

Análise da Evolução da Pluma de Contaminação no Solo a Partir de Soluções Analíticas com Mecanismos de Transporte Tridimensionais

Mateus Bezerra Alves da Costa

Universidade de Brasília, Brasília, Brasil, mateusbezerradacosta@gmail.com

Katherin Rocío Cano Rojas

Universidade de Brasília, Brasília, Brasil, kathycanorojas@gmail.com

André Luís Brasil Cavalcante

Universidade de Brasília, Brasília, Brasil, abrasil@unb.br

RESUMO: A contaminação, com posterior deterioração, da água é um assunto de intensos debates no cenário atual e os mecanismos nos quais ela ocorre no solo devem ser entendidos para a correta análise e remediação do problema, haja vista a sua capacidade de gerar problemas de saúde pública a partir da alteração das propriedades físicas, químicas e biológicas dos corpos hídricos e do solo presente. O contaminante, quando percola o solo, se dispersa ao longo dos vazios dele e, além disso, o próprio solo atua como filtro e como barreira para essa percolação. Sabe-se que, apesar de os métodos numéricos serem tema relevante e dominante na engenharia em geral, as soluções analíticas têm sua especial e particular utilidade. Além de poderem fornecer resultados mais precisos, são um dos possíveis caminhos para validar uma solução numérica. Quando se trata de modelos para caracterização do transporte de contaminantes no solo, as soluções analíticas da equação da advecção-dispersão que permitem que se calcule a concentração do soluto no tempo e no espaço, a partir de condições de contorno, em geral, consideram a advecção 1D com a dispersão 3D, o que é uma suposição razoável, porém não completa, por não considerar a possível tridimensionalidade da advecção. Foi feita, então, a interpretação gráfica da solução analítica de Ozelim e Cavalcante, 2013, que considera advecção e dispersão 3D, resolvida a partir das transformadas de Fourier no espaço e de Laplace no tempo representando a distribuição espaço-temporal de concentração. Apresenta, entretanto, a limitação de considerar o aquífero com dimensões infinitas. A solução de Huang e Yeh, 2014, permite que se considere o aquífero finito em uma direção, porém demonstrou descontinuidades, baixas concentrações de contaminante ao longo da profundidade e comportamento isotrópico ao longo do plano horizontal. Já no trabalho de Ozelim e Cavalcante, 2014, o aquífero é considerado finito em duas direções. De forma similar, as concentrações obtidas foram baixas, no entanto, o comportamento da pluma seguiu a tendência de comportamento contínua esperada e demonstrou anisotropia. Ela possibilitou uma representação realista das dimensões do aquífero, porém inserindo menos parâmetros característicos do fluxo e, além disso, a resolução por séries de Fourier, que dependem da natureza e do número de interações, favoreceram o aparecimento de tendências não esperadas pela natureza do fluxo. Em conclusão, a utilização do modelo inicial, caso as dimensões do aquífero sejam suficientes para caracterizá-lo como infinito, pode ter uma representação mais realista do transporte.

PALAVRAS-CHAVE: Transporte de Contaminantes; Advecção-Dispersão; Fluxo.

1 INTRODUÇÃO

Os resíduos gerados pelas intensas atividades humanas podem provocar a contaminação das águas, do ar e dos solos que, segundo a Política Nacional do Meio Ambiente (Lei 6.938/81), são bens a serem protegidos. A análise e possível remediação de um ambiente contaminado deve ser feita adequadamente para o controle e proteção da saúde, do bem-estar da população e da manutenção da estrutura biológica dos ecossistemas. Quando ocorre o transporte de um contaminante pela água através dos vazios do solo, vários mecanismos de transporte devem ser levados em consideração.

A etapa seguinte à contaminação é a poluição, que é quando a substância contaminante se encontra acima dos limites toleráveis aceitáveis, podendo gerar problemas de saúde pública a partir das alterações físicas, químicas ou biológicas dos corpos de água existentes. No Brasil, a Companhia de Tecnologia de Saneamento Ambiental (CETESB) do estado de São Paulo disponibilizou uma tabela para identificar para quais valores determinados contaminantes passam a virar poluentes no solo ou nas águas subterrâneas.

