

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Transporte de Contaminantes em Aquífero Freático

João Paulo Martins dos Santos¹, Alessandro Firmiano de Jesus²

Academia da Força Aérea-AFA, Estrada de Aguaí, s/n - Jardim Bandeirantes, 13631-972, Pirassununga-SP, Brasil

Edson Wendland³

Departamento de Hidráulica e Saneamento, EESC-USP, Av. Trabalhador Sancarlene, 400, 13566-590, São Carlos-SP, Brasil

Resumo. A resolução numérica da equação do transporte de contaminantes com campo de velocidades determinado pela solução da equação não linear do modelo de fluxo de água subterrânea em aquífero freático é apresentada. Neste trabalho, uma estimativa inicial para o método iterativo de Picard aplicado à equação do fluxo é determinado com base nas cargas hidráulicas dos poços de monitoramento e, em seguida, o campo de velocidades gerado em aquífero livre com poço de bombeamento e recarga é transferido para a equação de advecção-difusão-reação que determina uma distribuição de contaminantes no domínio.

Palavras-chave. Aquífero Livre, Nível Freático, Método de Elementos Finitos, FEniCS

1 Introdução

A compreensão dos fenômenos hídricos que descrevem a migração de poluentes em meio poroso saturado requer uma combinação de soluções numéricas. Ou seja, é preciso que o modelo matemático que descreve o comportamento hidráulico do aquífero esteja acoplado às equações do transporte de contaminantes através do campo de velocidades do fluxo subterrâneo. Assim, a solução do fluxo fornece a distribuição de cargas hidráulicas e um campo de velocidades, após ser obtido pela *Lei de Darcy*, é implementado no problema do transporte para a definição de suas componentes dispersivas e advectivas.

Neste trabalho, a simulação computacional considera que o fluxo subterrâneo ocorre em aquífero livre de domínio retangular e que o nível freático sofre alterações devido as vazões constantes em poços penetrantes no seu interior. Desta forma, a solução numérica das equações não lineares de Boussinesq requer a implementação do esquema de iterações de Picard. O artigo tem como objetivo obter o campo de velocidades de águas subterrâneas em aquífero livre para implementação na resolução adaptativa do problema de transporte de contaminantes. Assim, o texto foi organizado visando atender os três passos principais da modelagem dos recursos hídricos [2]: *i.*) desenvolvimento e modelo conceitual, *ii.*)

¹jp2@usp.br

²alessandroafj@afa.aer.mil.br

³ew@sc.usp.br

desenvolvimento e aplicação do modelo matemático e *iii.*) processamento e visualização dos resultados.

2 Desenvolvimento e Modelo Conceitual

O desenvolvimento do código computacional para a aproximação das equações diferenciais parciais que governam o fluxo e transporte em meio poroso considera o método de elementos finitos, um domínio computacional bidimensional $\Omega = [x_0, x_1] \times [y_0, y_1]$, uma malha de elementos finitos triangulares τ , a distribuição de cargas hidráulicas h , a condutividade hidráulica K , o tempo $0 < t \leq T < \infty$, a matriz de dispersão D , o campo de velocidades $v = (v_x, v_y)$ e a função que descreve as reações no meio λ . C_0 é uma condição inicial, C_D a função que define a fronteira de Dirichlet e $n \cdot D\nabla C = g$ a função que define a fronteira de Neumann.

