

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

INSTITUTO DE PESQUISAS HIDRÁULICAS

**MODELAGEM DA CONTAMINAÇÃO DE AQUÍFEROS LIVRES POR
NAPLS RESIDUAIS NA ZONA NÃO-SATURADA**

Stela D. Santos Cota

Tese submetida ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental da Universidade Federal do Rio Grande do Sul como requisito parcial para a obtenção do título de Doutor em Engenharia

Porto Alegre

Agosto/2000

APRESENTAÇÃO

Este trabalho foi desenvolvido no Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Recursos Hídricos e Saneamento Ambiental do Instituto de Pesquisas Hidráulicas da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, sob a orientação do Prof. Nelson Oswaldo Luna Caicedo da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Desejo expressar meus agradecimentos e o mais sincero reconhecimento às seguintes instituições e pessoas:

- ao CNPq e à CAPES, pelo financiamento das bolsas de doutoramento no país e de estágio no exterior (PDEE). O projeto foi também financiado pelo MCT-CNPq-FINEP e MEC-CAPES, através do Programa de Núcleos de Excelência (PRONEX);
- ao Prof. Nelson Caicedo, por me introduzir na problemática da contaminação de aquíferos e por sua orientação durante a execução do trabalho;
- à Colorado State University, pela boa acolhida durante o estágio realizado, e aos Professores James Warner, Deanna Durnford e David McWhorter, por compartilharem sua grande experiência;
- ao Prof. David da Mota Marques, por sua grande ajuda durante a execução da parte experimental e pelas discussões proveitosas sobre a análise de compostos voláteis;
- ao setor de Saneamento Ambiental do IPH, pela utilização do cromatógrafo gasoso; aos técnicos do setor João, Carla e Tiago, por me treinarem no uso do aparelho e por sua assistência constante;
- aos estagiários André Mito, Eduardo e Vinícius, por sua inestimável ajuda durante o trabalho experimental;
- aos professores do IPH, por tudo que me ensinaram;
- aos funcionários do IPH, especialmente à secretária Nadir Solari, por seu suporte que garante o trabalho de todos;
- aos colegas e amigos da Pós-Graduação, pela boa-vontade sempre demonstrada ao discutir os assuntos de meu interesse, pela ajuda prestada sempre que necessária, por mais trabalhosa que fosse, e, principalmente, pelos inesquecíveis momentos que passamos juntos;

- um agradecimento todo especial à minha amiga Cleuda Freire, por sua amizade e suporte e incentivo constantes.

Naturalmente, esta pequena lista de citações não faz justiça ao grande número de pessoas que, de uma forma ou de outra, em menor ou maior grau, me auxiliaram durante a execução deste trabalho. Mas, cada um deles pode ter a certeza que sua ajuda não será jamais por mim esquecida.

Este trabalho é dedicado ao meu marido Max, por seu apoio e paciência incondicionais durante todos esses anos e por seu companheirismo, que o levou a me acompanhar para onde eu precisei ir para relizar este trabalho.

RESUMO

Este trabalho aborda a modelagem de áreas de NAPLs ("Non-Aqueous Phase Liquids" - Fase Líquida Não-Aquosa) residuais, localizadas na zona não-saturada, com o objetivo de auxiliar na avaliação do impacto dessas áreas na qualidade dos aquíferos freáticos. Dentro deste enfoque, foram desenvolvidos os seguintes pontos:

- * Implementação de um modelo numérico de fluxo de água e transporte de contaminantes, para ambas as zonas não-saturada e saturada, baseado na conexão entre um modelo unidimensional de zona não-saturada com um modelo multidimensional de zona saturada.
- * Avaliação da sensibilidade da simulação de transporte de contaminantes em zona não-saturada ao uso do fluxo da fase aquosa em regime permanente e com perfis de saturação e descarga específica uniformes.
- * Inclusão, no modelo de transporte desenvolvido, da dissolução de fontes de NAPLs residuais na zona não-saturada através de diferentes abordagens de literatura para a estimativa do coeficiente de transferência de massa. Um trabalho experimental foi elaborado para gerar dados de dissolução, em condições de fluxo não-saturado, de NAPLs compostos por substância pura e por misturas binárias.

A forma mista da equação de Richards e a equação de transporte advectivo-dispersivo foram implementados em diferenças finitas, constituindo o modelo unidimensional FT1D, que simula o fluxo de água e transporte de contaminantes na zona não-saturada. Este modelo foi conectado aos modelos multidimensionais de fluxo e transporte em zona saturada, MODFLOW e MT3D. A abordagem de substituir a zona não-saturada multidimensional por domínios unidimensionais foi bem sucedida. Comparativamente aos modelos integrados multidimensionais FEMWATER (fluxo) e LEWASTE (transporte), foram obtidos resultados equivalentes e com um tempo computacional bastante inferior. Para a conexão do módulo de fluxo de FT1D e o modelo MODFLOW, foi desenvolvida nova metodologia para simular a elevação do nível do freático em resposta à recarga, que demonstrou ser numericamente mais estável do que a metodologia citada na literatura.

Dentro da faixa de valores avaliados, o modelo de transporte demonstrou grande sensibilidade quanto ao uso dos dados de fluxo em regime permanente, principalmente em solos com características mais arenosas. Além disso, a obtenção dos dados de fluxo em regime permanente não foi possível, em alguns casos, devido à não-convergência do método

numérico. Neste caso, a solução permanente pode ser obtida estendendo-se a simulação transiente até que os resultados não mais se alterassem, mas às custas de maior tempo computacional. A simulação de transporte utilizando perfis uniformes de saturação e descarga específica também mostrou grande sensibilidade à escolha do valor de saturação. Para baixos valores de saturação, a estimativa utilizando este método gerou valores da massa de contaminante que atravessa determinada profundidade do domínio não-saturado até 88 vezes maiores do que utilizando os dados de fluxo transiente.

Na modelagem da dissolução de zonas de NAPLs residuais, três formulações empíricas para a estimativa do coeficiente de transferência de massa foram adicionadas ao módulo de transporte de FT1D. Os dados de dissolução não-saturada obtidos experimentalmente não foram conclusivos, uma vez que, na maioria dos ensaios realizados, a concentração na fase aquosa atingiu valores próximos à solubilidade. Além disso, a metodologia empregada não levou em consideração a interferência da partição com a fase gasosa. Nos ensaios com misturas binárias de NAPLs, foram observadas evidências de que a transferência de massa pode ser limitada pela difusão do contaminante dentro da fase NAPL, com redução da ordem de 20% na concentração atingida com relação à solubilidade efetiva.

ABSTRACT

The subject of this work is the modeling of residual NAPLs (Non-Aqueous Phase Liquids) areas located in the vadose zone, with the objective to improve the evaluation of the impact of this areas on the quality of phreatic aquifers. The following points have been developed:

- * Implementation of a water flow and contaminant transport numeric model for both vadose and saturated zones, based on the approach of using a unidimensional model in the unsaturated zone connected to a multidimensional saturated model.
- * Sensitivity evaluation for the unsaturated zone transport model due to the use of the steady state flow solution and uniform saturation and specific discharge profiles.
- * The dissolution of NAPLs residual sources in the unsaturated zone, using different approaches for the mass transfer coefficient estimation, is introduced on the transport model. An experimental work was developed to generate dissolution data on unsaturated conditions, with single and binary mixtures NAPLs.

The mixed form of Richards equation and the advective-dispersive transport equation were implemented using the finite differences technique, resulting the FT1D model. It simulates the unidimensional flow and contaminant transport in the unsaturated zone. This model was linked to the flow and transport multidimensional models for the saturated zone, MODFLOW and MT3D. The approach of replacing a multidimensional unsaturated zone by unidimensional domains was successful. The results obtained were quite similar to those of the integrated multidimensional models FEMWATER (water flow) and LEWASTE (contaminant transport), with the advantage of being much less time consuming. For the connection between the FT1D flow module and the MODFLOW model, a new methodology was developed to simulate the water table level elevation due to the recharge and it has shown to be numerically more stable than the literature methodology.

Within the range of evaluated data, the transport model has shown a large sensitivity due to the use of steady state flow data, mainly in sandy soils. Besides, the achievement of steady state flow data was not possible, in some cases, due to the numerical solution methods non-convergence. In these cases, it is still possible to obtain the steady state solution by extending the transient solution until the results stops changing, but it's a more time consuming process. The transport simulation using uniform saturation and specific discharge

profiles also showed a large sensitivity to the choice of the saturation value. For small values of saturation, the estimation using these methods generated contaminant amounts crossing a certain deep of the unsaturated domain that it is 88 times larger than using transient flow data.

On the simulation of the dissolution of residual NAPL zones, the estimation of the mass transfer coefficient was made by three empirical formulations, being added to the transport module of the FT1D model. The experimental unsaturated dissolution data were not conclusive since, in the major part of the experiments, the aqueous phase had reached the solubility level. Besides, the used methodology did not consider the influence of the gas phase partition. For the tests using binary NAPLs, it was found evidences that the mass transfer rate can be limited by diffusion inside the NAPL phase, with a reduction of about 20% in the concentration of the aqueous phase regarding the effective solubility.

ÍNDICE GERAL

APRESENTAÇÃO	I
RESUMO	III
ABSTRACT	V
ÍNDICE GERAL	VII
ÍNDICE DE TABELAS	X
ÍNDICE DE FIGURAS	XII
LISTA DE SÍMBOLOS	XVII
1. INTRODUÇÃO.....	1
1.1. Escopo do problema.....	1
1.2. Objetivos	5
1.3. Organização do trabalho.....	6
2. FLUXO E TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL NA ZONA NÃO-SATURADA.....	7
2.1. Introdução.....	7
2.2. Simulação de fluxo em zona não-saturada.....	7
2.2.1. Descrição matemática do fluxo de água na zona não-saturada.....	7
2.2.2. Métodos de solução da Equação de Richards	11
2.3. Simulação de transporte em zona não-saturada	15
2.3.1. Transporte de contaminantes dissolvidos em fase aquosa na zona não-saturada.	15
2.3.2. Métodos de solução da equação de transporte na zona não-saturada.....	17
2.4. Implementação do modelo de fluxo e transporte unidimensional.....	22
2.5. Simulações de casos de fluxo e transporte unidimensionais.....	25
2.6. Conclusões	37
3. EFEITO DO REGIME DE FLUXO NA SIMULAÇÃO DE TRANSPORTE EM ZONA NÃO-SATURADA	39
3.1. Introdução.....	39

3.2. Revisão Bibliográfica	39
3.3. Metodologia.....	42
3.4. Resultados e discussões.....	45
3.4.1. Caso A – Solo arenoso	47
3.4.2. Caso B – Solo silte-argiloso	55
3.5. Conclusões	66
4. MODELO TRIDIMENSIONAL SIMPLIFICADO DE FLUXO E TRANSPORTE NAS ZONAS NÃO-SATURADA E SATURADA.....	68
4.1. Introdução.....	68
4.2. O problema da condição de contorno no topo do aquífero freático	68
4.3. Breve descrição dos modelos MODFLOW e MT3D	73
4.4. Conexão dos modelos das zonas não-saturada e saturada.....	74
4.4.1. Conexão dos modelos de fluxo não-saturado e saturado	74
4.4.2. Conexão dos modelos de transporte não-saturado e saturado	81
4.5. Resultados e discussões.....	84
4.5.1. Modelo de fluxo não-saturado e saturado	84
4.5.2. Modelo de transporte não-saturado e saturado.....	104
4.6. Conclusões	113
5. ÁREAS RESIDUAIS COMO FONTES DE CONTAMINANTES NA ZONA NÃO-SATURADA	117
5.1. Introdução.....	117
5.2. Lixiviação, dissolução e dessorção	117
5.3. Teoria da dissolução de fluidos imiscíveis.....	120
5.3.1. Taxa de transferência de massa entre as fases NAPL e aquosa	120
5.3.2. Modelos para determinação do coeficiente de transferência de massa	122
5.4. Modelagem computacional da dissolução de NAPLs residuais.....	125
5.4.1. Inclusão da dissolução no modelo FT1D	125

5.4.2. Verificação do cálculo de dissolução em FT1D.....	127
5.5. Dissolução em colunas não-saturadas	132
5.5.1. Metodologia experimental.....	133
5.5.2. Resultados e discussões.....	140
5.5.3. Simulação da dissolução de colunas não-saturadas	151
5.6. Conclusões	155
6. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	157
6.1. Conclusões	157
6.2. Recomendações.....	161
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	162

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 2.1 – Valores dos parâmetros de solos utilizados nas simulações.....	26
Tabela 2.2 – Condições de simulação para os casos analisados.	27
Tabela 3.1 – Valores dos fatores utilizados nas análises.....	45
Tabela 3.2 – Resultado da simulação de cada combinação, para o Caso A (areia)	48
Tabela 3.3 – Sumário dos valores de E (Caso A).....	50
Tabela 3.4 – Efeitos de cada parâmetro (Caso A).....	50
Tabela 3.5 – Níveis das variáveis Q e L para a simulação com saturação e descarga específica constantes (Caso A).....	53
Tabela 3.6 – Resultado da simulação de cada combinação utilizando saturação e velocidade de infiltração constantes (Caso A).....	54
Tabela 3.7 – Resultado da simulação de cada combinação, para o Caso B (silte-argiloso).....	57
Tabela 3.8 – Sumário dos valores de E (Caso B).....	61
Tabela 3.9 – Efeitos de cada parâmetro (Caso B).....	61
Tabela 3.10 – Níveis das variáveis Q e L para a simulação com saturação e descarga específica constantes (Caso B).....	64
Tabela 3.11 – Resultado da simulação de cada combinação utilizando saturação e descarga específica constantes (Caso B).....	65
Tabela 4.1 – Resultados das simulações para dois pontos do domínio do <i>Exemplo 4-2</i>	101
Tabela 5.1 – Correlações de números adimensionais para cálculo do coeficiente de transferência de massa.....	124
Tabela 5.2 – Valores de solubilidade do tolueno em água, a 25°C, a partir de vários autores.	133
Tabela 5.3 – Características do método de análise de tolueno utilizado.....	139
Tabela 5.4 – Resultado dos ensaios de solubilidade do tolueno puro a 25°C.	140
Tabela 5.5 – Condições avaliadas nos testes de lixiviação.	141

Tabela 5.6 – Resultados obtidos no Teste 1 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 5% de tolueno); valores de concentração dados em mg/l.	145
Tabela 5.7 – Resultados obtidos no Teste 2 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 2% de tolueno); valores de concentração dados em mg/l.	146
Tabela 5.8 – Resultados obtidos no Teste 3* (coluna de 50 cm de comprimento e saturação de 0,5% de tolueno); valores de concentração dados em mg/l.....	147
Tabela 5.9 – Resultados obtidos no Teste 4 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 2% de mistura tolueno e xilenos a 1:1 v/v); valores de concentração dados em mg/l. ..	148
Tabela 5.10 – Resultados obtidos no Teste 5 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 2% de mistura tolueno e xilenos a 1:2 v/v); valores de concentração dados em mg/l.	149
Tabela 5.11 – Resultados obtidos no Teste 6 (coluna de 50 cm de comprimento e saturação de 2% de mistura tolueno e xilenos a 1:2 v/v); valores de concentração dados em mg/l. ..	150
Tabela 5.12 – Valores dos parâmetros de transporte utilizados nas simulações.....	153
Tabela 5.13 – Resultados da simulação da dissolução das colunas experimentais (Testes 1, 2 e 3), utilizando o modelo FT1D	153

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Esquemas de discretização com a variável atribuída no centro da célula (esquerda) e no nóduo entre células (direita).	13
Figura 2.2 – Representação dos efeitos de dispersão e oscilações numéricas em um problema advectivo.	20
Figura 2.3 – Curvas de retenção para os solos 1, 2 e 3 descritos na Tabela 2.1.....	26
Figura 2.4 – Carga de pressão simulada para o Caso 1 com FT1D e HYDRUS.	28
Figura 2.5 – Perfil de concentração simulado para o Caso 1 com FT1D e HYDRUS.....	28
Figura 2.6 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 10 cm.	30
Figura 2.7 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 1 cm.	30
Figura 2.8 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 0,5 cm.	31
Figura 2.9 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 0,1 cm.	31
Figura 2.10 – Carga de pressão simulada (Caso 2) com condições dadas por Celia et al. (1990)	32
Figura 2.11 – Descarga específica (Caso 2), com condições dadas por Celia et al. (1990).....	33
Figura 2.12 – Carga de pressão simulada no Caso 3 com FT1D e FEMWATER, após 72 h de simulação.....	34
Figura 2.13 – Descarga específica e saturação da água simuladas para o Caso 3 com FT1D e FEMWATER, após 72 h de simulação.	34
Figura 2.14 – Perfil de concentração simulado para o Caso 3 com FT1D e LEWASTE, após 72 h de simulação.	35
Figura 2.15 – Perfil de saturações para o Caso 4, a 20 min. de drenagem.....	36
Figura 2.16 – Perfil de saturações para o Caso 4, a 100 min. de drenagem.....	36
Figura 2.17 – Perfil de saturações para o Caso 4, a 1000 min. de drenagem.....	37
Figura 3.1 – Curvas “breakthrough” simuladas a partir de fluxo transiente e de fluxo permanente.	41
Figura 3.2 – Curvas de retenção para os solos utilizados na análise.....	46

Figura 3.3 – Sensibilidade do modelo à taxa de precipitação (Caso A), com K e L fixos em 0,1 cm/min e 500 cm.	52
Figura 3.4 – Sensibilidade do modelo à cond. hidráulica saturada (Caso A), com Q e L fixos em 0,08 cm/min e 500 cm.	52
Figura 3.5 – Sensibilidade do modelo à espessura da zona não-saturada (Caso A), com Q e K fixos em 0,08 e 0,1 cm/min.	52
Figura 3.6 – Perfis de saturação para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 920 min de simulação.....	58
Figura 3.7 – Velocidades lineares para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 920 min de simulação.....	58
Figura 3.8– Perfis de concentrações para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 20 cm do topo, utilizando fluxo permanente.....	59
Figura 3.9 – Valores de M_p para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 20 cm do topo.	59
Figura 3.10 – Sensibilidade do modelo à taxa de precipitação (Caso B), com K e L fixos em 0,01 cm/min e 1000 cm.	62
Figura 3.11 – Sensibilidade do modelo à cond. hidráulica saturada (Caso B), com Q e L fixos em 0,01cm/min e 1000 cm.	62
Figura 3.12 – Sensibilidade do modelo à espessura da zona não-saturada (Caso B), com Q e K fixos em 0,01 cm/min.....	62
Figura 4.1 – Avanço da pluma de contaminante utilizando os modelos MODFLOW/MT3D e FEMWATER/LEWASTE, após 1.000 minutos de simulação.....	71
Figura 4.2 – Esquema do algoritmo do modelo FT1D-MODFLOW baseado na metodologia de Fedors (1997).....	77
Figura 4.3 – Esquema da nova metodologia proposta para o modelo FT1D-MODFLOW, mostrado para um período de stress.	79
Figura 4.4 – Exemplo da forma de obtenção de f pelo método da bisseção.	80
Figura 4.5 – Esquema do algoritmo do modelo FT1D – MT3D.....	83
Figura 4.6 – Geometria e dimensões para o Exemplo 4-1.	85
Figura 4.7 – Elevação do aquífero ao longo do tempo, a 5 m do canal (Exemplo 4-1).....	86

Figura 4.8 – Elevação do aquífero para o Exemplo 4-1 simulado com FEMWATER.....	89
Figura 4.9 – Elevação do aquífero para o Exemplo 4-1 simulado com FT1D-MODFLOW/V2.	90
Figura 4.10 – Elevação do aquífero para o Exemplo 4-1 simulado com FT1D- MODFLOW/V3.	91
Figura 4.11 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-1, em 300 min.	92
Figura 4.12 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-1, em 500 min.	92
Figura 4.13 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-1, em 800 min.	92
Figura 4.14 – Elevação do topo do aquífero para o Exemplo 4-1, a 200 cm do canal, simulado por FEMWATER, FT1D-MODFLOW/V2, FT1D-MODFLOW/V3 e MODFLOW.....	94
Figura 4.15 – Elevação do topo do aquífero para o Exemplo 4-1, a 500 cm do canal, simulado por FEMWATER, FT1D-MODFLOW/V2, FT1D-MODFLOW/V3 e MODFLOW.....	95
Figura 4.16 – Geometria e dimensões para o Exemplo 4-2.	97
Figura 4.17 – Simulação do Exemplo 4-2 através de FT1D-MODFLOW/V1, para o ponto $x=1000\text{m}$ e $y=400\text{m}$	97
Figura 4.18 – Diferença da elevação dos domínios saturado e não-saturado (erro), em função do número de iterações, para FT1D-MODFLOW/V3 (Exemplo 4-2)	98
Figura 4.19 – Elevação do topo do aquífero ao longo do tempo para o Exemplo 4-2, no ponto de coordenadas (1000; 400).	99
Figura 4.20 – Elevação do topo do aquífero ao longo do tempo para o Exemplo 4-2, no ponto de coordenadas (0; 400).	100
Figura 4.21 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-2, após 200 h de simulação, ao longo do eixo y , em $x = 0$	102
Figura 4.22 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-2, após 200 h de simulação, ao longo da linha referente a $y = 400\text{ m}$	103
Figura 4.23 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo FT1D – MT3D (V2), para o Exemplo 4-3 (eixos em metros)	106
Figura 4.24 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo FT1D – MT3D (V3), para o Exemplo 4-3 (eixos em metros)	106

Figura 4.25 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo LEWASTE, para o Exemplo 4-3 (eixos em metros).....	107
Figura 4.26 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo MT3D, para o Exemplo 4-3 (eixos em metros).....	107
Figura 4.27 – Comparação do avanço da pluma do contaminante para FT1D-MT3D (V2) e LEWASTE (Exemplo 4-3).....	109
Figura 4.28 – Comparação do avanço da pluma do contaminante para FT1D-MT3D (V3) e LEWASTE (Exemplo 4-3).....	110
Figura 4.29 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 500 min de simulação	111
Figura 4.30 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 1000 min de simulação	111
Figura 4.31 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 1500 min de simulação	112
Figura 4.32 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 2000 min de simulação	112
Figura 5.1 – Comparação da solução de FT1D com a solução analítica (Exata) para o problema de dissolução, para diversos comprimentos.	129
Figura 5.2 – Comparação da solução de FT1D com a solução analítica (Exata) para o problema de dissolução, em função de Re , para 10 cm de comprimento.....	130
Figura 5.3 – Resultados de simulação com FT1D para um caso de dissolução completa de estireno de Powers et al. (1994a).....	131
Figura 5.4 – Curva granulométrica da areia média utilizada.	135
Figura 5.5 – Curva de retenção experimental (pontos) e ajustada (linha) para a areia média.	136
Figura 5.6 - Experimento de lixiviação de tolueno em colunas	137

Figura 5.7 – Curva de calibração da análise de tolueno por cromatografia gasosa.	139
Figura 5.8 – Condições de saturação da fase aquosa para as colunas de 50 e 100 cm de comprimento.....	151
Figura 5.9 – Evolução da concentração da fase aquosa na saída da coluna para o Teste 3, considerando a depleção da fonte.....	154

LISTA DE SÍMBOLOS

α [L ⁻¹]	Parâmetro do modelo de van Genuchten
α_L [L]	Dispersividade longitudinal
ϕ [-]	Porosidade
λ [-]	Índice de distribuição de tamanho de poros
μ [L ² /T]	Viscosidade dinâmica da água
θ [-]	Conteúdo volumétrico da fase aquosa
ρ_b [M/L ³]	Densidade volumétrica do meio poroso
ρ_s [M/L ³]	Densidade dos grãos
ρ_w [M/L ³]	Densidade da água
Δt [T]	Incremento de discretização temporal
Δz [L]	Incremento de discretização espacial
A_c [L ²]	Área de contato entre as fases NAPL e aquosa
C [M/L ³]	Concentração do contaminante na fase aquosa
C_{max} [M/L ³]	Solubilidade efetiva do contaminante j na mistura
C_p [L ⁻¹]	Capacitância
Cr [-]	Número de Courant
C_s [mg/kg]	Massa do contaminante no solo
C_{sol} [M/L ³]	Solubilidade do contaminante j puro
D [L ² /T]	Coefficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal
d_{10} [L]	Diâmetro de 10% passante
d_{50} [L]	Diâmetro médio das partículas
d_{60} [L]	Diâmetro de 60% passante
D_d [L ² /T]	Coefficiente de dispersão mecânica
D_f [L ² /T]	Difusividade
D_m [L ² /T]	Coefficiente de difusão molecular
d_M [L]	Tamanho de um grão médio de areia
E [-]	Adequação da estimativa de transporte utilizando fluxo permanente
fm_j [-]	Fração molar do contaminante j na mistura
foc [-]	Fração mássica de carbono orgânico no solo
H [-]	Constante de Henry (forma adimensional)
h [L]	Pressão da água (em termos de carga hidráulica)
h_{ar} [L]	Pressão do ar
h_c [L]	Pressão capilar da interface ar-água
h_d [L]	Pressão mínima de drenagem do meio poroso
i	Índice referente à discretização espacial
K [L/T]	Condutividade hidráulica saturada
k	Índice referente ao nível de iteração no método Picard
K_l [T ⁻¹]	Coefficiente de transferência de massa
Koc [L ³ /M]	Coefficiente de partição entre carbono orgânico e fase aquosa
k_r [-]	Condutividade relativa
L [L]	Espessura da zona não-saturada
m [-]	Parâmetro do modelo de van Genuchten

M_P [M/L ²]	Massa específica de contaminante calculada utilizando fluxo permanente
M_T [M/L ²]	Massa específica de contaminante calculada utilizando fluxo transiente
n [-]	Parâmetro do modelo de van Genuchten
Pe [-]	Número de Peclet
Q [L/T]	Taxa de precipitação no topo do domínio não-saturado
q [L/T]	Descarga volumétrica específica (velocidade de Darcy) da fase aquosa
R [-]	Coefficiente de retardo
Re [-]	Número de Reynolds
S [-]	Saturação da fase aquosa
\bar{S} [-]	Saturação efetiva da fase aquosa
Sc [-]	Número de Schmidt
S_g [-]	Saturação da fase gasosa
Sh [-]	Número de Sherwood
S_m [-]	Saturação irreduzível da fase aquosa
S_o [-]	Saturação da fase NAPL residual
S_o^i [-]	Saturação inicial da fase NAPL residual
S_r [-]	Saturação residual da fase aquosa
T [M/L ³ .T]	Taxa de transferência de massa entre fase NAPL e aquosa
t [T]	Tempo
τ	Índice referente à discretização temporal
v [L/T]	Velocidade linear da fase aquosa
U [-]	Índice de uniformidade do meio poroso
x [L]	Eixo horizontal
y [L]	Eixo horizontal, transversal a x
z [L]	Eixo vertical, paralelo à aceleração da gravidade

1. INTRODUÇÃO

1.1. Escopo do problema

Na maioria dos países do mundo, o estabelecimento de políticas de recursos hídricos sustentáveis tem se tornado um dos principais focos de discussão da sociedade. Com a demanda sempre em ascensão e a crescente consciência do limite das reservas de água potável disponíveis, busca-se cada vez mais alternativas que venham garantir a economia e o uso criterioso desse recurso. Os mananciais subterrâneos são fontes alternativas não muito valorizadas quando há abundância de águas superficiais, mas elas se tornam importantes em situações de carência. Como são fontes estratégicas, a manutenção da qualidade dos aquíferos é vital.

A contaminação de aquíferos começou a ser estudada há algumas décadas e, atualmente, é considerada um dos mais sérios problemas ambientais a serem enfrentados. A baixa velocidade de deslocamento da água subterrânea faz com que o efeito da diluição dos contaminantes seja mais discreto do que nas águas superficiais, tornando o problema mais difícil de analisar. Uma porção de água subterrânea contendo certo contaminante será transportada na direção preferencial do fluxo de acordo com a velocidade média do aquífero. O contaminante dissolvido sofrerá diluição devido à difusão molecular e à dispersão mecânica e poderá ficar adsorvido ao material poroso. Efeitos como esses são alguns dos únicos processos que podem gerar diluição da concentração do contaminante na água subterrânea. Além disso, a análise do efeito desses processos é bastante complexa.

A questão dos aquíferos contaminados se torna ainda mais complicada se a contaminação for causada por líquidos orgânicos imiscíveis em água. Esses contaminantes são genericamente denominados NAPLs ("Non-Aqueous Phase Liquids" - Fase Líquida Não-Aquosa). O complicante neste caso é que esses fluidos, apesar de caracterizados como imiscíveis em água, não são exatamente insolúveis. Em diferentes níveis, todos os líquidos orgânicos apresentam certa solubilidade em água. Outro fator complicador é que a solubilidade desses fluidos, embora baixa, costuma ser várias ordens de magnitude superior ao teor máximo permissível na água potável (Mercer e Coheb, 1990). Como resultado, os fluidos imiscíveis são fontes de contaminação persistentes, capazes de durar por décadas, ou até séculos em alguns casos, e de contaminar grandes volumes de água em níveis bem superiores aos limites para consumo. Por outro lado, a baixa solubilidade desses

contaminantes faz com que não seja possível utilizar a água eficientemente como mecanismo de remoção do contaminante do meio subsuperficial.

Em geral, estes contaminantes entram em contato com o subsolo devido a derrames durante o transporte por caminhões-tanque, vazamentos em tubovias e em tanques de estocagem superficiais e subterrâneos, infiltração em áreas de disposição de resíduos, como aterros industriais e processos de landfarming, entre outros (Mercer e Coheb, 1990; Pankow e Cherry, 1996).

Nos EUA, quase 500 mil áreas foram identificadas como potencialmente contaminadas por esses tipos de fontes nos últimos 15 anos. Somente com relação às áreas contaminadas por tanques de estocagem subterrâneos (tanques de postos de abastecimento de combustíveis, por exemplo), têm-se, pelo menos, 165.000 áreas, com um total de 24 milhões de metros cúbicos de solo contaminado. Estima-se que esse país irá gastar cerca de 187 bilhões de dólares nos próximos anos para recuperar 217.000 áreas ainda em processo de remediação (U.S.EPA, 1997).

Ao penetrarem na camada superficial do solo, os NAPLs iniciam um caminho descendente sob o efeito da gravidade e da capilaridade, acompanhado de espalhamentos laterais devido à capilaridade e às variações espaciais de permeabilidade do meio. Enquanto o NAPL se infiltra, grande quantidade deste contaminante é retida pelos espaços porosos, constituindo resíduos imobilizados pelas forças capilares. Assim, formam-se regiões com NAPLs a baixas saturações, ocupando poros desconectados entre si, constituindo as chamadas áreas de NAPLs residuais.

Um caso particular dessas áreas ocorre quando o volume derramado não é suficiente para superar a capacidade de retenção do solo e a frente de avanço do fluido pára antes de atingir o topo do aquífero freático. Essa situação pode ocorrer devido a pequenos derrames de fluidos, em áreas de zonas não-saturadas espessas, entre outros. Nesses casos, embora o aquífero freático não tenha sido atingido diretamente pelo fluido imiscível infiltrante, a presença de áreas residuais de NAPLs na zona não-saturada representa risco potencial de contaminação desses aquíferos. Um dos principais meios de contaminação é através da recarga dos mananciais subterrâneos. A água de chuva, infiltrando-se pelo solo, dissolve os contaminantes nas zonas residuais e arrasta-os até o aquífero freático, gerando plumas de contaminantes dissolvidos.

Uma das questões que se impõem nesses casos é saber se uma área de NAPL residual, com determinada extensão e teor de contaminante, representa risco à saúde humana e ao meio

ambiente. O meio subsuperficial é altamente complexo e varia muito quanto às suas características físicas e químicas. Estes fatores, bem como as características de cada contaminante, fazem com que seja necessário avaliar-se cada área em particular para decidir-se sobre a atitude mais correta a ser tomada. A análise de risco de áreas contaminadas envolve a determinação do risco que essa contaminação acarreta para as populações que possam ser expostas ao contaminante por diferentes vias de exposição.

A avaliação de risco de solos contaminados por NAPLs é uma importante ferramenta para otimizar o uso dos recursos disponíveis para recuperação de áreas contaminadas. Quando várias áreas apresentam risco potencial, essa análise separa áreas que não oferecem riscos, estabelece critérios de prioridade para descontaminação de áreas com riscos variados e aponta os níveis de descontaminação necessários para cada área. Assim, procura-se conhecer cada área contaminada, analisam-se os fatores atenuantes e agravantes para o risco e avalia-se o grau de urgência para a recuperação da área, que é associado às características próprias de cada local.

Na análise de risco de uma área de NAPL residual na zona não-saturada, todas as possíveis vias de exposição devem ser pesquisadas: ingestão de água subterrânea contaminada por lixiviação, inalação dos gases provenientes de evaporação, ingestão do solo contaminado, etc. Este trabalho se limitará a pesquisar sobre a via de exposição por ingestão da água subterrânea contaminada. Além desta via ser considerada uma das mais significativas e difíceis de serem caracterizadas, ela se destaca por ter a capacidade de atingir regiões muito afastadas da área-fonte. As outras vias, tanto a inalação dos gases quanto de ingestão de solo contaminado, se limitam à região vizinha da fonte, o que possibilita o controle da exposição das populações através da limitação do acesso à área afetada.

Entre as etapas do processo de análise de risco de uma área, talvez a mais importante seja a estimativa da concentração do contaminante junto ao agente receptor, ou seja, um poço de abastecimento, por exemplo. Nos casos onde o contaminante ainda não tenha atingido o ponto de exposição (casos esses em que é impossível medir diretamente a concentração de exposição), esta estimativa é realizada através de simulações de modelos de transporte de contaminantes. Na simulação, os processos físico-químicos que exercem influência no transporte são relacionados em balanço de massa do contaminante e este é desenvolvido ao longo do tempo de simulação, para a geometria de interesse.

Na simulação de áreas residuais em zona não-saturada, diversas características do local e do contaminante exercem diferentes graus de influência na previsão do resultado: tipo do

contaminante, geometria e teor de contaminante da área residual, espessura da zona não-saturada, tipo do solo e presença de heterogeneidades, capacidades adsorptiva e dispersiva do solo, taxa e duração da precipitação, distância até o ponto de exposição, entre outras.

Diversos modelos de transporte estão disponíveis para serem utilizados em análises de risco, variando de soluções analíticas simplificadas até os mais complexos modelos numéricos. Os modelos mais simples são construídos fazendo-se considerações que podem restringir a validade de sua solução a casos particulares, mas, em compensação, são bastante econômicos do ponto de vista computacional e utilizam um mínimo de parâmetros. Por outro lado, os modelos numéricos podem ser muito precisos, mas a exigência de dados e de esforço computacional pode ser enorme.

Em análise de risco, busca-se compensar as incertezas do modelo utilizado, bem como dos valores dos parâmetros, induzindo esses fatores de incerteza em um sentido favorável à análise. Em outras palavras, procura-se utilizar considerações que produzirão as maiores concentrações no local de exposição do agente receptor, ou seja, procura-se simular o pior caso possível. Assim, pode-se afirmar que a concentração real no local de exposição não será maior do que o valor estimado pelo modelo de transporte, podendo ser menor. Esta é uma abordagem conservadora da modelagem. Uma desvantagem desse processo é que geralmente não se tem controle do efeito das considerações que se introduz no resultado da simulação. E quando várias considerações conservadoras são sobrepostas, pode-se chegar a resultados extremamente exagerados.

Desprezar a influência da zona não-saturada é um exemplo de consideração conservadora. Os efeitos do armazenamento e dos processos físico-químicos que se passam na zona não-saturada são freqüentemente subtraídos da análise do transporte. Esta abordagem é implementada ao estender a área contaminada até o topo do aquífero freático. Estando a fonte de contaminação diretamente em contato com o aquífero freático, despreza-se o tempo de viagem da pluma dissolvida ao longo da zona não-saturada, bem como as possíveis formas de diluição que possam ocorrer. Muitas vezes essa abordagem é bastante razoável, mas, em outros casos, como em áreas com zonas não-saturadas espessas, os efeitos do armazenamento e dos processos de transporte que ocorrem nessa região podem ser expressivos.

Por outro lado, a preferência por modelos mais simplificados pode ser plenamente compreendida quando se avalia a dificuldade de se operar modelos numéricos mais complexos, especialmente os modelos multidimensionais de zona não-saturada. Em geral, as entradas de dados complicadas e os inúmeros problemas numéricos que ocorrem exigem um

operador altamente qualificado e experiente. Além disso, o tempo computacional pode ser considerável, mesmo em um computador potente, o que pode tornar a análise inviável.

Assim, é sempre desejável que haja um balanceamento entre o grau de complexidade do modelo que se escolhe e o nível das considerações assumidas por esse modelo. Dentro deste contexto, propõe-se, neste trabalho, abordar a modelagem de áreas de NAPLs ("Non-Aqueous Phase Liquids") residuais, localizadas na zona não-saturada, com o objetivo de auxiliar na avaliação do impacto dessas áreas na qualidade dos aquíferos freáticos.

1.2. Objetivos

O principal enfoque do trabalho é o estudo de áreas de solos contaminados e seu impacto nos aquíferos livres através da análise do transporte de contaminantes dissolvidos na fase aquosa provenientes destas fontes. Pretende-se gerar uma ferramenta computacional que permita o estudo de tais áreas, considerando aspectos de eficiência da simulação de fluxo e transporte na zona não-saturada e saturada.