A lista mais atualizada para os valores orientadores foi publicada em 21/02/2014 pelo Diário Oficial do Estado de São Paulo e, para cada substância estudada, mostra-se o Valor de Referência de Qualidade (VRQ), que define o solo puro ou a água subterrânea em seu estado de qualidade natural, o Valor de Prevenção (VP) que, acima do qual já ocorreram alterações prejudiciais em suas propriedades, sendo o monitoramento exigido e o Valor de Intervenção (VI), acima do qual há riscos para a saúde humana e a intervenção para a remediação deve ser imediata.

O desenvolvimento da sociedade revela a sua faceta desvantajosa quando, por exemplo, se analisa a deterioração dos ecossistemas e, assim, o correto manejo dos recursos hídricos se faz necessário, tanto pela manutenção da vida aquática quanto pelo contínuo e saudável uso humano desses recursos. Fetter (2008) destaca que os aquíferos subterrâneos são fontes de ingestão de água para boa parte da população,

especialmente nas áreas rurais. Apesar do avanço do conhecimento entre as interações geológicas, topográficas e climáticas entre as águas superficiais e subterrâneas, Ivkovic (2008) destaca que esse conhecimento ainda apresenta muitas lacunas em seu entendimento.

Com o passar das últimas décadas, começou-se a estudar essa interação que existe entre os diversos corpos de água com os aquíferos subterrâneos de forma que as modelagens para a análise da contaminação das águas subterrâneas passaram a simular a sua integração com todos os corpos de águas existentes, podendo estes causarem significativas mudanças em seu estado químico.

Nos modelos de transporte de contaminantes o que interessa é a concentração do contaminante no espaço e no tempo, consequente de uma fonte de contaminação inicial. Para isso, modelagens analíticas e numéricas são aplicadas a fim de obter os resultados desejados. Este trabalho visa a comparar três soluções analíticas cujos modelos se propuseram a determinar essa concentração de contaminante dada uma condição de contorno específica em comum.

2 HISTÓRICO PRELIMINAR

Apesar de os métodos numéricos serem difundidos em diversos usos para a engenharia, as soluções analíticas têm sua importância no cenário científico. É sabido que um dos caminhos para validar uma solução numérica é a verificação de sua consistência a partir de uma solução analítica. Ozelim e Cavalcante (2013) propuseram uma metodologia analítica para a determinação da concentração de um contaminante no espaço-tempo através da equação da advecção-dispersão considerando, de forma inovadora, a advecção tridimensional, além da tradicional dispersão tridimensional avaliada em trabalhos anteriores como, por exemplo, o trabalho de Domenico (1987).

Essa equação foi, então, resolvida analiticamente, através da aplicação da Transformada de Laplace com relação ao tempo e da Transformada de Fourier com relação ao espaço, para um singular prisma de

contaminação inicial que pôde, facilmente, ser definido pela função Heaviside. Após a introdução do prisma em um aquífero de altura infinita, a concentração desse contaminante é obtida no espaço tempo e é dada por:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0 e^{-\lambda^* t}}{8} \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{b/2 - x + v_x^* t}{\sqrt{4D_x^* t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{-b/2 - x + v_x^* t}{\sqrt{4D_x^* t}} \right) \right] \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{l/2 - y + v_y^* t}{\sqrt{4D_y^* t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{-l/2 - y + v_y^* t}{\sqrt{4D_y^* t}} \right) \right] \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{m/2 - z + v_z^* t}{\sqrt{4D_z^* t}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{-m/2 - z + v_z^* t}{\sqrt{4D_z^* t}} \right) \right] \quad (1)$$

onde,

b, l, m = medidas do prisma de contaminação, respectivamente, nos eixos x, y, z [L];

c_0 = concentração do contaminante inserido [M/L³];

λ^* = coeficiente de reação de primeira ordem dividido pelo fator de retardo R [1/T];

v_x^*, v_y^*, v_z^* = componentes de velocidade do fluxo estacionário nas direções x, y e z , respectivamente, divididas pelo fator de retardo R [L/T];

D_x^*, D_y^*, D_z^* = coeficientes de dispersão hidrodinâmica nas direções x, y e z divididos pelo fator de retardo R [L²/T], dados pela fórmula geral:

$$D = \tau D_0 + \alpha v_p \quad (2)$$

onde,

τ = fator de tortuosidade [adimensional];

D_0 = coeficiente de difusão molecular em solução aquosa [L²/T];

α = coeficiente de dispersividade longitudinal ou transversal [L];

v_p = velocidade real de percolação [L/T];

R = fator de retardo [adimensional], dado por:

$$R = 1 + \left(\frac{\rho_d k_d}{n} \right) \quad (3)$$

onde,

ρ_d = massa específica seca do contaminante [M/L³];

K_d = coeficiente de distribuição referente à isoterma de sorção linear [L³/M];

n = porosidade do solo [L³/L³].