O desenvolvimento do código computacional de elementos finitos utiliza as ferramentas disponíveis em FEniCS [7]. A disponibilidade de integração com ferramentas computacionais de alto nível torna possível a integração com softwares de georreferenciamento, manipulação e processamento das soluções para adequada análise e apresentação. A delimitação do domínio computacional por meio da geração de malhas estruturadas é disponibilizada pela função `RectangleMesh(**kargs)`, enquanto `generate_mesh(**kargs)` é a função para geração de malha não estruturada. No caso da equação do fluxo com poço é necessário forçar que o poço seja um vértice da malha. Esta imposição de que pontos específicos do domínio computacional sejam vértices de triângulos da malha de elementos finitos pode ser realizado por meio da função `MeshPassingVertex(**kargs)`.

```

1 def MeshPassingVertex(mesh,coorx,coory):
2     #Based on example From: https://fenicsproject.org/qa/9763/method-compute_closest_point
3     import numpy as np
4     from dolfin import*
5     coords=mesh.coordinates(); tree = mesh.bounding_box_tree()
6     point_cloud = [dolfin.Point(point) for point in mesh.coordinates()]
7     tree.build(point_cloud, 2); p=Point(coorx[0],coory[0])
8     p_i, distance = tree.compute_closest_point(p)
9     lengthCoor=np.shape(coords)[0]
10    for i in range(len(coorx)):
11        p=Point(coorx[i],coory[i])
12        p_i, distance = tree.compute_closest_point(p)
13        coords[p_i][0]=coorx[i]; coords[p_i][1]=coory[i];
14    return mesh

```

3 Desenvolvimento e Aplicação do Modelo Matemático

O modelo matemático para o fluxo subterrâneo em aquífero freático com recarga W e fonte/sumidouro f é dado pela equação de Boussinesq [1].

$$-\nabla(Kh \cdot \nabla h) + W = f \quad \text{em} \quad \Omega \quad (1)$$

A solução numérica pelo método de elementos finitos requer a formulação variacional do problema (1) [3–5, 7, 9]. O sistema linear resultante requer um método de substituição sucessivas, tais como o esquema iterativo de Picard [7].

O código computacional Python^R que implementa a formulação variacional do problema do fluxo em meio poroso homogêneo, com recarga W e iteradas de Picard com Fatoração LU é dado por:

```

1 u = TrialFunction(V); v = TestFunction(V)
2 u.k = interpolate(WellsLocFunc, V) ; f = Expression('W', W=W)
3 a = inner(K*q(u.k)*nabla_grad(u), nabla_grad(v))*dx
4 L = f*v*dx - g*v*ds
5 A = assemble(a); b = None
6 u = Function(V)
7 eps = 1.0; tol = 1.0E-5; iter = 0; maxiter = 200
8 while eps > tol and iter < maxiter:
9     iter += 1
10    solve(a == L, u, bc)
11    diff = u.vector().array() - u.k.vector().array()
12    eps = np.linalg.norm(diff, ord=np.Inf)
    u.k.assign(u)
    
```

O critério de parada nas iteradas de Picard é com $\epsilon = \max |u^{k+1} - u^k| < tol$ ou um máximo de iterações permitidas para evitar soluções divergentes ou convergência lenta [7].

3.1 Equação do transporte de contaminantes

Dado o campo de velocidades $v = (v_x, v_y)$, a distribuição de contaminantes $C(x, y, t)$ em meio poroso é dada pela equação de advecção-dispersão-reação (2), conforme [1]:

$$\partial_t C - \text{div}(\mathbf{D}\nabla C) + \mathbf{v} \cdot \nabla C + \lambda C = f \text{ em } \Omega \quad (2)$$

Analogamente ao caso da equação do fluxo, a aproximação de elementos finitos requer a formulação variacional. Simplificadamente, no passo n , com intervalo de tempo Δt , a aproximação de elementos finitos é dada pelas forma bilinear e linear $a(C^n, w) = L(w)$. Uma descrição mais detalhada da formulação variacional para a equação do transporte de contaminantes pode ser encontrado em [4, 8, 9]. As formas bilinear e linear são elementos chave na implementação utilizando a metodologia do Projeto FEniCS [7]. O código computacional que implementa as formas bilinear e linear é dado por:

```

1 c = TrialFunction(C); w = TestFunction(C)
2 a = (1.0/dt)*c*w*dx(mesh) + theta*inner(D*nabla_grad(c), nabla_grad(w))*dx(mesh) + \
3     theta*(inner(v, nabla_grad(c))*w*dx(mesh) + theta*Lambda*c*w*dx(mesh) - \
4     theta*inner(D*grad(c), n)*w*ds(1, subdomain_data = boundary_parts))
5 L = ((1.0/dt)*c1*w + (theta-1.0)*inner(D*nabla_grad(c1), nabla_grad(w))*dx(mesh) + \
6     (theta-1.0)*inner(v, grad(c1))*w*dx(mesh) + (theta-1.0)*Lambda*c1*w*dx(mesh) + (theta*f1 + (1.0-theta)*f) \
7     *w*dx(mesh) + \
8     (1.0-theta)*inner(D*grad(c1), n)*w*ds(1, subdomain_data = boundary_parts))
    
```

