sons, maio 1991, 5a edição, 328p.

JURY, W.A.; ROTH, K. **Transfer functions and solute movement through soil: theory and applications.** Basel, Birkhauser Verlag. 1990.

KEENEY, D. **Soil science in the last 100 years: introductory comments.** **Soil Science, An Interdisciplinary Approach to Soils Research,** v.165, p. 3-4, 2000.

KINOUCHI, T.; KANDA, M.; HIRO, M. **Numerical simulation of infiltration and solute transport in S-shaped model basin by a boundary-fitted grid system.** Journal Hydrology, Amsterdam, v.122, n.1/4.p.373-406, 1991.

KUTILEK, M.; NIELSEN, D.R. **Soil hydrology.** Cremlingen-Dested, Catena Verlag, 370p., 1994.

MARTINS, P.F.S.; COELHO, M.A., **Efeito do manejo da vegetação sobre retenção e movimento da água do solo.** Ver. Brás. Ci. Solo, Campinas, v.4. p.67-71. 1980.

MATSON, P.A.; PARTON, W.J.; POWER, A.G.; SWIFT, M.J. **Agricultural intensification and ecosystem properties.** Science, v.277, p.504-9, 1997.

NAIME, J.M. **Um novo método para estudos dinâmicos, in situ, da infiltração da água na região não-saturada do solo.** São Carlos- SP, 146p. (Tese de Doutorado), 2001.

NIECKELE, A.O. **Development and evaluation of numerical schemes for the solution of convection-diffusion equations.** Minnesota, USA: University of Minnesota, 296p. (Ph. D. Thesis), 1985.

NETO, A.M.; ANTONIO, A.C.D.; AUDRY, P.; CARNEIRO, C.J.G.; DALL'OLIO, A. **Condutividade hidráulica não-saturada de um podzólico amarelo da zona da mata, norte de Pernambuco.** Pesquisa Agropecuária Brasileira., Brasília, v.35 (36) p.1221-1228. 2000.

OLIVEIRA, P.C. **Esquema FLUX-SPLINE aplicado em cavidades abertas com convecção natural.** Campinas: UNICAMP, 196p. (Tese de Doutorado), 1997.

OLIVEIRA, P.C. Esquema FLUX-SPLINE aplicado a problemas difusivos tridimensionais em regime permanente. **Revista Brasileira de Engenharia Agrícola e Ambiental**, v. 3, n. 3, p. 327-330, Campina Grande, PB, 1999.

NOBRE et al, **Remediação dos solos, Revista química e derivados**, disponível em <http://www.quimica.com.br/quimicaederivados.htm> acessada em janeiro de 2007.

PARK, E.; ZHAN, H. **Analytical solutions of contaminat transport from finite one,two, and three-dimensinal sources in a finite-thickness aquifer**, Journal of contaminat hydrology, v.53, p. 41-61.2001.

PATANKAR, S.V. **Numerical heat transfer and fluid flow.** New York: Hemisphere Publishing Corporation, 197 p., 1980.

PERRET, J.; PRASHER, S.O.; KANTZAS, A.; LANGFORD, C. Three dimensional quantification of macropore networks in undisturbed soil cores. **Soil Science Society of America Journal**, v.63, p.1530-43, 1999.

PIFFER,R. **Movimento e degradação de Aldicarbe e Sulfona de Aldicarbe em dois diferentes solos.** Lavras: ESAL,99p. Dissertação de Mestrado. 1989.

PREVEDELLO, C.L; **Física dos solos com problemas resolvidos**. 1ª ed. Curitiba:Sociedade Autônoma de Estudos Avançados em Física dos Solos 446p, 1996.

PRUSK, F.F.; BRANDÃO, V.S; SILVA, D.D. **Infiltração da água no solo**. Viçosa-UFV, 98p. 2003

REICHARDT, K. **Processos de transferência no sistema solo-planta-atmosfera**. Campinas: Fundação Cargill, 268p. 1975.

REICHARDT, K. **Processos de transferência no sistema solo-planta-atmosfera**. Campinas: Fundação Cargill, 268p. 1975

RESENDE, J.O. **A água na produção agrícola**. São Paulo: McGraw Hill do Brasil, 120p. 1978.

REICHARDT, K. **A água em sistemas agrícolas**. Piracicaba: Manoele LTDA, 188p. 1990.

RICHTER, J. **The soil as a reactor**. Cremlingen, Germany, Catena Verlag,1987.

ROGERS, J.S. **Capacitance and initial time step effects on numerical solutions of Richards equation**. Transaction of the ASAE, St. Joseph, v.37, n.3,p.807-813. 1994.