O fator de retardo mede o grau de reatividade do contaminante com o solo (processos químicos de sorção e de dessorção). Quando a substância é inerte, esse fator vale 1. A função $\operatorname{erf}(x)$, é a função erro de Gauss, que pode ser definida, entre outras formas, por:

$$\operatorname{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x e^{-p^2} dp \quad (4)$$

Fundamentado nessa publicação, Huang e Yeh (2014) abriram uma discussão a respeito desta solução analítica. Eles procuraram desenvolver um modelo matemático que também propõe, inicialmente, descrever a advecção e dispersão tridimensionais, porém considerando um aquífero com um valor finito de comprimento na direção vertical, e infinito no plano horizontal. A metodologia foi desenvolvida a partir das mesmas condições iniciais e aplicando a transformada de Fourier em x e em y (infinitos), de Cosseno de Fourier em z (finito) e de Laplace no tempo. No entanto, na formulação de Huang e Yeh (2014), os autores consideraram os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal iguais e também, ao final, não consideraram a advecção tridimensional. A solução obtida é dada por:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0 e^{-\frac{\lambda t}{R}}}{4D} \times \left\{ m + 2 \sum_{n=1}^{\infty} H(n) e^{-\frac{D_z p_n^2 x t}{R}} \cos \left[p_n \left(z + \frac{L_z}{2} \right) \right] \right\} \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{x + b/2 - vt/R}{2\sqrt{D_x t/R}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{x - b/2 - vt/R}{2\sqrt{D_x t/R}} \right) \right] \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{y + l/2}{2\sqrt{D_y t/R}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{y - l/2}{2\sqrt{D_y t/R}} \right) \right] \quad (5)$$

com,

$$v = \sqrt{v_x^2 + v_y^2 + v_z^2} \quad (6)$$

onde L_z é o comprimento vertical do aquífero. Além disso, a função $H(n)$ é definida por:

$$H(n) = \frac{1}{p_n} \left\{ \sin \left[p_n \left(\frac{m}{2} + \frac{D}{2} \right) \right] - \sin \left[p_n \left(-\frac{m}{2} + \frac{D}{2} \right) \right] \right\} \quad (7)$$

com,

$$p_n = \frac{\pi n}{D} \quad (8)$$

Na réplica ao artigo mencionado, Ozelim e Cavalcante (2014) elaboraram uma solução analítica considerando uma altura e profundidade finitas ao aquífero e fizeram considerações relevantes ao modelo de Huang e Yeh (2014), aclarando que as simplificações adotadas das velocidades v_y e v_z serem nulas e os coeficientes de dispersão longitudinal e transversal serem iguais ($\alpha_l/\alpha_t = 1$) não atingiam às expectativas e objetivos iniciais do trabalho de origem. O resultado final da equação de modelagem é expresso por:

$$c(x, y, z, t) = \frac{c_0 e^{-\lambda t/R}}{2L_y L_z} \times \left[\operatorname{erf} \left(\frac{\frac{b}{2} - x + \frac{vt}{R}}{\sqrt{4D_x t/R}} \right) - \operatorname{erf} \left(\frac{-\frac{b}{2} - x + \frac{vt}{R}}{\sqrt{4D_x t/R}} \right) \right] \times \left[l + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2L_y}{\pi n} \sin \left(\frac{l\pi n}{L_y} \right) \cos \left(\frac{2\pi n y}{L_y} \right) e^{\left(-4D_y t \frac{\pi^2 n^2}{RL_y^2} \right)} \right] \times \left[m + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{2L_z}{\pi n} \sin \left(\frac{m\pi n}{L_z} \right) \cos \left(\frac{2\pi n z}{L_z} \right) e^{\left(-4D_z t \frac{\pi^2 n^2}{RL_z^2} \right)} \right] \quad (9)$$

com L_y e L_z iguais a profundidade e altura do aquífero.