Dentro deste tema, são objetivos específicos deste trabalho:

- Analisar o efeito de considerar fluxo permanente na simulação do transporte de contaminante dissolvido na zona não-saturada, avaliando cenários que poderiam significar impedimentos para se utilizar essa consideração. Comparar os métodos de obtenção dos dados de fluxo em regime permanente e analisar fatores como dificuldades numéricas e tempo de execução do modelo.
- Avaliar a adequabilidade de substituir uma análise multidimensional de um modelo de fluxo e transporte na zona não-saturada por uma abordagem de múltiplas colunas unidimensionais. Propor um modelo multidimensional de fluxo e transporte para as zonas não-saturada e saturada, baseado na conexão entre um modelo unidimensional de zona não-saturada com um modelo multidimensional de zona saturada.
- Avaliar as diferentes formas de contaminação da fase aquosa na zona não-saturada do solo. Analisar métodos de avaliação de taxas de dissolução de áreas residuais quanto a sua adequabilidade para a zona não-saturada. Os métodos selecionados serão implementados em um modelo de transporte. Dados de dissolução não-saturada serão gerados em modelo físico unidimensional para comparação com os métodos.

1.3. Organização do trabalho

O Capítulo 2 deste trabalho mostra o desenvolvimento, implementação e validação de um modelo de fluxo e transporte na zona não-saturada que será utilizado como base para as análises que serão realizadas ao longo do trabalho, bem como no desenvolvimento de outros modelos.

No Capítulo 3, se analisará o problema do fluxo permanente na zona não-saturada e seu impacto na simulação de transporte. A desconsideração da parte transiente do fluxo na modelagem de transporte é prática comum nas análises de risco, quando o fluxo é considerado já em regime permanente enquanto o transporte é simulado. Pretende-se, com essa parte do trabalho, desenvolver uma análise do efeito do fluxo permanente a fim de se verificar se o fluxo transiente na zona não-saturada pode ser importante e em quais situações.

No Capítulo 4, se proporá um modelo aproximado para fluxo e transporte nas zonas não-saturada e saturada. Este algoritmo se baseia na aproximação da zona não-saturada em duas ou três dimensões por uma série de colunas unidimensionais. Desconsideram-se, assim, os fluxos horizontais e transversais que possam desenvolver na zona não-saturada, estabelecendo que o único sentido de fluxo seja o vertical. A zona não-saturada multidimensional, simulada através de um série de colunas unidimensionais, será conectada a um modelo de fluxo e transporte para a zona saturada. A adequação deste esquema será avaliada pela comparação dos resultados de casos simulados com um modelo multidimensional já verificado e validado. Essa consideração permite que a exigência computacional seja drasticamente reduzida, bem como os problemas numéricos associados aos esquemas multidimensionais. Dentro deste capítulo também se abordará o método de conexão da zona não-saturada com a zona saturada. Métodos propostos na literatura serão implementados e comparados com uma nova metodologia desenvolvida, avaliando-se a precisão dos resultados obtidos, os tempos de execução, a estabilidade e a ocorrência de oscilações nos resultados.

A última parte deste trabalho (Capítulo 5) analisará a forma de modelagem das fontes de contaminantes localizados na zona não-saturada do solo. A lixiviação do solo contaminado será avaliada através de duas formas possíveis: dessorção ou dissolução de NAPLs residuais. Neste trabalho, vão-se apresentar dados de concentração da fase aquosa resultantes da lixiviação de colunas de solo contaminados. Esses dados serão comparados com os dados gerados a partir de modelos existentes para previsão de taxas de solubilização em zona saturada.

2. FLUXO E TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL NA ZONA NÃO-SATURADA

2.1. Introdução

Este capítulo dedica-se à descrição das equações que governam os fenômenos de fluxo e transporte na zona não-saturada, bem como os métodos de solução das equações diferenciais parciais. Também se abordará a implementação de um modelo de fluxo e transporte unidimensional não-saturado, para solos heterogêneo (em camadas), utilizando as equações e métodos selecionados.

Este modelo será comparado com outros modelos numéricos semelhantes. O objetivo é obter um modelo unidimensional confiável, com baixo tempo de execução e com entrada de dados simples, para ser conectado a um modelo de fluxo e transporte saturado como será descrito nos capítulos posteriores.

2.2. Simulação de fluxo em zona não-saturada

2.2.1. Descrição matemática do fluxo de água na zona não-saturada

A equação diferencial que descreve o fluxo na zona não-saturada é obtida através da lei de conservação de massa, aliada à Lei de Darcy modificada para descrever a descarga específica do fluxo na zona não-saturada (Remson et al., 1971; Freeze e Cherry, 1979). Considerando-se que a densidade do fluido é relativamente invariante espacial e temporalmente e que o meio poroso é incompressível, obtém-se a equação de balanço de massa, dada aqui para o caso unidimensional e vertical, sendo que z [L] refere-se ao eixo paralelo à aceleração da gravidade, positivo para baixo:

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = - \frac{\partial q}{\partial z} \quad (2.1)$$

onde ϕ é a porosidade (volume de poros / volume do meio poroso) [$L^3 L^{-3}$], S é a saturação da água [$L^3 L^{-3}$] (volume de água / volume de poros), q [$L^3 L^{-2} T^{-1}$] refere-se à descarga volumétrica específica da fase aquosa (velocidade de Darcy) e t é o tempo [T]. Pode-se também expressar essa equação em termos de conteúdo volumétrico de água θ [$L^3 L^{-3}$] (volume água/volume meio poroso), definido por $\theta = \phi S$.

O fluxo ou descarga específica (q) é dado pela Lei de Darcy para a zona não-saturada, mostrada a seguir para o caso unidimensional e vertical, sendo o eixo z orientado positivamente para baixo:

$$q = -K \cdot k_r \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \quad (2.2)$$

onde K é a condutividade hidráulica saturada [$L T^{-1}$], k_r é a condutividade relativa e h é a pressão da água expressa em termos de carga hidráulica [L] (pressão dividida pela gravidade e densidade da água).

A carga de pressão da água é calculada baseando-se na definição de pressão capilar h_c [L] na interface ar-água ($h_c = h_{ar} - h$), considerando que o ar está sempre à pressão atmosférica ($h_{ar} = 0$). Assim, a pressão da água torna-se igual ao negativo da pressão capilar ($h = -h_c$), sendo sempre negativa na zona não-saturada.

Incluindo a Equação de Darcy na equação de balanço de massa, obtém-se a forma mista da Equação de Richards (Freeze e Cherry, 1979; Fedors, 1997), expressa em termos de h e S (ou θ):

$$\phi \frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \cdot k_r \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right) \quad (2.3)$$

Utilizando o conceito de capacitância (C_p) [$1/L$], pode-se obter a equação de Richards em termos de carga de pressão. A capacitância é definida como $C_p = d\theta / dh = \phi \cdot dS / dh$, sendo, portanto, função da carga de pressão. A Equação de Richards em termos da carga de pressão é dada por:

$$C_p \frac{\partial h}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(K \cdot k_r \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right) \quad (2.4)$$

Outra forma possível para a Equação de Richards é expressá-la em termos apenas do conteúdo volumétrico de água. Para isso, utiliza-se a função difusividade (D_f) [L^2/T], definida por $D_f(\theta) = K(\theta) / C_p(\theta)$, onde $K(\theta) = K \cdot k_r(\theta)$ e $C_p(\theta)$ é a capacitância. Realizando uma expansão no termo de gradiente da carga de pressão na Eq. (2.3) e substituindo pela definição da difusividade, obtém-se:

$$\frac{\partial \theta}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial z} \left(D_f(\theta) \frac{\partial \theta}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (K(\theta)) \quad (2.5)$$

Cada uma das três formas possíveis da Equação de Richards (Eq. (2.3), (2.4) e (2.5)) tem suas vantagens e desvantagens (Fedors, 1997). A forma expressa em conteúdo volumétrico apresenta o mérito de ser essencialmente conservadora, com bom resultado no balanço de massa, mas é de difícil aplicação em solos heterogêneos devido à descontinuidade que a umidade apresenta no limite entre as diferentes camadas de solos. Sua utilização também não é bem sucedida em solos muito secos. Já a forma em termos carga de pressão representa bem solos heterogêneos, uma vez que a pressão da água é contínua entre os solos, mas apresenta um balanço de massa pobre. Por congregiar as vantagens das duas formas anteriores, contornando ao mesmo tempo as desvantagens, provavelmente a melhor forma para a Equação de Richards é a forma mista. Entretanto, esta forma apresenta uma dificuldade na discretização numérica, que será abordada oportunamente.

A forma mista da Equação de Richards apresenta 3 variáveis independentes (h , S e k_r), sendo necessário, portanto, mais 2 equações para descrever o sistema. Essas equações são obtidas através das relações empíricas de pressão capilar e saturação e de permeabilidades relativas em função da saturação ou da pressão capilar. Entre as expressões mais utilizadas para cálculo de pressão capilar, dado a saturação do fluido molhante, estão as relações de Brooks-Corey (Brooks e Corey, 1964) e van Genuchten (van Genuchten, 1980). É bom lembrar que, por definição, h_c é sempre positivo e tem relação com h através de ($h = -h_c$).

A relação de Brooks-Corey é dada por:

$$\bar{S} = \frac{S - S_r}{S_m - S_r} = \left(\frac{h_d}{h_c} \right)^\lambda \quad \text{para } h_c > h_d \quad (2.6)$$

$$\bar{S} = 1 \quad \text{para } h_c \leq h_d$$

onde \bar{S} é a saturação efetiva da água, S_m é a saturação máxima (geralmente, $S_m=1$), S_r é a saturação residual, h_c é a pressão capilar, h_d [L] é a pressão mínima de drenagem do meio poroso, dada em termos de carga, e λ é o índice de distribuição de tamanho de poros. Os parâmetros h_d e λ são os principais parâmetros de calibração, mas o modelo também mostra sensibilidade com relação a S_r .

O modelo de van Genuchten é:

$$\bar{S} = \frac{S - S_r}{S_m - S_r} = \left(\frac{1}{1 + (\alpha h_c)^n} \right)^m \quad \text{para } h_c \geq 0 \quad (2.7)$$

onde α , m e n são parâmetros de ajuste do modelo. Frequentemente, utiliza-se uma relação entre m e n , sendo $m = 1 - 1/n$.

As expressões para estimativa de permeabilidade relativa são obtidas através do uso das relações entre pressão capilar e saturação da água nos modelos de Burdine (Burdine, 1953) e Mualem (Mualem, 1976). Utilizando Brooks-Corey em Burdine e van Genuchten em Mualem, obtém-se as equações (2.8) e (2.9), onde as permeabilidades relativas são dadas em função da pressão capilar:

$$k_r = \left(\frac{h_d}{h_c} \right)^{2+3\lambda} \quad \text{para } h_c > h_d \quad (2.8)$$

$$k_r = \frac{\left(1 - (\alpha h_c)^{n-1} \cdot (1 + (\alpha h_c)^n)^{-m} \right)^2}{\left(1 + (\alpha h_c)^n \right)^{m/2}} \quad \text{para } h_c \geq 0 \quad (2.9)$$

Para resolver a Eq. (2.3), é também necessária a especificação das condições iniciais e de contorno para o problema. As condições iniciais são geralmente especificadas através da distribuição espacial das cargas de pressão ou saturações de água no domínio do problema. As condições de contorno podem ser de 1º tipo (ou Dirichlet), onde as cargas de pressão são especificadas para o contorno do domínio, de 2º tipo (ou Neumann), onde uma taxa volumétrica de água devido ao gradiente da carga de pressão é especificada, e de 3º tipo (ou Cauchy), onde a taxa especificada inclui, além do gradiente da carga de pressão, também o gradiente gravitacional. Para o caso de infiltração vertical (paralelo ao eixo z), as condições inicial, de contorno Dirichlet e Cauchy são mostradas abaixo nas equações (2.10), (2.11) e (2.12), respectivamente:

$$h(z, t) = h(z, 0) \quad \text{para } t = 0 \quad (2.10)$$

$$h(z, t) = h(z_i, t) \quad \text{onde } z_i \text{ refere-se ao contorno} \quad (2.11)$$

$$Q(z_i, t) = -K(z_i) k_r(z_i, t) \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \quad \text{onde } Q \text{ é o fluxo aplicado ao contorno} \quad (2.12)$$

A principal dificuldade encontrada na simulação do fluxo não-saturado, e também no fluxo saturado, está na especificação das condições de contorno na superfície do aquífero freático. Este contorno é marcado pela carga de pressão nula, mas sua posição não é previamente conhecida. Normalmente, nos modelos de fluxo não-saturado unidimensionais, a condição de contorno inferior é simulada aplicando carga nula ao limite inferior do domínio, mas esse limite é mantido fixo durante a simulação, sendo impossível simular-se a elevação do topo do aquífero freático em casos de infiltração. Este problema será abordado mais detalhadamente em capítulo posterior.

2.2.2. Métodos de solução da Equação de Richards

Soluções analíticas para a Equação de Richards são difíceis de ser obtidas, sendo limitadas a casos específicos de condições iniciais e de contorno. Normalmente são possíveis soluções semi-analíticas, que envolvem técnicas numéricas na solução do problema (integrações numéricas, por exemplo) mas que não se utilizam de métodos numéricos propriamente ditos (diferenças finitas ou elementos finitos). Um sumário desses métodos pode ser encontrado em Ravi e Williams (1998).

Talvez a mais conhecida dessas soluções seja a de Philip (1957), desenvolvida para meio homogêneo e semi-infinito, submetido à condição de contorno de saturação fixa na extremidade finita. Esta solução se baseia na expansão da solução em uma série, onde cada termo da série é uma correção da solução. Em geral, quatro termos são suficientes para uma boa representação, sendo a solução exata para curtos períodos de tempo (60 horas de simulação representam um erro de 1/1000).

Mais recentemente, Philip (1973, 1974) desenvolveu outra solução quasi-analítica aproximada, baseada no algoritmo de Parlange (1971a; 1971b), sendo aplicável à condição de contorno de conteúdo volumétrico constante em meio homogêneo. A estrutura básica do algoritmo se baseia no conceito da relação fluxo-concentração aplicado ao fenômeno de fluxo não-saturado, envolvendo um processo iterativo para primeiro estabelecer a forma da solução e depois sua magnitude. Segundo o autor, esta forma de solução do problema é aplicável a outras condições de contorno, tais como conteúdo volumétrico variável no tempo e fluxo fixo e variável.

Para meios heterogêneos, Marinelli e Durnford (1998) apresentam uma solução semi-analítica através da redução da equação unidimensional de Richards a uma série de equações

diferenciais ordinárias pela aplicação da aproximação de diferenças finitas à derivada temporal, sendo as equações resolvidas explicitamente.

Os métodos numéricos são os mais usados na solução da equação de Richards devido à sua maior flexibilidade para descrever diferentes condições de contorno e heterogeneidades. Os métodos mais utilizados na solução deste tipo de problema são diferenças finitas e elementos finitos, embora haja outros métodos (Press et al., 1992). O método de elementos finitos é especialmente aplicável a problemas multidimensionais com limites de domínio complexos, pela facilidade de alteração do formato dos elementos. Diferenças finitas é de mais fácil implementação, a entrada de dados é mais sucinta, mas não representa bem problemas de geometria complexa.

Entre os modelos de fluxo não-saturado que utilizam diferenças finitas estão CHEMFLO (Nofziger et al., 1989), modelo unidimensional da U. S. Environmental Protection Agency (U.S.EPA), e VS2DT (Healy, 1990), modelo bidimensional desenvolvido pelo U.S. Geological Survey. Já os modelos HYDRUS (Vogel et al., 1996; Simunek et al., 1998), do U.S. Salinity Laboratory (U.S. Department of Agriculture), e 3DFEMWATER / 3DLEWASTE (Yeh et al., 1992), da U. S. EPA, foram desenvolvidos em elementos finitos.

Para se realizar a discretização em diferenças finitas é necessário definir-se a malha e o local de atribuição para as variáveis. Para isso, duas possibilidades se apresentam: centralizar a variável na célula ou atribuí-la ao nóculo entre as células. Para o problema unidimensional, a Figura 2.1 mostra os esquemas para essas duas formas de representação. Ambas as formas têm suas vantagens e desvantagens. Por exemplo, centralizar a variável na célula permite se obter o valor médio para a célula, sendo uma forma mais representativa, enquanto atribuir a variável ao nóculo facilita a descrição do contorno do domínio.

A discretização da derivada temporal e a representação dos termos não-lineares da Equação de Richards merecem uma atenção especial. Existem, basicamente, 3 formas para realizar essa etapa: a discretização explícita, a implícita com termos não-lineares avaliados no período de tempo atual e a implícita com termos não-lineares avaliados no período de tempo futuro (Remson et al., 1971).

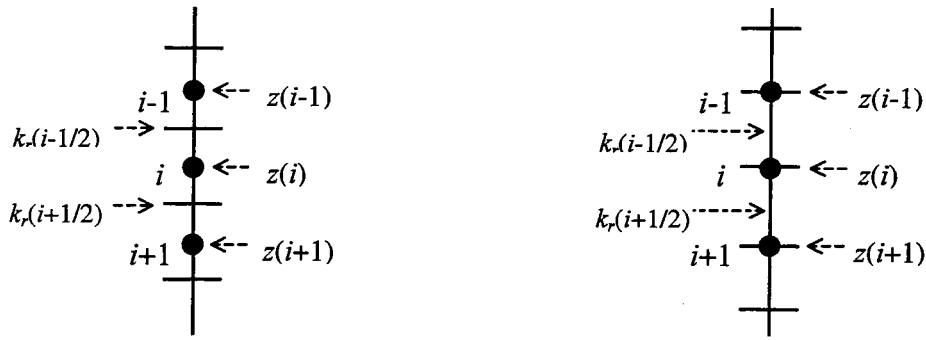


Figura 2.1 – Esquemas de discretização com a variável atribuída no centro da célula (esquerda) e no nóculo entre células (direita).

Utilizando as diferenças finitas e atribuindo a variável ao nóculo entre as células, a discretização explícita da Eq. (2.3) resulta em:

$$\left(\frac{\phi_i \cdot S_i^{t+1} - \phi_i \cdot S_i^t}{\Delta t} \right) = \left[\frac{K_{i+1/2} \cdot k_{r,i+1/2}^t}{\Delta z_i} \cdot \left(\frac{h_{i+1}^t - h_i^t}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{K_{i-1/2} \cdot k_{r,i-1/2}^t}{\Delta z_i} \cdot \left(\frac{h_i^t - h_{i-1}^t}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{K_{i+1/2} \cdot k_{r,i+1/2}^t - K_{i-1/2} \cdot k_{r,i-1/2}^t}{\Delta z_i} \right) \quad (2.13)$$

onde $\Delta z_i = (z_{i+1} + z_i)/2 - (z_i + z_{i-1})/2 = (z_{i+1} - z_{i-1})/2$. Nesta equação e nas seguintes, os índices i e t referem-se à discretização espacial e temporal, respectivamente.

A principal vantagem da discretização explícita é a solução direta e gradual das equações para cada nóculo a cada período de tempo, já que a única incógnita da equação é a saturação no tempo futuro. A grande desvantagem deste esquema é que ele não é incondicionalmente estável (Remson et al., 1971), exigindo valores de Δt menores do que para outros esquemas. Em um estudo comparativo entre os diversos esquemas, Haverkamp et al. (1977) encontraram tempos de execução 5 a 10 vezes maiores para o esquema explícito do que para os esquemas implícitos avaliados.

Usando-se discretização implícita, com linearização explícita, a Eq. (2.3) torna-se:

$$\left(\frac{\phi_i \cdot S_i^{t+1} - \phi_i \cdot S_i^t}{\Delta t} \right) = \left[\frac{K_{i+1/2} \cdot k_{r,i+1/2}^t}{\Delta z_i} \cdot \left(\frac{h_{i+1}^{t+1} - h_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{K_{i-1/2} \cdot k_{r,i-1/2}^t}{\Delta z_i} \cdot \left(\frac{h_i^{t+1} - h_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{K_{i+1/2} \cdot k_{r,i+1/2}^t - K_{i-1/2} \cdot k_{r,i-1/2}^t}{\Delta z_i} \right) \quad (2.14)$$

Este esquema é incondicionalmente estável e fácil de implementar pois resulta em uma série de equações lineares. Haverkamp et al. (1979) encontraram, para este esquema, a metade dos tempos de execução dos esquemas totalmente implícitos, mas obteve maiores erros de balanço de massa, principalmente para casos em que o avanço da umidade é mais brusco. O modelo CHEMFLO utiliza esse tipo de esquema (Nofziger et al., 1989).

O esquema implícito, com avaliação implícita dos termos de condutividade, gera uma série de equações não-lineares que deve ser linearizada para que o sistema de equações possa ser resolvido. Este esquema é um dos mais utilizados, devido à sua estabilidade e bom resultado em termos de balanço de massa. Por exemplo, os modelos 3DFEMWATER, VS2DT e HYDRUS, já citados anteriormente, utilizam-se deste método. 3DFEMWATER fornece ainda a opção de operar nos esquemas explícito e Crank-Nicholson, que é uma forma intermediária dos esquemas explícito e implícito (Yeh et al., 1992). A forma mista da equação de Richards, aplicada ao esquema implícito, fornece:

$$\left(\frac{\phi_i \cdot S_i^{t+1} - \phi_i \cdot S_i^t}{\Delta t} \right) = \left[\frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{h_{i+1}^{t+1} - h_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{h_i^{t+1} - h_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1} - K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \right) \quad (2.15)$$

Os métodos mais utilizados para a linearização da Eq. (2.15) são Picard e Newton-Raphson. Picard baseia-se em um ciclo iterativo onde os valores de condutividade são calculados com os valores de carga de pressão do nível de iteração anterior (k) e os novos resultados ($k+1$) são comparados com os valores da iteração anterior (Remson et al., 1971). O ciclo é repetido até que a diferença entre os novos e os antigos valores de pressão sejam inferiores a determinado erro. É um método simples de implementar, com boa convergência, mas sua taxa de convergência é linear.

Taxas de convergência quadráticas podem ser obtidas utilizando-se o método Newton-Raphson (Press et al., 1992). Este método exige a avaliação das primeiras derivadas da função, necessitando de mais cálculos em cada iteração do que Picard. Outro potencial problema do método é que, se o ponto de partida da iteração não for perto suficiente, o método pode não convergir (Press et al., 1992).

A linearização da forma mista da equação de Richards (Eq. (2.15)) envolve uma dificuldade: há a necessidade de avaliar-se a saturação S_i^{t+1} no novo nível de iteração $k+1$. Para superar esse problema, Celia et al. (1990) propõem um método baseado na expansão

deste termo em série de Taylor, utilizando-se da relação entre saturação e carga de pressão da água:

$$S_i^{t+1,k+1} = S(h_i^{t+1,k} + \delta h_i) = S(h_i^{t+1,k}) + \left(\frac{dS}{dh} \right)_i^{t+1,k} \cdot \delta h_i + O(\delta^2) \quad (2.16)$$

A equação acima pode ser reescrita, observando-se que a derivada de S com relação à h é a definição de capacitância (Cp):

$$S_i^{t+1,k+1} = S_i^{t+1,k} + Cp_i^{t+1,k} (h_i^{t+1,k+1} - h_i^{t+1,k}) \quad (2.17)$$

2.3. Simulação de transporte em zona não-saturada

2.3.1. Transporte de contaminantes dissolvidos em fase aquosa na zona não-saturada

Do mesmo modo que foi desenvolvido para o fluxo de água na zona não-saturada, a equação de transporte de substâncias dissolvidas em fase aquosa também pode ser deduzida aplicando-se o princípio da continuidade e incluindo-se os principais processos físicos e físico-químicos que influem no transporte. Para um sistema unidimensional (paralelo ao eixo z), incluindo-se os processos de adsorção, dispersão hidrodinâmica e advecção, obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \left(S + \frac{(1-\phi)}{\phi} \cdot \rho_s \cdot f_{oc} \cdot K_{oc} \right) C \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi \cdot S \cdot D \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (q \cdot C) \quad (2.18)$$

onde C é a concentração do contaminante na fase aquosa [M/L^3], ρ_s é a densidade das partículas de solo [M/L^3], f_{oc} é a fração mássica de carbono orgânico no solo [-], K_{oc} é o coeficiente de partição entre carbono orgânico e água [L^3/M].

O parâmetro D é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal [L^2/T], descrito por:

$$D = D_m + D_d = D_m + \alpha_L v = D_m + \alpha_L \frac{q}{\phi \cdot S} \quad (2.19)$$

onde D_m é o coeficiente de difusão molecular do contaminante na fase aquosa [L^2/T], D_d é o coeficiente de dispersão mecânica [L^2/T], α_L é a dispersividade longitudinal do meio poroso

[L] e v [L/T] é a velocidade linear da fase aquosa na direção z ($v = q/(\phi S)$). Todos os demais elementos da Eq. (2.18) já foram definidos no item 2.2.

Na Eq. (2.18), os termos da direita da equação representam a somatória dos fluxos dispersivo e advectivo na fase aquosa. O fluxo advectivo descreve o deslocamento do contaminante através do arraste pela velocidade média da água. O fluxo dispersivo é o resultado da atuação de dois efeitos: difusão e dispersão mecânica. O fluxo difusivo é resultante de um processo químico (difusão molecular), devido ao gradiente de concentração do componente no fluido considerado. Já o fluxo dispersivo-mecânico deve-se às variações locais de velocidade do fluido com relação à velocidade média. Juntos, os fluxos difusivo e dispersivo compõem a chamada dispersão hidrodinâmica. Em geral, nos meios aquosos, a difusão molecular representa uma pequena contribuição ao coeficiente de dispersão hidrodinâmica se comparada à grandeza da dispersão mecânica.

A adsorção está relacionada com a tendência do contaminante dissolvido em água em se aderir ao material orgânico presente no solo. Essa tendência reflete o grau de hidrofobicidade do composto orgânico. Quanto mais hidrofóbico é um determinado composto, maior será sua preferência em se fixar a um composto orgânico presente no sistema ao invés de permanecer em solução aquosa. A adsorção é quantificada através de testes de agitação do solo em questão com soluções do composto a diferentes concentrações, mantidas condições isotérmicas. Formam-se, assim, curvas isotérmicas de concentração do composto adsorvido por unidade de massa de solo seco (w_s) [M/M] em função da concentração na fase aquosa que podem ser ajustada a relações empíricas. Uma das relações mais utilizadas é a forma linear da isoterma de Freundlich (Domenico e Schwartz, 1997):

$$w_s = K_d C \quad (2.20)$$

onde K_d é um coeficiente de distribuição do contaminante entre as fases [L³/M]. Esse parâmetro é calculado normalmente pela relação $K_d = K_{oc} f_{oc}$, onde K_{oc} e f_{oc} já foram definidos anteriormente.

A expressão contida nos parênteses internos do lado esquerdo da Eq. (2.18) pode ser reescrita em termos do fator de retardo (R), definido para o meio não-saturado como:

$$R = \left(1 + \frac{(1-\phi)}{\phi \cdot S} \rho_s f_{oc} K_{oc} \right) \quad (2.21)$$

O fator de retardo fornece uma medida de quantas vezes mais lento é o movimento da pluma de um contaminante em relação ao movimento da água subterrânea devido à adsorção

do contaminante na matriz do solo. Para o fluxo não-saturado, o conceito também é válido, mas, neste caso, o efeito do retardo é variável com a saturação da fase aquosa no solo, sendo, portanto, função do espaço e do tempo.

Introduzindo o fator de retardo, a Eq. (2.18) torna-se:

$$\frac{\partial}{\partial t}(\phi.S.R.C) = \frac{\partial}{\partial z}\left(\phi.S.D.\frac{\partial C}{\partial z}\right) - \frac{\partial}{\partial z}(q.C) \quad (2.22)$$

Observa-se que a Eq. (2.22) está acoplada à equação de fluxo, Eq. (2.3), através dos termos das velocidades de Darcy e das saturações, sendo que ambos podem ser variáveis no espaço e no tempo. Normalmente, faz-se a consideração de que o transporte dos contaminantes não afeta o fluxo das fases. Essa consideração é bastante razoável para a fase aquosa e permite que as equações possam ser desacopladas. Assim, o fluxo pode ser simulado primeiro, com a obtenção das funções espaciais e temporais da saturação da água e da descarga específica do fluxo aquoso. Posteriormente, o transporte é simulado a partir desses dados, produzindo a distribuição espacial e temporal da concentração do contaminante na fase aquosa.

A condição inicial para a descrição de um problema de transporte é geralmente feita através da atribuição de concentrações para todo o domínio no tempo inicial ($C(z,t) = C_o(z,0)$). As condições de contorno podem ser de 1º tipo (concentrações especificadas), de 2º tipo (gradiente de concentração nulo) ou de 3º tipo (fluxo mássico especificado), mostrados, respectivamente, nas Eq. (2.23), (2.24) e (2.25) abaixo:

$$C(z,t) = C_o(z_i,t) \quad (2.23)$$

$$\frac{\partial C}{\partial z}(z_i,t) = 0 \quad (2.24)$$

$$qC - \phi S D \frac{\partial C}{\partial z} = Q(z_i,t).C_o(z_i,t) \quad (2.25)$$

onde z_i refere-se ao contorno.

2.3.2. Métodos de solução da equação de transporte na zona não-saturada

Tal como foi discutido para o fluxo não-saturado, soluções numéricas são preferíveis também para o transporte de contaminantes dissolvidos na fase aquosa, por possibilitar a descrição de diferentes condições de contorno e meios heterogêneos. É bom realçar que, para

se obter a solução da equação de transporte não-saturado, é necessário que se obtenha antes a solução para o problema de fluxo não-saturado, ou seja, as funções de saturação e descargas específicas com a profundidade e o tempo de simulação.

Wilson e Gelhar (1981) apresentam uma solução semi-analítica composta de duas partes: a solução exata da parte advectiva é obtida pelo método das características e a dispersão tratada através de análise de perturbação, considerando que a espessura da zona de mistura é pequena em relação ao deslocamento da frente. Assim, a advecção é primeiro determinada, ou seja, a posição da frente de avanço da contaminação, e o efeito da dispersão é adicionado por superposição. Os casos de fluxo transiente são descritos com base na solução semi-analítica de Philip (1974).

No desenvolvimento da solução numérica, as mesmas considerações feitas para o problema de fluxo são também válidas para a equação de transporte. Apesar desta equação não apresentar termos não-lineares, o que torna mais fácil a obtenção da solução, há outras dificuldades que serão discutidas abaixo. Utilizando diferenças finitas e atribuindo a variável ao nóculo entre as células, a discretização explícita da Eq. (2.22), considerando que

$D \approx \alpha_L \frac{q}{\phi \cdot S}$, resulta em:

$$\left(\frac{\phi_i \cdot R_i^{t+1} \cdot S_i^{t+1} \cdot C_i^{t+1} - \phi_i \cdot R_i^t \cdot S_i^t \cdot C_i^t}{\Delta t} \right) = \alpha_L \cdot \left[\frac{q_{i+1/2}^t}{\Delta z_i} \left(\frac{C_{i+1}^t - C_i^t}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{q_{i-1/2}^t}{\Delta z_i} \left(\frac{C_i^t - C_{i-1}^t}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{q_{i+1}^t \cdot C_{i+1}^t - q_{i-1}^t \cdot C_{i-1}^t}{z_{i+1} - z_{i-1}} \right) \quad (2.26)$$

onde $R_i^t = \left(1 + \frac{(1 - \phi_i)}{\phi_i \cdot S_i^t} \rho_s f_{oc} K_{oc} \right)$

Na Eq. (2.26), nota-se que a equação é explícita em C_i^{t+1} , já que todos os outros parâmetros (inclusive S_i^{t+1}) já foram obtidos no tempo anterior ou através do modelo de fluxo, podendo ser resolvida gradualmente, célula a célula. Como foi discutido para o fluxo, este esquema é apenas condicionalmente estável, sendo a escolha do espaçamento da malha e do incremento temporal limitada ao critério de estabilidade, mas reduz consideravelmente o tempo de execução e a quantidade de memória requerida. A seção de transporte do modelo HYDRUS inclui esta opção de esquema, além de outras. Outro exemplo de modelo de transporte que utiliza o esquema explícito é MT3D (Zheng, 1990), modelo tridimensional em meio saturado da U.S.EPA.

O esquema implícito, escolha da maioria dos modelos unidimensionais, entre os quais 3DLEWASTE, VS2DT, CHEMFLO e HYDRUS (além dos esquemas explícito e implícito, HYDRUS também permite a escolha de Crank-Nicholson), implica na solução do sistema tridiagonal de equações lineares dado por:

$$\left(\frac{\phi_i \cdot R_i^{t+1} \cdot S_i^{t+1} \cdot C_i^{t+1} - \phi_i \cdot R_i^t \cdot S_i^t \cdot C_i^t}{\Delta t} \right) = \alpha_L \left[\frac{q_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{q_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{C_i^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{q_{i+1}^{t+1} \cdot C_{i+1}^{t+1} - q_{i-1}^{t+1} \cdot C_{i-1}^{t+1}}{z_{i+1} - z_{i-1}} \right) \quad (2.27)$$

A solução numérica da equação de transporte enfrenta um problema adicional. Problemas advectivos, ou mesmo aqueles advectivos-dispersivos mas com pequeno grau de dispersão, não são bem descritos por métodos numéricos baseados em um sistema de coordenadas fixas ou Euleriana, como é o caso da Eq (2.22). A solução numérica para o problema advectivo é vulnerável a dois tipos de problemas numéricos, dispersão numérica e oscilações artificiais, como resultantes da dificuldade dos métodos numéricos em descrever mudanças abruptas no valor da variável (Bear e Verruijt, 1987; Zheng, 1990; Yeh et al., 1992).

Estes efeitos são decorrentes dos erros associados à aproximação das derivadas de primeira ordem. Dependendo do esquema utilizado, a discretização de ambas derivadas espacial e temporal pode produzir erros da ordem de grandeza da segunda derivada, que são anexados ao termo de fluxo dispersivo. Com relação ao erro de truncamento da discretização da derivada espacial, este pode ser evitado utilizando-se um esquema de discretização espacial central, cujo erro de truncamento é da ordem da terceira derivada.

O efeito de dispersão numérica é análogo ao do processo físico de dispersão hidrodinâmica; em casos onde a dispersão física é grande, a dispersão numérica é normalmente coberta pela dispersão física e não introduz erros representativos à solução. Entretanto, quando a dispersão hidrodinâmica é pequena, a dispersão numérica produz uma suavização irreal da frente de avanço do contaminante, como mostra a Figura 2.2. As oscilações numéricas se apresentam como elevações e rebaixamentos da solução em torno da solução exata e são comuns em problemas envolvendo frentes de contaminante abruptas (Figura 2.2).

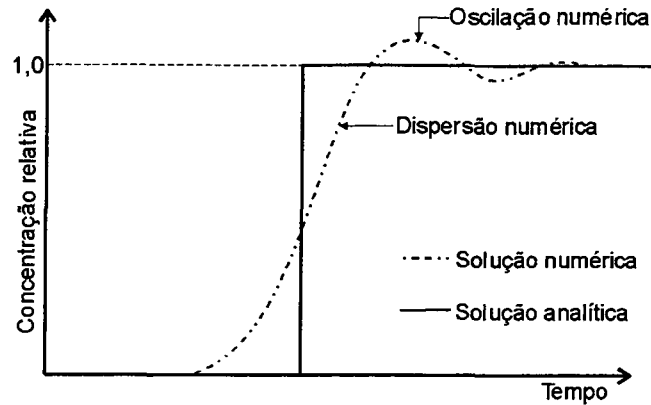


Figura 2.2 – Representação dos efeitos de dispersão e oscilações numéricas em um problema advectivo.

O número adimensional Peclet (Pe), descrito como a razão entre os efeitos advectivo e dispersivo (Eq. (2.28)), fornece uma idéia da importância relativa da advecção em um problema específico. Quanto maior for o Pe , mais advectivo é o problema e, conseqüentemente, mais sujeito a problemas numéricos; casos puramente advectivos apresentam Pe infinito. Huyakorn e Pinder (1983) apud Simunek et al. (1998) afirmam que a dispersão numérica torna-se desprezível ao se escolher incrementos espaciais de forma que $Pe \leq 2$ a 10.

$$Pe = \frac{v \cdot \Delta z}{D} \quad (2.28)$$

onde v é velocidade linear, Δz é comprimento da célula e D é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica. Nos casos onde o coeficiente de difusão molecular é desprezível (meios aquosos), o coeficiente de dispersão hidrodinâmica reduz-se a $D \approx D_d = \alpha_L \cdot v$ e $Pe = \Delta z / \alpha_L$.

Outro número adimensional que fornece informações sobre problemas numéricos associados à simulação de transporte advectivo-dispersivo é o número de Courant (Cr) (Eq.(2.29)), sendo este índice associado com a discretização temporal.

$$Cr = \frac{q \cdot \Delta t}{\phi \cdot S \cdot R \cdot \Delta z} \quad (2.29)$$

onde q refere-se à velocidade de Darcy.

Perrochet e Berod (1993) apud Simunek et al. (1998) trazem um critério para minimizar problemas numéricos que considera os números Peclet e Courant:

$$Pe.Cr \leq \varepsilon \quad (2.30)$$

onde ε é um índice de performance do critério. Segundo os autores, este critério pode ser utilizado na escolha de Δt de modo a reduzir Cr e satisfazer a Eq. (2.30), tomando-se $\varepsilon \leq 2-10$.

A única forma exata de prever a posição da frente do contaminante é através do uso de um sistema de coordenadas móveis ou Lagrangiano, com solução através do método das características, devendo esta ser a escolha mais apropriada para problemas puramente advectivos ou com forte predominância advectiva. Normalmente, apenas o termo advectivo é descrito neste sistema de coordenadas, constituindo o chamado método Euleriano-Lagrangiano misto ou híbrido. Esse método é praticamente livre de dispersão numérica mas pode ser bastante lento e requerer uma grande quantidade de memória, especialmente em casos multidimensionais. Além disso, certos problemas podem apresentar grandes erros de balanço de massa, uma vez que esse método não é totalmente baseado no princípio de conservação de massa. Maiores detalhes sobre esse método pode ser obtido nos manuais de LEWASTE (Yeh et al., 1992) e do modelo de transporte saturado MT3D (Zheng, 1990) que empregam essa aproximação.

