IV-012 - MODELAGEM COMPUTACIONAL DA CONTAMINAÇÃO DE AQÜÍFEROS POR DERIVADOS DE PETRÓLEO ATRAVÉS DO MÉTODO NUMÉRICO SEM MALHA "MESHLESS"

Marcos Abílio Medeiros de Sabóia(1)
Engenheiro Civil pela Universidade Federal do Ceará. Mestrando em Recursos Hídricos na UFC.
Alessandro de Araújo Bezerra(2)
Engenheiro Civil pela Universidade Federal do Ceará. Mestrando em Recursos Hídricos na UFC.
Magno Gonçalves da Costa(3)
Engenheiro Civil pela Universidade Federal do Ceará. Mestrando em Recursos Hídricos na UFC.
Marco Aurélio Holanda de Castro(4)
Engenheiro Civil, PhD., Drexel University -USA. Professor Adjunto, Departamento de Enga. Hidráulica e Ambiental, Coordenador da Pós-Graduação em Eng. Civil - Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Ceará.

Endereço(1): Campus do Pici, Bloco 713, CEP 60450-970, Fortaleza, Ceará, Brasil. Telefone (85)33669621, Fax (85)33669589. E-mail: alessandroaraujo86@hotmail.com

RESUMO

A contaminação de aqüíferos vem se tornando um problema muito preocupante não só no Brasil, mas em todo o mundo. Grande parte das reservas de água doce do planeta estão em aqüíferos e esses precisam estar livres de contaminantes para que possam ser utilizados pela população. Este trabalho tem por objetivo principal achar a solução numérica da equação transiente de convecção-difusão que rege o fluxo de contaminantes em aqüíferos utilizando o método numérico “meshless” que tem como principal característica a ausência da necessidade de uma malha regular, pois só o que importa no método é a distância entre dois pontos do domínio e do contorno, não importando sua posição nos eixos cartesianos.

PALAVRAS-CHAVE: Modelagem, petróleo, aquíferos

INTRODUÇÃO

No Brasil, a falta de monitoramento em milhares de locais onde há um potencial para contaminação, juntamente com a falta de uma análise abrangente da qualidade da água em centenas de milhares de poços, elimina a possibilidade de uma determinação confiável da extensão e severidade da degradação de água subterrânea e os riscos para a saúde da população. Na falta de programas de monitoramento, segmentos de importantes aqüíferos se degradaram e podem estar perdidos para sempre como fontes de água potável. A contaminação da água subterrânea pode ter origens diversas: resíduos industriais, aterros e lixões, fossas sépticas, irrigação, chuvas ácidas, fertilizantes e pesticida agrícolas, dutos subterrâneos e tanques de armazenamento de combustíveis, intrusão salina, efluentes urbanos e entre outros.

Nos aqüíferos, devido à lenta circulação das águas subterrâneas, uma contaminação pode levar muito tempo até manifestar-se claramente. O notável poder de depuração dos aqüíferos, em relação a muitos contaminantes, e o grande volume de água que armazenam, fazem com que as contaminações extensas se manifestem muito lentamente e as contaminações localizadas somente apareçam depois de algum tempo. Em outras palavras, os aqüíferos são muito menos vulneráveis a contaminação do que as águas superficiais. Mas, uma vez produzida a contaminação, a recuperação, dependendo do tipo de contaminante, pode levar muitos anos e até mesmo tornar-se tecnicamente e economicamente inviável.

De um modo geral pode-se dizer que as águas subterrâneas podem sofrer contaminação direta, sem diluição, quando o contaminante atinge diretamente o aqüífero e contaminação indireta, com diluição, quando o contaminante atinge o aqüífero depois de passar por alterações a partir do ponto de origem.

A contaminação por derivados de petróleo possui um caráter especial em relação a outros poluentes, e se apresenta de forma complexa, pelo fato do petróleo possuir uma grande quantidade de compostos com características distintas, sendo na sua grande maioria caracterizado pela baixa solubilidade e pouca persistência no solo. A forma como interagem com o fluxo freático, com os argilo-minerais e com a matéria orgânica presentes no solo é complexa do ponto de vista físico e químico. Mais ainda, sendo produtos orgânicos de fácil conversão, as ações biológicas que se deflagram no terreno a partir da sua presença são significativas e alteram o comportamento dos contaminantes ao longo do tempo.