3 APRESENTAÇÃO E ANÁLISE DE RESULTADOS

A condição inicial estabelecida mostrava um prisma de contaminação e as modelagens, em seu desenvolvimento, propunham-se a representar a concentração do contaminante no espaço e no tempo. Foram utilizados os parâmetros de Sánchez (2011) e de Fetter (1993) para uma retratação realista dos valores do solo e do contaminante e os valores de concentração foram utilizados em porcentagens em relação à concentração inicial.

A equação de Ozelim e Cavalcante (2013) permite a inserção de velocidades e dispersividades diferentes, além de todos os fenômenos acoplados de advecção, de dispersão e de decaimento. A Figura 1 retrata a análise gráfica executada.

A Fig. 1(a) mostra uma seção horizontal a uma profundidade de 0,5 m, após o período de 1 dia corrido. Percebe-se que o pico de concentração apresenta-se na projeção do centro do prisma e, à medida que se distancia do eixo z , a concentração diminui até que não haja mais influência do contaminante. O comportamento do contaminante também revela-se diferente nos eixos x e y , devido às suas diferentes velocidades, dispersividades e tortuosidades, contemplando a possível anisotropia do solo.

A Fig. 1(b) mostra uma seção horizontal à mesma profundidade, porém agrupando alguns valores de concentração em anéis concêntricos e de diferentes cores, revelando também o comportamento de diminuição da concentração à medida que o contaminante se afasta do eixo central ao qual foi depositado inicial.

A Fig. 1(c) retrata o avanço da pluma ao longo da profundidade, em um corte no eixo x para um valor de y constante. O comportamento anisotrópico do solo também é percebido pelo avanço de concentração mais célere no eixo z e a visualização dessa imagem retrata o caminho percorrido pela pluma para o corte estudado.

Fez-se, então, um estudo das curvas da pluma de contaminação da equação de Huang e Yeh (2014). Esse modelo considera que a velocidade é não nula em apenas um dos eixos, nesse caso, o eixo z . Além disso, ela considera todas as dispersividades iguais. A Figura 2 mostra o resultado dessa análise.

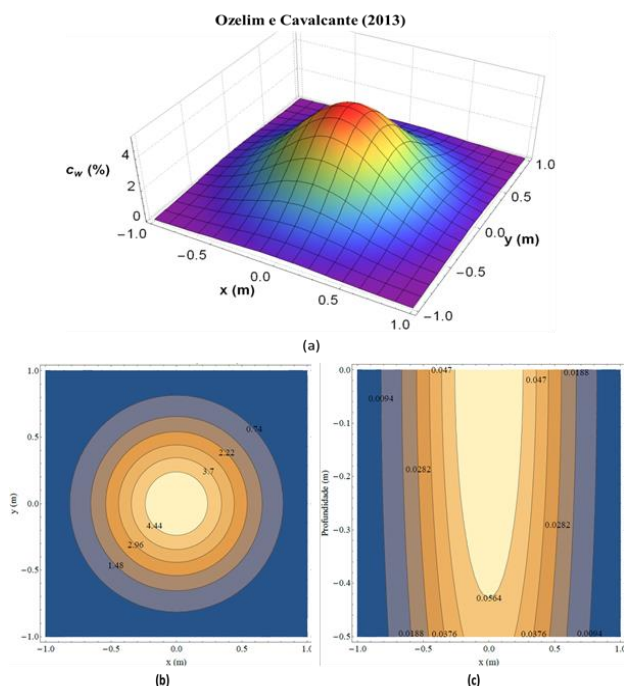


Figura 1. Interpretação gráfica (a) tridimensional, (b) em corte transversal e (c) corte longitudinal da evolução da pluma de contaminação pelo método de Ozelim e Cavalcante (2013).

Percebe-se um comportamento uniforme nas direções x e y devido aos coeficientes de dispersividades e velocidades (nulas) iguais e o eixo z , apesar de apresentar uma dispersividade igual aos outros eixos, a parcela de velocidade e de tortuosidade torna o coeficiente de dispersão hidrodinâmica diferente (Equação 2).