3.2 Metodologia para o cálculo das soluções numéricas

Em problemas envolvendo fluxo subterrâneo livre e o transporte de contaminantes é necessário que a solução do fluxo forneça o campo de velocidades para o transporte de contaminantes. Para obter solução da equação não linear do fluxo é necessário fornecer uma função h^0 para o método de Picard e que será usada para determinar a distribuição de cargas hidráulicas h no domínio com a presença de poços e recarga em regime estacionário. No entanto, h^0 não é conhecida e uma alternativa é usar algum método de interpolação que forneça uma estimativa h_0^0 baseado nas informações de poços de observação, localizados nas coordenadas $[(x_1, y_1), (x_2, y_2), \dots, (x_N, y_N)]$ do domínio computacional.

Suponha que $h_i = h(x_i, y_i)$, $i = 1, 2, \dots, N$ são as cargas hidráulicas nos poços. Dessa forma, a função h_0 pode ser calculada por meio da solução da equação (1) com estimativa inicial $h_0^0 = f(x, y)$ dada por:

$$f(x, y) = \begin{cases} h_i, & \text{para } (x, y) = (x_i, y_i), i = 1, 2, \dots, N \\ \min_{i=1,2,\dots,N} h(x_i, y_i), & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (3)$$

Em seguida, considere que $h^0 = h_0$ é usada como a estimativa inicial para método de Picard na equação que determina a distribuição de cargas h em um domínio com recarga e poço. Após a obtenção da carga hidráulica h , o campo de velocidades é obtido pela Lei de Darcy e utilizado nos termos dispersivo e advectivo para determinar a distribuição do contaminante no meio por meio da solução da equação (2).

4 Processamento e Visualização dos Resultados

Nesta seção dois problemas são considerados. O primeiro refere-se a validação da discussão apresentada para cálculo de h_0 enquanto que o segundo refere-se ao acoplamento entre as equações do fluxo e do transporte com o cálculo de h_0 , h e C , respectivamente. Os resultados gráficos apresentados utilizam a biblioteca Python^R Matplotlib [6].

4.1 Problema 01

Considere um domínio retangular $100m \times 100m$ homogêneo, com taxa de recarga de $W = 5.0 \times 10^{-6}[m/d]$, cargas hidráulicas nas fronteiras de Dirichlet dadas por $h_1 = h(0, y) = 25[m]$ e $h_2 = h(100, y) = [10m]$, poços de observação com $[h_e(10, 10), h_e(10, 70), h_e(50, 50), h_e(70, 10), h_e(70, 70)]$, em que $h_e(x, y) = \sqrt{h_1^2 - ((h_1^2 - h_2^2)/(x_1 - x_0))x}$ [1].

Nesse caso, h_0^0 e h_0 são apresentados na Figura [1]. A sobreposição da função h_0 em relação ao resultado analítico demonstra que a função $h_0^0 = f(x, y)$ é adequada para a metodologia apresentada.

4.2 Problema 02

Considere um domínio retangular $482m \times 482m$, malha não estruturada $n = 120$, cargas hidráulicas idênticas ao exercício anterior, taxa de recarga $W = 0.01[m/d]$ no retângulo $0 < x < 50m$ e $0 < y < 50m$, fronteira de Dirichlet $h(0, y) = 90m$ e $h(482, y) = 50m$, poço