MATERIAIS E MÉTODOS

Durante a fase inicial da pesquisa, demos uma maior ênfase ao estudo das características do solo e seus possíveis contaminantes. Posteriormente, deu-se o estudo de um método numérico inovador que não necessita de malha regular, conhecido por "meshless".

Além de livros relacionados sobre hidrogeologia, foram utilizadas para a realização do projeto inúmeros artigos científicos, pois o método numérico sem malha "meshless", que foi utilizado para solucionar a equação diferencial que rege o fluxo de contaminantes na água subterrânea, é um método inovador e que possui poucos livros que falam a respeito.

Os problemas transientes de convecção-difusão são regidos pela seguinte equação fundamental:

$$\frac{\partial u(x,t)}{\partial t} + L[u(x,t)] = f(x,t) \tag{1}$$

Onde: $x \in \Omega \subset R^d, t > 0$ e $L = (k\nabla^2 + v\nabla)$ é o operador da convecção-difusão.

Sabendo que ∇^2 é o laplaciano e ∇ é o gradiente da função, k é o coeficiente de difusão, v é o vetor de velocidade e $u(x,t)$ representa uma função potencial. Ω representa um domínio qualquer e $\partial\Omega$ representa o seu contorno, enquanto $f(x,t)$ é uma função conhecida.

A equação de convecção-difusão é largamente utilizada para modelar uma grande variedade de problemas físicos e químicos, entre eles destaca-se a contaminação de águas subterrâneas por derivados de petróleo, que é o tema principal deste trabalho.

A peculiaridade dessa equação é que ela representa simultaneamente dois fenômenos diferentes, convecção e difusão. Define-se convecção como o movimento de um fluido causado por gradientes de temperatura ocorrendo fluxos ascendentes e descendentes. Já a difusão se refere ao movimento de mistura do componente na coluna de fluido sem a ação mecânica da corrente mas por forças eletrostáticas e químicas.

O método numérico "meshless"

Funções de base radial (RBF)

Recentemente uma classe de métodos numéricos para solução de equações diferenciais parciais, conhecidos como métodos de colocação, tem recebido uma significativa atenção por causa de sua natureza livre de malha (*meshless, mesh free*) e suas propriedades de convergência.

Uma abordagem relativamente nova para solução de equações diferenciais parciais é através das funções de base radial (no inglês, RBF's). Uma RBF depende apenas da distância a um ponto central x_j e é expressa da seguinte forma:

$$\phi(\| x - x_j \|)$$

A norma $\| x - x_j \|$ pode ser substituída por r, apenas para simplicidade de escrita. As funções de base radial a serem estudadas também dependem de um parâmetro de forma, c, sendo então expressas da seguinte maneira:

$\phi(\| x - x_j \|, c)$ ou $\phi(r, c)$

Onde:

$$r = \sqrt{(x - x_j)^2}$$ Caso unidimensional

$$r = \sqrt{(x_1 - x_j)^2 + (x_2 - x_j)^2 + ... + (x_n - x_j)^2}$$ Caso n-dimensional

Algumas das RBF's mais populares estão na tabela a seguir:

Tabela 1 – Funções RBF

Splines de Placas Finas (*Thin Plate Splines*)	$\lvert r \rvert^n \ln \lvert r \rvert^n$, com n par
Multiquadráticas (*Multiquadrics*)	$\sqrt{r^2 + c^2}$
Multiquadráticas Inversas (*Inverse Multiquadrics*)	$(r^2 + c^2)^{-\frac{1}{2}}$
Gaussianas (*Gaussians*)	$e^{-(cr)^2}$

A principal característica do método RBF é que ele não requer malha. A única propriedade geométrica que é utilizada são os pares de distância entre os pontos. Essas distâncias são fáceis de calcular em qualquer dimensão, então o aumento na dimensão do problema não apresenta um aumento na dificuldade do método.