A pluma de contaminação apresenta as mesmas tendências nas Fig. 2(a) e Fig. 2(b), entretanto, as concentrações do contaminante mais baixas do que no modelo inicial. Ademais, na Fig. 2(c), o comportamento se distancia do esperado, demonstrando descontinuidades no contaminante ao longo da profundidade. Além disso, percebe-se que a concentração do contaminante obedeceu a um comportamento aproximado circular, devido à aproximada isotropia nos eixos x e y introduzida no modelo, nos quais as tendências não são exatamente iguais devido às diferentes tortuosidades introduzidas.

Essa equação apresenta a vantagem de poder ser introduzido o comprimento do aquífero finito em uma das direções, porém sua solução por séries de Fourier depende tanto do número de interações executadas e também da própria natureza do fenômeno observado, o que foi a

provável causa do comportamento descontínuo observado na Fig. 2(c).

O modelo de Ozelim e Cavalcante (2014) apresenta as mesmas tendências de comportamento esperadas e retratadas no modelo inicial, com a pluma avançando de forma mais preponderante no eixo z e também se dispersando ao longo do espaço, porém os valores de concentração também baixos, como é observado na Figura 3. Essa equação apresenta a vantagem de considerar o aquífero finito nas direções y e z , coeficientes de dispersividades e velocidades diferentes para o cálculo do coeficiente de dispersão hidrodinâmica conferindo, também, um comportamento anisotrópico ao solo.

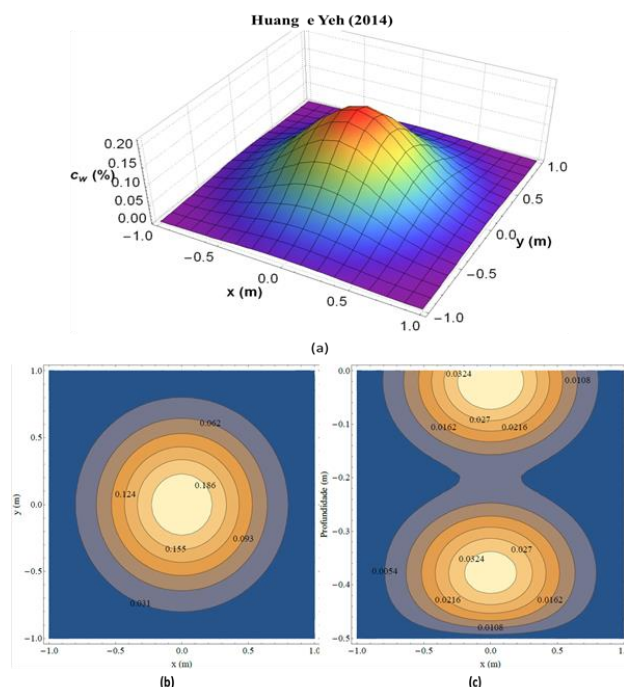


Figura 2. Interpretação gráfica (a) tridimensional, (b) em corte transversal e (c) corte longitudinal da evolução da pluma de contaminação pelo método de Huang e Yeh (2014).

A Figura 4 mostra uma análise do avanço da concentração do contaminante ao longo da profundidade para as três modelagens em um ponto $(x, y) = (0,5, 0,5)$. A equação de Ozelim e Cavalcante (2013) demonstra as tendências esperadas, onde a concentração de contaminante aumenta à medida que o tempo passa e diminui com o aumento da profundidade. O modelo de Huang e Yeh (2014) apresentou valores de concentração baixos e, em alguns momentos,

valores negativos que não apresentam significado físico, porém são matematicamente coerentes para a modelagem estudada. O modelo de Ozelim e Cavalcante (2014) apresentou valores negativos e a concentração aumentou, para os instantes de tempo iniciais, enquanto a profundidade aumentou, resultados diferentes do esperado pois a concentração do contaminante deve diminuir à medida que a profundidade aumenta.

