



XII-016 - MODELAGEM E SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE POLUENTES EM MEIOS POROSOS

Erick dos Santos Leal⁽¹⁾

Graduando de Eng. Sanitária e Ambiental na Universidade Estadual da Paraíba. Aluno de Iniciação Científica PIBIC/UEPB.

Fernando Fernandes Vieira

Engenheiro Químico (UEPB, 1986), Mestre em Engenharia Química (UEPB, 1989), Doutor em Engenharia Mecânica (UEPB, 2002). Professor Titular de Departamento de Química da Universidade Estadual da Paraíba (UEPB).

Geralda Gilvania Cavalcante de Lima

Engenheira Química (UEPB, 1988), Mestre em Engenharia Química, (UEPB, 1992), Doutora em Engenharia Mecânica, (UEPB, 2002). Professora Titular do Departamento de Química (UEPB).

Carlos Antonio Pereira de Lima

Engenheiro Químico (UEPB, 1988), Mestre em Engenharia Química, (UEPB, 1992), Doutor em Engenharia Mecânica, (UEPB, 2002). Professor Titular do Departamento de Química (UEPB).

Endereço⁽¹⁾: Rua: João Batista Neves, N°74-A – Santa Cruz – Campina Grande - PB - CEP: 58417-070 - Brasil - Tel: (83) 3335-5501 - e-mail: erickleal21@gmail.com

RESUMO

As águas subterrâneas são importantes e em alguns casos essenciais para o fornecimento de água potável para algumas regiões. Contudo existem sérios problemas que põe em risco a qualidade dessas fontes hídricas, como ausência de redes de esgotos e vazamentos de efluentes industriais. A necessidade de um modelo matemático para simular o transporte de poluentes na região saturada do solo, para implementar ações de controle e remediação. O uso de métodos híbridos analítico-numéricos e computação permitem o desenvolvimento de novas técnicas para o tratamento de sistemas de equações diferenciais parciais acopladas. A equação de dispersão para transferência massa em meio poroso, analiticamente tratada através do uso da técnica de transformada integral generalizada (GITT) e dos recursos de computação. Neste tratamento de caráter genérico evita-se a escolha de problemas auxiliares associados acoplados, eliminando-se a eventual ocorrência de autovalores complexos. Isto é conseguido adotando-se um par de problemas auxiliares desacoplados, do tipo Sturm-Liouville, para a concentração. Determinam-se as concentrações no interior do meio poroso, as quais são obtidas segundo os formalismos inerentes à GITT na forma de séries de expansão de autofunções. Para efeito de implementação computacional, foram obtidas soluções numéricas. Nestas, utiliza-se precisão prescrita e trunca-se, a uma ordem finita, o sistema diferencial ordinário transformado, o qual é resolvido numericamente através do uso de subrotinas bem estabelecidas de bibliotecas matemáticas disponíveis. Os resultados obtidos nas soluções são comparados e constata-se que os mesmos são numericamente idênticos. Para validar estes resultados, desenvolve-se através dos formalismos da GITT a solução exata do problema utilizando computação. Os resultados são criticamente comparados aos anteriores, validando-os. Obtém-se um conjunto de resultados de referência e avalia-se a influência de parâmetros no comportamento.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem matemática, Simulação computacional, Água subterrânea, Meio porosos.

INTRODUÇÃO

As maiores fontes abastecedoras de água para consumo são as águas superficiais e subterrâneas. Dados estatísticos demonstram que principalmente as águas subterrâneas têm sido poluídas devido aos problemas decorrentes a inexistência de redes coletoras de esgotos domésticos, a disposição de efluentes líquidos industriais e as práticas atuais de cultivo agrícola.

O crescente incremento das concentrações de nitratos nas águas subterrâneas e os freqüentes episódios de penetração na sub-superfície de hidrocarbonetos halogenados voláteis, constituem um perigo para a qualidade da água potável (BRATBERG & HOPKINS, 1995). Como por exemplo, deste tipo de problema, podemos citar o vazamento de gasolina a partir dos tanques subterrâneos de postos de abastecimento. Em contato com a água subterrânea, a gasolina se dissolve parcialmente, liberando compostos denominados de BTEX, que são

os constituintes da gasolina que tem maior solubilidade em água. Por isto estes são os primeiros que irão alcançar o lençol freático. Tais contaminantes são substâncias perigosas por serem depressoras do sistema nervoso central e podem causar leucemia em exposições crônicas (CORSEUIL, 1997).

Um importante elemento na qualidade dos recursos hídrico, o solo representa um fator de estudo importante, pois, é a partir dele que são formadas as grandes fontes de água para consumo. Estima-se que sete oitavos de água da água de drenagem anual do ciclo hidrológico infiltrem no solo mesmo que momentaneamente e apenas um oitavo escoar para o mar a partir da superfície da terra (CHRISTOFOLETTI, 1974).