O método trabalha com pontos espalhados no domínio de interesse e o interpolador RBF é uma combinação linear de funções RBFs centrada nos pontos x_j.

$$u(x, c) = \sum_{j=1}^{n} \lambda_j \phi(r, c) \qquad (2)$$

onde N é número de pontos de dados; $x = (x_1, x_2, ..., x_d)$ e d é a dimensão do problema; os λ_j´s são os coeficientes a serem determinados; e ϕ é a função de base radial.

A precisão das soluções é função do parâmetro de forma, c. Pequenos valores de c geralmente dão os melhores resultados, recomenda-se entre 0 e 1. Um problema bastante comum nesses métodos RBFs é o mau condicionamento da matriz, tanto para pequenos valores de c como valores muito altos. Particularmente, o valor ótimo de c foi achado através de múltiplas tentativas.

RESULTADOS E DISCUSSÕES

Problema 2D de convecção-difusão transiente

Aqui, iremos resolver a equação de convecção-difusão que rege o problema de percolação de contaminantes em águas subterrâneas que é aplicada também na contaminação por derivados de petróleo.

A equação de governo do problema é escrita da seguinte forma:

$$\frac{\partial u}{\partial t} = K_x \frac{\partial^2 u}{\partial x^2} + K_y \frac{\partial^2 u}{\partial y^2} + V_x \frac{\partial u}{\partial x} + V_y \frac{\partial u}{\partial y} \text{ em } \Omega = (0,1)x(0,1) \quad (3)$$

A difusão se refere ao movimento de mistura do componente na coluna de fluido sem a ação mecânica da corrente, mas por forças eletrostáticas e químicas e é representada pelas constantes K_x e K_y. Enquanto as velocidades são representadas por V_x e V_y.

e as seguintes condições de contorno:

$$u(0,y,t) = ae^{bt}(1+e^{-c_y y}) \quad (4)$$
$$u(x,0,t) = ae^{bt}(1+e^{-c_x x}) \quad (5)$$
$$u(1,y,t) = ae^{bt}(e^{-c_x}+e^{-c_y y}) \quad (6)$$
$$u(x,1,t) = ae^{bt}(e^{-c_x x}+e^{-c_y}) \quad (7)$$

com a condição inicial:

$$u(x,y,0) = a(e^{-c_x x}+e^{-c_y y}) \quad (8)$$

e a solução analítica é dada por:

$$u(x,y,t) = ae^{bt}(e^{-c_x x}+e^{-c_y y}) \quad (9)$$

onde:

$$c_x = \frac{V_x \pm \sqrt{V_x^2 + 4bk_x}}{2k_x} > 0 \quad (10)$$

e

$$c_y = \frac{V_y \pm \sqrt{V_y^2 + 4bk_y}}{2k_y} > 0 \quad (11)$$

No exemplo citado, foram considerados os seguintes dados:
a=1.0 (constante arbitrária)
b=0.1
V_x=1.0
V_y=1.0
K_x=1.0
K_y=1.0
δt =1 segundo

$$u(x,1,t) = ae^{bt}(e^{-c_x x} + e^{-c_y})$$

$$u(x,0,t) = ae^{bt}(1 + e^{-c_x x})$$

$$u(1,y,t) = ae^{bt}(e^{-c_x} + e^{-c_y y})$$

$$u(x,0,t) = ae^{bt}(1 + e^{-c_x x})$$

Figura 1 – Contorno do problema

Como função aproximadora foi utilizada a multiquadrática inversa $(R^2 + C^2)^{-\frac{1}{2}}$, que mostrou ser a função que apresentou os resultados mais satisfatórios. Através de tentativas pode-se constatar que o valor ótimo de C para o problema foi 0,136.