Ao se utilizar métodos baseados no sistema Euleriano, duas possibilidades se apresentam para minimizar os problemas numéricos relativos a casos de transporte com forte componente advectiva. A primeira delas refere-se à escolha dos incrementos espacial e temporal de modo a satisfazer os critérios de $Pe \leq 2$ e $Pe.Cr \leq 2$ (considerando os critérios mais restritivos), de forma a satisfazer ambos os critérios para o número Peclet e a Eq. (2.30). Neste caso, a estratégia baseia-se em reduzir os números Peclet e Courant através da escolha do tamanho dos incrementos utilizados na discretização.

Outra possível estratégia para reduzir os efeitos da dispersão numérica é corrigir o valor do coeficiente de dispersão a partir de uma estimativa da dispersão artificial adicionada pelo esquema de discretização utilizado. A demonstração da forma de estimar a dispersividade artificial pode ser encontrada em Bear e Verruijt (1987). O erro de truncamento da discretização da derivada do fluxo advectivo pode ser evitado ao se utilizar o esquema de discretização central ou pode ser corrigido ao se utilizar outros esquemas (progressivo e regressivo). Quanto à discretização temporal, cujo erro de truncamento é inevitável, a correção da dispersão artificial é muito utilizada nos modelos de transporte. Os modelos HYDRUS e CHEMFLO utilizam a correlação desenvolvida por van Genuchten (1978) apud Simunek et al (1998) e apud Nofziger et al. (1989), para elementos finitos e esquemas implícito e explícito. O coeficiente de dispersão hidrodinâmica corrigido, neste caso, torna-se:

$$\begin{aligned}
D^{t+1} &= D - \frac{q^2 \cdot \Delta t}{6 \cdot \theta^2 \cdot R} \\
D^t &= D + \frac{q^2 \cdot \Delta t}{6 \cdot \theta^2 \cdot R}
\end{aligned}
\tag{2.31}$$

onde θ é o conteúdo volumétrico da fase aquosa e D^{t+1} e D^t referem-se aos coeficientes de dispersão corrigidos para os esquemas implícito e explícito, respectivamente.

2.4. Implementação do modelo de fluxo e transporte unidimensional

As equações unidimensionais de fluxo não-saturado e transporte advectivo-dispersivo em zona não-saturada (Eq. (2.3) e (2.22), respectivamente) foram implementadas numericamente utilizando o método de diferenças finitas. Na discretização de ambas equações, utilizou-se o esquema implícito para as derivadas temporais e termos não-lineares. As derivadas espaciais foram resolvidas aplicando-se as variáveis nos nódulos entre as células.

Para o fluxo, escolheu-se a forma mista da equação de Richard devido ao seu bom resultado na conservação do balanço de massa e por sua versatilidade. Os termos de condutividade foram avaliados no centro das células, utilizando a média aritmética dos valores de cada nódulo. A Eq. (2.32) abaixo foi implementada, descrevendo o fluxo unidimensional (vertical), em meio poroso heterogêneo.

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\phi_i \cdot S_i^{t+1} - \phi_i \cdot S_i^t}{\Delta t} \right) &= \left[\frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{h_{i+1}^{t+1} - h_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{h_i^{t+1} - h_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] \\
&\quad - \left(\frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1} - K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \right)
\end{aligned}
\tag{2.32}$$

onde $\Delta z_i = (z_{i+1} - z_{i-1})/2$.

Os termos não-lineares da equação de fluxo foram avaliados utilizando o método Picard, aliado ao método proposto em Celia et al. (1990). Os resultados obtidos no fim de cada iteração são comparados com os valores da iteração anterior, sendo o ciclo repetido até que a diferença entre os valores de carga de pressão entre duas iterações sucessivas sejam inferiores a um erro preestabelecido. Além disso, utiliza-se também o critério de que o balanço de massa deva ser inferior a um erro aceito.

A Eq. (2.32), aplicada a Picard e a metodologia descrita em (2.16) e (2.17), fornece o sistema de equações lineares em termos das incógnitas $h_{i-1}^{t+1,k+1}$, $h_i^{t+1,k+1}$ e $h_{i+1}^{t+1,k+1}$, descrito pela Eq. (2.33). Este sistema é tridiagonal, sendo de fácil solução por decomposição LU ("Lower-Upper") (Press et al., 1992).

$$\begin{aligned} & \left(-\frac{K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1,k}}{\Delta z_i \cdot (z_i - z_{i-1})} \right) h_{i-1}^{t+1,k+1} + \\ & \left(\frac{K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1,k}}{\Delta z_i \cdot (z_i - z_{i-1})} + \frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1,k}}{\Delta z_i \cdot (z_{i+1} - z_i)} + \frac{\phi_i \cdot Cp_i^{t+1,k}}{dt} \right) h_i^{t+1,k+1} + \\ & \left(-\frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1,k}}{\Delta z_i \cdot (z_{i+1} - z_i)} \right) h_{i+1}^{t+1,k+1} = - \left(\frac{K_{i+1/2} \cdot kr_{i+1/2}^{t+1,k} - K_{i-1/2} \cdot kr_{i-1/2}^{t+1,k}}{\Delta z_i} \right) \\ & \quad + \left(\frac{\phi_i \cdot S_i^{t+1,k} - \phi_i \cdot S_i^t}{\Delta t} \right) + \frac{\phi_i \cdot Cp_i^{t+1,k} \cdot h_i^{t+1,k}}{dt} \end{aligned} \quad (2.33)$$

Os valores $S(z,t)$ foram obtidos através da relação de van Genuchten (Eq. (2.7)) e $k_r(z,t)$ foram obtidos através de Van Genuchten aplicado a Mualem (Eq. (2.9)). A equação de fluxo foi submetida às condições de contorno no topo do solo de carga fixa e de fluxo especificado (taxa de precipitação constante) e de carga fixa no limite com o aquífero freático. O limite entre as camadas de diferentes solos foi computado através da continuidade da função de carga de pressão, sendo $S_{i,soloK}^t$ e $kr_{i,soloK}^t$ obtidos com os parâmetros de van Genuchten para cada solo específico.

Após a equação de fluxo ter sido resolvida, a função $h(z,t)$, bem como os valores atualizados de $kr(z,t)$, foram utilizados para gerar-se os valores das descargas específicas da fase aquosa ($q(z,t)$) através da equação de Darcy discretizada:

$$q_i^t = -K_i \cdot kr_i^t \left[\left(\frac{h_{i+1}^t - h_{i-1}^t}{z_{i+1} - z_{i-1}} \right) - 1 \right] \quad (2.34)$$

Os valores de $S(z,t)$ e $q(z,t)$ obtidos através da solução da equação de fluxo foram aplicados à equação de transporte discretizada (Eq. (2.35)), que descreve o transporte advectivo-dispersivo, com adsorção dada pela isoterma linear de Freundlich. Esta equação deriva da Eq. (2.27) tendo sido modificada para permitir que se introduza a compensação da dispersão numérica. Com relação ao termo advectivo, outra modificação foi introduzida com o objetivo de buscar uma melhor descrição da pluma. Neste caso, os fluxos advectivos foram avaliados entre as células, ao invés de se utilizar o esquema central tradicional.

$$\left(\frac{\phi_i \cdot R_i^{t+1} \cdot S_i^{t+1} \cdot C_i^{t+1} - \phi_i \cdot R_i^t \cdot S_i^t \cdot C_i^t}{\Delta t} \right) = \left[\frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{C_{i+1}^{t+1} - C_i^{t+1}}{z_{i+1} - z_i} \right) - \frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \left(\frac{C_i^{t+1} - C_{i-1}^{t+1}}{z_i - z_{i-1}} \right) \right] - \left(\frac{q_{i+1/2}^{t+1} \cdot C_{i+1/2}^{t+1} - q_{i-1/2}^{t+1} \cdot C_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i} \right) \quad (2.35)$$

onde $\bar{D}_{i\pm 1/2}^{t+1} = (\phi_i \cdot S_i \cdot Dc_i^{t+1} + \phi_{i\pm 1} \cdot S_{i\pm 1} \cdot Dc_{i\pm 1}^{t+1})/2$ e Dc_i^{t+1} é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica corrigido.

Os termos do fluxo advectivo $q_{i\pm 1/2}^{t+1}$ e $C_{i\pm 1/2}^{t+1}$ são as médias aritméticas das variáveis, sendo avaliados como:

$$q_{i\pm 1/2}^{t+1} = (q_i^{t+1} + q_{i\pm 1}^{t+1})/2$$

$$C_{i\pm 1/2}^{t+1} = (C_i^{t+1} + C_{i\pm 1}^{t+1})/2$$

A Eq. (2.35) é linear e pode ser colocada da forma de um sistema tridiagonal de equações (Eq.(2.36)) e resolvida por decomposição LU.

$$\left(-\frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_i - z_{i-1})} - \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_i^{t+1} + q_{i-1}^{t+1})}{\Delta z_i} \right) \cdot C_{i-1}^{t+1} + \left(\begin{aligned} & + \frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_{i+1} - z_i)} + \frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_i - z_{i-1})} \\ & - \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_i^{t+1} + q_{i-1}^{t+1})}{\Delta z_i} + \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_{i+1}^{t+1} + q_i^{t+1})}{\Delta z_i} + \frac{\phi_i \cdot R_i^{t+1} \cdot S_i^{t+1}}{\Delta t} \end{aligned} \right) \cdot C_i^{t+1} + \left(-\frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_{i+1} - z_i)} + \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_{i+1}^{t+1} + q_i^{t+1})}{\Delta z_i} \right) \cdot C_{i+1}^{t+1} = \left(\frac{\phi_i \cdot R_i^t \cdot S_i^t \cdot C_i^t}{\Delta t} \right) \quad (2.36)$$

A esse sistema de equações foram adicionadas as condições de contorno para o topo e fundo do domínio (topo do solo e freático, respectivamente). Para este estudo, utilizaram-se condições de contorno de concentração fixa para as duas extremidades. Embora a Eq. (2.36) simule apenas os processos de advecção, dispersão e adsorção linear, a estrutura do programa permite que outros processos, tais como outras formas de adsorção, dissolução e biodegração, sejam facilmente adicionados.

Introduziu-se um fator de correção ao coeficiente de dispersão para atenuar problemas de oscilação e dispersão numéricas possíveis de ocorrer ao se simular casos onde o fluxo advectivo é predominante. Seguindo-se a metodologia descrita em Bear e Verruijt (1987), a dispersão artificial para o ponto i , em t , adicionada ao sistema devido ao erro de truncamento

da discretização implícita da derivada temporal, pode ser estimada pelo coeficiente de dispersão artificial dado por:

$$(D_{artif.})_i^t = \frac{1}{2} \Delta t \frac{(q_i^t)^2}{(\phi_i \cdot S_i^t)^2} \quad (2.37)$$

O coeficiente de dispersão corrigido Dc_i^t , para o ponto i , em t , é:

$$Dc_i^t = D_i^t - (D_{artif.})_i^t = D_m + \alpha_L \cdot \frac{q_i^t}{\phi_i \cdot S_i^t} - \frac{1}{2} \Delta t \cdot \frac{(q_i^t)^2}{(\phi_i \cdot S_i^t)^2} \quad (2.38)$$

Como a discretização espacial do termo advectivo foi conduzida utilizando-se um tipo de esquema central (Eq.(2.35)), este termo não adiciona dispersão artificial ao sistema.

2.5. Simulações de casos de fluxo e transporte unidimensionais

As equações de fluxo e transporte unidimensionais discretizadas foram implementadas em linguagem FORTRAN 90, gerando o modelo denominado FT1D (Fluxo e Transporte Unidimensionais). O modelo desenvolvido foi testado através da comparação com modelos análogos tradicionalmente utilizados. Nos testes, utilizou-se o modelo unidimensional em elementos finitos HYDRUS 5.0 (Vogel et al., 1996) e o modelo tridimensional FEMWATER (fluxo) / LEWASTE (transporte), também em elementos finitos, da U.S. EPA (Yeh et al., 1992).

A Tabela 2.1 mostra os valores para os parâmetros dos solos utilizados nas simulações realizadas e a Figura 2.3 traz a representação gráfica das curvas de retenção para os três solos. A Tabela 2.2 descreve as condições utilizadas em cada um dos quatro casos simulados, onde L é a espessura da zona não-saturada, C.I. é a condição inicial, C.C. TOPO é a condição de contorno no topo do domínio, C.C. FUNDO é a condição de contorno inferior do domínio e os índices (F) e (T) referem-se a fluxo e transporte, respectivamente.

Tabela 2.1 – Valores dos parâmetros de solos utilizados nas simulações.

Variável	Solo 1	Solo 2	Solo 3
Tipo	Areia	Areia	Silte-argiloso
ϕ	0,368	0,39	0,42
α^*	0,0335 cm ⁻¹	0,059 cm ⁻¹	0,0004 cm ⁻¹
n	2,0	1,48	1,65
S _r	0,2772	0,1	0,0357
K	0,5532 cm/min	1,3 cm/h	0,972 cm/h

* $S_m=1$ para os três solos.

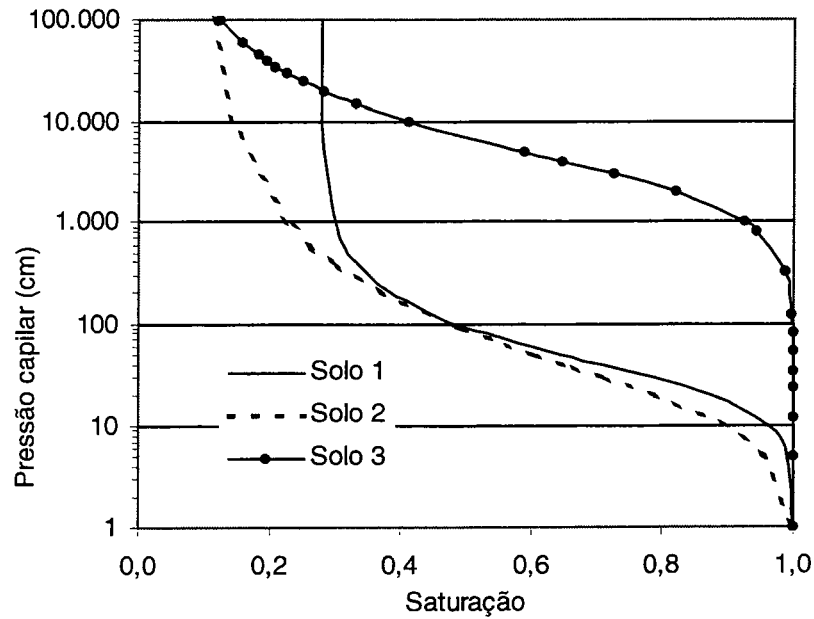


Figura 2.3 – Curvas de retenção para os solos 1, 2 e 3 descritos na Tabela 2.1.

Tabela 2.2 – Condições de simulação para os casos analisados.

Variável	Caso 1	Caso 2	Caso 3	Caso 4
Solo	Solo 1	Solo 1	Solo 2	Solo 3 / Solo 1
L	200 cm	200 cm	200 cm	20 / 80 cm
C. I. (F)	-200 cm	-1000 cm	Equilíbrio	-10 cm
C.C. Topo (F)	0,02 cm/min	-10 cm	0,2 cm/h	0,0 cm/min
C.C. Fundo (F)	-200 cm	-1000 cm	0,0 cm	-50 cm
C. I. (T)	0,0 g/ml	-	0,0 g/ml	-
C.C. Topo (T)	1,0 g/ml	-	1,0 g/ml	-
C.C. Fundo (T)	0,0 g/ml	-	0,0 g/ml	-
Δz	1 cm	1 cm	1 cm	1 cm
Δt	1 min	1 min	1 min	1 min

O Caso 1 simula a aplicação de uma taxa de precipitação de 0,02 cm/min em um solo arenoso inicialmente bastante seco ($h(z,0) = -200$ cm). Este problema constitui um dos mais difíceis para a simulação numérica devido à mudança abrupta no estado de umidade do meio. A simulação de casos como este expõe o modelo implementado às condições mais desfavoráveis do ponto de vista numérico, sendo importante na fase de verificação para aumentar a confiança no modelo que se está testando.

A Figura 2.4 mostra os resultados da simulação de fluxo (carga de pressão) para este caso, utilizando os modelos FT1D e HYDRUS, para 200 e 500 minutos de simulação. A infiltração do Caso 1 foi acompanhada pela imposição de uma concentração unitária próxima à superfície do solo, utilizando dispersividade de 10 cm, sendo o perfil de avanço da frente de contaminação mostrado na Figura 2.5.

A análise dessas figuras demonstra a boa concordância entre os resultados obtidos pelo modelo FT1D e o modelo HYDRUS na previsão da carga de pressão e do perfil de concentração. Na simulação de transporte de FT1D para este caso, utilizando uma dispersividade de 10 cm e o espaçamento da malha em 1 cm, o número de Peclet foi de 0,1, sendo, portanto, um caso alvo de baixa dispersão numérica.

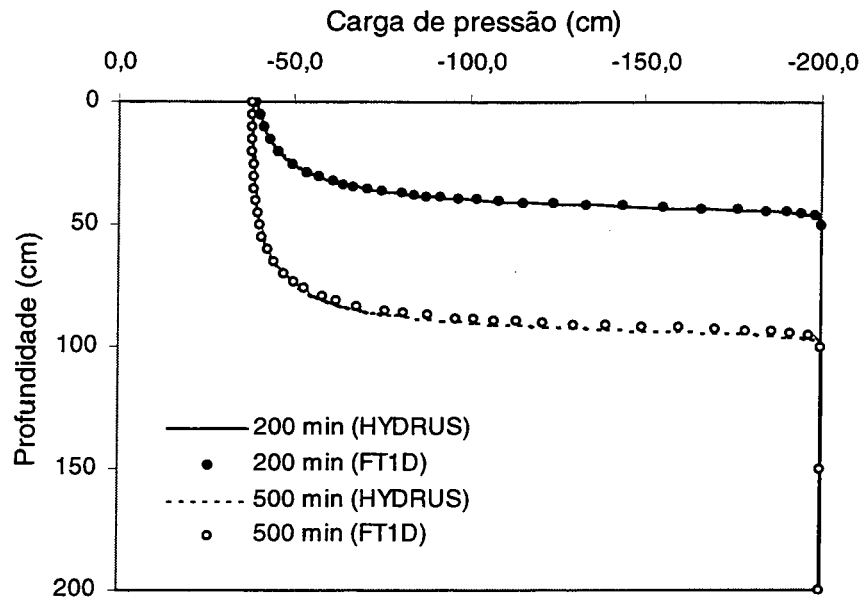


Figura 2.4 – Carga de pressão simulada para o Caso 1 com FT1D e HYDRUS.

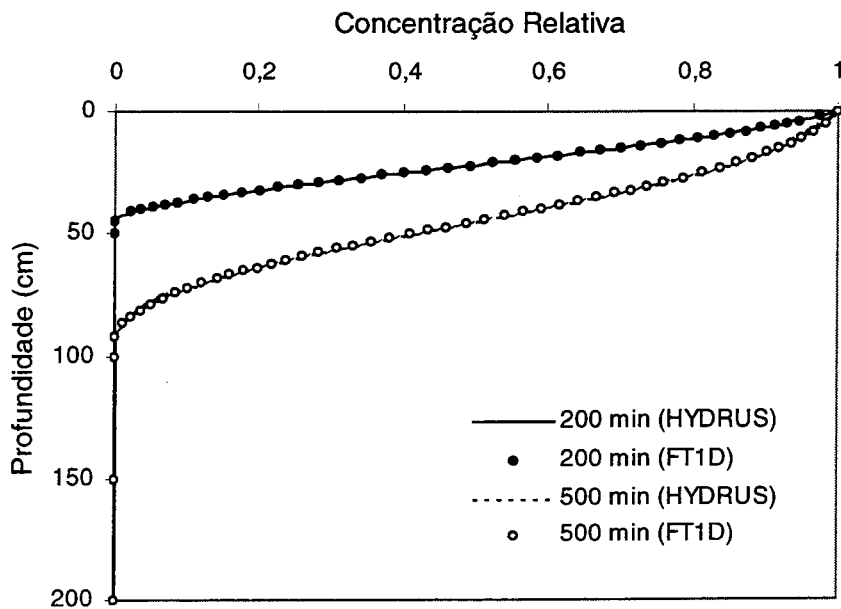


Figura 2.5 – Perfil de concentração simulado para o Caso 1 com FT1D e HYDRUS.

Para testar os limites do modelo FT1D quanto à dispersão numérica produzida e à eficácia do método de compensação utilizado, foram simulados casos com dispersividades de 10, 1, 0.5 e 0.1 cm, mantendo o espaçamento da malha fixo em 1 cm, atingindo valores de Peclet de 0.1, 1, 2 e 10. Esses casos foram comparados com a solução analítica do problema dispersivo-advectivo para domínio semi-infinito (Eq. 18.2, Domenico e Schwartz, 1997). O modelo FT1D foi modificado para utilizar saturação e velocidade de Darcy constantes. Uma saturação de 60% e descarga específica de 0,02 cm/min foram utilizadas, produzindo uma velocidade linear de 0,091 cm/min. A Figura 2.6 até a Figura 2.9 mostram os resultados dessas simulações, incluindo a dispersividade de 10 cm. Nestas simulações, o ponto de observação foi tomado a 5 cm do topo do domínio.

A Figura 2.6 e a Figura 2.7 mostram o bom desempenho de FT1D comparado com a solução analítica para dispersividades de 10 e 1 cm, podendo a dispersão numérica ser considerada nula. As demais figuras da série mostram situações onde a dispersão numérica começa a tornar-se visível (dispersividades 0,5 e 0,1 cm), sendo que a últimas delas representa uma situação em que os erros são consideráveis. Nestas figuras, a influência da dispersão e oscilações numéricas na resposta dos modelos pode ser observada, sendo cada vez maior com a redução da dispersividade.

Pode-se estimar o valor de Cr para os quatro casos ($Cr = 0,09$) considerando $S = 0,60$, $q = Q = 0,02$ cm/min e Δt igual a 1 min. O critério ($Pe.Cr$) foi estimado em 0,009, 0,09, 0,18 e 0,9, para os quatro casos, respectivamente. Portanto, com base no resultado obtido na Figura 2.9, pode-se concluir que é recomendável cautela ao simular-se casos com valores de Pe superiores a 2, mesmo que o critério $Pe.Cr \leq 2$ esteja sendo respeitado. Uma opção para estes casos é reduzir o valor de Δz para reduzir o valor de Pe .

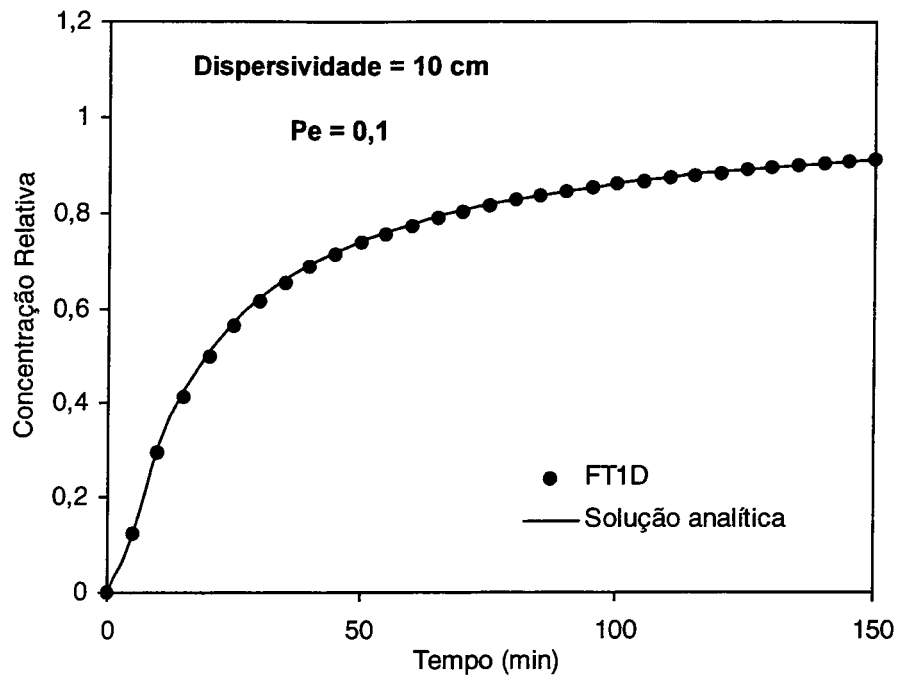


Figura 2.6 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 10 cm.

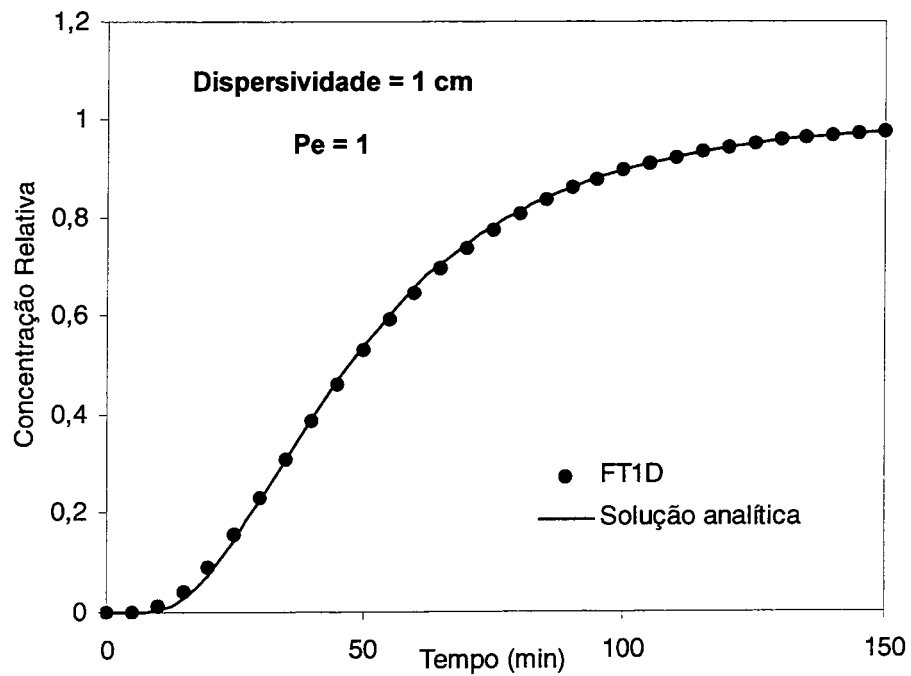


Figura 2.7 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 1 cm.

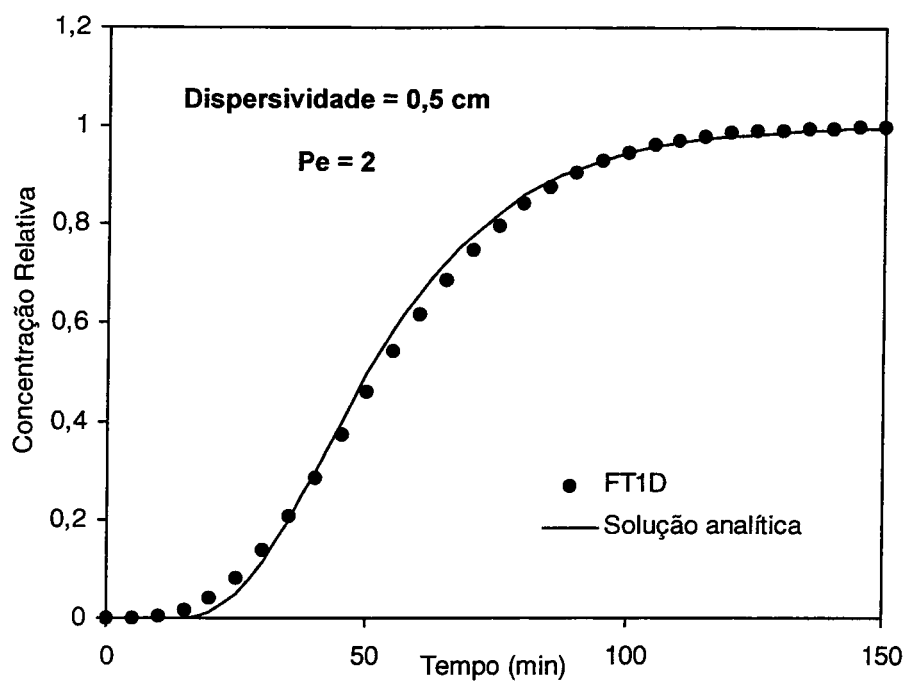


Figura 2.8 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 0,5 cm.

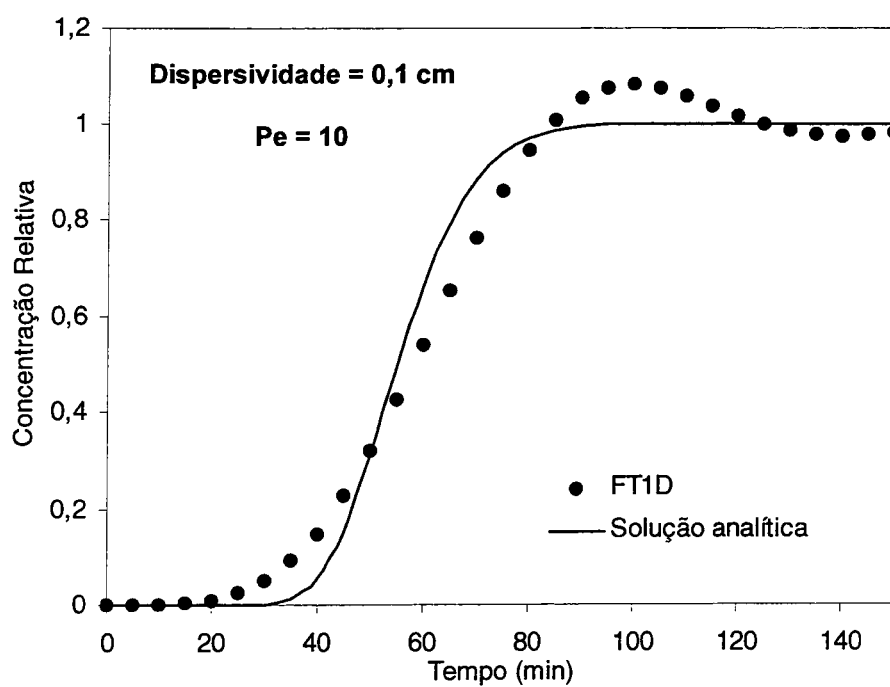


Figura 2.9 – Concentração versus tempo para o Caso 1 (S e v fixos) com α_L de 0,1 cm.

O Solo 1, descrito na Tabela 2.1 e utilizado na simulação do Caso 1, foi retirado de um exemplo de Celia et al. (1990), onde utiliza-se uma condição inicial de solo extremamente seca ($h(z,0) = -1000$ cm) e impõe-se uma condição Dirichlet no topo do solo de -75 cm. Simulou-se este caso com a condição de contorno ainda mais restritiva de -10 cm no topo 200 cm de solo (Caso 2), através de FT1D e de HYDRUS. Os resultados, para 50 e 150 minutos de simulação, são mostrados na Figura 2.10 para carga de pressão e na Figura 2.11 para a descarga específica. Novamente os resultados obtidos por FT1D estiveram de acordo com a simulação de HYDRUS.

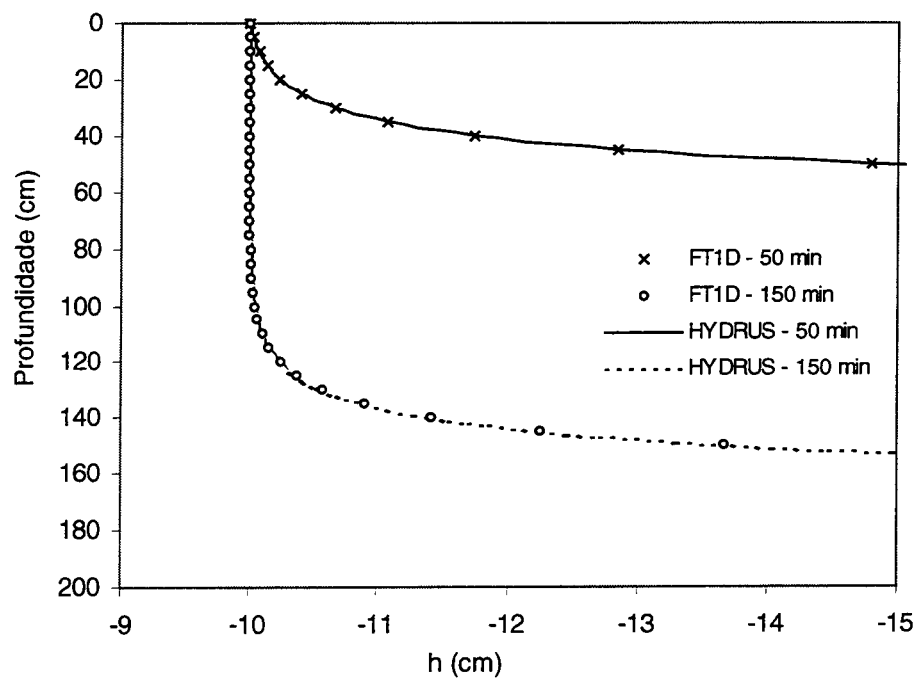


Figura 2.10 – Carga de pressão simulada (Caso 2) com condições dadas por Celia et al. (1990)

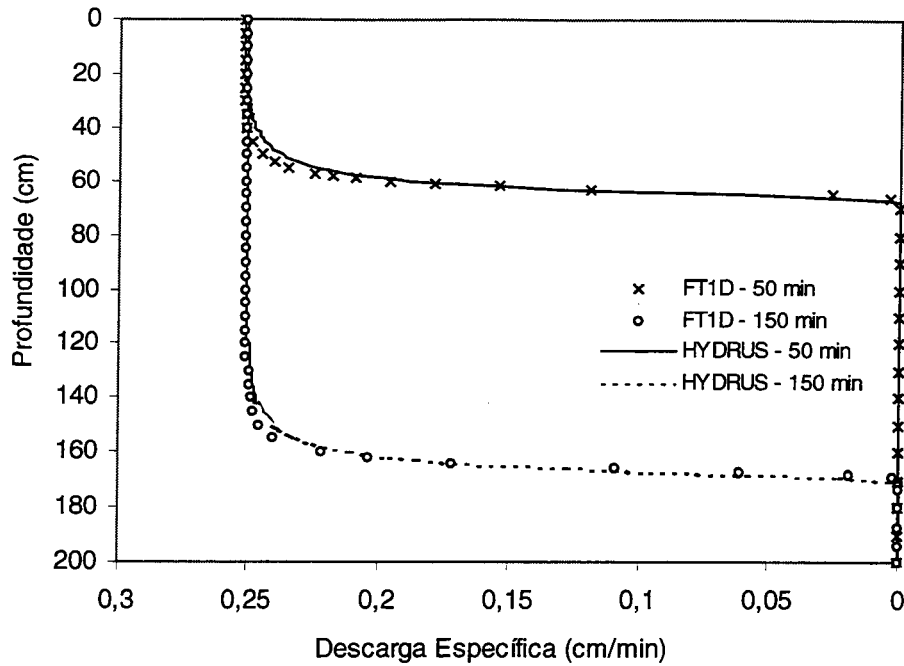


Figura 2.11 – Descarga específica (Caso 2), com condições dadas por Celia et al. (1990)

O Caso 3 simula a infiltração em uma zona não-saturada de 200 cm de profundidade que se encontra inicialmente com um perfil de umidade de equilíbrio. Uma taxa de precipitação de 0,2 cm/h é imposta no topo do solo, enquanto o topo do aquífero freático é mantido fixo no fim da zona não-saturada ($h(z = 200\text{cm}) = 0\text{cm}$). A Figura 2.12 e a Figura 2.13 mostram o avanço da frente de umidade após 72 h de infiltração, em termos da carga de pressão e saturação. A Figura 2.13 também traz a evolução da descarga específica da água infiltrante. Os resultados obtidos foram comparados com os obtidos através do modelo FEMWATER, sendo também mostrados nas figuras citadas acima.

Durante as 72 horas de infiltração, uma concentração unitária de um contaminante dissolvido foi imposta no topo da zona não-saturada. Os perfis verticais de concentrações do contaminante obtidos através da simulação com os modelos FT1D e LEWASTE são mostrados na Figura 2.14. A análise das figuras relativas ao Caso 3 mostra a boa concordância da estimativa do fluxo e transporte obtida através do modelo FT1D com a estimativa obtida com os modelos FEMWATER e LEWASTE.

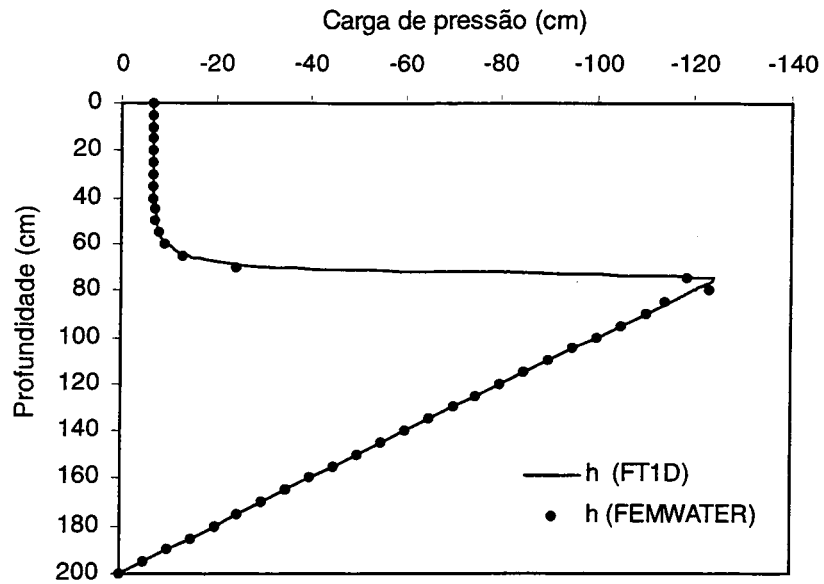


Figura 2.12 – Carga de pressão simulada no Caso 3 com FT1D e FEMWATER, após 72 h de simulação.