A necessidade de desenvolver medidas de contornar os problemas de poluição do solo, das águas subterrâneas e de superfície, se faz necessário o desenvolvimento de pesquisas que possibilitem o entendimento do transporte de espécies químicas de poluentes em meios porosos. Estas pesquisas envolvem as propriedades químicas e físicas e biológicas destes compostos e do ambiente onde os mesmos se encontram, parâmetros importantes para compreender o processo de destruição natural dos poluentes dos aquíferos, antes de se implementar uma ação de limpeza ou um programa de monitoramento de longo prazo.

Modelos matemáticos podem ser usados para responder as seguintes questões que invariavelmente surgem durante o estudo de remediação. Para responder tais questões, necessita-se de uma descrição adequada dos vários processos intrínsecos de remediação natural que ocorrem no local.

O objetivo da pesquisa foi propor um modelo matemático robusto para a simulação numérica da propagação de poluentes na região saturada do solo, considerando os mecanismos de dissolução, advecção, dispersão, sorção e reações químicas. , capaz de prever simultaneamente o comportamento do transporte reativo, de microorganismos, de substratos e poluentes no interior do meio poroso.

MATERIAL E METODOS

Tomando como problema um meio poroso, com apenas uma camada, transferência de massa unidirecional transiente, com reação química irreversível e as propriedades dentro da camada constantes.

Partindo do balanço de massa para o desenvolvimento das equações diferenciais que descrevem o transporte de solutos em meio poroso. Onde de acordo com a conservação das massas podemos realizar o balanço material para a espécie química através de volume de controle que é dado pela equação (1). A massa do soluto transportada pode ser representada pelos mecanismos de transporte de soluto por advecção, dispersão.

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fluxo mássico} \\ \text{entrando no} \\ \text{volume} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Fluxo mássico} \\ \text{saindo do} \\ \text{volume} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{c} \text{Perda ou Ganho} \\ \text{de Massa devido} \\ \text{a reações} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{de massa no} \\ \text{volume} \end{array} \right] \quad \text{equação (1)}$$

Realizou-se a modelagem da equação que descrevem o transporte de massa em um meio poroso, a partir da equação de transporte:

$$\left[D_x \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} + D_y \frac{\partial^2 C}{\partial y^2} + D_z \frac{\partial^2 C}{\partial z^2} \right] - \left[u \frac{\partial C}{\partial x} + v \frac{\partial C}{\partial y} + w \frac{\partial C}{\partial z} \right] = R \frac{\partial C}{\partial t} - KRC \quad \text{equação (2)}$$

em que o R é o fator de retardo, D é o coeficiente de dispersão, C é a concentração do soluto, K é a velocidade de reação.

A equação obtida após aplicar as condições do problema proposto neste trabalho na equação (2) foi à seguinte equação adimensional:

$$R \frac{\partial C(x,t)}{\partial t} - W \frac{\partial C(x,t)}{\partial x} = D \frac{\partial^2 C(x,t)}{\partial x^2} - KC(x,t) \quad \text{equação (3)}$$

em que W é a velocidade de escoamento.

A equação (3) foi resolvida mediante a aplicação da Técnica de Transformada Integral Generalizada (GITT). A equação encontrada foi à seguinte:

$$\frac{d}{dt} \bar{C}_1(t) = \frac{1}{R} [-(D \mu_1^2 + K) \bar{C}_1(x) + \sum_{j=1}^{\infty} W A_j \bar{C}_j] \quad \text{equação (4)}$$



Após a resolução, realizamos a validação da equação (4) através de simulações que comprovaram a que o modelo é estável e converge. Sendo analisada a convergência da solução até a quarta casa decimal. Em seguida, partiu-se para a análise da influência da variação dos parâmetros do sistema como: coeficiente de dispersão do meio (D), velocidade de escoamento (W), coeficiente de retardo (R), coeficiente de reação química (K).

Os resultados obtidos a partir da implementação do código computacional gerado através do modelo matemático desenvolvido, demonstra que os fatores físico-químicos influem diretamente no comportamento da pluma no meio poroso. Onde o fator importante que podemos levar em consideração é o coeficiente de reação química (K), onde sua presença ou ausência pode influenciar a possibilidade que o poluente possui para atingir grandes profundidades, e assim a possível contaminação das águas subterrâneas. Outros fatores como o coeficiente de retardo (R), a dispersividade do solo (D) e a velocidade de escoamento do poluente (W) podem ser relacionadas com o coeficiente de reação química, na caracterização do comportamento da pluma do poluente. Sendo assim esses fatores estão diretamente relacionados, pois o poluente depende do coeficiente de reação química para ser consumido, mas também da velocidade de escoamento, da dispersividade e do coeficiente de retardo para que o poluente possa se propagar no meio, onde se a reação for rápida e os demais parâmetros forem lentos, a pluma irá atingir uma pequena profundidade, e não apresentará risco para uma possível contaminação de um aquífero subterrâneo. Mas se a reação for lenta e os demais forem maiores, a pluma irá se deslocar para regiões mais profundas podendo contaminar os aquíferos.