Para a sua resolução, o problema foi dividido em 25 pontos, sendo 9 do domínio, e 16 do contorno, como mostra a figura a seguir:

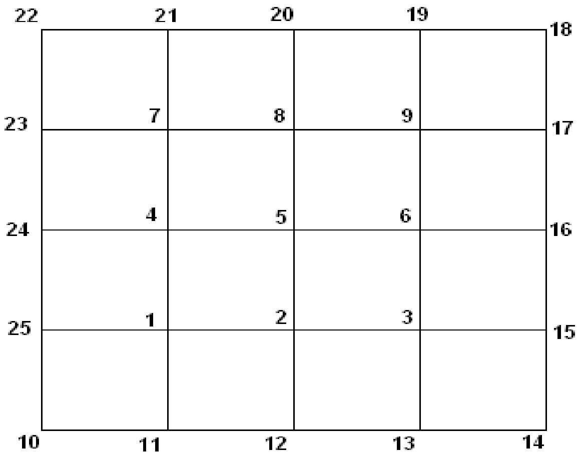

Figura 2 – Malha do domínio

Com essa subdivisão da malha em apenas 25 pontos, já foi possível a obtenção de resultados bastante satisfatórios, como mostram a tabela a seguir com as 5 primeiras iterações no tempo, ou seja, os 5 primeiros segundos.

A resolução da equação diferencial parcial que rege o problema de contaminação de aqüíferos foi resolvida em um software de minha autoria na linguagem de programação A*utolisp* com a utilização do software *Autocad.* Os resultados foram plotados no software *Surfer*.