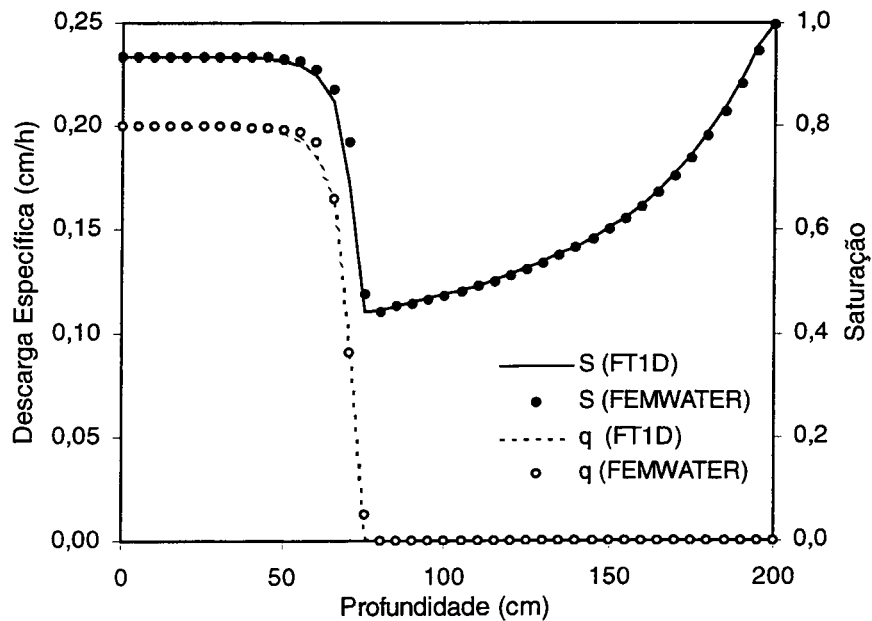


Figura 2.13 – Descarga específica e saturação da água simuladas para o Caso 3 com FT1D e FEMWATER, após 72 h de simulação.

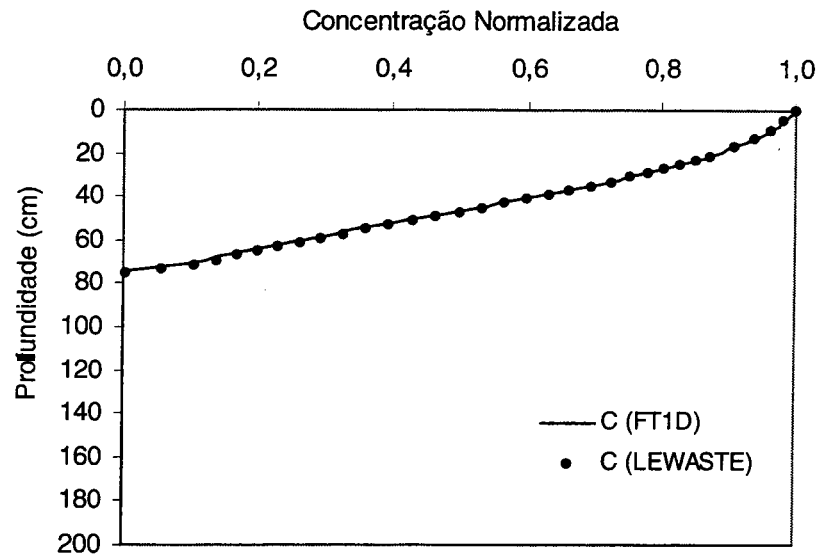


Figura 2.14 – Perfil de concentração simulado para o Caso 3 com FT1D e LEWASTE, após 72 h de simulação.

O Caso 4 simula a drenagem de um solo heterogêneo composto de uma camada superior de 20 cm do Solo 3 e uma camada mais profunda composta de 80 cm de Solo 1. A drenagem parte de uma carga de pressão uniforme de -10 cm, sendo o topo do solo submetido a fluxo nulo e a carga do fundo reduzida para -50 cm. A evolução do perfil de saturação ao longo da simulação é mostrada na Figura 2.15 (20 minutos), Figura 2.16 (100 minutos) e Figura 2.17 (1000 minutos), onde são também mostrados os resultados obtidos para o mesmo caso simulado no modelo HYDRUS.

A análise dessas figuras revela novamente a boa concordância dos resultados gerados pelo modelo FT1D com os obtidos a partir de HYDRUS para este caso de drenagem em solo heterogêneo. Pode-se observar também que o solo superior (Solo 3, silte-argiloso) apresenta grande dificuldade em drenar, só iniciando a desaturação após 1000 minutos de drenagem, enquanto o solo inferior (Solo 1, areia) drena com grande facilidade.

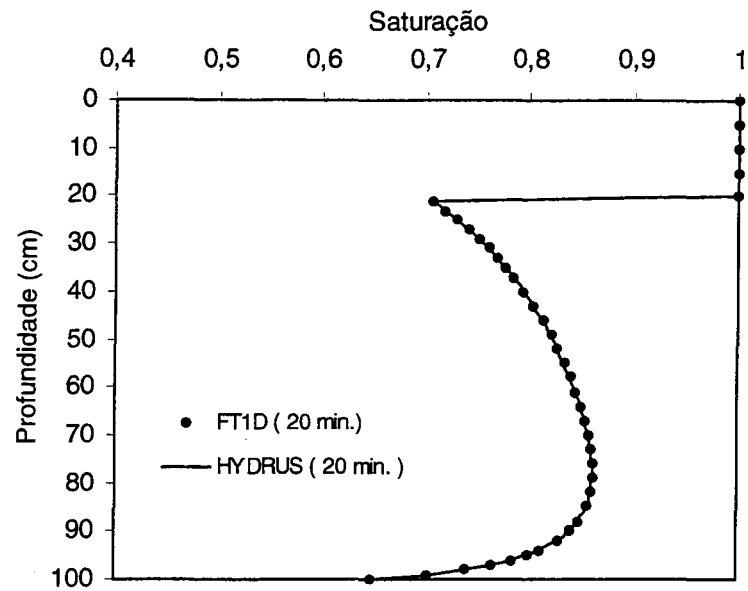


Figura 2.15 – Perfil de saturações para o Caso 4, a 20 min. de drenagem.

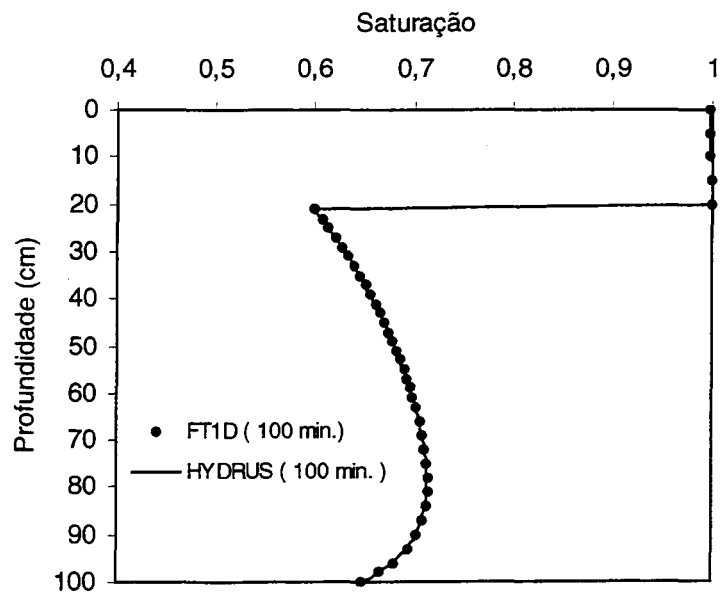


Figura 2.16 – Perfil de saturações para o Caso 4, a 100 min. de drenagem.

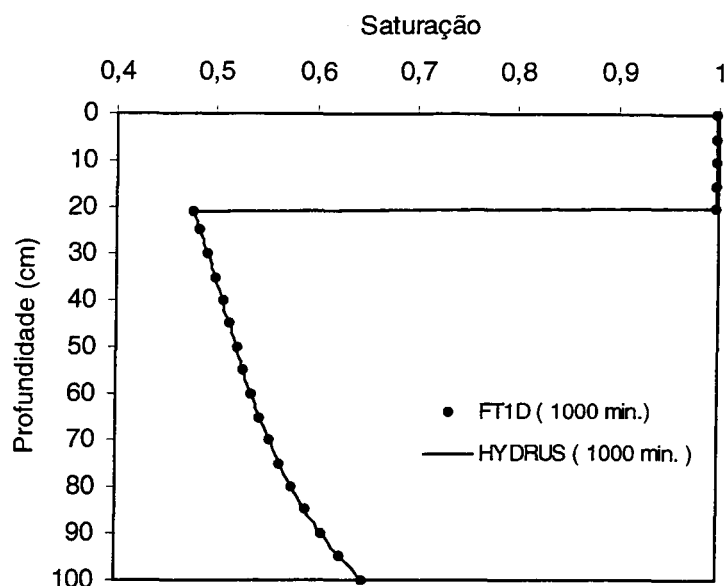


Figura 2.17 – Perfil de saturações para o Caso 4, a 1000 min. de drenagem.

2.6. Conclusões

Neste capítulo, as formas de solução das equações de fluxo e transporte não-saturados foram analisadas, sendo elaborado e implementado, em diferenças finitas, o modelo FT1D, que simula o fluxo e transporte advectivo-dispersivo com adsorção dada pela isoterma linear de Freundlich, para solo heterogêneo e não-saturado. O modelo FT1D utiliza discretização implícita para todos os termos, inclusive para os termos não-lineares. A linearização da equação de fluxo foi realizada pelo método Picard, sendo os sistemas de equações lineares tridiagonais, tanto de fluxo quanto de transporte, resolvidos por decomposição LU.

As principais considerações utilizadas no desenvolvimento da equação de fluxo são a incompressibilidade da água e a pressão atmosférica para o ar ao longo de todo o domínio. Também não se considerou efeitos de histerese nas curvas características dos solos, bem como a influência de macroporosidades. Com relação ao transporte, a partição com a fase gasosa foi desconsiderada, além de outras reações tais como biodegradação e dissolução de fase imiscível.

O modelo foi avaliado através da simulação de fluxo e transporte de quatro casos diversos, sendo os resultados comparados com dois modelos numéricos similares (HYDRUS e FEMWATER/LEWASTE), desenvolvidos em elementos finitos. Em todos os casos simulados, os resultados foram bastante satisfatórios, tanto com relação à carga de pressão calculada, quanto com relação à saturação e descarga específica. Entretanto, é necessário acrescentar que o modelo não foi ainda validado contra dados experimentais, tendo sido, portanto, apenas parcialmente validado.

A evolução do perfil de concentrações também mostrou-se comparável aos simulados através dos outros modelos. Devido ao uso do sistema Euleriano na descrição do fluxo advectivo, o modelo FT1D apresenta dispersão numérica para simulações com Peclet superiores a 2, devendo-se utilizar os critérios $Pe \leq 2$ e $Pe.Cr \leq 2$ para se evitar este problema. A vantagem do modelo FT1D é o reduzido tempo de execução em relação a modelos que se utilizam do sistema Lagrangiano.

Conclui-se que o modelo desenvolvido atingiu os objetivos propostos, ou seja, mostrou-se um programa de baixo tempo de execução, robusto e confiável. Este modelo será a base das atividades desenvolvidas no capítulo seguinte, onde será utilizado na avaliação da importância do fluxo transiente para o transporte na zona não-saturada.

3. EFEITO DO REGIME DE FLUXO NA SIMULAÇÃO DE TRANSPORTE EM ZONA NÃO-SATURADA

3.1. Introdução

Este capítulo desenvolve uma análise quali-quantitativa do efeito de considerar fluxo permanente na zona não-saturada durante a simulação do transporte de contaminante dissolvido na fase aquosa. O principal objetivo é avaliar o grau de sensibilidade do modelo de transporte à entrada proveniente do modelo de fluxo, comparando-se a previsão de transporte obtida com o modelo de fluxo simulando o regime transiente com a obtida através dos métodos que consideram fluxo permanente.

Como essa sensibilidade pode ser mais ou menos pronunciada de acordo com as condições da simulação, faixas de valores dos parâmetros do modelo de fluxo são pesquisados, bem como os efeitos das inter-relações entre os parâmetros, a fim de se obter tendências que delimitem a aplicabilidade ou não da simplificação do fluxo permanente na simulação do transporte.

Adicionalmente, avaliam-se as vantagens e desvantagens computacionais das diferentes formas de obtenção do fluxo permanente. Aborda-se também o uso da técnica de análise fatorial como ferramenta de análise de sensibilidade da influência dos parâmetros do modelo de fluxo na adequação do uso da consideração do fluxo permanente.

3.2. Revisão Bibliográfica

A simulação computacional do transporte de contaminantes dissolvidos em fase aquosa na zona não-saturada sempre se depara com uma primeira dificuldade: a descrição do fluxo não-saturado. De uma maneira geral, o transporte que ocorre em áreas não-saturadas não se diferencia consideravelmente do transporte em zona saturada. Entretanto, é necessário introduzir certos fatores na formulação das equações que farão a correção para o estado real de umidade do solo. Esses fatores, essencialmente as funções temporais e espaciais de saturação e descarga específica do fluxo aquoso, estão relacionados com a forma que o fluxo da fase aquosa se dá nas condições particulares do solo em estudo.

Assim, para se obter o grau de saturação do solo e a descarga específica em função da posição e do tempo, é preciso simular-se também a evolução da fase aquosa no solo. No

entanto, dentro da hidrogeologia, a equação de fluxo não-saturado é uma das mais complicadas de se resolver. Ela não só exige o conhecimento do valor de múltiplos parâmetros, quanto apresenta não-linearidades difíceis de serem contornadas. Além disso, a solução numérica dessa equação está sujeita a vários problemas de instabilidade e convergência, que podem necessitar de grandes períodos de cálculos computacionais para serem solucionados.

Por todos esses motivos, os modelos de transporte não-saturado buscam simplificar a solução do problema através do uso de uma única distribuição espacial de saturações e velocidades para todo o tempo de simulação do transporte. Assim, além de não ser necessário simular o fluxo durante todo o tempo de simulação, também economiza-se o tempo computacional utilizado no armazenamento e leitura dos dados de fluxo ao longo do tempo, bem como o espaço de memória que seria utilizado. No entanto, o avanço da frente de contaminante simulada desta forma é diferente da simulada utilizando a solução de fluxo transiente, principalmente nos casos onde a perturbação de fluxo do meio não-saturado é grande e gera um estado final da simulação de fluxo bastante diferente do estado inicial.

A diferença das duas abordagens para um caso de infiltração em solo homogêneo é exemplificada na Figura 3.1, que mostra curvas (teóricas) de concentração relativa versus tempo (curvas de chegada ou curvas “breakthrough”) para uma determinada profundidade produzidas através da abordagem de fluxo transiente e de fluxo permanente. Observa-se que o contaminante começa a surgir no ponto de observação em um tempo inferior (t_p) com o uso do fluxo permanente do que na simulação utilizando o fluxo transiente (t_T). Este comportamento reflete o uso de saturações e descargas específicas maiores no início da simulação de transporte com fluxo permanente. Como a área abaixo das curvas é proporcional à massa de contaminante que passa pelo ponto de observação até determinado tempo de simulação, a diferença entre as áreas das curvas fornece um indicativo do erro introduzido pelo uso da consideração de fluxo estacionário na simulação de transporte.

Para obter-se a função espacial de saturação e descarga específica do fluxo, constantes no tempo, dois caminhos são utilizados: obter a solução permanente do fluxo não-saturado ou introduzir uma distribuição de umidade mais ou menos arbitrária, podendo ser utilizado um valor único de saturação e descarga específica para todo o perfil do solo. Os modelos de fluxo e transporte HYDRUS (Vogel et al., 1996) e 3DFEMWATER / 3DLEWASTE (Yeh et al., 1992), já descritos no capítulo anterior, apresentam opção para cálculo do perfil de fluxo permanente.

A segunda abordagem é adotada no modelo de lixiviação na zona não-saturada VLEACH (Ravi e Johnson, 1990), onde o usuário deve introduzir um valor de saturação e de fluxo para toda a espessura da zona não-saturada. Com relação a este tipo de abordagem, uma ressalva deve ser feita. Wilson e Gelhar (1981) observam que, enquanto a dispersão tende a aumentar o comprimento de um pulso de contaminante, suavizando seu pico, a existência de um perfil não-uniforme de umidade tem efeito contrário. Assim, ao se utilizar um valor uniforme de saturação para todo o solo, podem-se obter respostas de concentrações subestimadas.

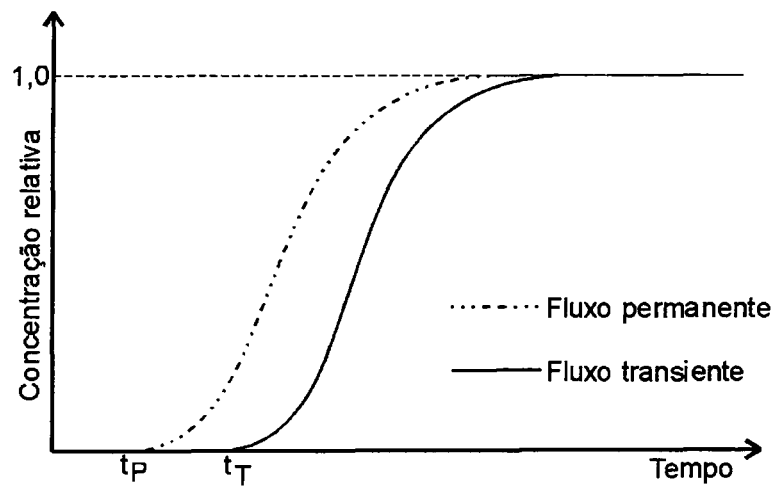


Figura 3.1 – Curvas “breakthrough” simuladas a partir de fluxo transiente e de fluxo permanente.

Ao utilizar esta simplificação, os modelos de transporte justificam que o fluxo alcança o regime de equilíbrio mais rápido do que o contaminante que está sendo transportado dissolvido neste fluxo. Esse fato é também citado por Wilson e Gelhar (1981) ao observar que a frente de umidade avança mais rapidamente do que a correspondente frente do contaminante, independentemente de qualquer retardo que possa estar interferindo no transporte. Segundo os autores deste trabalho, enquanto o contaminante move-se conforme a velocidade média do fluxo aquoso, a água move-se também sob a influência da capilaridade, obtendo, com isso, maior mobilidade. Entretanto, nenhuma das fontes consultadas estabelece as limitações para esse comportamento, nem a influência que o fluxo transiente exerce sobre o transporte, mesmo quando o fluxo permanece transiente por longos períodos de tempo.

Normalmente, a solução de fluxo permanente é obtida a partir da equação de fluxo não-saturado, suprimindo-se a derivada temporal. Partindo da equação de Richards na forma mista (Eq. (2.3), Item 2.2.1), obtém-se:

$$\frac{\partial}{\partial z} \left(K \cdot k_r \left(\frac{\partial h}{\partial z} - 1 \right) \right) = 0 \quad (3.1)$$

A solução numérica da Eq. (3.1) pode não ser convergente, tal como adverte o manual do modelo FEMWATER (Yeh et al., 1992). De fato, se a condição inicial estabelecida for muito diferente da condição final permanente, o ciclo iterativo que realiza a linearização das permeabilidades relativas pode divergir. Neste caso, outro tipo de estratégia pode ser utilizada para se obter a solução permanente: a aproximação pela extensão da simulação transiente até se atingir o estado estacionário. Resta avaliar se o tempo de execução gasto para se atingir essa aproximação não supera o tempo necessário para a simulação transiente.

3.3. Metodologia

O modelo de fluxo e transporte FT1D, apresentado e validado no Capítulo 2, foi modificado para introduzir o cálculo de fluxo em estado permanente, tendo sido simulado através de três métodos: direto, por aproximação e com saturação e descarga específica fixas. No método direto, o termo de variação do armazenamento na equação de fluxo é igualado a zero, gerando a Eq. (3.1). Com isso, o primeiro período de simulação leva ao resultado do fluxo permanente.

O segundo método utilizado visa obter a solução de fluxo permanente através da simulação transiente, sendo esta estendida o suficiente para que o termo de armazenamento não mais varie com o tempo. Neste caso, o critério de finalização da simulação foi estipulado como sendo

$$\phi \cdot \left(\frac{S_i^{t+1} - S_i^t}{\Delta t} \right) < \varepsilon \quad (3.2)$$

onde ε é o erro aceito para esse critério. No terceiro método, a subrotina de fluxo do modelo não é utilizada, sendo os valores de saturação e descarga específica fornecidos na entrada de dados e mantidos fixos ao longo da simulação do transporte.

Assim, o modelo FT1D passa a dispor das opções de cálculo: somente fluxo, fluxo e transporte e somente transporte, sendo que a simulação de fluxo pode ser transiente, permanente direto, permanente por aproximação e com saturação e descargas específicas fixos e fornecidos pelo usuário. A opção de simulação somente transporte deve sempre ser antecedida pela simulação de fluxo, sendo os dados relativos à última simulação de fluxo armazenados para serem utilizados pela opção de somente transporte. Isto permite que sejam feitas múltiplas simulações de transporte com base em apenas uma de fluxo, evitando a necessidade de simular-se novamente o fluxo ao avaliar-se variações nos parâmetros de transporte.

O modelo de fluxo e transporte FT1D foi utilizado para se obter o valor da contribuição do contaminante para um aquífero freático localizado abaixo de uma zona não-saturada, utilizando ou não a consideração de fluxo permanente. Essa contribuição (M) foi calculada através da integração, no tempo, do valor do fluxo mássico do contaminante que passa por determinada profundidade da zona não-saturada ou ponto de observação (z_i), por unidade de área de meio poroso transversal ao fluxo. A massa do contaminante é calculada como sendo a concentração $C(z_i, t)$ multiplicada pela descarga específica da fase aquosa:

$$M = \int_0^T C(z_i, t) \cdot q(z_i, t) dt \quad (3.3)$$

onde T é o tempo de simulação. O tempo de simulação foi estabelecido como sendo o tempo necessário para que a concentração no ponto de observação (z_i) atinja 50% da concentração no topo do domínio. Com este critério, pretende-se integrar metade da curva 'breakthrough' para este ponto e limitar o tempo de execução para cada simulação a um valor razoável.

A Eq. (3.3) foi integrada numericamente pela regra do trapezóide (Press et al., 1992) aplicada a cada intervalo de tempo, através da Eq. (3.4) abaixo:

$$M = \sum_{i=1}^T \frac{(C_{z_i}^i \cdot q_{z_i}^i + C_{z_i}^{i-1} \cdot q_{z_i}^{i-1})}{2} \cdot \Delta t \quad (3.4)$$

O valor de M para determinado ponto z_i foi calculado utilizando o modelo de fluxo com regime permanente e com regime transiente, sendo referidos por M_P e M_T , respectivamente. Considerando que a simulação utilizando regime transiente representa melhor a realidade do processo físico, M_T foi tomado como o valor referência para o cálculo do grau de adequação da estimativa que o regime de fluxo permanente gera. A adequação da estimativa (E) foi definida através da fração entre M_P e M_T :

$$E = \frac{M_P}{M_T} \quad (3.5)$$

Assim, quanto mais E se aproximar de 1, mais a simulação com fluxo permanente se aproxima da simulação com fluxo transiente. Valores de E menores do que 1 indicam situações em que a massa de contaminante que passa por determinado ponto de observação, em dado período de tempo, é subestimada pelo uso da consideração de fluxo permanente. Essa situação pode ser indesejável, visto que, neste caso, a estimativa não seria conservadora. Em contrapartida, casos que geram valores de E maiores do que 1 denotam superestimação da contribuição da contaminação para o aquífero, que é uma estimativa mais segura, principalmente quando se deseja realizar uma análise de risco. Entretanto, o objetivo deste trabalho inclui também uma avaliação do grau que essa superestimação pode atingir.

A avaliação da influência dos parâmetros do modelo de fluxo na adequação da consideração de fluxo permanente na simulação do transporte foi realizada através de uma análise de sensibilidade utilizando a técnica de análise fatorial (Box, 1978; Miller, 1977). Esta técnica estatística permite avaliar o efeito da resposta de um experimento (ou a resposta de um modelo) provocado pela alteração dos valores de fatores que influem no fenômeno. A técnica necessita de 2^N realizações do experimento (ou simulações do modelo) para N fatores (ou variáveis) que são avaliados, onde utilizam-se 2 níveis de variação para cada fator. Comparando-se as respostas obtidas com cada combinação de níveis dos fatores, pode-se calcular os efeitos de cada fator individualmente (efeitos principais) e as interações entre os fatores (efeitos secundários). Esta última característica da técnica faz com que ela seja mais versátil do que uma análise de sensibilidade convencional baseada na alteração de um fator de cada vez.

O modelo de fluxo vertical utiliza-se, basicamente, de 7 fatores: taxa de precipitação [L/T], Q , espessura da zona não-saturada [L], L , e 5 fatores relacionados com o tipo do solo (porosidade, ϕ , condutividade hidráulica saturada [L/T], K , e três fatores da equação de van Genuchten (α [L⁻¹], n , S_r), considerando $S_m=1$). Devido à grande quantidade dos fatores a serem avaliados e à incompatibilidade física e numérica de certas combinações de valores dos fatores, a análise fatorial dos fatores do modelo foi conduzida dividindo-se os fatores em grupos. Assim, os fatores relativos ao solo, exceto a condutividade hidráulica saturada, foram agrupados, tendo sido conduzida a análise para dois tipos de solos. Os demais fatores foram avaliados em dois níveis.

3.4. Resultados e discussões

A análise foi conduzida para dois tipos de solo: arenoso e silte-argiloso (respectivamente, Solos 1 e 3, descritos na Tabela 2.1), onde a porosidade, os fatores de van Genuchten e a dispersividade do meio foram fixados para caracterizar cada tipo de solo analisado, constituindo os Casos A e B. A Tabela 3.1 mostra os valores fixados e os níveis de variação para os dois casos. A Figura 3.2 traz as curvas de retenção, dadas pelo modelo de van Genuchten, para os dois solos considerados, utilizando-se os valores fornecidos na tabela anterior.

Tabela 3.1 – Valores dos fatores utilizados nas análises.

Variável	Nível	Caso A	Caso B
Tipo	--	Areia	Silte-argiloso
ϕ	(fixo)	0,368	0,42
α	(fixo)	0,0335 cm ⁻¹	0,0004 cm ⁻¹
n	(fixo)	2,0	1,65
S_r	(fixo)	0,2772	0,0357
α_L	(fixo)	10 cm	10 cm
Q	Q0	0,01 cm/min	0,005 cm/min
	Q1	0,05 cm/min	0,01 cm/min
K	K0	0,1 cm/min	0,01 cm/min
	K1	0,5 cm/min	0,05 cm/min
L	L0	200 cm	100 cm
	L1	500 cm	500 cm

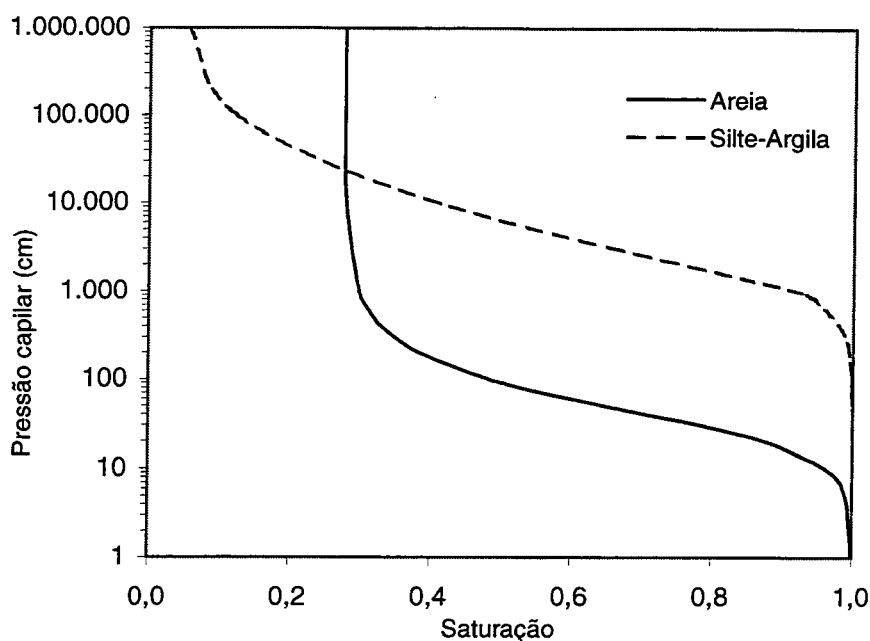


Figura 3.2 – Curvas de retenção para os solos utilizados na análise.

Para todas as simulações dos Casos A e B, o ponto de observação (z_i) foi escolhido a 20 cm abaixo do topo do domínio. Para o fluxo, a condição inicial das simulações do Caso A foi colocada como sendo equilíbrio hidrostático, tendo pressão nula como condição de contorno no fundo do domínio. Para o Caso B, a condição inicial para o fluxo foi estipulada como sendo pressão de -3.000 cm, sendo esta pressão mantida fixa no fundo do domínio (condição de contorno no fundo). No topo, para os Casos A e B, aplicou-se uma das taxas de precipitação dadas na Tabela 3.1, de acordo com a combinação que se estava simulando.

Para o transporte, nos Casos A e B, atribuiu-se concentração nula como condição inicial ao longo do perfil e a condição de contorno no topo e no fundo do domínio foram estipuladas como sendo concentração unitária e concentração nula, respectivamente. Assim, as concentrações simuladas são dadas em termos de concentração relativa à concentração no topo do domínio. Os incrementos espacial e temporal foram estipulados inicialmente como constantes e iguais a 1 cm e 1 minuto, respectivamente. Quando necessário, de acordo com cada simulação, esses valores foram reduzidos para garantir a convergência do método numérico.

3.4.1. Caso A – Solo arenoso

A Tabela 3.2 traz o resultado da simulação de cada combinação de valores de fatores para a areia. A coluna ‘Q K L’ mostra os níveis dessas variáveis para cada combinação, sendo que ‘0’ e ‘1’ representam o primeiro e segundo níveis, respectivamente. Assim, a combinação ‘1 0 1’ utiliza Q no nível $Q1$, K no nível $K0$ e L no nível $L1$. A coluna ‘T simul.’ traz o tempo de simulação (em minutos) para cada combinação dos fatores, tendo sido definido como o tempo necessário para que a concentração em z_i atinja 50% da concentração no topo do domínio.

As três colunas seguintes trazem os valores de M obtidos utilizando fluxo transiente (M_T), permanente pelo método direto (M_T (direto)) e permanente por aproximação (M_T (aprox.)), além do tempo de execução (em segundos) de cada simulação. A coluna ‘T aprox.’ mostra o tempo de simulação necessário (em minutos) para o fluxo atingir o regime permanente na simulação com fluxo permanente por aproximação. A última coluna mostra a adequação da estimativa (E) do fluxo permanente em relação ao fluxo transiente obtido para cada simulação. Nesta tabela, e nas seguintes, os valores de M_P e M_T têm um significado de massa acumulada no tempo de simulação, que passa por z_i , por unidade de área transversal ao fluxo, por unidade de concentração, pois se está utilizando uma concentração normalizada com relação à concentração no topo do domínio.

A primeira observação que se pode fazer sobre a Tabela 3.2 é que, nos casos onde a zona não-saturada era mais espessa, a solução de fluxo permanente não foi possível de ser obtida pelo método direto. Como já havia sido observado, verificou-se que, quando a solução do fluxo permanente está muito distante dos valores com que se iniciou o ciclo iterativo, a solução direta pode ser numericamente divergente, devendo-se buscar a solução permanente por aproximação quando esses casos ocorrerem.

Tabela 3.2 – Resultado da simulação de cada combinação, para o Caso A (areia)

QKL	T simul. (min)	M _T	M _P (direto)	M _P (aprox.)	T aprox. (min)	E
		T exec. (s)	T exec. (s)	T exec. (s)		
000	395	0,414	0,809	0,809	2.907	1,95
		11,0	0,7	45,7		
100	89,5	0,253	0,864	0,864	712,3	3,42
		20,8	1,1	113,5		
010	333,6	0,470	0,709	0,709	1.811,4	1,51
		30,5	1,8	100,2		
110	78,9	0,411	0,807	0,807	563,8	1,96
		18,2	1,0	79,7		
001	369,5	0,224	--	0,690	8.089,5	3,08
		49,8	--	731,7		
101	83,9	0,0394	--	0,737	2.097,1	18,71
		56,3	--	1005,1		
011	319,0	0,346	--	0,638	5.601,5	1,84
		44,6	--	477,7		
111	73,9	0,224	--	0,689	1.617,9	3,08
		50,4	--	741,9		

Nos casos onde a solução permanente pelo método direto foi possível, os tempos computacionais foram inferiores ao tempo gasto na simulação transiente, como era esperado. Dos 4 casos simulados com solução permanente por aproximação, o tempo computacional necessário para atingir a solução permanente foi bem maior do que o tempo gasto na simulação transiente, considerando o tempo total de simulação de fluxo e transporte. Isso pode ser observado também analisando-se os tempos nas colunas 'T aprox.' e 'T simul.' da Tabela 3.2. Na maioria dos casos, foi necessário um tempo de simulação de fluxo muito maior para se atingir o estado permanente do que o tempo de simulação desejado.

Naturalmente, durante a simulação do fluxo, a variação do tempo de execução não é linear com o tempo de simulação, já que os primeiros intervalos de tempo requerem maior número de iterações do sistema não-linear do que os últimos. Assim, do ponto de vista de tempo de execução, quanto maior o tempo de simulação, mais vantajoso se torna o uso da solução permanente por aproximação.

Dentro da faixa pesquisada, os valores de adequação da estimativa obtidos mostram que a consideração de fluxo permanente foi sempre conservadora ($E > 1$), sendo que o uso desta consideração superestimou a massa de contaminante que passou pelo ponto analisado em até 18 vezes. Os valores obtidos são resumidos na Tabela 3.3 e os efeitos de cada parâmetro e das inter-relações entre os fatores são mostrados na Tabela 3.4.

Para o caso analisado, e considerando a ordem de grandeza dos valores dos fatores avaliados, a taxa de precipitação apresentou o maior efeito médio, seguido da condutividade hidráulica saturada e da espessura da zona não-saturada. Enquanto os demais fatores tiveram um efeito positivo, a condutividade hidráulica apresentou efeito negativo, significando que o valor de E decresce quando a condutividade hidráulica aumenta.

A influência dos fatores taxa de precipitação, condutividade hidráulica saturada e espessura da zona não-saturada no grau de estimativa da simulação com fluxo permanente com relação ao fluxo transiente está relacionada com o maior ou menor afastamento do perfil de saturações inicial da solução do fluxo permanente, bem como com a maior ou menor facilidade em atingir essa solução.

A espessura da zona não-saturada, juntamente com a curva de retenção do solo, determina o perfil de pressões iniciais, já que se está considerando o perfil de equilíbrio como condição inicial. Quanto maior a espessura, maior é a pressão (em módulo) no topo do solo, gerando um perfil inicial de equilíbrio para este solo mais seco, estando, portanto, mais afastado de um estado úmido em estado permanente. Esse processo pode ser agravado em

solos com curvas de retenção que apresentam uma súbita desaturação em pressões capilares baixas (solos arenosos), por levarem a um estado inicial de equilíbrio ainda mais seco.

A taxa de precipitação influi no teor de umidade do solo no estado permanente. Quanto maior a taxa de precipitação aplicada, mais úmido será o solo no estado permanente, tornando esse estado permanente mais afastado do estado seco inicial. A condutividade hidráulica influencia na maior ou menor rapidez com que o perfil de umidade se tornará permanente, sendo que, em solos com pequenos valores de K , o avanço da frente de umidade é mais lento, fazendo com que a consideração de fluxo permanente possa ser menos adequada.

Entre os efeitos secundários, a inter-relação entre Q e K apresentou o efeito de maior magnitude (efeito negativo), seguida de K e L e Q e L , sendo o primeiro negativo e o segundo positivo. Isto pode ser observado na Tabela 3.3, onde vê-se que as combinações que tiveram Q e L no maior nível e, paralelamente, K no menor nível e L no maior nível apresentaram os maiores valores de E . Notadamente, observa-se que a combinação '1 0 1' ($Q1$, $K0$ e $L1$) gerou o maior valor de E , enquanto a '0 1 0' gerou o menor valor de E . Naturalmente, a magnitude dos efeitos de cada parâmetro e de suas inter-relações reflete a faixa de valores de cada parâmetro que foi pesquisada, podendo ser diferente se a análise for conduzida de outra forma.

Tabela 3.3 – Sumário dos valores de E (Caso A).

		Q0	Q1
L0	K0	1,95	3,42
	K1	1,51	1,96
L1	K0	3,08	18,71
	K1	1,84	3,08

Tabela 3.4 – Efeitos de cada parâmetro (Caso A).

	EFEITOS
Q	4,698
K	-4,693
L	4,468
Q / K	-3,853
Q / L	3,738
K / L	-3,743
Q / K / L	-3,343

A técnica de análise fatorial utilizada mostrou-se de grande utilidade para se obter rapidamente uma análise de sensibilidade dos fatores do modelo e localizar-se os pontos mais críticos. No caso avaliado, pode-se confirmar os resultados da análise fatorial realizando-se uma análise de sensibilidade convencional em torno da combinação '1 0 1'. Os valores-base foram fixados em: $Q = 0,08$ cm/min; $K = 0,1$ cm/min; $L = 500$ cm. Os fatores foram alterados um a um conforme os valores mostrados nas tabelas da Figura 3.3, Figura 3.4 e Figura 3.5, que também mostram os valores de M_T , M_P e E resultantes de cada simulação. Os valores dos demais fatores continuam fixados segundo a Tabela 3.1 para o Caso A.