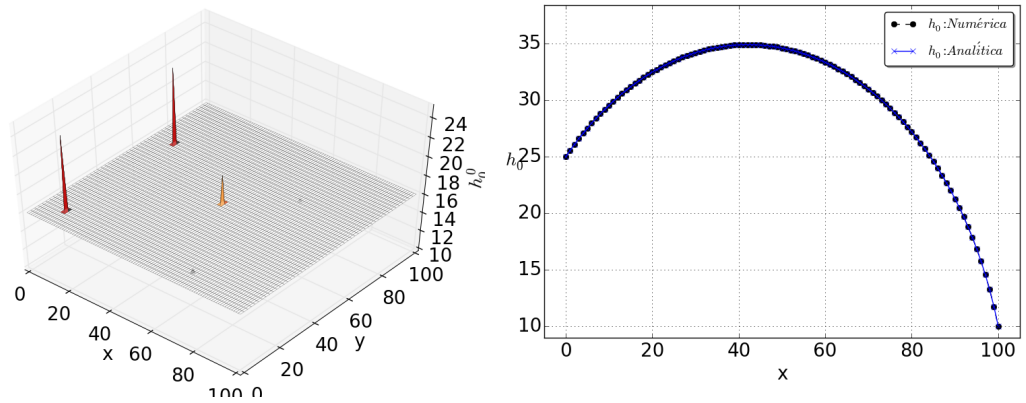


Figura 1: Função h_0^0 e a função h_0 com sobreposição da solução analítica $h_{e0}(x, y) = \sqrt{h_1^2 - ((h_1^2 - h_2^2)/(x_1 - x_0))x}$

de bombeamento em $(291, 291)$ com $Q = 25 \text{ m}^3/d$, $K = 0.005 \text{ m/d}$, fontes de contaminação com concentração normalizada definidas nos retângulos com $100 < x < 200$, $300 < y < 400$ e $300 < x < 400$, $100 < y < 200$, conforme ilustrados na figura 2.

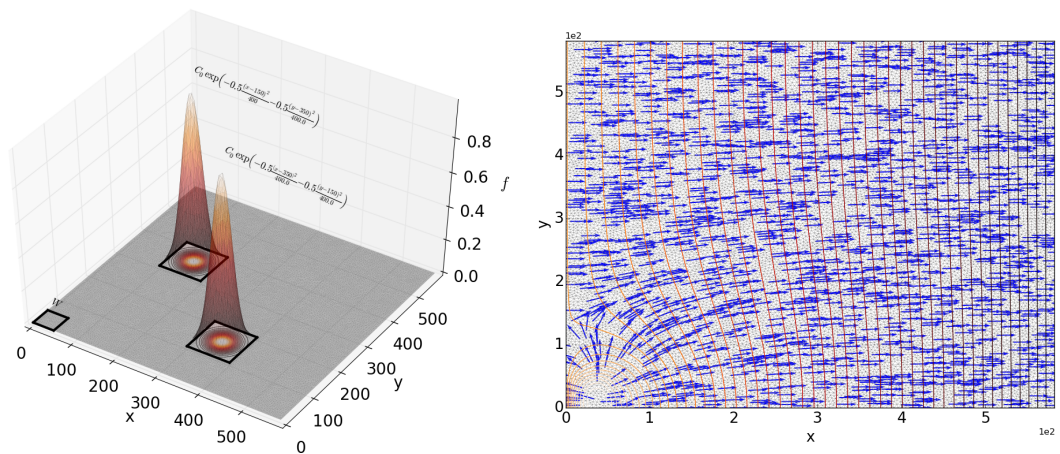


Figura 2: Fonte de contaminação e campo de velocidades determinado por h_0

O campo de velocidades determinado por h_0 , apresentado na Figura [2], evidencia o efeito da recarga no campo de direções. A inclusão do bombeamento provoca uma perturbação na região e, conseqüentemente, o campo de velocidades é modificado conforme pode ser observado na Figura [3]. Por sua vez, ocasiona uma movimentação do contaminante em direção ao poço [3]. Nesse caso, o termo de fonte f injeta contaminante no domínio, que migra preferencialmente na direção do campo de velocidades e é extraído à taxa constante Q .