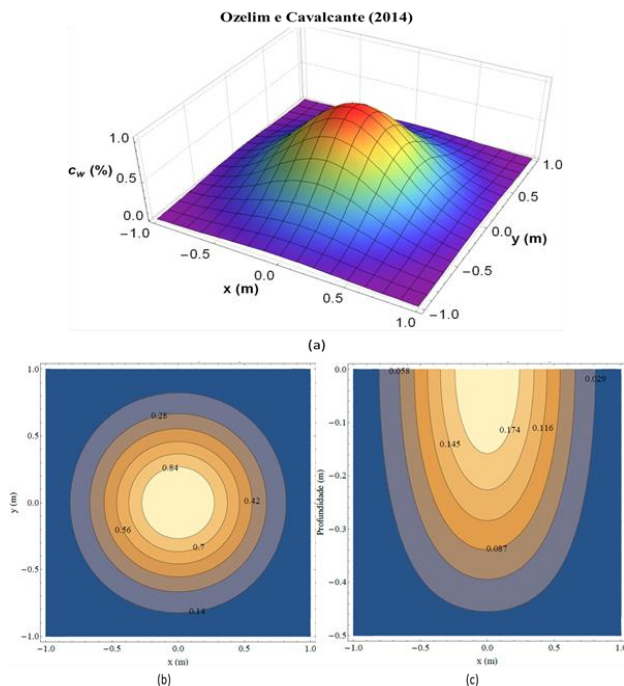


Figura 3. Interpretação gráfica (a) tridimensional, (b) em corte transversal e (c) corte longitudinal da evolução da pluma de contaminação pelo método de Ozelim e Cavalcante (2014).

Nos gráficos da Figura 4 percebe-se, também, o espaço de tempo em que o solo apresenta-se em seu estado não contaminado até a chegada da pluma e é na modelagem de Ozelim e Cavalcante (2013) que o contaminante chega mais rápido ao solo.

Além da flexibilidade de inserção de diversos parâmetros de fenômeno físico, pode-se observar também a influência do decaimento linear na concentração do contaminante. A Figura 5 mostra o comparativo da influência do decaimento para os três modelos à uma profundidade de 0,5 m e verifica-se que, no modelo de Ozelim e Cavalcante (2013), o decaimento exerce uma maior influência na

concentração do contaminante ao longo do tempo.

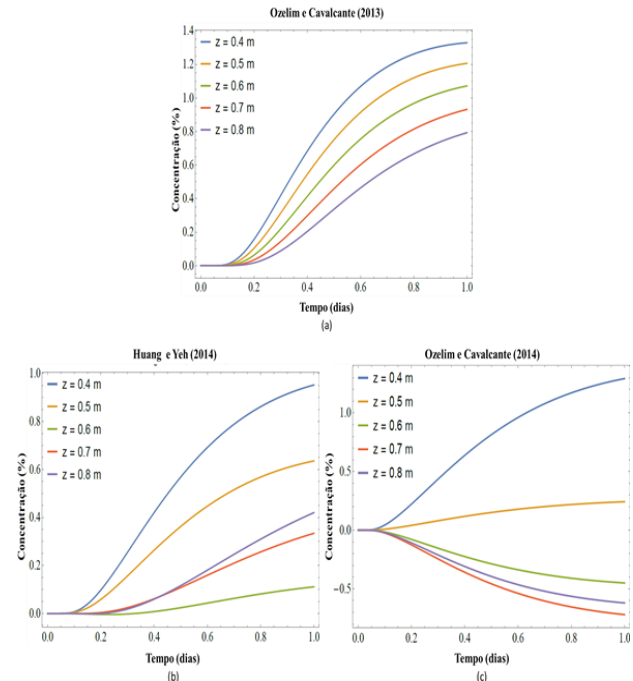


Figura 4. Concentração vs Tempo para diferentes profundidades pelos métodos de: (a) Ozelim e Cavalcante (2013), (b) Huang e Yeh (2014) e (c) Ozelim e Cavalcante (2014).