Os resultados obtidos na análise de sensibilidade confirmam a tendência evidenciada através da análise fatorial. Simular o transporte com fluxo permanente, em solos arenosos, com baixas condutividades hidráulicas saturadas conjugadas a altas taxas de precipitação e zonas não-saturadas espessas, considerando perfil inicial de saturações no equilíbrio, pode gerar estimativas de massa de contaminante entregue ao aquífero muito superiores às aquelas estimativas obtidas utilizando fluxo transiente.

No pior caso simulado, o exagero da estimativa foi de 46 vezes, devido à redução brusca dos valores de M_T com o aumento de Q , enquanto M_P manteve-se relativamente constante. Isto reflete a diferença entre os valores da descarga específica no estado transiente em contraste com as descargas específicas muito maiores do estado permanente. Nos casos simulados em que a espessura de zona não-saturada foi de 400 e 500 cm, a solução direta do fluxo permanente foi não-convergente e o tempo computacional para se obter a solução por aproximação foi alto.

O valor de M_T , em função dos valores das variáveis, obedece duas relações básicas que se dão em sentido contrário. Na primeira delas, M_T aumenta quando há aumento da descarga específica (q), já que M_T é proporcional a q . Na outra relação, M_T sofre redução devido à redução da concentração ($M_T \propto C$) como consequência do aumento de q . O mecanismo neste último caso decorre do aumento da saturação (S) com o aumento de q , gerando velocidades lineares (v) menores ($v = q/(\phi \cdot S)$). Como a velocidade linear é diretamente responsável pelo processo de transporte advectivo, menores valores de v geram menores concentrações.

Q (cm/min)	M _T	M _P	E
0,01	0,224	0,640	3,08
0,02	0,143	0,701	4,90
0,04	0,060	0,723	12,07
0,06	0,027	0,752	27,96
0,08	0,017	0,801	46,03

K (cm/min)	M _T	M _P	E
0,1	0,017	0,801	46,03
0,2	0,060	0,723	12,07
0,3	0,108	0,713	6,63
0,4	0,143	0,701	4,92
0,5	0,171	0,700	4,09

L (cm)	M _T	M _P	E
100	0,602	1,111	1,85
200	0,187	0,870	4,65
300	0,059	0,798	13,55
400	0,025	0,787	32,00
500	0,017	0,801	46,03

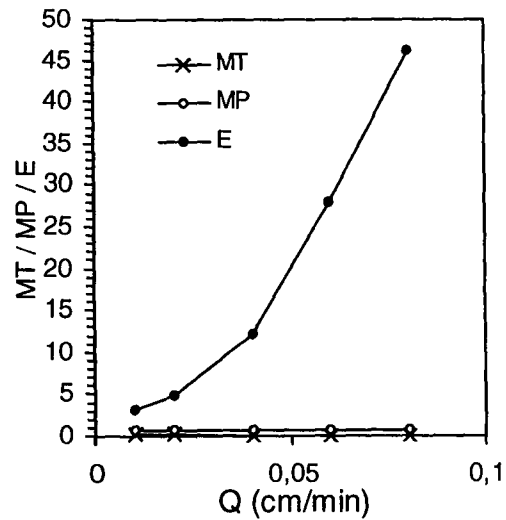


Figura 3.3 – Sensibilidade do modelo à taxa de precipitação (Caso A), com K e L fixos em 0,1 cm/min e 500 cm.

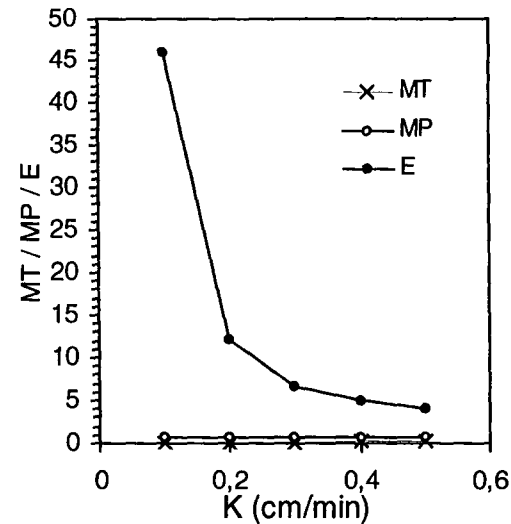


Figura 3.4 – Sensibilidade do modelo à cond. hidráulica saturada (Caso A), com Q e L fixos em 0,08 cm/min e 500 cm.

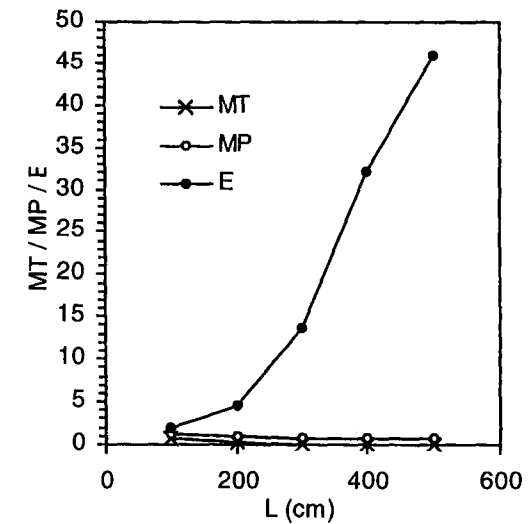


Figura 3.5 – Sensibilidade do modelo à espessura da zona não-saturada (Caso A), com Q e K fixos em 0,08 e 0,1 cm/min.

O grau de adequação da estimativa do transporte que a consideração de fluxo em regime permanente gera foi também avaliado utilizando a terceira forma de uso do fluxo permanente, ou seja, considerar que a saturação e a velocidade de infiltração da água sejam constantes também no espaço. Neste caso, a análise foi conduzida de modo que os valores de E obtidos utilizando esta opção possam ser comparados aos valores de E obtidos anteriormente através do método direto ou por aproximação.

Dentre as combinações de valores testados, escolheram-se os casos em que se obteve o menor e o maior efeito para a areia. Assim, conforme os resultados da Tabela 3.2, foram utilizadas as combinações '0 1 0' e '1 0 1' descritas na Tabela 3.5. Como, nesta opção, a subrotina de simulação de fluxo do modelo FT1D não é executada, apenas os valores da porosidade, comprimento da zona não-saturada e dispersividade longitudinal são necessários. Para o valor da descarga específica, utilizaram-se os valores da taxa de precipitação de cada combinação. A Tabela 3.5 mostra os valores de Q e L para cada combinação de níveis utilizada. Nota-se que as combinações ($Q K L$) também subentendem um valor para a condutividade hidráulica saturada (K), mas esse parâmetro não é considerado na opção de simulação atual.

Tabela 3.5 – Níveis das variáveis Q e L para a simulação com saturação e descarga específica constantes (Caso A).

Q K L	Variável	Areia
0 1 0	Q	0,01 cm/min
	L	200 cm
1 0 1	Q	0,05 cm/min
	L	500 cm

A Tabela 3.6 traz os resultados da estimativa da massa acumulada que passa por z_i utilizando fluxo permanente (M_p) e do grau de adequação da estimativa do transporte (E) para as combinações escolhidas, utilizando saturações de água entre 0,1 e 0,9. Para facilitar a comparação, também são mostrados os valores de M_p e E obtidos utilizando o método de direto ou por aproximação (linha rotulada por 'Perm. direto ou aprox.>') e de M_T obtido com o fluxo transiente (linha 'Transiente'), provenientes da Tabela 3.2, para as combinações analisadas. Todos os valores de E foram obtidos considerando os valores de M_T para o fluxo transiente mostrado na última linha da Tabela 3.6. É importante notar que as simulações de transporte nesta análise foram realizadas durante o tempo de simulação estipulado anteriormente para cada combinação (ver Tabela 3.2).

Tabela 3.6 – Resultado da simulação de cada combinação utilizando saturação e velocidade de infiltração constantes (Caso A).

Q K L	0 1 0		1 0 1	
Saturação	M_p	E	M_p	E
0,1	2,614	5,56	3,463	87,89
0,2	2,024	4,31	2,821	71,60
0,3	1,587	3,38	2,311	58,65
0,4	1,261	2,68	1,911	48,50
0,5	1,014	2,16	1,593	40,43
0,6	0,823	1,75	1,338	33,96
0,7	0,674	1,43	1,131	28,71
0,8	0,555	1,18	0,962	24,42
0,9	0,460	0,98	0,821	20,84
Perm. direto ou aprox. *	0,709	1,51	0,737	18,71
Transiente*	0,470	--	0,0394	--

* Valores provenientes da Tabela 3.2

Comparando-se os valores de E para cada combinação, ao longo da faixa de saturações pesquisada, com aquele obtido através do método direto ou por aproximação, nota-se que, para determinada faixa de saturações, esses valores estão na mesma ordem de grandeza. Este fato é importante quando se considera que o método de saturação e descarga específica fixas exige um número muito inferior de dados (por exemplo, não é necessária a curva de retenção do solo) e que o tempo computacional é bastante reduzido simulando-se com esta opção.

Por outro lado, nota-se que, quando o valor de E é muito superestimado pelo método direto (ou por aproximação), esse método tende a superestimá-lo ainda mais para alguns valores de saturação. Isso é demonstrado na simulação da combinação '1 0 1', onde o valor de E , que já é superestimado em ~ 19 vezes usando o método permanente por aproximação, pode ser superestimado em ~ 88 vezes usando o método pesquisado com saturações reduzidas. Isto decorre da velocidade linear ($v = q/(\phi.S)$) tornar-se muito alta quando utilizam-se saturações muito pequenas, gerando concentrações maiores em um mesmo tempo de simulação.

Outra desvantagem encontrada com o uso do método de saturação e descarga específica fixas é que, para combinações que apresentaram menor grau de superestimação, dependendo do valor escolhido para a saturação fixa, o valor de E pode ser menor do que 1, caracterizando uma situação indesejável em avaliações de risco. Para a combinação '0 1 0', o valor de E foi menor do que 1 para as saturações superiores a 90%. Portanto, pode-se concluir que este método nem sempre fornece valores superestimados como se supõe, podendo-se obter estimativas da massa entregue a um aquífero inferiores às estimativas obtidas considerando fluxo transiente ao se utilizar saturações altas.

3.4.2. *Caso B – Solo silte-argiloso*

Os resultados das simulações para o solo silte-argiloso (Caso B) (ver Tabela 3.1 para os valores dos fatores) são mostrados na Tabela 3.7, que segue a mesma forma da tabela para a areia (Tabela 3.2). É bom lembrar que, para este caso, a condição inicial do solo foi uniforme, dada pela pressão de -3.000 cm, enquanto a condição de contorno no fundo do domínio foi fixada na pressão de -3.000 cm. As variáveis foram avaliadas em dois níveis: taxa de precipitação (0,005 e 0,01 cm/min), condutividade hidráulica saturada (0,01 e 0,05 cm/min) e espessura da zona não-saturada (100 e 500 cm). Nesse caso, a obtenção da solução de fluxo permanente através do método direto foi bem sucedida em todas as simulações realizadas,

sendo possível obter-se tempos de execução bastante pequenos. Os resultados utilizando o método por aproximação são citados apenas para permitir a comparação entre os tempos de execução dos três métodos.

A análise dos resultados da Tabela 3.7 revela que, para as simulações com espessura da zona não-saturada de 100 cm, todos os valores de E foram maiores do que 1, enquanto que, para a maior espessura (500 cm), a maioria dos valores de E foram inferiores a 1. Esta diferença ocorreu como um reflexo da redução de M_P com o aumento de L , ao mesmo tempo que M_T permanece mais ou menos constante. A redução de M_P é causado pela menor influência da condição de contorno inferior no perfil de saturações nos casos com maior L , permitindo a formação de um perfil mais úmido nestes casos. Maiores saturações, por sua vez, geram velocidades lineares menores, mesmo que a descarga específica da fase aquosa seja a mesma. E, como a advecção é proporcional à velocidade, isto resulta em um perfil de concentrações menor. Esta cadeia de efeitos pode ser visualizada nos gráficos da Figura 3.6 à Figura 3.9, onde são mostrados, respectivamente, os perfis de saturação e velocidades lineares para 920 min de simulação e a evolução da concentração relativa e de M_P com o tempo (ponto de observação a 20 cm do topo), para as combinações '0 0 0' ($L = 100$ cm) e '0 0 1' ($L = 500$ cm).

Tabela 3.7 – Resultado da simulação de cada combinação, para o Caso B (silte-argiloso)

Q K L	T simul. (min)	M _T	M _P (direto)	M _P (aprox.)	T aprox. (min)	E
		T exec. (s)	T exec. (s)	T exec. (s)		
0 0 0	922	0,924	1,005	1,005	1.777	1,09
		16,5	1,0	24,5		
1 0 0	488	0,928	1,056	1,056	1.467	1,14
		10,5	0,6	22,1		
0 1 0	842	0,896	0,906	0,906	471	1,01
		11,5	0,9	6,5		
1 1 0	434	0,910	0,941	0,941	494	1,03
		7,6	0,5	7,2		
0 0 1	942	0,901	0,870	0,870	16.227	0,97
		49,3	2,8	498,3		
1 0 1	493	0,930	0,894	0,894	10.006	0,96
		26,8	1,6	335,8		
0 1 1	859	0,876	0,879	0,879	7.076	1,00
		36,7	2,5	208,9		
1 1 1	446	0,891	0,875	0,875	6.212	0,98
		23,9	1,4	207,2		

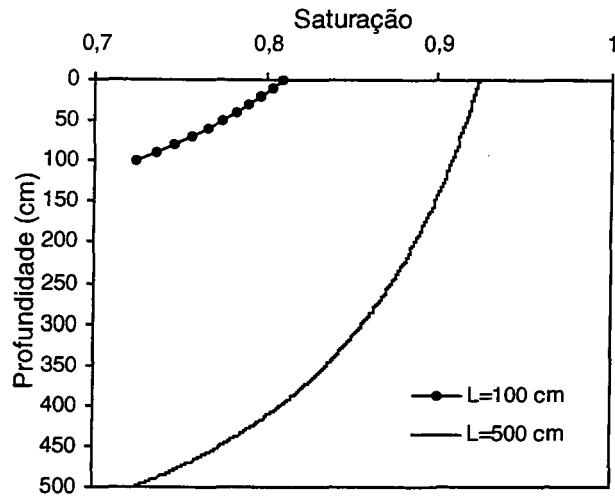


Figura 3.6 – Perfis de saturação para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 920 min de simulação.

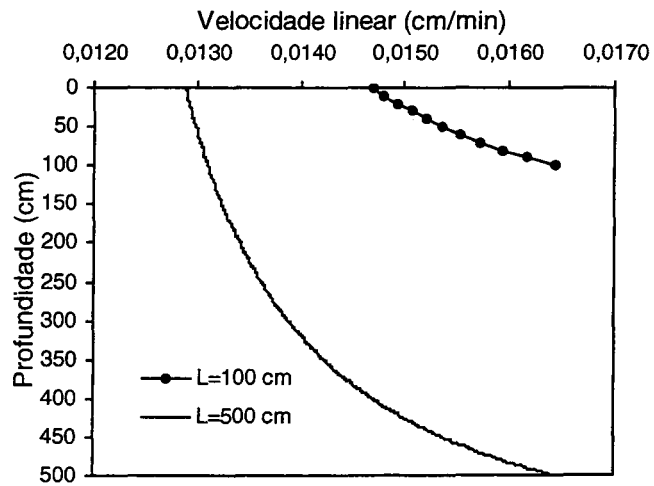


Figura 3.7 – Velocidades lineares para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 920 min de simulação.

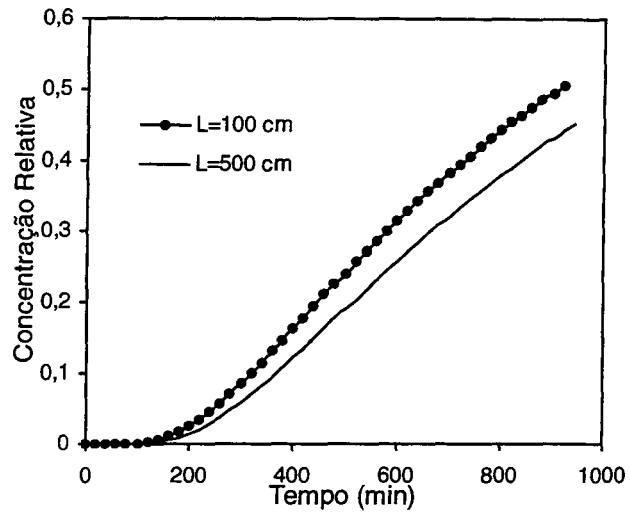


Figura 3.8– Perfis de concentrações para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 20 cm do topo, utilizando fluxo permanente.

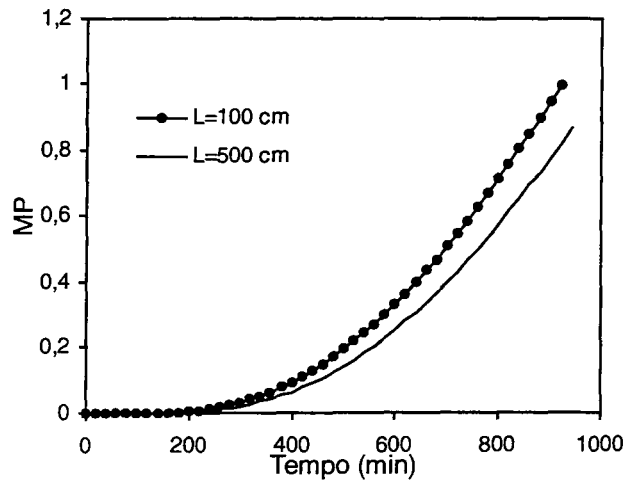


Figura 3.9 – Valores de M_P para as combinações ‘0 0 0’ e ‘0 0 1’, a 20 cm do topo.

A magnitude dos valores obtidos para E no Caso B foi muito inferior do que para a areia (caso A), sendo que a máxima superestimação obtida foi de apenas 14%. Esta diferença nos valores de E obtidos para a areia e para o solo silte-argiloso deve-se principalmente à forma das curvas de retenção dos dois solos mostradas na Figura 3.2. Nota-se que a curva relativa ao solo silte-argiloso apresenta saturações muito maiores para uma mesma pressão do que a areia, por exemplo, $h_c = 1.000$ cm, corresponde a $S = 0,299$ para a areia e a $S = 0,927$ para o solo silte-argiloso. Assim, o solo silte-argiloso apresenta perfis de saturação muito úmidos para uma faixa muito maior de pressões do que a areia, estando sempre próximo de uma solução permanente mais úmida.

A Tabela 3.8 traz um sumário dos valores de E obtidos nas simulações com o solo silte-argiloso e a Tabela 3.9 mostra os efeitos médios calculados para os fatores e suas inter-relações. Pode-se observar que os resultados foram diferentes dos obtidos para a areia. Este comportamento pode estar relacionado com a ordem de grandeza da faixa de valores avaliada para os fatores, que seguiram restrições de ordem física e numérica para o solo considerado, além da mudança no tipo das condições inicial e de contorno utilizadas.

Neste caso, a espessura da zona não-saturada apresentou o maior efeito médio, seguido da condutividade hidráulica saturada e da taxa de precipitação, sendo que o primeiro e o segundo efeito são negativos. Nos efeitos secundários, houve grande influência da espessura da zona não-saturada, apresentando K/L e Q/L os maiores efeitos (o primeiro positivo e o segundo negativo). Estes valores refletem a pequena magnitude dos valores de E obtidos, bem como uma certa falta de definição das tendências para este caso.

Nas simulações em que L foi fixado no menor nível, obtiveram-se as mesmas tendências verificadas para a areia, ou seja, E aumenta com o aumento de Q e com a redução de K . Entretanto, quando L é fixado no nível mais alto, esta tendência se inverte. Este comportamento decorre da maior influência da condição de contorno inferior nos casos envolvendo a menor espessura, fazendo com que estes casos sejam similares aos utilizados com a areia. Nos casos em que se utiliza a maior espessura, a condição de contorno inferior não exerce influência em alguns casos. Por este comportamento, pode-se concluir que a função de E com as variáveis avaliadas apresenta pontos de mínimos ou máximos com mudança na inclinação da função, ou seja, na taxa de crescimento ou decrescimento de E .

Tabela 3.8 – Sumário dos valores de E (Caso B). Tabela 3.9 – Efeitos de cada parâmetro (Caso B).

		Q0	Q1
L0	K0	1,09	1,14
	K1	1,01	1,03
L1	K0	0,97	0,96
	K1	1,00	0,98

EFEITOS	
Q	0,010
K	-0,035
L	-0,090
Q / K	-0,010
Q / L	-0,025
K / L	0,060
Q / K / L	0,005

A técnica de análise fatorial para este caso não se mostrou tão precisa quanto para o caso da areia. Esta técnica é melhor empregada se a função avaliada for linear ou se apresentar uma tendência de crescimento ou decrescimento constante. A presença de valores máximos ou mínimos dentro da faixa de valores avaliada faz com que a análise fatorial seja de difícil interpretação. Entretanto, mesmo neste caso, a análise fatorial pode ser utilizada como uma forma rápida de se obter informações preliminares das tendências das funções, podendo-se ampliar a avaliação utilizando a análise de sensibilidade nos pontos mais complicados.

Para este caso, o grau de subestimação de E foi avaliado por análise de sensibilidade aplicado à combinação '1 0 1', que forneceu o menor valor de E . Os valores-base foram fixados em $Q = 0,01$ cm/min; $K = 0,01$ cm/min e $L = 1000$ cm, enquanto os demais fatores foram fixados segundo o Caso B descrito na Tabela 3.1. As tabelas da Figura 3.10, Figura 3.11 e Figura 3.12 mostram os valores das variáveis avaliadas, bem como os valores de M_T , M_P e E resultantes de cada simulação. As figuras trazem também os resultados obtidos em forma gráfica.

Q (cm/min)	M _T	M _P	E
0,002	0,898	0,826	0,92
0,004	0,906	0,816	0,90
0,006	0,911	0,826	0,91
0,008	0,917	0,846	0,92
0,01	0,921	0,868	0,94

K (cm/min)	M _T	M _P	E
0,01	0,921	0,868	0,94
0,02	0,913	0,824	0,90
0,04	0,906	0,825	0,91
0,06	0,899	0,835	0,93
0,08	0,897	0,846	0,94
0,1	0,893	0,853	0,96

L (cm)	M _T	M _P	E
100	0,927	1,056	1,14
200	0,921	0,983	1,07
400	0,921	0,91	0,99
600	0,921	0,884	0,96
800	0,921	0,873	0,95
1000	0,921	0,868	0,94

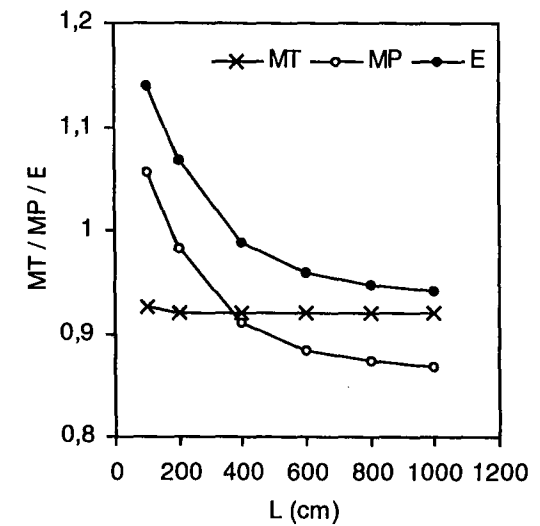
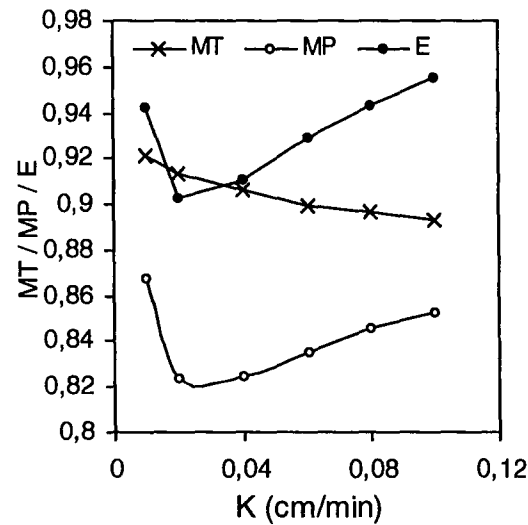
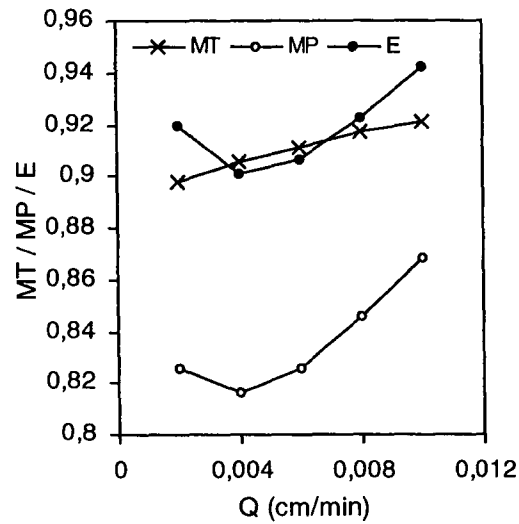


Figura 3.10 – Sensibilidade do modelo à taxa de precipitação (Caso B), com K e L fixos em 0,01 cm/min e 1000 cm.

Figura 3.11 – Sensibilidade do modelo à cond. hidráulica saturada (Caso B), com Q e L fixos em 0,01cm/min e 1000 cm.

Figura 3.12 – Sensibilidade do modelo à espessura da zona não-saturada (Caso B), com Q e K fixos em 0,01 cm/min.

A análise de sensibilidade indicou a presença de um mínimo na função de E , justificando a razão da inversão de tendências observadas na análise fatorial para Q e K . De um modo geral, pode-se observar que as variações em E são consequência das variações em M_P , uma vez que M_T apresenta menor variação. Isto é mais evidente no gráfico da Figura 3.12, onde observa-se que somente houve influência da condição de contorno inferior na espessura da zona não-saturada de 100 cm, causando um aumento do valor de M_T . É natural que o valor de M_P seja mais influenciado pelos valores das variáveis porque ele se refere ao estado final do fluxo, enquanto M_T refere-se a estados intermediários.

A tendência de mínimo para a variação de M_P (e, conseqüentemente, de E) com a taxa de precipitação deve-se às tendências opostas de dois fatores que compõem o valor de M_P , ou seja, q e C . O aumento de Q gera o aumento em q e a redução em C (maior q , maior S , menor v , menor C). A tendência de E depende de qual dos dois efeitos é preponderante no momento.

A presença do mínimo na variação de M_P com a condutividade saturada pode ser também explicada pela combinação de dois mecanismos. O aumento de K leva a um perfil de saturações menos úmido e, conseqüentemente, à maiores concentrações e maiores valores de M_P . Por outro lado, há também a influência do tempo de simulação, que é reduzido com o aumento de K , gerando um valor de M_P menor. Este mesmo mecanismo, ou seja, a influência do tempo de simulação, também explica a redução de M_T com o aumento de K , que também contribui para a elevação de E .

Com relação à espessura da zona não-saturada, a tendência segue o esperado. O aumento de L gera um perfil mais saturado no estado permanente, levando a menores velocidades lineares e, conseqüentemente, menores concentrações (ver Figura 3.6 a Figura 3.9)

Para a análise do uso do fluxo permanente com saturação e descarga específica constantes, escolheu-se os casos com as combinações '1 0 0' e '0 0 1' descritas na Tabela 3.1. Vale lembrar que, nesta opção, a subrotina de simulação de fluxo do modelo FT1D não é executada, sendo utilizados apenas os valores da porosidade, comprimento da zona não-saturada e dispersividade longitudinal. Para o valor da descarga específica, utilizou-se os valores da taxa de precipitação. A Tabela 3.10 mostra os valores de Q e L para cada combinação de níveis utilizada.

Tabela 3.10 – Níveis das variáveis Q e L para a simulação com saturação e descarga específica constantes (Caso B).

Q K L	Variável	Silte-argiloso
1 0 0	Q	0,01 cm/min
	L	100 cm
0 0 1	Q	0,005 cm/min
	L	500 cm

A Tabela 3.11, que segue a mesma formatação da Tabela 3.6 para a areia, traz os resultados da estimativa da massa acumulada que passa por z_i utilizando fluxo permanente (M_p) e do grau de adequação da estimativa do transporte (E) para as combinações escolhidas, utilizando saturações de água entre 0,1 e 0,99. Todos os valores de E foram obtidos considerando os valores de M para o fluxo transiente mostrado na tabela (M_T). Também neste caso, as simulações de transporte foram realizadas durante o tempo de simulação estipulado anteriormente para cada combinação (ver Tabela 3.2).

Como foi visto anteriormente, não se observou grande superestimativa em nenhum dos casos avaliados utilizando o solo silte-argiloso, ao contrário do solo arenoso. As duas combinações avaliadas para o solo silte-argiloso, considerando saturação e descarga específica constantes, apresentaram valores de E próximos a 1, obtendo-se valores menores do que 1 para altas saturações. Como havia sido observado para o caso da areia, situações como estas tendem a gerar grandes valores de E ($E > 1$) para saturações pequenas e E pequenos ($E < 1$) para saturações altas. A análise da Tabela 3.11 mostra que esta tendência se confirmou também neste caso.

Tabela 3.11 – Resultado da simulação de cada combinação utilizando saturação e descarga específica constantes (Caso B).

Q K L	1 0 0		0 0 1	
Saturação	M_p	E	M_p	E
0,1	4,042	4,36	3,875	4,30
0,2	3,305	3,56	3,147	3,49
0,3	2,717	2,93	2,571	2,85
0,4	2,253	2,43	2,120	2,35
0,5	1,884	2,03	1,763	1,96
0,6	1,586	1,71	1,478	1,64
0,7	1,344	1,45	1,246	1,38
0,8	1,145	1,23	1,057	1,17
0,9	0,980	1,06	0,901	1,00
0,99	0,855	0,92	0,783	0,87
Perm. direto ou aprox.	1,056	1,14	0,870	0,97
Transiente	0,928	--	0,901	--

Pode-se observar também a variação dos valores de E com a saturação, tendo sido obtidos valores 4 vezes maiores do que a avaliação utilizando fluxo transiente. Isto é consequência da grande variação de M_p , que está intimamente ligado ao valor da concentração, que, por sua vez, é função da saturação através da velocidade linear, como já foi abordado. Assim, ao se utilizar este método, deve-se ter em mente que saturações pequenas geram valores superestimados, sendo, portanto, mais conservadores. Entretanto, não há forma de se controlar o grau de superestimativa embutida na análise. Mesmo realizando-se uma análise de sensibilidade com relação à saturação, ao se deparar com casos com grande variabilidade, não pode-se ter certeza de qual valor de saturação irá produzir uma estimativa mais confiável.

3.5. Conclusões

Este capítulo analisou o efeito do uso da consideração de fluxo em regime permanente na simulação do transporte na zona não-saturada. No modelo em diferenças finitas de fluxo e transporte vertical na zona não-saturada, FT1D, incluíram-se opções para simular fluxo transiente, permanente pelo método direto ou por aproximação do fluxo transiente. Também incluiu-se a opção de simular o transporte utilizando saturações e velocidade de infiltração fixas temporal e espacialmente. Avaliou-se também a técnica de análise fatorial como ferramenta de análise de sensibilidade da influência dos fatores do modelo de fluxo na adequação do uso da consideração do fluxo permanente. Análises de sensibilidade tradicionais foram aplicadas a alguns casos para se verificar as tendências apontadas pela análise fatorial.

A obtenção da solução de fluxo permanente pelo método direto pode não ser possível em alguns casos devido a problemas de não-convergência numérica, principalmente quando a solução do fluxo permanente está muito distante dos valores com que se iniciou o ciclo iterativo. Além disso, nos casos em que a solução direta do fluxo permanente não foi possível, o tempo computacional necessário para atingir a solução permanente por aproximação pode ser maior do que o tempo gasto na simulação transiente.

Na maioria dos casos analisados, utilizando a consideração de fluxo permanente pelo método direto ou por aproximação, o resultado superestimou a massa de contaminante que passou pelo ponto analisado, sendo que a massa estimada com a consideração de fluxo permanente chegou a ser ~ 18 vezes maior do que a estimada com fluxo transiente. Os casos em que a superestimação da massa que passa pelo ponto de observação foi maior ocorreram quando o perfil de umidade de equilíbrio era muito diferente do perfil de equilíbrio inicial ou o tempo para atingir o estado permanente era muito longo.

Para o solo silte-argiloso associado a grandes espessuras da zona não-saturada, obtiveram-se valores subestimados para a massa de contaminante que passou pelo ponto analisado utilizando fluxo permanente. Isto ocorreu devido às maiores saturações desenvolvidas neste caso, que geraram velocidades lineares menores do que utilizando fluxo transiente.

O solo arenoso apresentou as maiores superestimativas. Para este solo, considerando as condições iniciais e de contorno utilizadas, grandes taxas de precipitação, baixas

condutividades hidráulicas e zonas não-saturadas espessas geraram valores mais superestimados com o uso da consideração de fluxo permanente.

O solo silte-argiloso apresentou valores de E em torno de 1 (erro máximo de 14%), chegando a ser inferiores a 1, em alguns casos. Para este tipo de solo, utilizando condições iniciais e de contorno diferentes das utilizadas no solo arenoso, obteve-se maiores valores de E para baixas taxas de precipitação, altas condutividades hidráulicas e pequenas zonas não-saturadas.

Dentro das condições e da faixa de valores avaliadas, observou-se que solos com características mais argilosas foram mais favoráveis ao uso da consideração de fluxo permanente, gerando menor superestimação do que solos mais arenosos, mas também apresentaram valores subestimados.

O uso do método de fluxo permanente com perfis de saturação e descarga específica uniformes gerou valores de grau de adequação da estimativa comparáveis, em magnitude, aos produzidos pelo método de fluxo permanente direto ou por aproximação, embora, nos casos em que a superestimativa já era alta, ela tenha sido em muito aumentada para baixos valores de saturação. Para altas saturações, valores menores do que 1 foram obtidos para os casos em que o grau de superestimativa foi baixo.

A técnica de análise fatorial mostrou-se de grande utilidade para realizar-se rapidamente uma análise de sensibilidade dos parâmetros do modelo e localizar-se casos mais problemáticos. Pode-se refinar a análise aplicando a análise de sensibilidade tradicional (um fator de cada vez) a estes casos. Entretanto, em situações onde há a presença de valores máximos ou mínimos dentro da faixa de valores avaliada, a análise fatorial pode ser de interpretação mais difícil.

Foi demonstrado que o uso de fluxo permanente na avaliação de transporte na zona não-saturada do solo pode gerar estimativas de contaminação muito exageradas, de acordo com o perfil de saturações utilizado e sua influência na velocidade de deslocamento do contaminante, além de valores subestimados em alguns casos, embora seja uma alternativa de simulação mais rápida. Recomenda-se cautela ao se utilizar estas opções, em especial com relação ao uso de saturações e velocidades de infiltração constantes. É necessário observar que os resultados obtidos neste estudo foram influenciados pela escolha das condições inicial e de contorno, podendo-se obter resultados diferentes em outras situações.

4. MODELO TRIDIMENSIONAL SIMPLIFICADO DE FLUXO E TRANSPORTE NAS ZONAS NÃO-SATURADA E SATURADA

4.1. Introdução

O objetivo deste capítulo é apresentar um modelo de fluxo e transporte nas zonas não-saturada e saturada do solo, composto por um modelo unidimensional (vertical) de zona não-saturada e um modelo tridimensional de zona saturada. O resultado é um modelo simplificado que é proposto como alternativa aos modelos integrados de zona não-saturada e saturada, que, apesar de muito mais precisos, apresentam a desvantagem do elevado tempo computacional necessário para a execução das simulações.

O modelo de fluxo e transporte na zona não-saturada utilizado foi desenvolvido e validado no Capítulo 2 deste trabalho. Para a zona saturada, escolheu-se o modelo de fluxo tridimensional MODFLOW (McDonald e Harbaugh, 1988), da U.S.G.S, e o modelo de transporte tridimensional MT3D (Zhen, 1990), desenvolvido pela U.S.EPA. A escolha desses dois modelos foi devido à sua grande aceitação pelos usuários, sua portabilidade e eficiência computacional. Os pontos básicos destes dois modelos são descritos no item 4.3.

4.2. O problema da condição de contorno no topo do aquífero freático

Os modelos de fluxo em zona não-saturada enfrentam um problema comum: a posição do fim do domínio não-saturado pode variar ao longo do tempo de simulação. A condição de contorno para o topo do lençol freático é definida como sendo a posição no domínio cuja pressão da água é atmosférica, mas sua posição é desconhecida a priori, já que esta pode variar devido a fatores tais como recarga do aquífero e bombeamentos. O mesmo problema também afeta os modelos de zona saturada com relação ao topo do domínio em casos envolvendo aquíferos não-confinados.

Nos modelos de fluxo não-saturado, por exemplo, CHEMFLO (Nofziger et al., 1989), VS2DT (Healy, 1990), HYDRUS (Vogel et al., 1996; Simunek et al, 1998) e FEMWATER (Yeh et al., 1992), geralmente a posição da parte inferior do domínio é tratada como sendo fixa, onde são aplicadas as condições de contorno tradicionais, tais como carga nula ou fluxo especificado. Entretanto, o uso dessas condições de contorno com um domínio fixo não é apropriado para descrever o comportamento da água no topo do freático.