Tempo = 1s

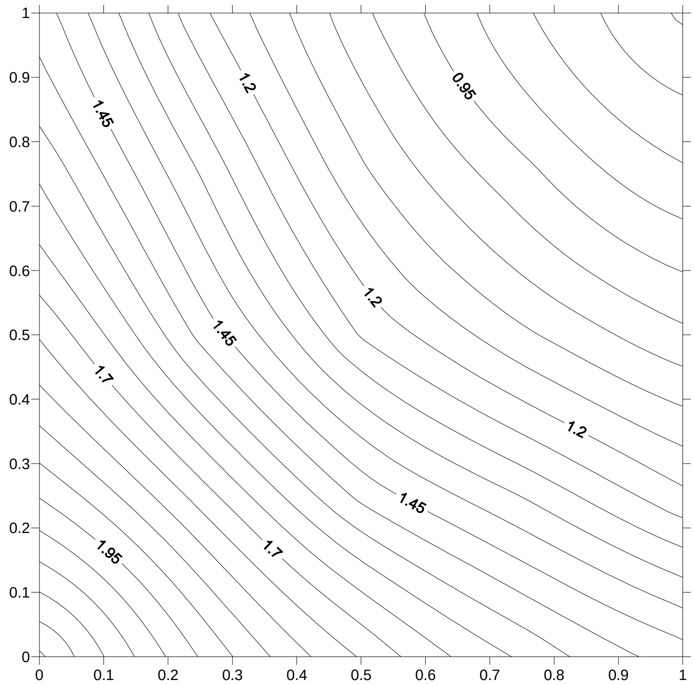

Figura 3 - Solução Numérica em 1s

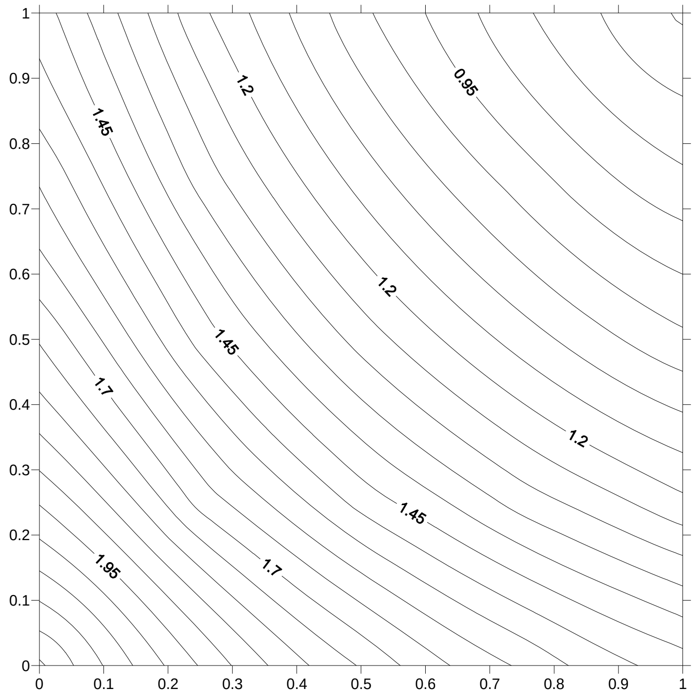

Figura 4 - Solução Analítica em 1s

Tempo = 2s

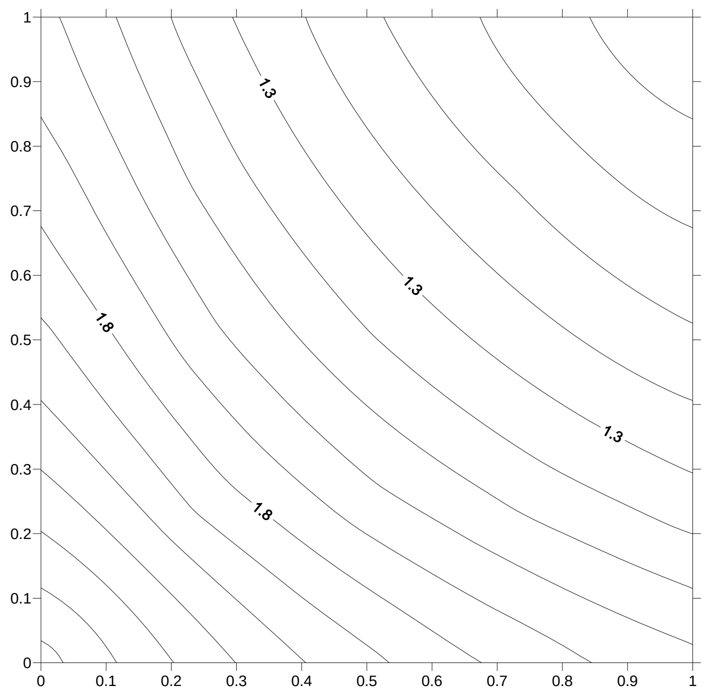

Figura 5 - Solução Numérica em 2s

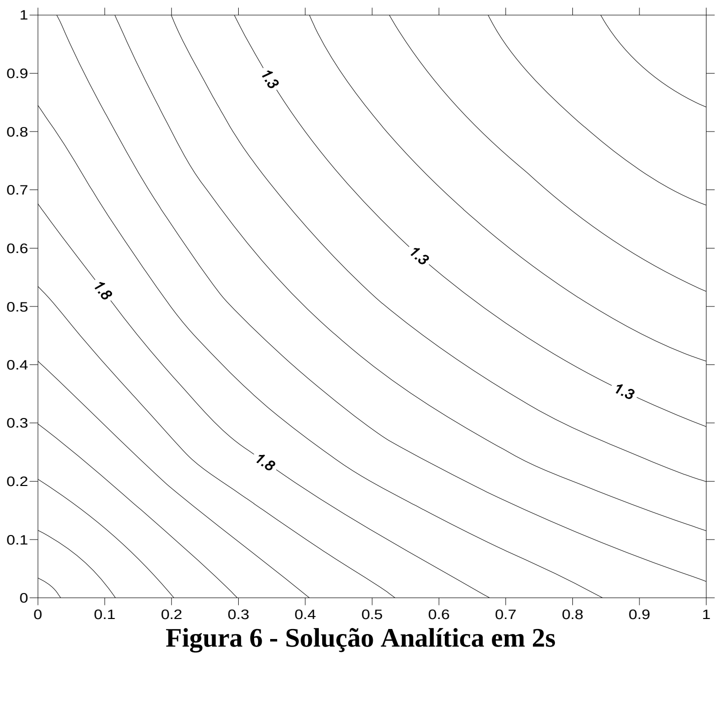

Figura 6 - Solução Analítica em 2s

Tempo = 3s

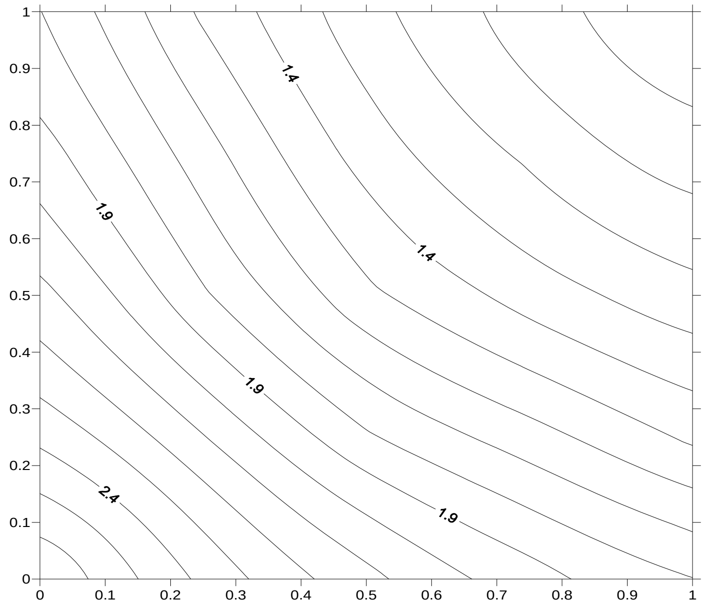

Figura 7 - Solução Numérica em 3s

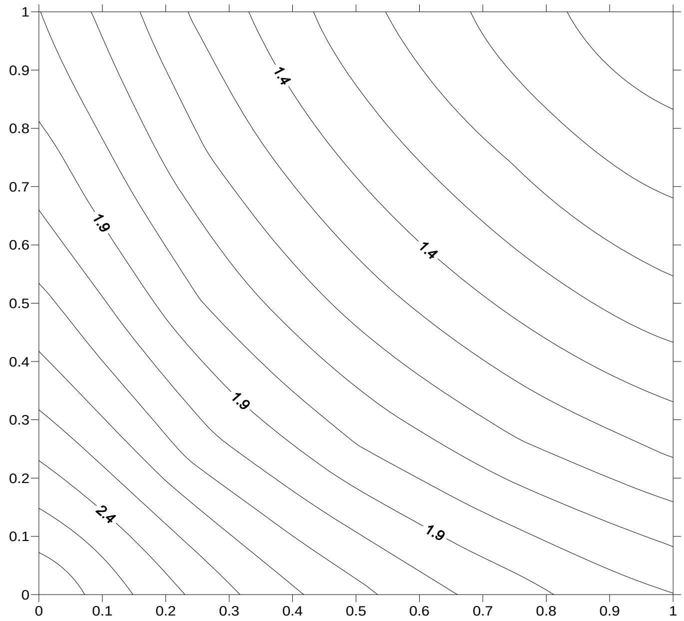

Figura 8 - Solução Analítica em 3s

Tempo = 4s

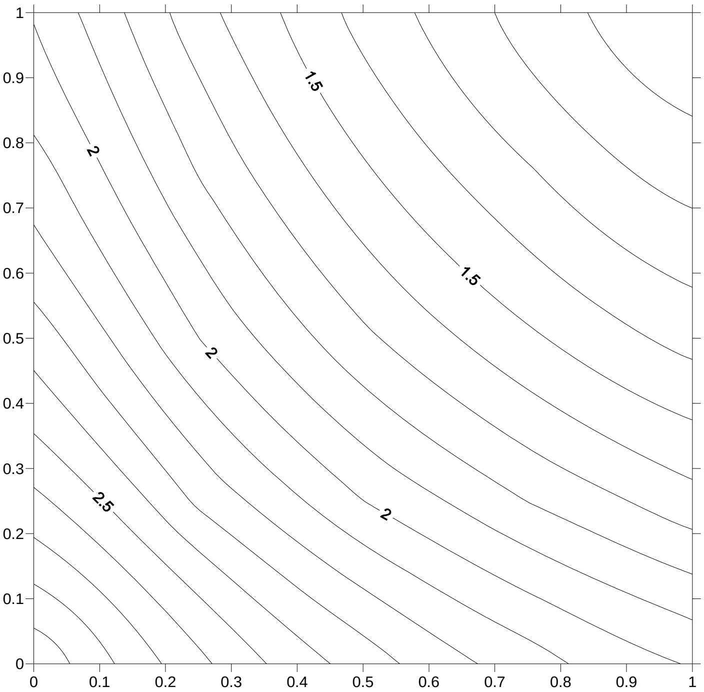

Figura 9 - Solução Numérica em 4s