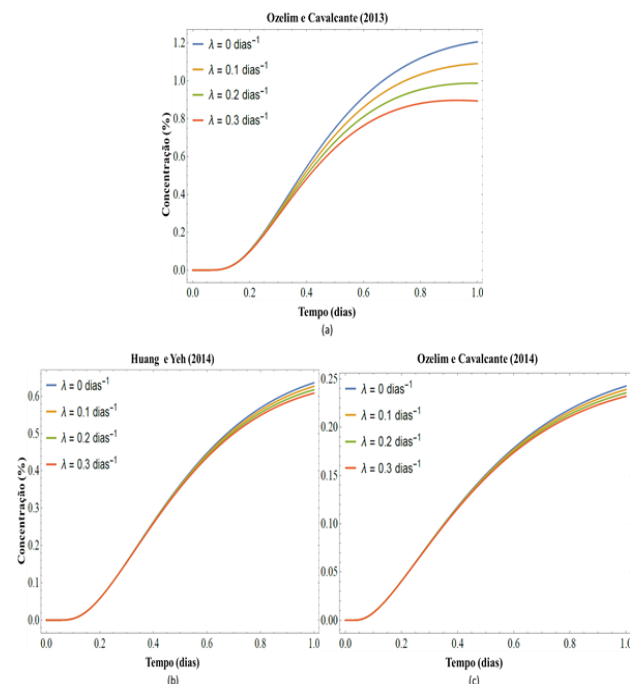


Figura 5. Influência do decaimento linear na concentração do contaminante para uma profundidade de 0,5m pelos métodos de: (a) Ozelim e Cavalcante (2013), (b) Huang e Yeh (2014) e (c) Ozelim e Cavalcante (2014).

4 CONCLUSÕES

A modelagem sempre apresenta a desvantagem da simplificação do fenômeno físico cujos parâmetros de comportamento devem ser observados e obtidos experimentalmente para verificar a veracidade de cada específica representação. No caso estudado, o transporte de um contaminante no solo foi observado a partir de três modelagens analíticas que consideram a Equação de Advecção-Dispersão com decaimento linear.

O modelo de Ozelim e Cavalcante (2013) conseguiu representar a distribuição de concentração no espaço e no tempo, com uma maior flexibilidade de parâmetros a serem utilizados e resultados mais coerentes. Apresenta, entretanto, a limitação de o aquífero necessitar de dimensões que caracterizem um aquífero infinito.

Os Modelos de Huang e Yeh (2014) e de Ozelim e Cavalcante (2014) possibilitaram uma representação realista das dimensões do aquífero, entretanto apresentando menos parâmetros a serem inseridos e, além disso, a resolução por séries de Fourier, por depender da natureza e das interações a serem executadas, podem favorecer o aparecimento de tendências e valores diferentes do esperado.

As três modelagens podem ser utilizadas a depender da situação a ser analisada e dos parâmetros disponíveis, entretanto, caso as dimensões do aquífero sejam possíveis de serem caracterizadas como infinitas e os parâmetros puderem ser obtidos, a equação de Ozelim Cavalcante (2013) é a recomendada para uso.

AGRADECIMENTOS

Os autores expressam seus agradecimentos à Universidade de Brasília (UnB), ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES).

REFERÊNCIAS

- Brasil. Lei no 6.938, de 31 de agosto de 1981. Dispõe sobre a Política Nacional do Meio Ambiente, seus fins e mecanismos de formulação e aplicação, e dá outras providências.
- Domenico, P. (1987). An Analytical Model for Multidimensional Transport of a Decaying Contaminant Species. *Journal of Hydrology*, Vol. 91, N° 1-2, p. 49-58.
- Fetter, C.W. (2008). *Contaminant Hydrogeology*. 2nd ed, Waveland Press, Inc. London, U.K. 234 p.
- Huang, C.S. e Yeh, H.D. (2014). Discussion of “Integral and Closed-Form Analytical Solutions to the Transport Contaminant Equation Considering 3D Advection and Dispersion” by Luan Carlos de S. M. Ozelim and André Luís Brasil Cavalcante. *International Journal Of Geomechanics*, ASCE.
- Ivkovic. K.M. (2009). A top-down approach to characterize aquifer-river interaction processes. *Journal of Hydrology* 365, p. 145-155.
- Ozelim, L.C e Cavalcante, A.B. (2014). Closure to “Integral and Closed-Form Analytical Solutions to the Transport Contaminant Equation Considering 3D Advection and Dispersion” by Luan Carlos de S. M. Ozelim and André Luís Brasil Cavalcante. *International Journal Of Geomechanics*, ASCE.
- Ozelim, L.C e Cavalcante, A.B. (2013). Integral and Closed-Form Analytical Solutions to the Transport Contaminant Equation Considering 3D Advection and Dispersion. *International Journal Of Geomechanics*, ASCE, p. 686–691.
- Sánchez, J.F. (2011). *Modelagem Multidimensional de Transporte de Contaminantes Inorgânicos em Solos tropicais Lateríticos*, Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Geotecnia, Departamento de Engenharia Civil, Universidade de Brasília, 184 p.