Ao atingir a zona saturada, a água infiltrante pode ter dois destinos: ser absorvida pelo aquífero ou se acumular sobre o freático. O primeiro caso ocorre quando a quantidade de água é pequena e/ou a capacidade de condução do aquífero é alta. Caso contrário, quando a capacidade do aquífero em conduzir a água é superada, o topo do aquífero se eleva acompanhando o aumento da pressão da água, uma vez que o topo do aquífero é definido como sendo a posição onde a água se encontra à pressão atmosférica.

Como exemplo, pode-se imaginar um caso de infiltração ou drenagem em zona não-saturada onde se especifica carga nula a um ponto fixo do domínio. Isto equivale a estipular que toda água que chegue a este ponto deva deixar o domínio, para que a pressão da água permaneça constante. Entretanto, como foi visto, esta situação não é real, já que nem toda água que chega ao fundo da zona não-saturada é absorvida instantaneamente pelo aquífero freático.

Utilizar a condição de contorno de fluxo especificado seria uma condição mais apropriada, já que permite que quantidade de água que exceda a determinado fluxo se acumule, aumentando assim a pressão e deslocando o freático para cima. Entretanto, a fração do fluxo que entra no aquífero, bem como a que é retida sobre ele, dependem das características hidrogeológicas do aquífero e da condição do fluxo no momento, não sendo possível prevê-lo de antemão. A versão 6.0 do modelo HYDRUS (Simunek et al, 1998) inclui esta opção para o caso onde a descarga para o aquífero é conhecida, sendo que cabe ao usuário informar os parâmetros de uma função exponencial ajustada para descrever a relação entre a descarga para o aquífero e a posição do topo do aquífero.

Segundo Anderson e Woessner (1992), apenas duas soluções são possíveis para este problema. A primeira delas é a simulação em conjunto de todo o domínio, não-saturado e saturado. Assim, a faixa da franja capilar seria tratada como parte do domínio e não como um contorno. O modelo de fluxo FEMWATER (Yeh et al., 1992) utiliza-se desta opção, constituindo um exemplo dos chamados modelos integrados de zona não-saturada e saturada.

A segunda opção é a aplicação da simplificação de Dupuit-Forchheimer (ou apenas Dupuit) à parte saturada do domínio (Freeze e Cherry, 1979; Anderson e Woessner, 1992). Esta simplificação é baseada em duas considerações:

- as linhas de fluxo são horizontais e as equipotenciais verticais;
- o gradiente hidráulico é dado pela inclinação da superfície livre, sendo constante ao longo da profundidade do aquífero.

Na prática, esta simplificação desconsidera os componentes verticais do fluxo e é razoável em situações onde a inclinação da superfície livre é pequena. Um exemplo de modelo de fluxo que emprega essa simplificação é o MODFLOW (Anderson e Woessner, 1992).

As duas opções de tratamento para a posição do topo do aquífero freático apresentam vantagens e desvantagens. A modelagem integrada das duas zonas é muito mais precisa, mas pode gerar um custo computacional elevado já que as soluções numéricas para problemas de fluxo não-saturado em geometrias multidimensionais são muito sujeitas a problemas numéricos. O uso da simplificação de Dupuit permite reduzir em muito o tempo de execução. Entretanto, os fenômenos que ocorrem na zona não-saturada são totalmente desprezados, equivalendo a se retratar uma zona não-saturada rasa. Por exemplo, em casos envolvendo zonas não-saturadas espessas, a recarga do aquífero é atrasada devido ao armazenamento do fluxo infiltrante ao longo da zona não-saturada. Isto pode torna-se importante em análises envolvendo transporte na zona não-saturada.

A Figura 4.1 demonstra a diferença que o armazenamento da zona não-saturada causa à propagação de uma pluma de contaminante. A figura mostra a simulação de um caso de infiltração utilizando os modelos MODFLOW/MT3D e FEMWATER/LEWASTE, após 1000 minutos de simulação. O caso retrata o avanço de uma pluma gerada pela aplicação de uma concentração fixa de 100 mg/l no topo de uma zona não-saturada bidimensional de 1 m de espessura (topo do aquífero inicialmente localizado a 200 cm do fundo do aquífero) e solo arenoso homogêneo, com a aplicação uniforme de uma taxa de precipitação constante de 0,01 cm/min. Os limites esquerdo e direito do domínio bidimensional de 5 metros de largura foram considerados como tendo condições de contorno de carga constante a 200 cm do fundo e fluxo nulo, respectivamente. A figura refere-se a um poço de observação localizado a 1 metro do limite esquerdo do domínio.

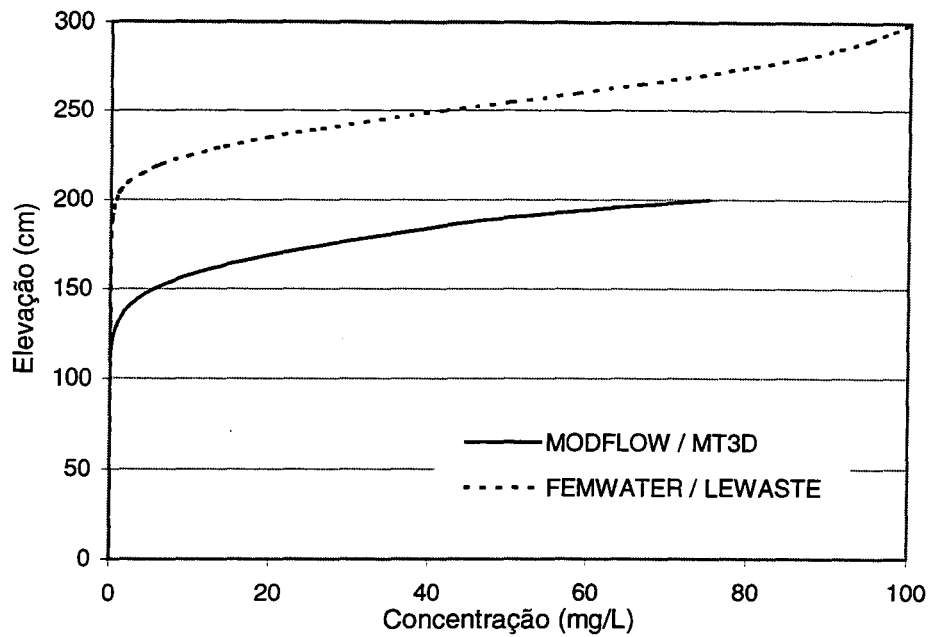


Figura 4.1 – Avanço da pluma de contaminante utilizando os modelos MODFLOW/MT3D e FEMWATER/LEWASTE, após 1.000 minutos de simulação.

Pode-se observar que, após um tempo de simulação de 1000 minutos, a pluma do contaminante simulada através de FEMWATER/LEWASTE acaba de alcançar o topo do aquífero, enquanto, segundo os modelos MODFLOW/MT3D, a concentração neste ponto já teria atingido o valor de ~75 mg/l. Portanto, na situação simulada, a desconsideração da zona não-saturada causou um exagero de 75% na previsão da concentração para o topo do aquífero. Ainda segundo a simulação com MT3D, a pluma já teria atingido a elevação de 125 m do fundo do aquífero. Por outro lado, enquanto o tempo computacional gasto na simulação com MODFLOW/MT3D foi de poucos minutos, o tempo utilizando FEMWATER/LEWASTE foi de cerca de 90 minutos.

A conexão de modelos de fluxo não-saturado com modelos saturados é uma solução interessante para que se possa incluir os efeitos da zona não-saturada na simulação de fluxo saturado, de uma forma menos rigorosa do que o uso de um modelo integrado mas mantendo a vantagem da eficiência computacional.

Hornberger et al. (1969) propuseram este tipo de abordagem para estudar um problema bidimensional de rebaixamento de aquífero, no qual realizou-se a conexão de um modelo não-saturado com um modelo saturado, mantendo-se fixos a posição e o valor da condição de contorno. Os autores afirmam que, devido ao rápido movimento do topo do aquífero no início da simulação, são necessários incrementos de tempos bastante reduzidos.

Pikul et al. (1974) introduziram o ajuste do comprimento da coluna de solo e um coeficiente de armazenamento dinâmico no trabalho de Hornberger et al. (1969), através da conexão de várias colunas não-saturadas verticais (modelos não-saturados verticais) a um modelo bidimensional saturado horizontal. O trabalho assume como considerações: a validade da teoria de Dupuit-Forchheimer para o modelo de fluxo saturado; o fluxo não-saturado é essencialmente vertical; os valores de armazenamento e recarga são constantes ao longo de cada incremento de tempo; a mudança instantânea da posição do topo do aquífero no início de cada incremento de tempo é válida.

A última das considerações assumidas implica que o perfil de pressões e saturações é ajustado à mudança da posição do aquífero decorrente do incremento de tempo anterior ao longo do incremento de tempo atual. Isto implica que grandes alterações na posição do aquífero de um incremento de tempo para outro devem ser evitados através do uso de incrementos de tempo pequenos. Os autores citam também o uso de um ciclo iterativo para corrigir este problema, mas a forma deste ciclo não é indicada. Os autores concluíram que, para casos onde o fluxo lateral na zona não-saturada é significativo, tais como em pequenos sistemas em laboratório, o modelo não apresenta bons resultados, mas, para situações de campo, onde os gradientes do topo do aquífero são pequenos, as considerações são válidas.

Gutab (1988) apud Fedors (1997) realizou a conexão de um modelo bidimensional não-saturado a um modelo saturado bidimensional de fluxo horizontal. O problema não-saturado foi resolvido primeiro para fornecer o termo de recarga para o modelo saturado. Mais recentemente, Fedors (1997) utilizou o mesmo tipo de procedimento para conectar um modelo unidimensional ao modelo tridimensional de fluxo saturado MODFLOW, alterando posição da parte inferior do domínio do modelo unidimensional de acordo com a variação da carga nas células da primeira camada do domínio do MODFLOW. Cada período de stress do MODFLOW foi tratado como um período de simulação completo do modelo não-saturado e a recarga ao fim de um período de simulação é calculada com base no balanço de massa realizado para o período.

4.3. Breve descrição dos modelos MODFLOW e MT3D

O modelo de fluxo saturado MODFLOW (McDonald e Harbaugh, 1988) foi desenvolvido pela United States Geological Survey (U.S.G.S.) com o objetivo de ser simples de usar, altamente portátil e eficiente com relação ao gasto de memória computacional e tempo de execução. Para isso, ele foi elaborado utilizando uma estrutura modular, de forma que as opções computacionais e hidrológicas são independentes umas das outras. Assim, novas opções podem ser facilmente adicionadas como novos módulos sem causar conflito com as opções preexistentes. Entre as opções de simulação disponíveis, podem-se citar a simulação de poços, recarga, rios, drenos e evapotranspiração.

O programa resolve a equação de fluxo transiente em meio poroso tridimensional heterogêneo e anisotrópico. A equação, juntamente com as condições iniciais e de contorno (carga e/ou fluxo), é resolvida por diferenças finitas, resultando em um sistema de equações lineares que pode ser resolvido através de duas opções de esquemas iterativos (“Strongly Implicit Procedure” e “Slice-Successive Overrelaxation”). O domínio a ser simulado é discretizado em linhas, colunas e camadas, sendo que, de modo geral, as camadas correspondem aos horizontes hidrogeológicos. Os nódulos na discretização são localizados no centro dos blocos, tanto horizontal quanto verticalmente.

O esquema de discretização temporal é implícito, sendo que o tempo de simulação pode ser dividido em períodos nos quais as condições impostas são mantidas constantes (tal como uma determinada taxa de recarga ou de bombeamento), denominados períodos de stress. Cada período de stress pode ser também subdividido em intervalos menores, de acordo com as necessidades da simulação.

O modelo de transporte em zona saturada MT3D (Zhen, 1990), desenvolvido pela United States Environmental Agency (U.S.EPA), segue a mesma estrutura modular empregada em MODFLOW. Embora qualquer modelo de fluxo possa ser utilizado para gerar os dados de fluxo necessários ao MT3D, o modelo MODFLOW é uma escolha natural pois ele gera os arquivos necessários à simulação do MT3D, na formatação apropriada para serem lidos pelo MT3D. O modelo assume automaticamente as condições de contorno para o domínio especificadas no modelo de fluxo. O modelo de transporte simula os fenômenos de advecção, dispersão e reações químicas para um meio poroso saturado tridimensional.

A solução numérica utiliza três opções para a solução do problema advectivo: método das características (MOC), método das características modificado (MMOC) e um método híbrido (HMOC). O objetivo desses esquemas de solução numérica é conjugar a eficiência do

método das características em evitar problemas de dispersão e oscilações numéricas com métodos mais econômicos do ponto de vista computacional (ver Capítulo 2 para maiores detalhes sobre o assunto). A parte dispersiva do transporte, bem como as reações químicas, são resolvidas por diferenças finitas com a discretização aplicada ao centro da célula. Como o modelo utiliza um esquema explícito na discretização temporal, a simulação está sujeita a critérios de estabilidade na escolha do tamanho do incremento temporal.

4.4. Conexão dos modelos das zonas não-saturada e saturada

O acoplamento de uma zona não-saturada, através de um modelo de fluxo e transporte não-saturado, aos modelos MODFLOW e MT3D tem como objetivo permitir a consideração do armazenamento e a simulação dos fenômenos de transporte passíveis de ocorrer na zona não-saturada do solo, principalmente em casos de aquíferos freáticos mais profundos. Além disso, tem-se em vista a economia de tempo computacional ao utilizar esse esquema em comparação com os modelos integrados da zona não-saturada e saturada. Também pretende-se reduzir a possibilidade de ocorrer instabilidades e oscilações numéricas, muito comuns nos modelos multidimensionais da zona não-saturada.

Para a simulação da zona não-saturada, utilizou-se o modelo de fluxo e transporte unidimensional FT1D, apresentado e validado no Capítulo 2 deste trabalho. Para a zona saturada, escolheu-se o modelo de fluxo tridimensional MODFLOW e o modelo de transporte tridimensional MT3D. A escolha desses dois modelos foi devido à sua grande aceitação pelos usuários, sua portabilidade e eficiência computacional. As metodologias utilizadas na conexão dos modelos de fluxo e de transporte são descritas nos ítems abaixo.

4.4.1. Conexão dos modelos de fluxo não-saturado e saturado

A conexão entre o modelo unidimensional de fluxo na zona não-saturada (FT1D) ao modelo MODFLOW foi realizada de duas formas, utilizando a metodologia de alteração instantânea do domínio não-saturado, proposta por Pikul et al. (1974) e aplicada por Fedors (1997), e uma nova metodologia que obtém um alteração gradual do domínio ao longo da simulação.

A metodologia de conexão de Pikul et al. (1974) tem como base o cálculo da recarga na zona não-saturada ao longo de um período de stress (período de cálculo de MODFLOW no

qual as condições de contorno são mantidas constantes) e a alteração da condição de contorno inferior do domínio não-saturado de acordo com a resposta do aquífero a esta recarga, sendo esta alteração feita ao final do período de stress. Nesta metodologia, cada período de stress de MODFLOW corresponde a uma simulação completa de FT1D. Em FT1D, o período de stress é subdividido em intervalos de tempo menores do que em MODFLOW, devido à maior rapidez do fluxo na zona não-saturada e às suas características de fenômeno não-linear. O esquema da metodologia de Pikul et al. (1994), desenvolvido por Fedors (1997), pode ser visto na Figura 4.2.

Segundo esta metodologia, ao se iniciar um período de stress em MODFLOW, a recarga é colocada ativa mas é atribuído valor zero a ela. MODFLOW executa os preparativos para a simulação do período de stress atual, que inclui a leitura dos arquivos de entrada de dados, alocação de memória, etc. Antes de iniciar a simulação do período de stress, o programa acessa três subrotinas incluídas para adicionar a zona não-saturada ao MODFLOW. Estas subrotinas são executadas para cada coluna e linha do domínio de MODFLOW, sendo executadas, portanto, $ncol * nrow$ vezes, onde $ncol$ é o número de colunas e $nrow$ é o número de linhas.

A primeira dessas subrotinas verifica se houve alteração na carga das células da primeira camada do domínio de MODFLOW durante o período de stress anterior. Estas cargas indicam que ocorreu uma elevação ou rebaixamento do aquífero. Caso tenha havido alterações, o tamanho do domínio não-saturado é reduzido ou aumentado, acompanhando o rebaixamento ou a elevação do aquífero. As células que não estavam sendo usadas anteriormente (em caso de rebaixamento do aquífero) são inicializadas com pressão nula, para permitir que elas drenem durante a simulação seguinte. Esta subrotina pode ser facilmente retirada do modelo para realizar a simulação mantendo fixa a espessura do domínio não-saturado.

Após esta subrotina, segue-se a subrotina de cálculo de fluxo na coluna correspondente à coluna e linha de MODFLOW que está sendo simulada, utilizando a rotina de fluxo de FT1D. Durante esta simulação, que corresponde a um período de stress de MODFLOW, o domínio não-saturado é mantido fixo e é atribuída pressão nula à célula inferior do domínio (condição de contorno de carga fixa) e, ao topo, é imposta a taxa de precipitação indicada pelo usuário (condição de contorno de fluxo especificado). Nota-se que o perfil de pressões inicial ao longo do domínio não-saturado é assumido como sendo o perfil final do período de stress anterior, com exceção do primeiro período de stress, onde assume-se perfil de equilíbrio.

Ao fim de cada incremento de tempo de FT1D, o programa calcula a taxa com que a água deixa o domínio não-saturado durante este incremento de tempo (igual à taxa de recarga do aquífero) e este valor é armazenado. A taxa de recarga em cada incremento de tempo é calculada através de um balanço de massa no perfil não-saturado. É possível estimar esta taxa como a descarga específica na última célula do domínio, entretanto, a aplicação da Equação de Darcy à última célula através de diferenças finitas não é um método muito preciso.

Ao fim da simulação do período de stress, o programa entra na terceira subrotina citada, onde é estimada a taxa de recarga média para o período de stress atual com base nas taxas de recarga estimadas por FT1D para cada incremento de tempo. Além disso, esta subrotina atribui o valor de recarga média à matriz de recargas do MODFLOW, correspondente à coluna e linha que está sendo simulada, preparando para o início da simulação do período de stress atual em MODFLOW.

Após todas as (*ncol.nrow*) colunas terem sido simuladas por estas três subrotinas, o programa continua a simulação do período de stress de MODFLOW. Este ciclo se repete para todos os períodos de stress até que o período total de simulação seja atingido. Durante toda a simulação, os dados necessários para a simulação de transporte são armazenados em arquivos binários tanto por FT1D quanto por MODFLOW, na formatação apropriada para serem lidos pelos programas de simulação de transporte.

Esta metodologia apresenta um problema: a condição de contorno no fim do domínio não-saturado é mantida fixa durante cada período de stress, sendo alterada somente ao fim deste período. Com isso, a mudança da condição de contorno, que é um resultado da recarga referente ao período de stress atual, vai incidir sobre o período de stress seguinte. O efeito desta alteração é sentida pela formação de um fluxo de água para cima como resposta à acomodação do perfil de pressões à nova condição de contorno. Este efeito é tanto maior quanto maior for a alteração da condição de contorno.

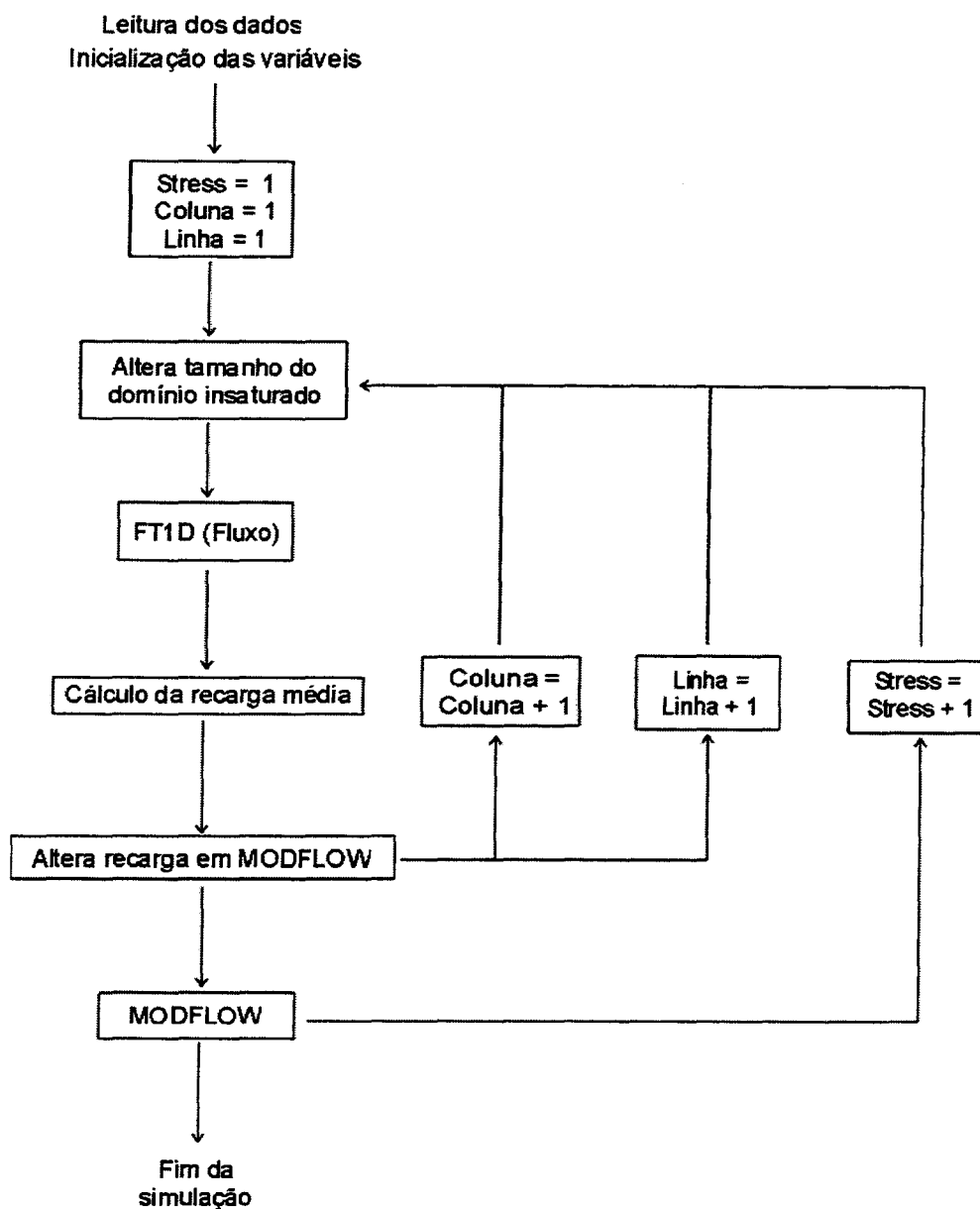


Figura 4.2 – Esquema do algoritmo do modelo FT1D-MODFLOW baseado na metodologia de Fedors (1997).

Para se evitar este inconveniente, elaborou-se uma nova proposta para realizar a conexão de um modelo de zona não-saturada a um modelo de fluxo saturado. Esta proposta se baseia na inclusão de um ciclo iterativo que permita o ajuste do perfil de pressões e da posição da condição de contorno inferior da zona não-saturada ao longo de toda simulação, através do uso conjunto de dois tipos de condições de contorno. O ponto básico desta metodologia é a suposição de que a recarga calculada utilizando a condição de contorno de carga fixa no fim do domínio não-saturado é a maior recarga possível de se obter, equivalendo à situação em que toda a água infiltrante é absorvida pelo aquífero e o topo do domínio não-saturado não se eleva.

A situação real estaria mais próxima de uma condição de contorno de fluxo determinado, equivalendo ao máximo de fluxo que o aquífero pode absorver. Neste caso, toda água que excedesse a capacidade de absorção e de condução do aquífero seria acumulada sobre o mesmo, elevando seu contorno. O grande problema neste caso é que não se conhece o valor de fluxo limite, que é também variante ao longo do tempo de acordo com as condições de fluxo do aquífero.

A solução proposta para este problema foi a suposição de que o fluxo limite de absorção do aquífero estaria compreendido entre zero e o valor da recarga máxima do aquífero, sendo este valor de fluxo calculado utilizando a condição de contorno de pressão nula para o fim do domínio não-saturado. A fração da recarga máxima que equivale à recarga que deve ser adicionada ao aquífero foi obtida através de tentativas onde se compara a elevação das pressões no fim do domínio não-saturado, como resposta do módulo de fluxo do modelo FT1D, e no topo do aquífero, como resposta do modelo MODFLOW. Nesta etapa, a condição de contorno no fim do domínio não-saturado foi estipulado como fluxo constante. Deve-se notar que a elevação da pressão no fim da zona não-saturada corresponde à diferença entre o fluxo máximo (com carga fixa) e o fluxo que é retirado do domínio. O valor ótimo é obtido por aproximações a partir de um valor inicial de fração. A Figura 4.3 mostra um esquema deste processo.

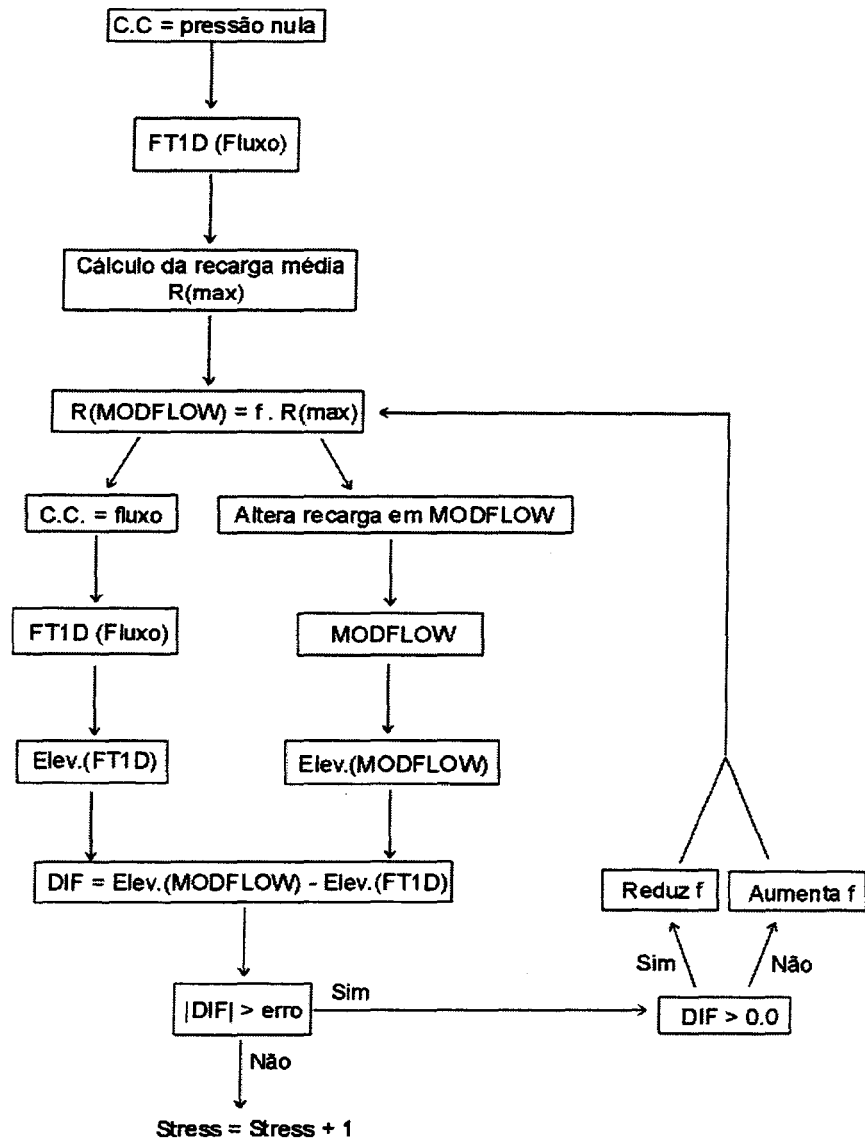


Figura 4.3 – Esquema da nova metodologia proposta para o modelo FT1D-MODFLOW, mostrado para um período de stress.

Assim, primeiramente, a condição de contorno no fim do domínio não-saturado é colocada como fluxo nulo. O modelo FT1D é simulado para o período de stress e a recarga nesta situação é calculada pela média das recargas de cada incremento de tempo de FT1D. Esta recarga equivale à recarga máxima para este período ($R(max)$). O valor-tentativa para a recarga no MODFLOW é obtido como uma fração f da recarga máxima. Este valor é introduzido no MODFLOW e também como condição de contorno de fluxo determinado para FT1D e ambos os modelos são executados para esta condição. As elevações produzidas nas zonas não-saturada ($Elev.(FT1D)$) e saturada ($Elev.(MODFLOW)$) são calculadas e comparadas. Se o módulo da diferença entre elas (DIF) estiver abaixo de determinado erro, o programa passa para o próximo período de stress. Se não estiver, o sinal de DIF é pesquisado para se obter o sentido em que f deve ser alterada. Se DIF for positivo, significa que a recarga utilizada foi maior do que deveria ser; portanto, f deve ser reduzida. Caso contrário, a recarga foi insuficiente e f deve ser aumentada.

A forma como f é alterada segue o método da bisseção, utilizado tradicionalmente para buscar determinado valor em uma tabela ordenada (Press et al., 1992). O valor inicial foi estipulado como 0,5, permitindo que primeiro ciclo defina o lado em que se encontra o valor de f que se busca, ou seja, na direção de 0,0 ou de 1,0. Em cada passo de aproximação, o novo valor é obtido pela média entre os dois valores que delimitam os valores prováveis. A Figura 4.4 traz um exemplo do método da bisseção aplicado ao caso da alteração de f . Neste exemplo, a segunda aproximação foi obtida como 0,75 (média entre 0,5 e 1,0), seguida de 0,875 (média entre 0,75 e 1,0), de 0,8125 (média entre 0,75 e 0,875), e assim por diante até que o limite do erro seja obtido.

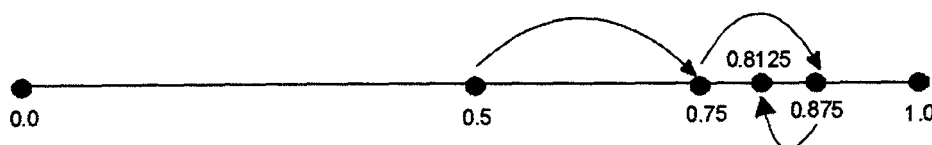


Figura 4.4 – Exemplo da forma de obtenção de f pelo método da bisseção.

No início de cada período de stress, são guardadas as informações referentes a este momento, tais como pressões na zona não-saturada e cargas na zona saturada. A cada vez que os modelos FT1D e MODFLOW são executados dentro do ciclo iterativo, os dados iniciais são recuperados a fim de que a simulação parta sempre do mesmo ponto inicial. Ao fim do período de stress, o domínio não-saturado é pesquisado para determinar a formação de pressões positivas e o domínio é ajustado para excluir estes valores.

Deve-se observar também que apenas uma coluna não-saturada foi simulada nesta metodologia, ao invés de (*ncol.nrow*) vezes na metodologia de Fedors (1997). Por isso, a recarga estipulada para MODFLOW foi introduzida igualmente para todas as colunas e linhas. Além disso, a posição do aquífero a ser comparada com o resultado da zona não-saturada foi estipulada como o ponto de maior elevação do domínio. Entretanto, o efeito desta escolha pode ser avaliado com a alteração desta posição e a comparação dos resultados.

4.4.2. Conexão dos modelos de transporte não-saturado e saturado

Durante a execução dos modelos de fluxo FT1D e MODFLOW são gerados dois arquivos binários para a transferência dos dados de fluxo necessários à simulação de transporte, tanto na zona não-saturada quanto na saturada. Basicamente, são necessários as velocidades de Darcy ao longo do tempo para cada célula do domínio, além das saturações para o modelo de transporte não-saturado. Estes dados são lidos a cada período de stress (em MT3D) e a cada intervalo de tempo (em FT1D).

A interação entre os modelos de transporte não-saturado (FT1D) e saturado (MT3D) foi estabelecida através da condição de contorno no topo do aquífero, em MT3D. Para isso, duas opções se apresentam: o uso da condição de contorno de concentração especificada ou o uso do termo de fontes (recarga). À primeira vista, parece ser mais adequada a especificação da concentração do contaminante no fluxo de recarga. Entretanto, ao se comparar os resultados obtidos utilizando esta opção com um modelo de transporte integrado das zonas não-saturada e saturada (LEWASTE), verifica-se que a concentração prevista para a zona saturada é subestimada com relação aos resultados gerados por LEWASTE. A razão para isso é que a concentração no topo do aquífero é aumentada lentamente até atingir o valor estipulado na recarga. Por isto, preferiu-se utilizar a condição de contorno de concentração estipulada para o topo do aquífero.

Para permitir o cálculo da concentração na célula imediatamente em contato com o aquífero, a condição de contorno de concentração fixa para a zona não-saturada não pode ser atribuída a esta célula. Por isso, o domínio não-saturado (em FT1D) foi estendido para baixo do topo do aquífero, de forma que o avanço da pluma na zona não-saturada não seja influenciado pela condição de contorno inferior, ou seja, que haja sempre um transporte livre do contaminante para baixo. Outra opção para este procedimento é o uso da condição de contorno de gradiente de concentração nulo no fim do domínio não-saturado.

Como os dados provenientes do modelo de fluxo não-saturado se limitam à extensão real do domínio não-saturado, o restante dos vetores de saturação e de descarga específica foram preenchidos com o valor da célula correspondente ao limite do domínio. Após a simulação do transporte não-saturado, a condição de contorno no topo do domínio saturado é estipulada como a concentração na célula correspondente ao limite entre os dois domínios, sendo o domínio não-saturado mantido fixo para o transporte. Em MT3D, esta condição de contorno é alterada no início de cada período de stress, com base nos resultados da simulação do transporte não-saturado ao longo deste período.

A condição de contorno deve ser mantida fixa ao longo de cada período de stress de MT3D, da mesma forma que a taxa de recarga em MODFLOW. Entretanto, para FT1D, a concentração no ponto de contato entre os dois domínios é alterada continuamente. Para a escolha da condição de contorno para determinado período de stress, três alternativas são possíveis: utilizar a concentração do início do período de stress, do fim ou a concentração média. Considerou-se que o uso da concentração do início do período de stress seria inaceitável por não incluir as alterações decorrentes deste período. Das duas outras opções, escolheu-se utilizar a concentração do fim do período, por ser mais conservadora.

Em princípio, o modelo FT1D-MT3D permite a simulação do transporte em (*ncol.nrow*) colunas não-saturadas. Entretanto, pode-se alterar o programa para simular apenas uma coluna se não houver diferença entre as condições das múltiplas colunas e linhas. Neste caso, a condição de contorno especificada deve ser estendida para todas as demais colunas. A Figura 4.5 descreve o algoritmo implementado no modelo FT1D-MT3D.

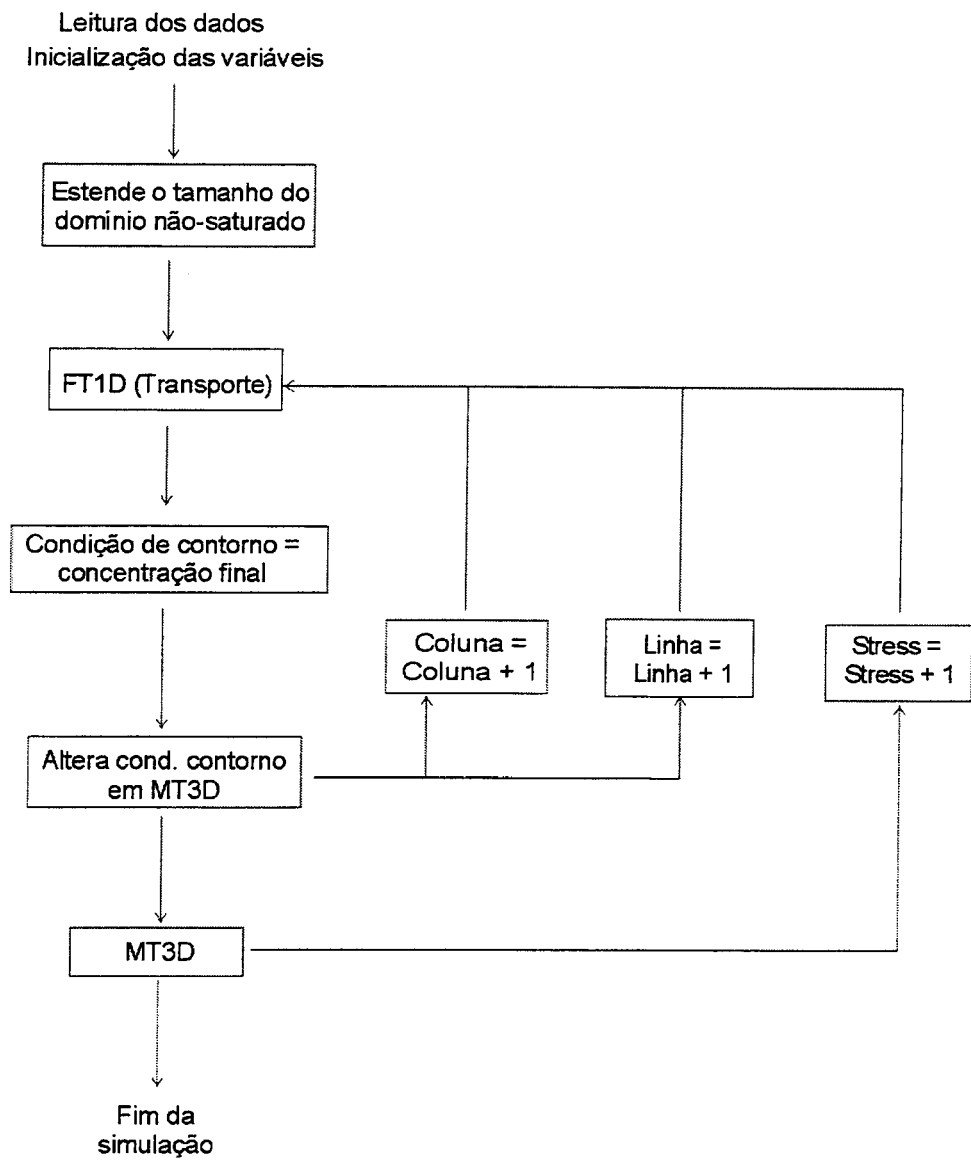


Figura 4.5 – Esquema do algoritmo do modelo FT1D – MT3D.