Os gráficos abaixo demonstram o comportamento do poluente sem reação química e com a influência dos demais parâmetros do sistema meio poroso-poluente.

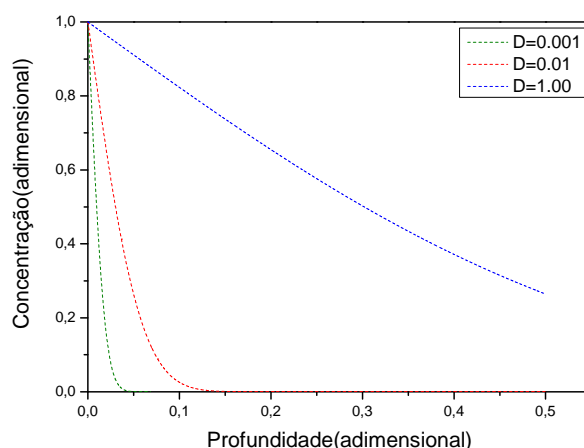


Figura 02- Perfil da concentração em função da profundidade, variando o D e mantendo o K=0.

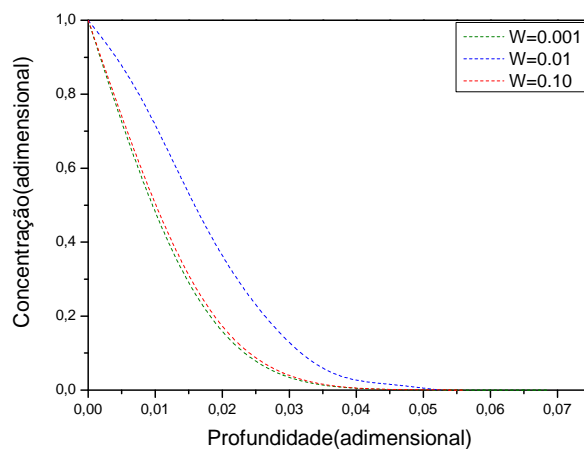


Figura 03- Perfil da concentração em função da profundidade, variando o W e mantendo o K=0.

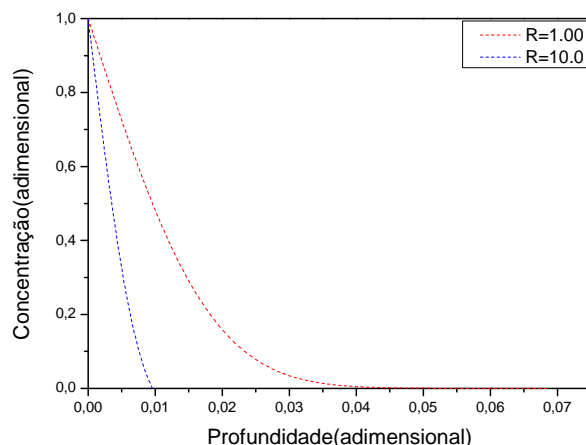


Figura 04- Perfil da concentração em função da profundidade, variando o R e mantendo o K=0.

CONCLUSÕES

Podemos observar com os resultados que os fatores como o coeficiente de retardo, a dispersividade do solo e a velocidade de escoamento do poluente podem ser relacionadas com o coeficiente de reação química caracterizando o comportamento da pluma do poluente, e a capacidade que ele possui de atingir grandes profundidades e conseqüentemente a contaminar águas subterrâneas.

Assim podemos demonstrar que um modelo matemático, implementado em um código computacional pode nos auxiliar em uma ação de prevenção ou contenção de um impacto ocasionado por um determinado poluente em meio poroso, simulando o comportamento de um poluente com determinadas características. Reduzindo assim a possibilidade de contaminação de águas subterrâneas.

Servindo também como ferramenta, para auxiliar nas decisões de implantações de empreendimentos, que possuam um grande potencial poluidor.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. CHRISTOFOLETTI, ANTÔNIO. GEOMORFOLOGIA. São Paulo. ED. Da Universidade de São Paulo, 1974.
2. CORSEUIL, H. X., MARTINS, M. D. M., (1997). Contaminação de Águas Subterrâneas por Derramamentos de Gasolina: O Problema é Grave? In: Engenharia Sanitária e Ambiental, Vol. 2, No. 2, Abril/Junho.
3. BRATBERG, D., HOPKINS, L., (1995). Risk Based Corrective Action and Risk Assessment Procedures in the United States: a 1995 Survey. In: Proceedings of the 1995 Petroleum Hydrocarbon and Organic Chemicals in Ground Water: Prevention, Detection, and Restoration Conference, Houston, Texas. Nov. p.25-31.