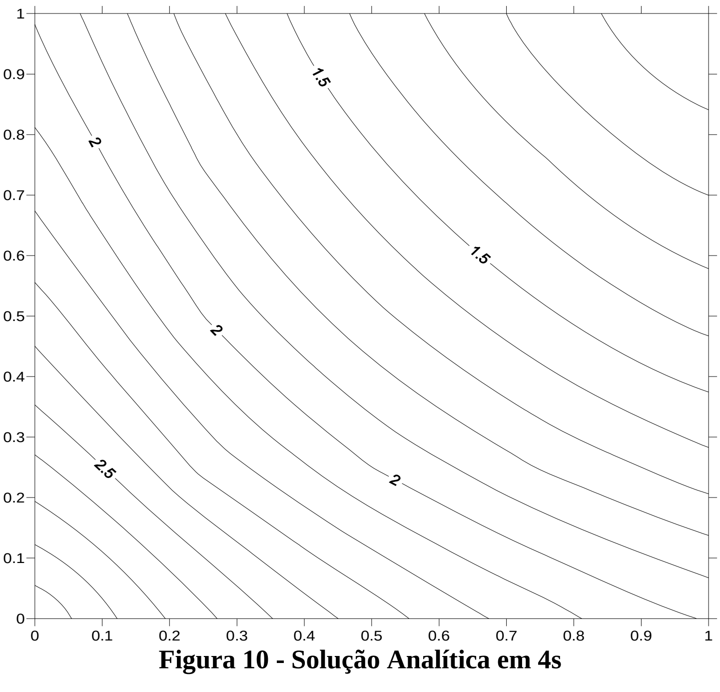

Figura 10 - Solução Analítica em 4s

Tempo = 5s

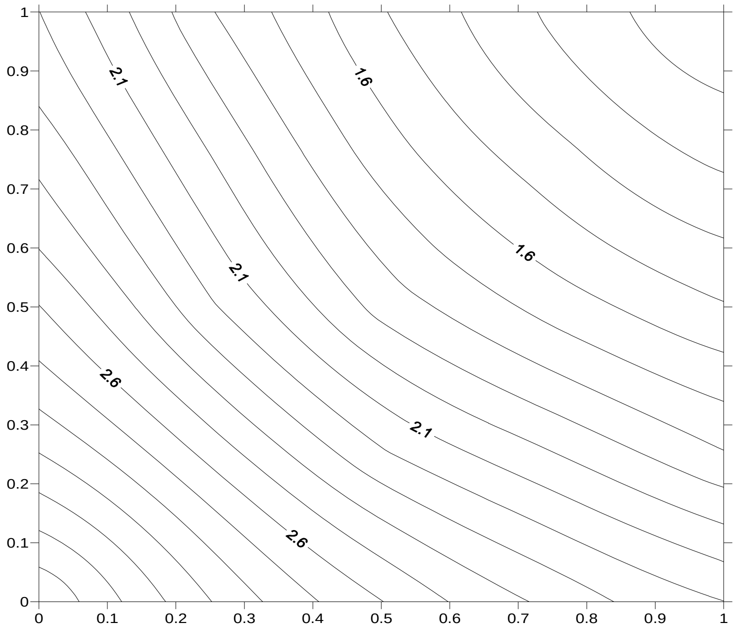

Figura 11 - Solução Numérica em 5s

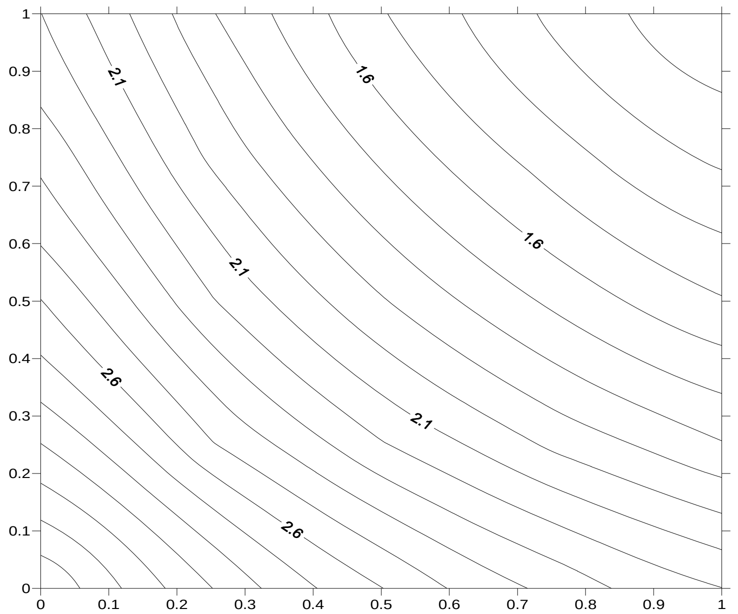

Figura 12 - Solução Analítica em 5s

Além disso, foram feitas comparações entre as concentrações no nó 5 (ponto central) nos cinco primeiros espaços de tempo, como seguem a seguir:

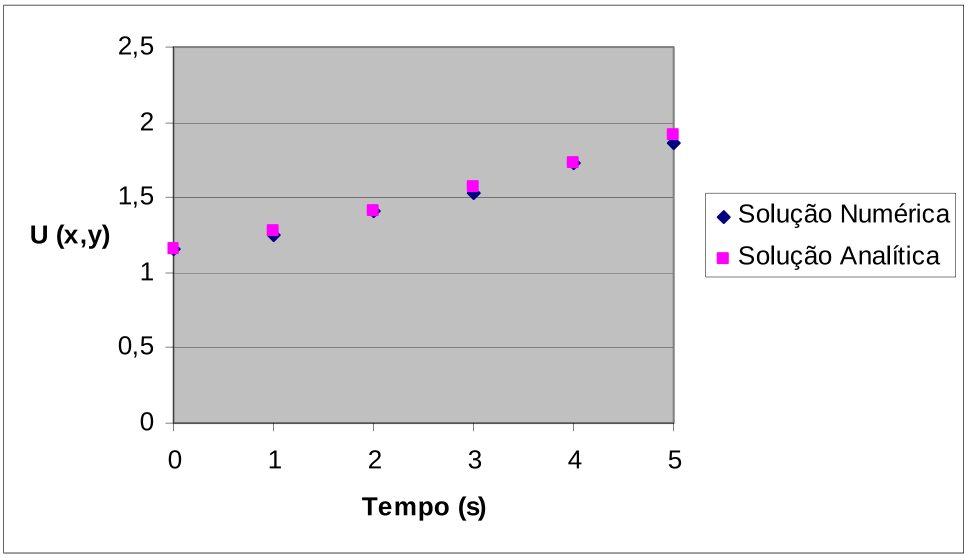

Figura 13 – Comparação entre a solução numérica e analítica nos 5 primeiros espaços de tempo no nó 5 (ponto central)

Nota-se uma excelente aproximação do método “meshless” mesmo com a utilização de poucos nós na malha.

CONCLUSÕES

Após a modelagem das contaminações de aqüíferos utilizando-se o método numérico sem malha “meshless” pode-se concluir que o método conseguiu apresentar uma aproximação satisfatória com poucos pontos no domínio e no contorno.

O grande benefício do método é a sua fácil formulação no regime transiente e principalmente no permanente, e o fato de não ser necessária a construção de uma malha regular, pois só o que importa é a distância entre os pontos e não sua posição. Além disso, leva vantagem em relação a outros métodos numéricos que exigem trabalhosa formulação matemática antes da sua execução.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ARAÚJO, C. C. **Comparação de Modelos Computacionais para Fluxo e Transporte de Poluentes em Água Subterrânea**. Dissertação de Mestrado. UFPE. 2008.
2. CHINCHAPATNAM P. P. et AL. “*Unsymmetric and symmetric meshless schemes for the unsteady convection-diffusion equation*” (2005) 22p.
3. FEITOSA F. A. C. & FILHO J. M. **Hidrogeologia - Conceitos e Aplicações**. CPRM. Fortaleza, 1997.