4.5. Resultados e discussões

4.5.1. Modelo de fluxo não-saturado e saturado

Foram elaboradas três versões do algoritmo de conexão entre os modelos de fluxo não-saturado unidimensional (FT1D) e o de fluxo saturado MODFLOW, gerando o modelo FT1D-MODFLOW. A primeira versão (denominada FT1D-MODFLOW/V1) utiliza a metodologia completa proposta por Pikul et al. (1974), e aplicada por Fedors (1997), tal como foi mostrada na Figura 4.2. A segunda versão (FT1D-MODFLOW/V2) utiliza a mesma metodologia da versão anterior mas sem a subrotina de alteração do tamanho do domínio não-saturado. A terceira versão (FT1D-MODFLOW/V3) emprega a nova metodologia de conexão apresentada na Figura 4.3.

As três versões de FT1D-MODFLOW foram testadas para dois casos de recarga, em domínio bidimensional e tridimensional, sendo os resultados das simulações comparados com os obtidos utilizando o modelo de fluxo integrado nas zonas não-saturada e saturada FEMWATER. Também são comparados os tempos de execução necessários para cada modelo, sendo que todas as simulações foram executadas em um microcomputador com processador Pentium II 300 MHz e 128 Mb de memória RAM.

Exemplo 4-1. Simulação de fluxo (Caso bidimensional)

O caso simulado retrata a elevação do topo de um aquífero bidimensional (em seção transversal) homogêneo e isotrópico com 10 metros de largura e 3 metros de altura, delimitado nos dois lados por canais drenantes (Figura 4.6). Inicialmente, o topo da zona saturada é horizontal e está localizado a 200 cm do fundo do aquífero (zona saturada com 2 metros de espessura). Os canais que delimitam o domínio lateralmente têm carga fixa de 200 cm e o fundo do aquífero é impermeável. No topo da zona não-saturada é aplicada uniformemente a precipitação de 0,01 cm/min, constante durante a simulação. O solo do aquífero é arenoso, sendo utilizado o Solo 1 descrito na Tabela 2.1.

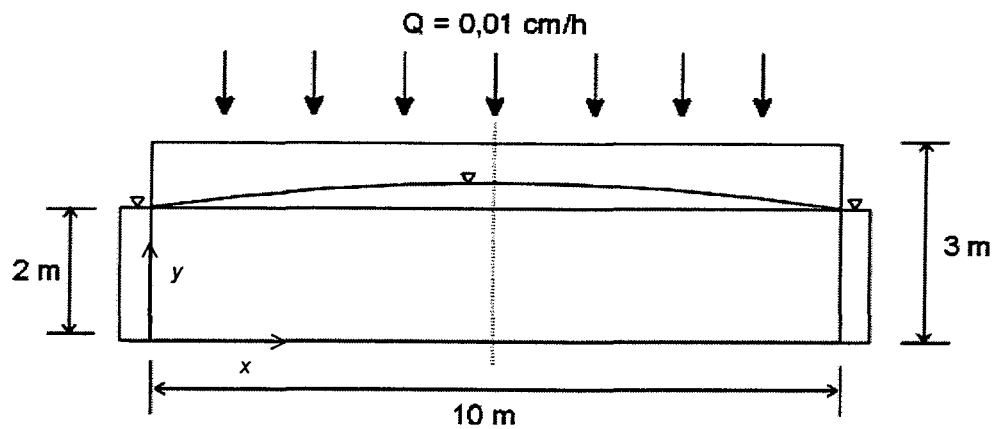


Figura 4.6 – Geometria e dimensões para o Exemplo 4-1.

Como o domínio é simétrico, simulou-se uma de suas metades (ou seja, 5 metros de largura) e, para a condição de contorno em um dos lados, foi atribuído fluxo nulo. Horizontalmente, o domínio foi dividido em 25 colunas de 20 cm de largura. Verticalmente, na zona saturada, utilizaram-se 20 camadas de 10 cm de espessura e, na zona não-saturada, dividiu-se em blocos de 1 cm de espessura. Simulou-se 2000 minutos de infiltração, divididos em 200 períodos de stress de 10 minutos de intervalo cada. Utilizou-se um esquema semelhante para a simulação com FEMWATER.

Durante as simulações utilizando a primeira versão (FT1D-MODFLOW/N1), observaram-se oscilações na posição do topo do aquífero ao longo dos períodos de stress, chegando a situações de instabilidade. Este efeito pode ser observado na Figura 4.7, onde é mostrada a evolução no tempo da elevação do aquífero junto à condição de contorno direita (5 m do canal) obtida através da simulação de FEMWATER e das versões V1 e V2 de FT1D-MODFLOW.

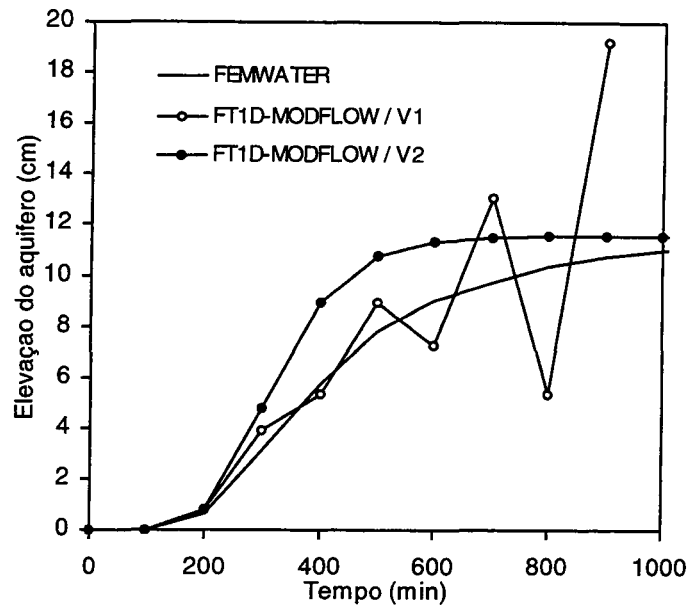


Figura 4.7 – Elevação do aquífero ao longo do tempo, a 5 m do canal (Exemplo 4-1)

Uma possível explicação para tais oscilações é a mudança instantânea da posição da condição de contorno da zona não-saturada no início de um período de stress. Como a elevação do aquífero é mantida constante durante todo o período de stress do MODFLOW e depois alterada instantaneamente ao se passar de um período de stress para outro, cria-se na zona não-saturada um gradiente de umidade no sentido oposto ao do fluxo, como resposta à acomodação do perfil das pressões à nova posição da condição de contorno. O resultado dessa acomodação é que a taxa de recarga é alterada com relação aos valores normais, principalmente nos primeiros incrementos de tempo de FT1D de cada período de stress. Se a elevação (ou rebaixamento) for grande, o fluxo de umidade no sentido oposto do fluxo preferencial (para cima, no caso de elevação, e para baixo, no caso de rebaixamento) pode ser significativo e causar o rebaixamento (ou elevação) do aquífero.

Pikul et al. (1974) não mencionam diretamente essas oscilações mas argumentam que é necessário deixar que o sistema interaja várias vezes para satisfazer as condições de contorno internas. Entretanto, os autores não detalham a forma do ciclo iterativo que adotaram. Uma maneira possível seria continuar a simulação até que o sistema atinja o novo equilíbrio, quando o fluxo negativo cessaria. Entretanto, durante este processo, a condição de contorno no topo do domínio não-saturado (precipitação) continuaria agindo, alterando o perfil de pressões. Outra forma alternativa é utilizar incrementos de tempo bastante pequenos, tal como aconselham Pikul et al. (1974). Neste caso, o objetivo é obter alterações mínimas a cada incremento de tempo para que a acomodação seja rápida. Mas, dependendo da taxa de precipitação utilizada e de sua extensão areal, mesmo pequenos incrementos de tempo podem produzir alterações significativas do ponto de vista da acomodação da condição de contorno.

Pikul et al. (1974) também apontam que a melhor situação seria não variar a posição da condição de contorno inferior do domínio não-saturado. Os autores argumentam que, para a maior parte das situações práticas, em escala real, a alteração da posição do topo do aquífero é mínima e pode ser desprezada. Esta situação equivale à simulação da versão V2 de FT1D-MODFLOW. Na Figura 4.7, pode-se observar que a elevação do aquífero simulada com esta versão é mais rápida do que com FEMWATER, mas acredita-se que os argumentos de Pikul et al. (1974) sejam razoáveis, ainda mais quando se está interessado na simulação de transporte em última instância.

A Figura 4.8, Figura 4.9 e Figura 4.10 mostram a evolução da elevação da linha do topo do aquífero ao longo do espaço entre o canal lateral e a condição de contorno de fluxo nulo (5 m do canal), para os primeiros 500 min de simulação, utilizando os modelos FEMWATER, FT1D-MODFLOW/V2 e FT1D-MODFLOW/V3, respectivamente. O resultado das simulações utilizando MODFLOW não permitem visualizar a evolução do topo do aquífero já que, logo nos primeiros períodos de stress, os estados estacionários já são atingidos, correspondendo a uma elevação máxima (a 5 m do canal) de 11,56 cm. O tempo de execução total para 2000 minutos de simulação foi de 2h18min para FEMWATER, 16,2 seg para FT1D-MODFLOW/V2, 13,6 min para FT1D-MODFLOW/V3 e 8 seg para MODFLOW. Portanto, FT1D-MODFLOW/V2 e FT1D-MODFLOW/V3 foram, respectivamente, 518 e 10 vezes mais rápidos do que FEMWATER.

Tal qual mostrado na Figura 4.7, novamente pode-se observar que FT1D-MODFLOW/V2 gerou uma subida do aquífero muito mais rápida do que FEMWATER. Enquanto a elevação segundo FEMWATER é de 7,8 cm após 500 min de simulação, FT1D-

MODFLOW/V2 fornece um valor próximo do estado estacionário (11,18 cm). Um dos fatores responsáveis por este fato é a manutenção da pressão fixa no fim da zona não-saturada ao longo de cada período de stress, fazendo com que o armazenamento calculado seja menor do que o real e, conseqüentemente, a taxa de recarga seja maior. Outra possível causa é o fluxo lateral na zona não-saturada. Como se utilizam colunas não-saturadas verticais, todo o fluxo lateral é desconsiderado. Em casos em que a componente horizontal do fluxo é importante, os erros devidos a esta consideração podem ser grandes. Entretanto, a simplicidade deste modelo e rapidez de execução podem compensar a falta de precisão nos resultados.

Na simulação de FT1D-MODFLOW/V3, adotou-se um erro permissível de 1.E-3 cm para o processo de comparação entre as elevações nas zonas não-saturada e saturada, sendo que a comparação foi feita para a coluna 25 da zona saturada. Comparando-se as figuras seguintes, pode-se verificar que a versão V3 de FT1D-MODFLOW apresentou resultados bem mais próximos de FEMWATER do que a versão V2. Além disso, não foi observado nenhum tipo de oscilação numérica nas simulações utilizando a versão V3 de FT1D-MODFLOW. O ciclo iterativo introduzido para conectar os domínios não-saturado e saturado apresentou boa taxa de convergência, com um média de 7 iterações para atingir-se o erro permissível (número máximo de 18 iterações).

Isto demonstra que a nova metodologia proposta é eficaz para simular a elevação do aquífero em resposta a uma recarga proveniente da zona não-saturada, sem gerar os problemas observados na versão V1 de FT1D-MODFLOW. A diferença básica entre o ajuste do domínio não-saturado nesta nova metodologia e na metodologia proposta em Fedors (1997) é que, ao fim do período de simulação, o perfil de pressões já se encontra acomodado à posição da nova condição de contorno. Desta forma, não há a formação de fluxos de água negativos (sentido inverso à infiltração) durante a simulação do período de stress seguinte.

Uma comparação dos resultados obtidos através da simulação de FEMWATER, FT1D-MODFLOW/V3 e MODFLOW pode ser vista nas figuras seguintes, para três momentos da simulação: 300 min (Figura 4.11), 500 min (Figura 4.12) e 800 min (Figura 4.13). Pode-se observar a boa concordância dos resultados de FT1D-MODFLOW/V3 e FEMWATER, principalmente para os menores períodos de simulação. Para maiores tempos, começa a haver maior diferença entre os resultados desses modelos. A principal razão para esta diferença parece ser a não-consideração dos fluxos horizontais na zona não-saturada através do uso de um modelo unidimensional (FT1D). Com relação ao modelo MODFLOW, pode-se notar a grande diferença no tempo para elevação do aquífero com relação a FEMWATER.

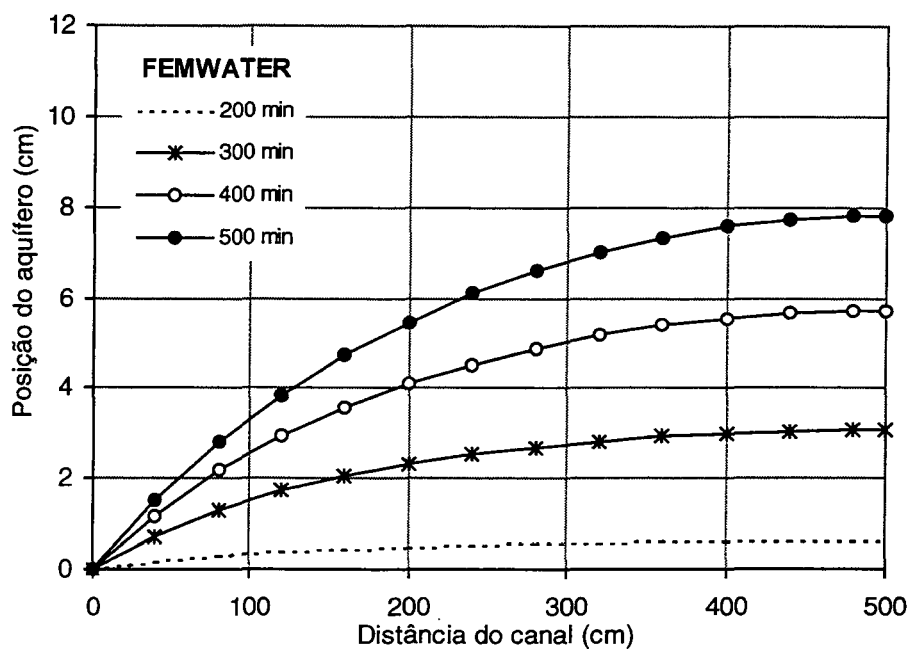


Figura 4.8 – Elevação do aquífero para o Exemplo 4-1 simulado com FEMWATER.

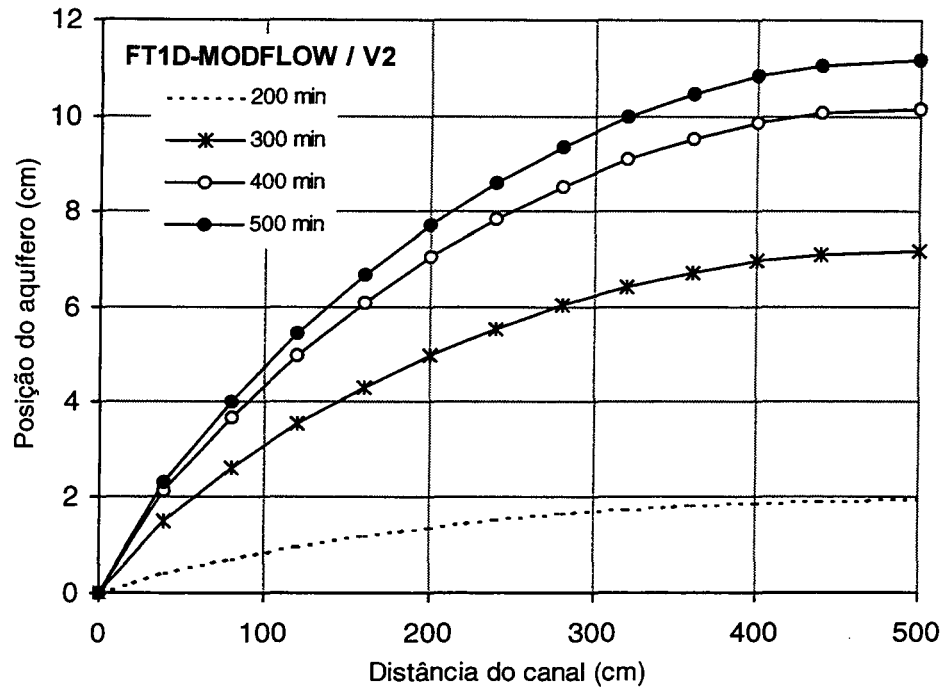


Figura 4.9 – Elevação do aquífero para o Exemplo 4-1 simulado com FT1D-MODFLOW/V2.

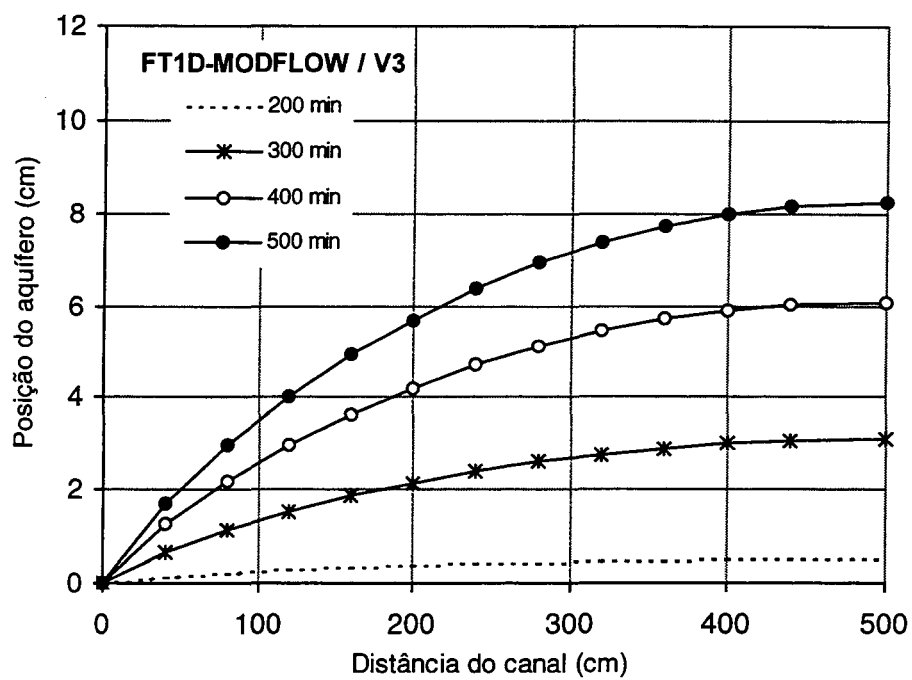


Figura 4.10 – Elevação do aquífero para o Exemplo 4-1 simulado com FT1D-MODFLOW/V3.

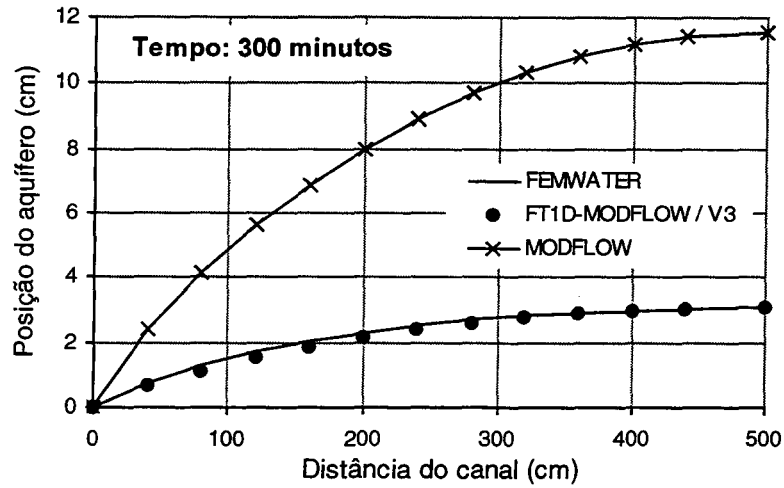


Figura 4.11 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-1, em 300 min.

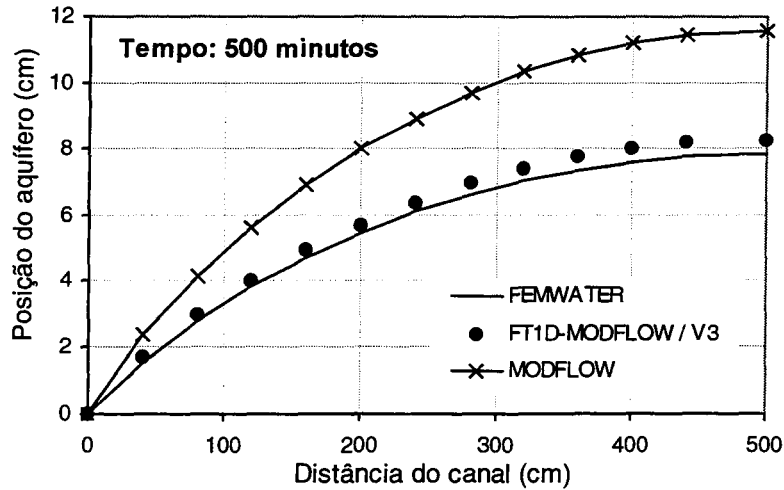


Figura 4.12 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-1, em 500 min.

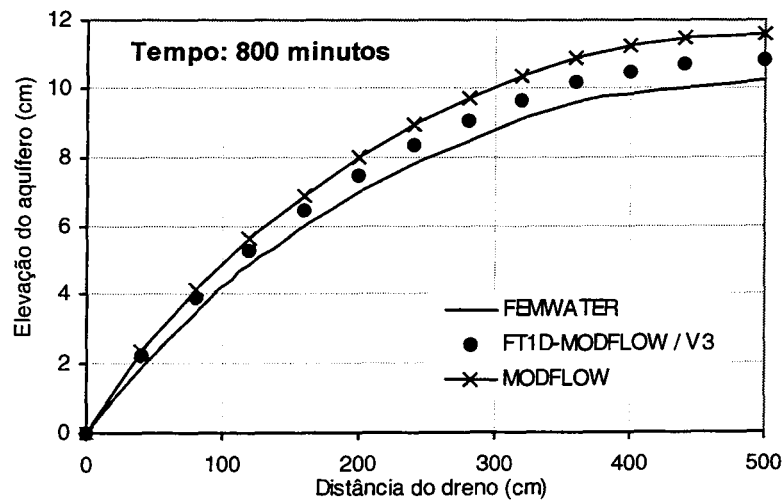


Figura 4.13 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-1, em 800 min.

A análise das figuras anteriores mostra que a conexão do modelo FT1D ao modelo saturado MODFLOW permite considerar o atraso que a subida que o topo do aquífero sofre devido ao armazenamento na zona não-saturada, como resposta à aplicação de uma taxa de precipitação na superfície do solo. Enquanto o modelo MODFLOW exibe elevações quase imediatas, este modelo conjugado a FT1D gera uma resposta mais suave ao longo do tempo. Por exemplo, após 100 min de precipitação, o modelo MODFLOW acusa uma elevação de 11,49 cm, enquanto a elevação simulada através de FT1D-MODFLOW/V3 é de apenas 0,0007 cm. Mesmo utilizando FT1D-MODFLOW/V2 que apresenta resultados não tão positivos, a previsão é de apenas 0,017 cm. Além disso, vale ressaltar que utilizou-se uma zona não-saturada relativamente pouco espessa neste exemplo (1 m de espessura), sendo que espera-se que este efeito seja mais pronunciado quanto mais espessa for a zona não-saturada.

A diferença na resposta dos modelos pode ser melhor visualizado através da Figura 4.14 e da Figura 4.15, que mostram a evolução no tempo do topo do aquífero a 200 cm do canal e junto ao contorno de fluxo nulo (500 cm do canal), respectivamente. Observa-se que, segundo a simulação de MODFLOW, a subida do aquífero é extremamente rápida, atingindo valores próximos ao equilíbrio logo no início da simulação. É importante notar que os modelos conectados FT1D-MODFLOW/V2 e FT1D-MODFLOW/V3 são consistentes, ou seja, ambos convergem para o valor de regime permanente dado por MODFLOW após grandes períodos de tempo. Além disso, apesar do ajuste da recarga ter sido feita apenas utilizando a coluna 25 da zona saturada em FT1D-MODFLOW/V3, os bons resultados também se refletiram nos outros pontos da zona saturada.

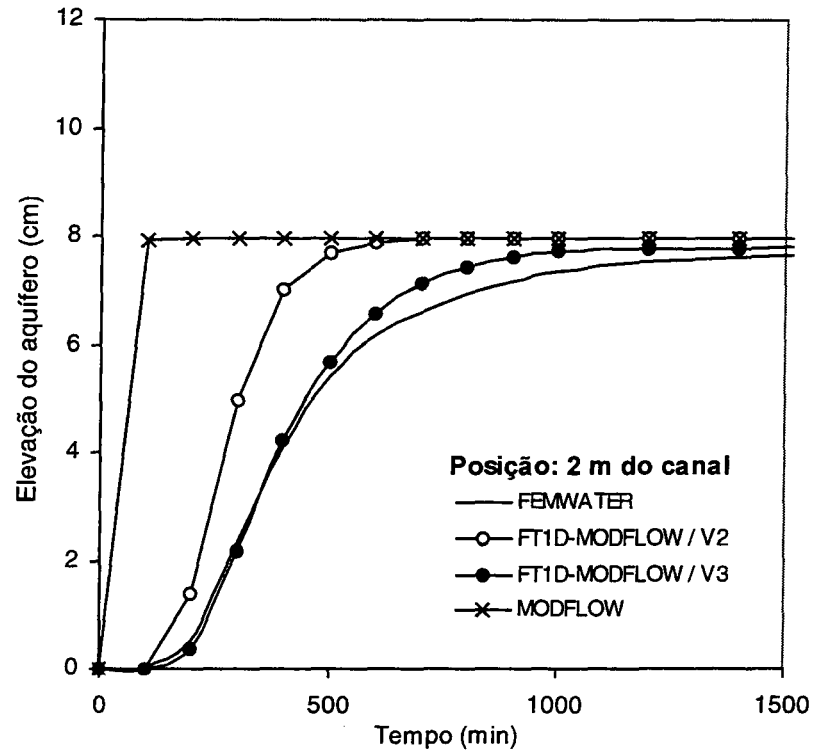


Figura 4.14 – Elevação do topo do aquífero para o Exemplo 4-1, a 200 cm do canal, simulado por FEMWATER, FT1D-MODFLOW/V2, FT1D-MODFLOW/V3 e MODFLOW.

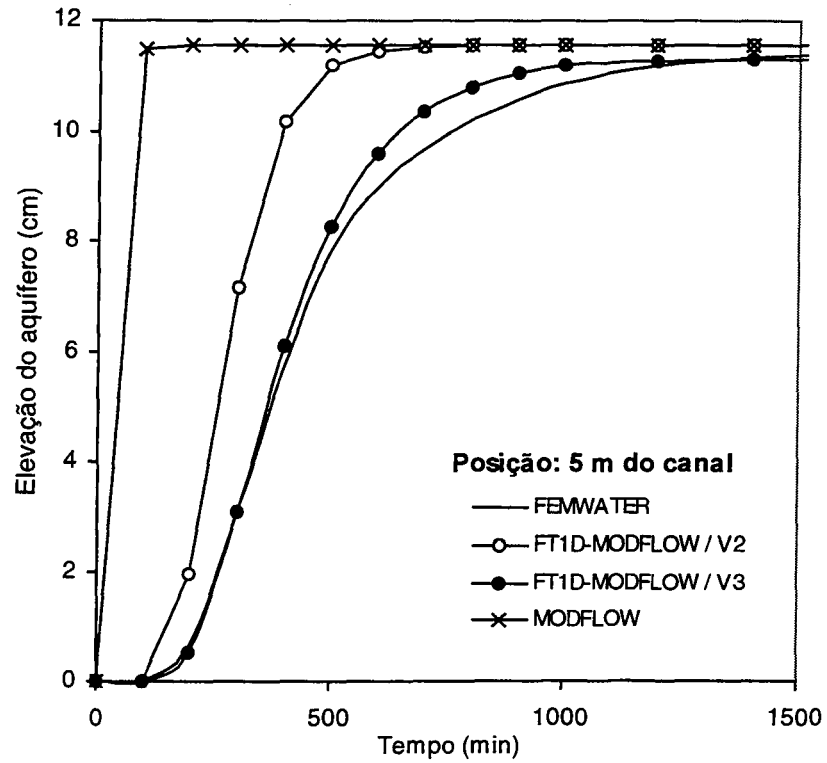


Figura 4.15 – Elevação do topo do aquífero para o Exemplo 4-1, a 500 cm do canal, simulado por FEMWATER, FT1D-MODFLOW/V2, FT1D-MODFLOW/V3 e MODFLOW.

Exemplo 4-2. Simulação de fluxo (Caso tridimensional)

O caso tridimensional simulado foi elaborado a partir de exemplos dos manuais de MODFLOW e de FEMWATER, sendo a geometria apresentada na Figura 4.16. O domínio é composto por um aquífero de 1000 m de comprimento, 400 m de largura e 70 m de profundidade, inicialmente com carga uniforme de 60 m em equilíbrio com o nível estático de um lago. A origem das coordenadas foi tomada no canto esquerdo inferior, ou seja, ao fundo do lago. O lago ocupa a área equivalente a uma elipse de raio maior 400 m (direção x) e de raio menor 200 m (direção y), sendo considerado um limite com carga fixa. Os demais limites laterais do domínio, bem como seu fundo, são tratados como fluxo nulo. O aquífero é considerado homogêneo e isotrópico nas três direções, sendo o solo argiloso, representado pelos parâmetros do Solo 3 da Tabela 2.1. No topo da zona não-saturada de 10 m de espessura é aplicada a precipitação uniforme de $3,3 \cdot 10^{-5}$ m/h.

Tanto em FEMWATER quanto em MODFLOW, o domínio foi discretizado em 20 colunas (direção x), 8 linhas (direção y) e 5 camadas (direção z). A zona não-saturada em FEMWATER foi discretizada com intervalos de 2 m, enquanto em FT1D utilizou-se intervalos de 1 m. O tempo de simulação foi de 200 horas, mantida a precipitação constante, sendo utilizados 200 períodos de stress para MODFLOW de 1 hora cada. Em FT1D, cada 1 hora foi subdividida em períodos de 0,1 hora. Para FEMWATER, utilizou-se 2000 intervalos temporais de 0,1 hora cada um. Na versão V3 de FT1D–MODFLOW, utilizou-se o erro de 0,0001 cm para a máxima diferença permissível entre as elevações calculadas por FT1D e MODFLOW, sendo a comparação feita utilizando a elevação da coluna 20 e linha 8 (ponto de maior elevação).

Novamente, neste caso, se verificou a presença de oscilações na elevação do aquífero calculada através da versão FT1D–MODFLOW/V1, como pode-se observar através da Figura 4.17, que mostra a elevação do aquífero ao longo do tempo para o ponto de coordenadas (1000; 400). Nesta figura, vê-se que houve inversão da tendência de subida do aquífero com a recarga devido à presença de valores negativos de elevação (ou seja, rebaixamentos). A simulação foi interrompida no 80. período de stress, pois, já neste ponto, as oscilações tornaram-se muito grandes. Este resultado mostra que as oscilações foram piores neste caso do que no caso do *Exemplo 4-1* (Figura 4.7), já que, mesmo sendo a precipitação inferior à utilizada no *Exemplo 4-1*, a área de recarga é maior no caso atual.

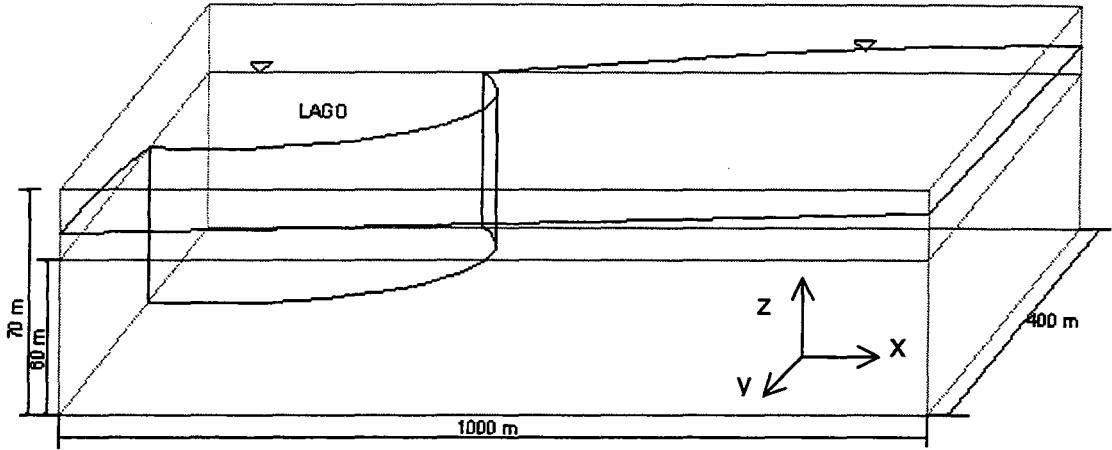


Figura 4.16 – Geometria e dimensões para o Exemplo 4-2.

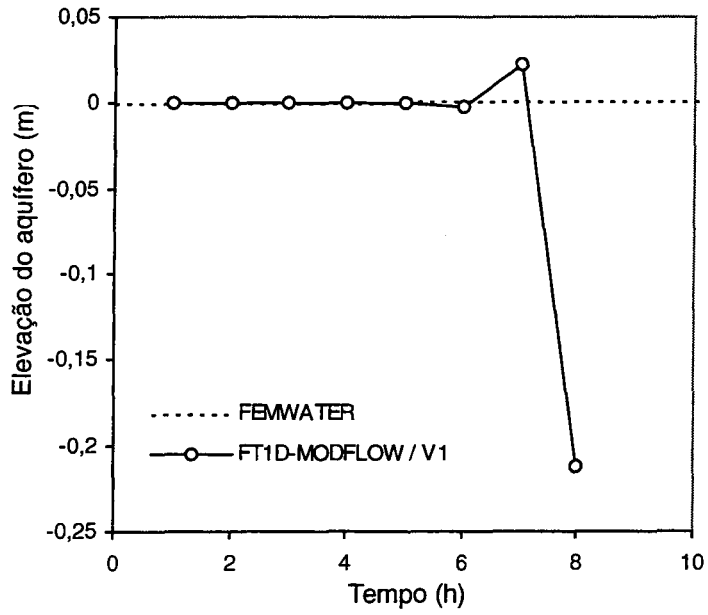


Figura 4.17 – Simulação do Exemplo 4-2 através de FT1D-MODFLOW/V1, para o ponto $x=1000m$ e $y=400m$.

As outras versões de FT1D-MODFLOW (V2 e V3) foram bem sucedidas durante as simulações deste caso, não se verificando a formação de oscilações nem outros problemas numéricos. Em V3, o ciclo iterativo introduzido para conectar os domínios não-saturado e saturado apresentou um taxa de convergência satisfatória, sendo necessário, em média, 6 iterações para atingir um erro (diferença entre as elevações obtidas no domínio saturado e não-saturado) inferior a $1.E-4$ cm, com um número máximo de 14 iterações. A Figura 4.18 mostra a evolução do erro com as iterações para o 10°, 14° e 28° período de stress.

Para uma simulação de 200 horas de duração, o tempo de execução foi de 61 min para FEMWATER, 13 seg para FT1D-MODFLOW/V2, 49 seg para FT1D-MODFLOW/V3 e 8 seg para MODFLOW. Apesar das dimensões do domínio neste caso serem bem maiores do que as do *Exemplo 4-1*, os tempos de execução foram menores porque utilizaram-se intervalos espaciais e temporais maiores neste caso, comparativamente com o caso anterior.

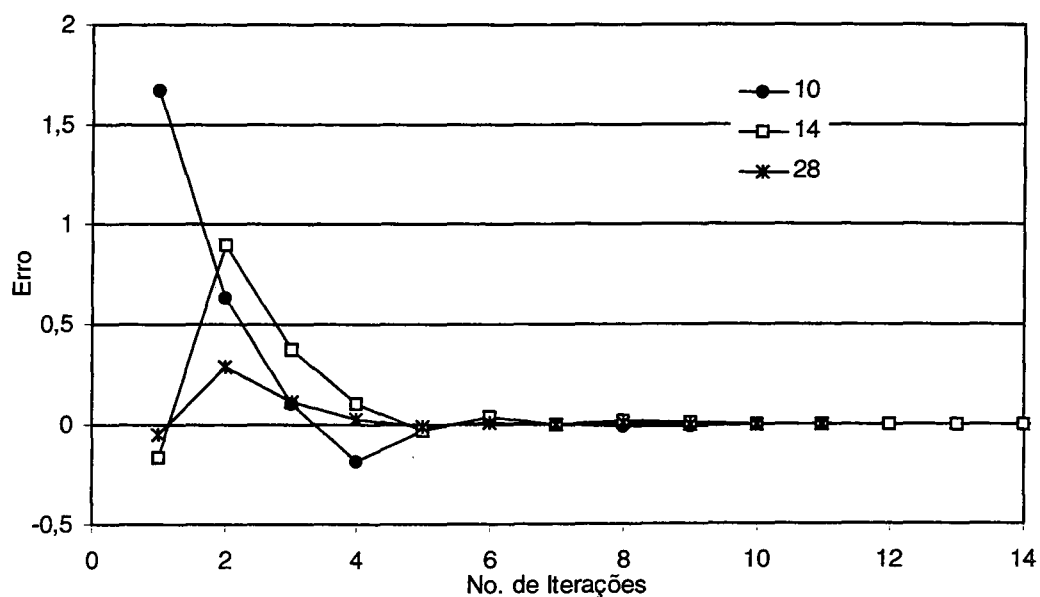


Figura 4.18 - Diferença da elevação dos domínios saturado e não-saturado (erro), em função do número de iterações, para FT1D-MODFLOW/V3 (Exemplo 4-2)

As figuras a seguir mostram valores de elevação do aquífero ao longo do tempo, para dois pontos do aquífero, calculados utilizando as versões V2 e V3 de FT1D-MODFLOW e comparados aos resultados da simulação deste exemplo através de FEMWATER e MODFLOW. A Figura 4.19 mostra os resultados das simulações para o ponto $x = 1000$ m e $y = 400$ m (coordenadas (1000; 400)), equivalendo à coluna 20 e linha 8. Este ponto está sujeito a sofrer a maior elevação do aquífero, por ser o ponto mais afastado do lago. A Figura 4.20 indica as elevações calculadas para outro ponto do domínio, a $x = 0$ m e $y = 400$ m (coluna 1 e linha 8). Como alguns dados são de difícil visualização nos gráficos, estes mesmos resultados são apresentados na Tabela 4.1.