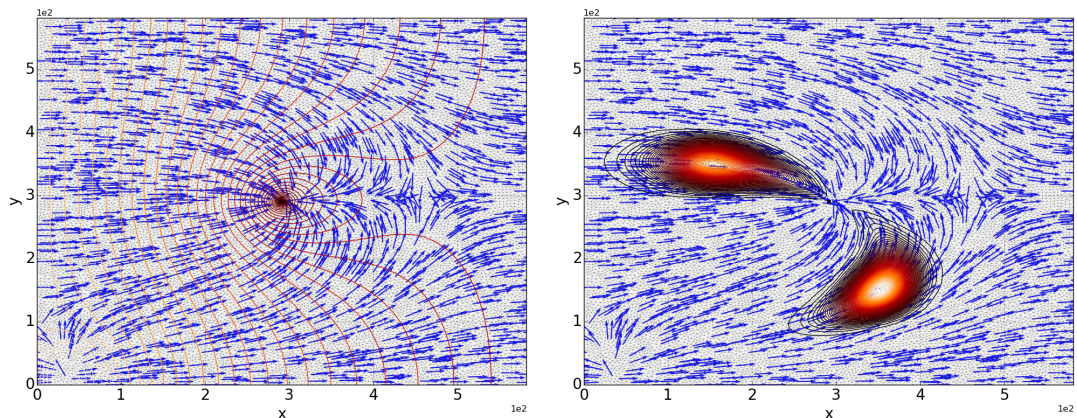


Figura 3: Campo de velocidades com isolinhas gerado devido a ação do poço e movimentação da pluma de contaminação

5 Conclusão

A adequada manipulação das ferramentas de computação científica é essencial para a simulação de problemas envolvendo o acoplamento entre as equações do fluxo e do transporte de contaminantes. Além disso, a possibilidade de integração com softwares de georreferenciamento torna possível a aplicabilidade em problemas da engenharia.

Simplificações foram consideradas para a solução numérica apresentada com relação as fronteiras do domínio computacional, homogeneidade, fluxo estacionário, quantidade de poços e tipo de fonte de contaminantes. No entanto, a disponibilidade de dados tais como o domínio computacional proveniente de software de georreferenciamento, parâmetros físicos do aquífero freático, lista de poços de monitoramento com respectivas cargas hidráulicas, lista de poços com respectivas vazões, torna possível a imediata extensão do código computacional para a simulação acoplada das equações do fluxo e do transporte de contaminantes.

Referências

- [1] J. Bear, *Hydraulics of Groundwater*, New York, McGraw Hill, 2012.
- [2] B. Dixon, V. Uddameri, *GIS and Geocomputation for Water Resource Science and Engineering*, Wiley Publishers AGU, 2015.
- [3] J. Donea, A. Huerta, *Finite Element Methods for Flow Problems*, John Wiley & Sons, 2004.
- [4] A. Firmiano, E. Wendland, *Solução numérica adaptativa da equação do transporte de contaminantes*, Biblioteca24horas, São Paulo, 2012.
- [5] M. Gockenbach, *Understanding and Implementing the Finite Element Method*, SIAM, 2006.
- [6] J.D. Hunter, Matplotlib: A 2D graphics environment, *Computing In Science & Engineering*, v.9, n.3, pg. 90-95, 2007. DOI = 10.1109/MCSE.2007.55—. Disponível em <http://matplotlib.org/>.
- [7] A. Logg, K.A. Mardal, G. Wells, *FEniCS Project: Lecture Notes in Computational Science and Engineering*, Springer, New York, 2010. DOI 10.1007/978.3.642.23099.8
- [8] J.P.M. Santos, Método Multigrid Algébrico: A Reutilização das Estruturas Multigrid no Transporte de Contaminantes, Tese de Doutorado, EESC/USP, 2015.
- [9] R. Verfürth, *Adaptive Finite Element Methods Lecture Notes Winter Term*, Fakultät für Mathematik, Ruhr-Universität Bochum, Deutschland, 2008.

6 Informações Complementares

A solução da equação do fluxo livre em domínio georreferenciado com vários poços de bombeamento e apresentado em outro trabalho complementar que também foi submetido ao XXXVII CNMAC, intitulado por **Geoprocessamento de Bacia Hidrográfica e a Solução Automatizada do Fluxo em Aquífero Freático**.