SHIPITALO, M.J.; DICK, W.A.; EDWARDS, W.M. **Conservation tillage and macropore factors that affect water movement and the fate of chemicals**. Amsterdam, Soil & Tillage Research, v.53,p.167-83, 2000.

SOIL SCIENCE SOCIETY OF AMERICA (SSSA). **Glossary of soil science research**. Madison, Soil Science Society of America, 1987.

STIKKER, A. **Water today and tomorrow**. Futures. Great Britain, Pergamon, v.30, p.43-62, 1998.

SWAIN, A. **Water wars: fact or fiction?** Futures. Netherlands, Pergamon, v.33, p.769-81,2001.

TORRE-NETO, A.; CRUVINEL, P.E.; INAMASU, R.Y; CRESTANA, S. **Tecnologias de ponta na agricultura: instrumentação e automação para agricultura de precisão**.Campina Grande: UFPB, p.75-95, 1997.

TRAUTMANN, N.M.; PORTER, K.S.; WAGENET, R.J. **Pesticides and groundwater: a guide for the pesticide user**. <http://pmep.cce.cornell.edu/factus-slides-self/facts/pest-gr-gud-grw89.html,2000>.

GENUCHTEN, M.V. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils. **Soil Science Society American Journal**, v.1, p.892-898, 1980.

VAREJÃO, L.M.C. **FLUX-SPLINE method for heat, mass and momentum transfer**. Minnesota, USA: University of Minnesota, 1979, 235p. (Ph. D. Thesis).

WALLACH, R.; SHABTAI, R. **Surface runoff contamination by chemicals initially incorporated below the soil surface**. Water resources research, Washington, DC, v.29, n.3, p.697-704, 1993.

ZHENG, C.; BENNETT, G.D., **Applied contaminant transport modeling. Theory and practice**, Van-Nostrand- Reinhold, New York, USA, 1995.

ANEXOS

ANEXO A - Fotografia do fundo do depósito temporário, local da coleta da amostra T₁ da empresa Mineração Três Corações Ltda, Cachoeiro de Itapemirim ES.



ANEXO B- Coleta de amostra indeformada T_2 do fundo do depósito temporário



ANEXO C- Parede lateral do depósito temporário, local da coleta da amostra indefomada T_3 .



ANEXO D- Coleta da amostra indeformada T₄ utilizada como solo testemunha



ANEXO E- Parede lateral inferior do depósito temporário, local da coleta da amostra indefomada J_1 .



ANEXO F- Parede lateral superior do depósito temporário, local da coleta da amostra indefomada J₂.



ANEXO G- Resultados das análises das amostras de solo coletadas

Amostra	Condutividade Hidráulica ¹ K_{oH_2O} (cm/h) ⁴	Densidade Aparente ² (g cm ⁻³)	Densidade de Partículas ³ (g cm ⁻³)	Porosidade (%)
T	0,00E+00	1,665	2,700	38,33
Dep. T2	0,00E+00	1,726	2,567	32,79
Dep. T3	1,56E-02	1,559	2,555	38,98
Dep. T4	1,91E-02	1,500	2,532	40,75
Dep. J1	4,37E-03	1,449	2,529	42,71
Dep. J2	4,38E-01	1,699	2,531	32,88
Dep. J3	2,92E-01	1,332	2,585	48,45
Dep. J4	1,51E+00	1,344	2,563	47,56
AT. A1	1,26E+00	1,701	2,911	41,58
AT. A2	3,46E-01	1,564	2,751	43,15
AT. A3	3,40E-03	1,569	2,550	38,47
AT. A4	9,48E-01	1,359	2,557	46,86

ANEXO H- Resultados dos Testes de Solubilização e Lixiviação

Amostra	Ca+ Mg _i mmol _c L ⁻¹	Mn _{Total}	Fe _{Total}	Cu _{Total}	Zn _{Total}	Cr _{Total}	Ni _{Total}	Cd _{Total}	Pb _{Total}
		----- mg L ⁻¹ -----							
Solubilização	4,61	0,01	0,01	0,027	0,07	N.D.	N.D.*	N.D.	N.D.
Lixiviação	22,08	0,43	0,18	0,027	0,12	0,02	N.D.	N.D.	N.D.

Em que: Ca+Mg – concentração de cálcio + magnésio; Mn_{Total} – manganês total;
 Fe_{Total} – ferro total; Cu_{Total} – cobre total; Zn_{Total} – zinco total; Cr_{Total} – crômio total;
 Ni_{Total} – Níquel total; Pb_{Total} – chumbo total.

* N.D. – não detectado