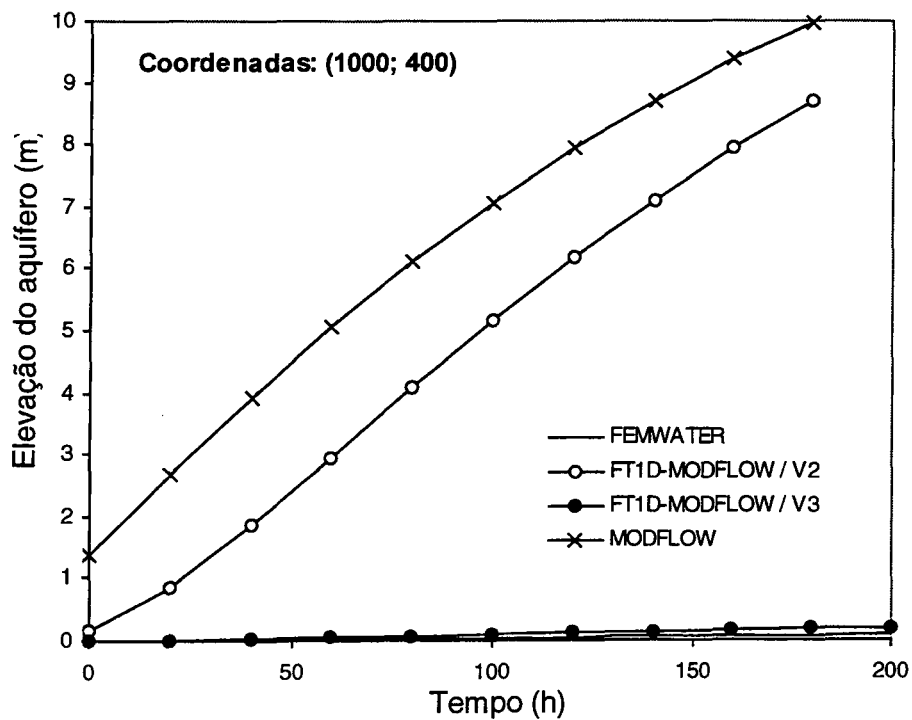


Figura 4.19 – Elevação do topo do aquífero ao longo do tempo para o Exemplo 4-2, no ponto de coordenadas (1000; 400).

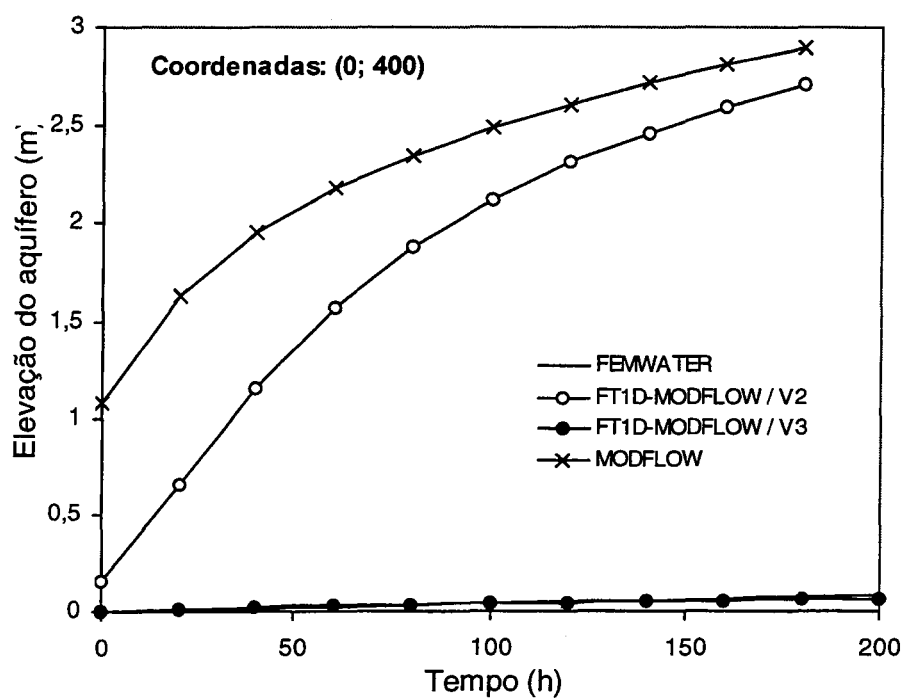


Figura 4.20 – Elevação do topo do aquífero ao longo do tempo para o Exemplo 4-2, no ponto de coordenadas (0; 400).

Tabela 4.1 – Resultados das simulações para dois pontos do domínio do *Exemplo 4-2*.

Tempo	FEMWATER		FT1D-MODFLOW / V3		FT1D-MODFLOW / V2		MODFLOW	
	(0;400)	(1000;400)	(0;400)	(1000;400)	(0;400)	(1000;400)	(0;400)	(1000;400)
20 h	0,004*	0,004	0,008	0,009	0,160	0,175	1,078	1,361
40 h	0,015	0,015	0,021	0,029	0,654	0,865	1,626	2,665
60 h	0,023	0,023	0,030	0,051	1,155	1,848	1,953	3,912
80 h	0,031	0,032	0,036	0,072	1,563	2,953	2,178	5,068
100 h	0,040	0,040	0,041	0,094	1,877	4,075	2,350	6,122
120 h	0,048	0,048	0,046	0,116	2,119	5,156	2,490	7,074
140 h	0,056	0,057	0,051	0,137	2,310	6,166	2,610	7,927
160 h	0,065	0,065	0,056	0,159	2,465	7,093	2,715	8,690
180 h	0,073	0,073	0,061	0,181	2,594	7,933	2,808	9,370
200 h	0,082	0,082	0,066	0,203	2,706	8,689	2,892	9,976

* Elevações em metros.

As figuras e os dados da tabela acima mostram que os resultados obtidos através da versão V3 de FT1D-MODFLOW estiveram bastante próximos aos obtidos através de FEMWATER, principalmente quando se compara com as elevações calculadas com MODFLOW. Apesar da diferença absoluta entre FT1D-MODFLOW/V3 e FEMWATER ser grande em alguns momentos, o ganho ao se utilizar FT1D-MODFLOW/V3 ao invés de MODFLOW é considerável. Para este exemplo, MODFLOW prevê que o aquífero estaria quase aflorando à superfície do solo, considerando uma zona não-saturada de 10 m de espessura, após 200 h de precipitação, enquanto o valor previsto por FEMWATER é 100 vezes menor. Isto significa que o efeito do armazenamento na zona não-saturada neste caso é bastante grande, não devendo ser desprezado. Pode-se verificar também que a diferença entre os resultados obtidos através da versão V2 e V3 de FT1D-MODFLOW foi muito maior neste caso do que no *Exemplo 4-1*, estando FT1D-MODFLOW/V2 mais próximo dos resultados de MODFLOW.

A Figura 4.21 mostra o perfil vertical do aquífero ao longo da lateral esquerda do domínio, ou seja, ao longo do eixo y , em $x = 0$. Nesta lateral, o lago vai da origem, ao fundo do domínio, até a distância de 200 m na direção do eixo y . Neste gráfico, a elevação é mostrada a partir do final do lago, já que a carga é mantida constante nas células referentes ao lago. A diferença entre a posição dos pontos nos modelos baseados em MODFLOW e em FEMWATER é devido à diferença do esquema de discretização espacial desses dois modelos. Enquanto FEMWATER foi elaborado em elementos finitos, tendo, portanto, as variáveis atribuídas aos nódulos entre as células, MODFLOW atribui esses valores ao centro das células, fazendo com que haja uma pequena diferença na posição das condições de contorno. A Figura 4.22 é similar à figura anterior, mas traz as elevações ao longo dos 1000 metros da linha 8, referente à $y = 400$ m. Ambas as figuras confirmam os resultados comentados anteriormente.

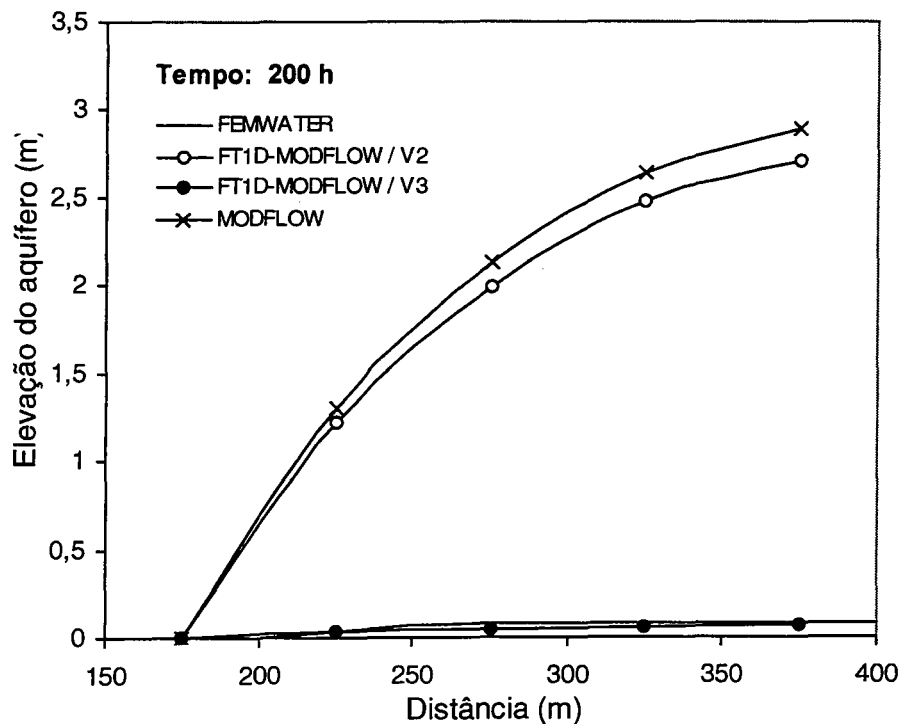


Figura 4.21 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-2, após 200 h de simulação, ao longo do eixo y , em $x = 0$.

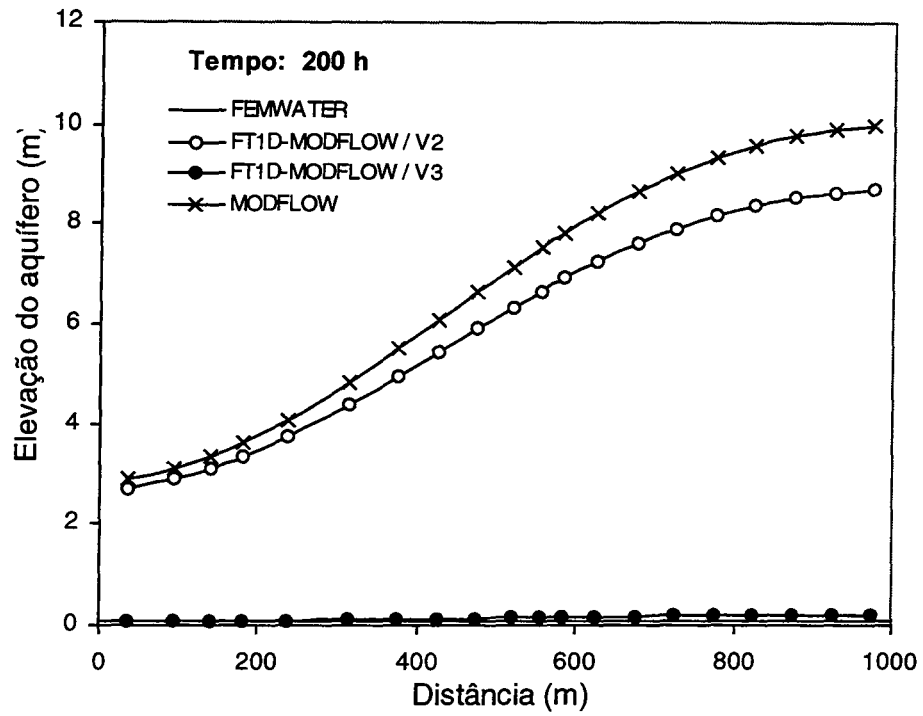


Figura 4.22 – Comparação dos resultados obtidos para o Exemplo 4-2, após 200 h de simulação, ao longo da linha referente a $y = 400$ m.

4.5.2. *Modelo de transporte não-saturado e saturado*

O modelo de transporte unidimensional na zona não-saturada FT1D foi incorporado ao modelo MT3D, gerando o modelo de transporte FT1D – MT3D. Para o transporte, o domínio não-saturado não foi alterado de acordo com a posição do topo do aquífero. Apesar de não haver diferentes versões para o modelo de transporte, como foi o caso do modelo de fluxo, dois resultados diferentes são obtidos ao se utilizar os arquivos de fluxo gerados através das versões V2 e V3 de FT1D – MODFLOW. Estes resultados foram referenciados como FT1D – MT3D (V2) e FT1D – MT3D (V3), respectivamente. A versão V1 de FT1D – MODFLOW não foi utilizada na simulação de transporte devido aos problemas de instabilidade observados durante a simulação de fluxo.

Os resultados gerados pelo modelo foram comparados com os obtidos através do modelo de transporte integrado nas zonas não-saturada e saturada LEWASTE. Também são comparados os tempos de execução necessários para cada modelo, sendo que todas as simulações foram executadas em um microcomputador com processador Pentium II 300 MHz e 128 Mb de memória RAM.

Exemplo 4-3. Simulação de transporte (Caso bidimensional)

Este caso foi baseado no *Exemplo 4-1* do item referente ao fluxo (item 4.5.2). Para o transporte, considerou-se que a fase aquosa no solo estaria inicialmente com concentração nula e que uma concentração igual a 100 mg/l seria imposta uniformemente no topo do domínio ($z = 300$ cm) a partir do início da simulação. No fundo do domínio, a concentração seria nula. As dispersividades longitudinal e transversal do solo foram estipuladas como 10 e 3 cm, respectivamente. Condições idênticas foram utilizadas para a simulação de LEWASTE. Também foram realizadas simulações com MT3D, nas quais se utilizou como condição de contorno uma concentração de 100 mg/l na recarga uniforme no topo do domínio. Foram desprezadas quaisquer formas de reação, tais como adsorção e biodegradação.

O tempo total de simulação foi de 2000 min, com 200 períodos de stress de 10 min cada e incrementos de tempo para FT1D de 1 minuto, tal como utilizado na simulação de fluxo do *Exemplo 4-1*. Para MT3D, tanto no original quanto no conectado a FT1D, utilizaram-se 10 incrementos de tempo de transporte (1 minuto cada) para cada período de stress simulado. Em

LEWASTE, o tempo de simulação foi dividido em 2000 incrementos de tempo de 1 minuto cada.

O tempo de execução para este exemplo foi de 44 segundos para FT1D – MT3D (tanto com a versão V2 do fluxo, como com a V3), 13,8 hs (49.680 seg) para LEWASTE e 17 seg para MT3D. Mesmo sem considerar o tempo necessário para a simulação de fluxo com FEMWATER, pode-se verificar que o tempo de execução de LEWASTE foi extremamente alto, o que pode inviabilizar o uso deste modelo para casos mais complexos. Além disso, o arquivo binário para transferência de dados para LEWASTE, gerado por FEMWATER, atingiu o tamanho de 292 Mb para este exemplo.

As figuras a seguir mostram as curvas de isoconcentrações, após 2000 minutos, obtidas através da simulação utilizando FT1D – MT3D (V2) (Figura 4.23), FT1D – MT3D (V3) (Figura 4.24), LEWASTE (Figura 4.25) e MT3D (Figura 4.26). Nestas figuras, os eixos horizontal e vertical são dados em metros e equivalem aos eixos x e y da Figura 4.6, respectivamente. A origem foi colocada no fundo impermeável do canal (à esquerda), sendo representada a metade do domínio mostrado na Figura 4.6. Pode-se notar que há um exagero vertical nas figuras, para permitir uma maior visualização das curvas. Como a escala de todas as figuras é a mesma, elas podem ser comparadas. Todos os valores de concentrações nas figuras têm unidades de mg/l.

Pode-se observar que a evolução da pluma de contaminação obtida através de FT1D – MT3D foi comparável à obtida através de LEWASTE. Tanto na simulação utilizando os resultados da versão V2 quanto com V3, após 2000 min de simulação, a concentração a 40 cm do topo foi inferior a 5 mg/l, tal como foi obtido com o modelo LEWASTE. Com relação ao topo do aquífero, foi obtida uma concentração ligeiramente superior utilizando-se os dados de fluxo de V2 do que com V3 para FT1D – MT3D. Isso pode ser visualizado ao se verificar que a linha de isoconcentração de 25 mg/l da Figura 4.23 não aparece na Figura 4.24.

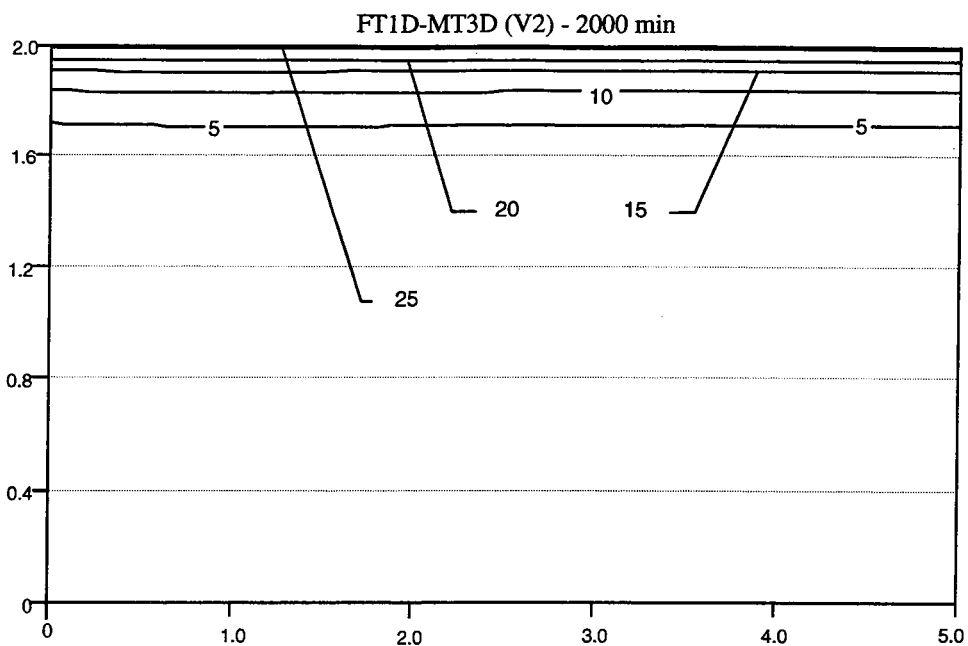


Figura 4.23 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo FT1D – MT3D (V2), para o Exemplo 4-3 (eixos em metros)

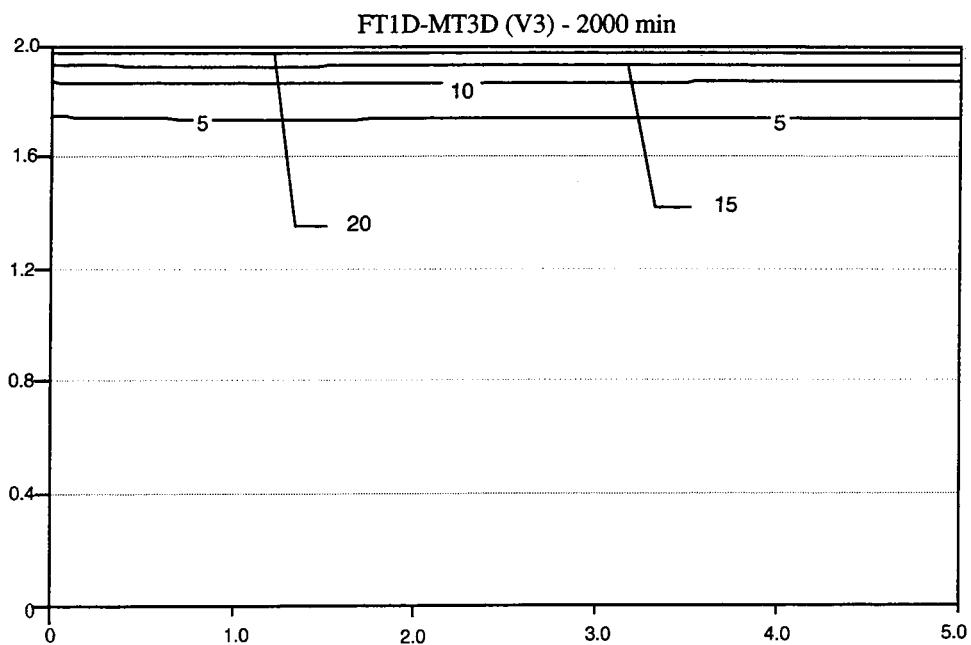


Figura 4.24 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo FT1D – MT3D (V3), para o Exemplo 4-3 (eixos em metros)

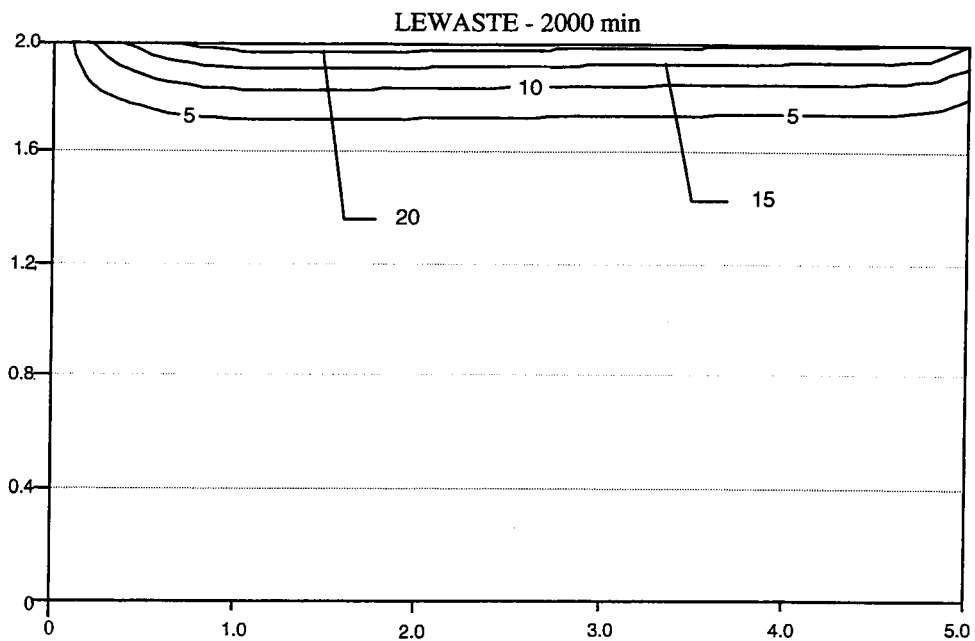


Figura 4.25 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo LEWASTE, para o Exemplo 4-3 (eixos em metros)

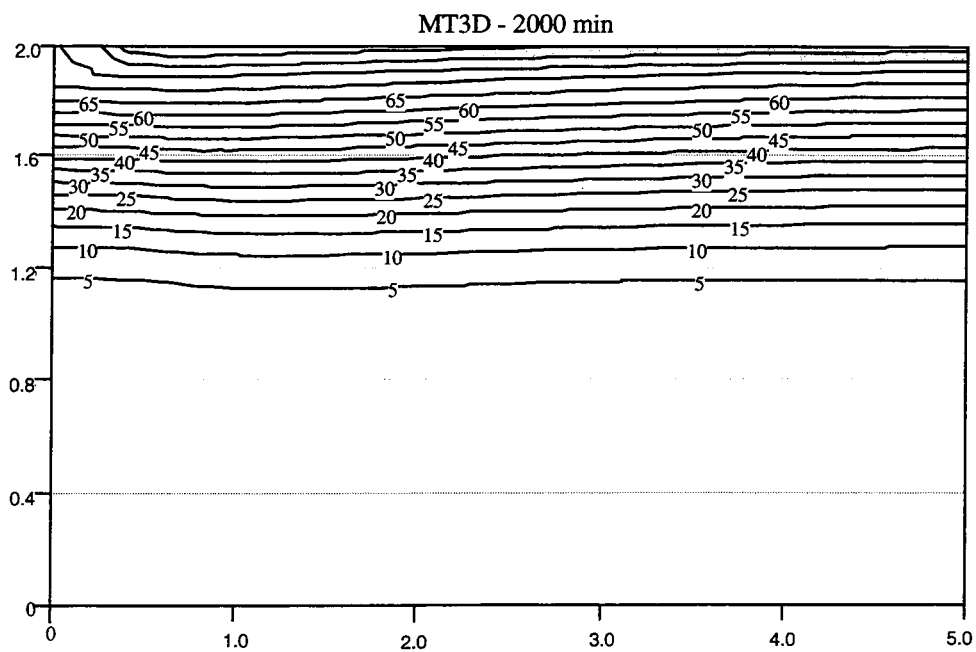


Figura 4.26 – Curvas de isoconcentração (mg/l) para 2000 min de simulação utilizando o modelo MT3D, para o Exemplo 4-3 (eixos em metros)

Comparando-se as três primeiras figuras com a Figura 4.26, que traz os resultados da simulação com MT3D, pode-se verificar a grande diferença que o armazenamento na zona não-saturada provoca na evolução da pluma de concentração, mesmo no caso de uma zona não-saturada relativamente pouco espessa como a utilizada neste exemplo (1 metro). Aplicando o modelo MT3D ao exemplo proposto, se obtém um resultado muito superestimado: a linha de 5 mg/l atinge profundidades superiores a 80 cm e a concentração no topo supera o valor de 80 mg/l. Vale lembrar que esta diferença de resultados seria progressivamente maior quanto maior fosse a espessura da zona não-saturada.

Nas figuras a seguir, a evolução temporal da simulação do *Exemplo 4-3* pode ser observada para um perfil de solo localizado a 2 metros do canal para FT1D – MT3D (V2) (Figura 4.27) e para FT1D – MT3D (V3) (Figura 4.28), sendo estes resultados comparados aos obtidos através de LEWASTE. Da Figura 4.29 até a Figura 4.32, têm-se os perfis de concentração para o mesmo ponto (2 metros do canal) obtidos com FT1D – MT3D (V2), FT1D – MT3D (V3) e LEWASTE, comparados com MT3D, para 500, 1000, 1500 e 2000 minutos, respectivamente. Com relação à comparação com MT3D, observa-se que o perfil de concentrações gerado por este modelo é bastante parecido com os demais modelos analisados, apesar de estar muito mais avançado no tempo, sendo que quanto menor o tempo de simulação, maior é a diferença entre MT3D e os outros modelos.

Nestas figuras pode-se verificar que, após 500 min de simulação, o perfil de concentrações é virtualmente o mesmo para V2 e V3. Até 500 minutos, a frente do contaminante não havia ainda atingido o aquífero (topo do aquífero posicionado a ~ 208 cm), portanto, as duas versões forneceram resultados similares. Existe uma pequena diferença entre elas, somente visível na Figura 4.29, devido às menores velocidades verticais de V3 em relação a V2.

A diferença entre as versões torna-se mais visível para os tempos posteriores (1000, 1500 e 2000 min). Pode-se observar que as concentrações geradas com a versão V2 de fluxo são progressivamente maiores com o tempo do que com V3, para uma mesma profundidade. Vale lembrar que o que caracteriza as duas versões de fluxo é a redução da velocidade do avanço da fase aquosa em V3 através da alteração da posição da condição de contorno inferior em resposta à elevação do aquífero. Em V2, não há alteração da posição do aquífero no domínio não-saturado. Com isso, devido à advecção, o avanço da pluma com V2 é maior do que com V3, tal como pode-se observar nas figuras citadas.

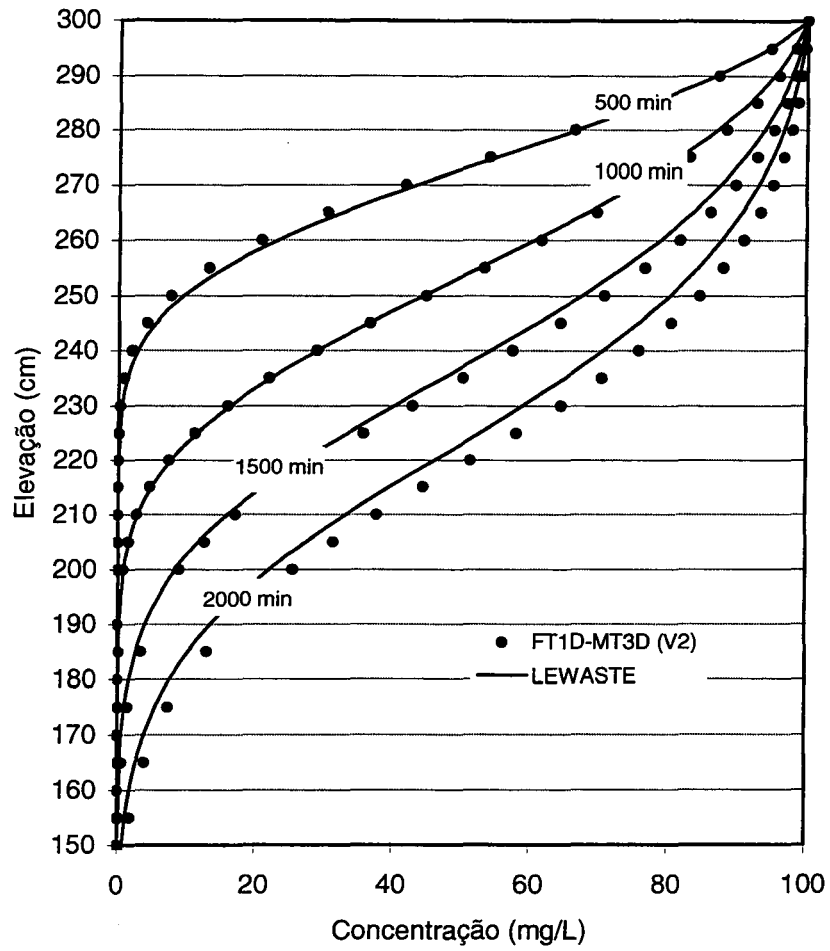


Figura 4.27 – Comparação do avanço da pluma do contaminante para FT1D-MT3D (V2) e LEWASTE (Exemplo 4-3)

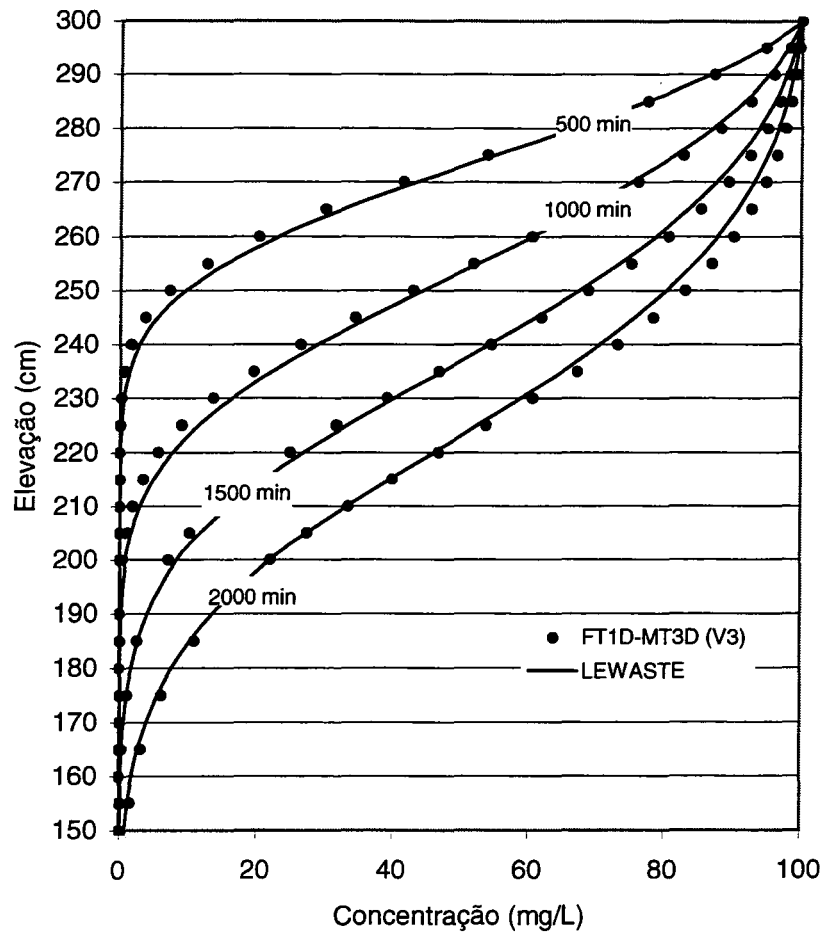


Figura 4.28 – Comparação do avanço da pluma do contaminante para FT1D-MT3D (V3) e LEWASTE (Exemplo 4-3)

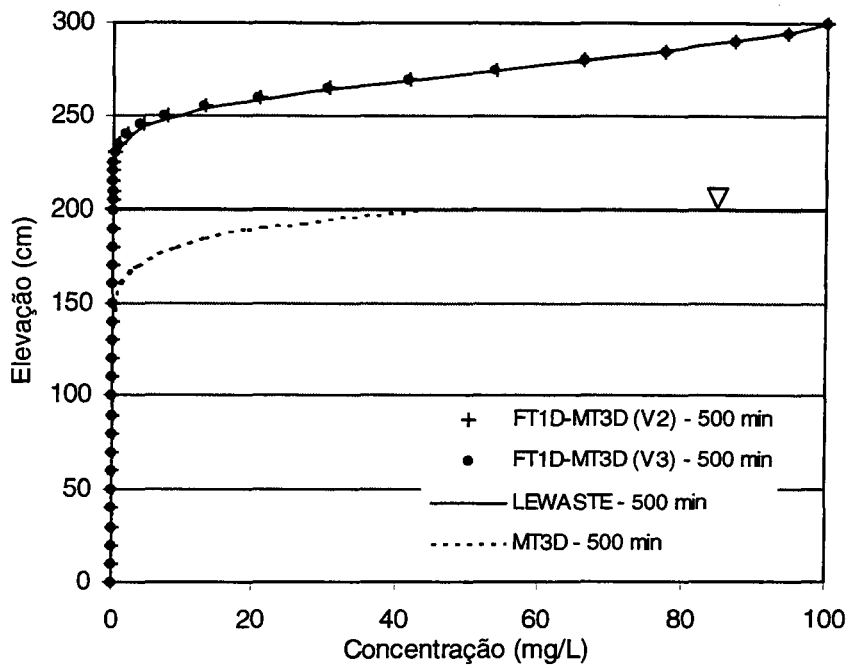


Figura 4.29 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 500 min de simulação

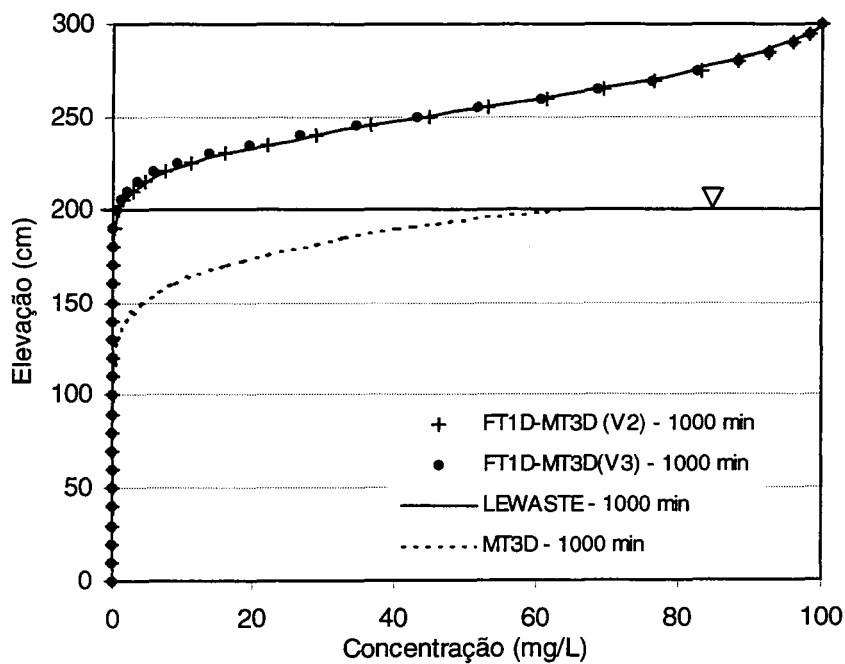


Figura 4.30 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 1000 min de simulação

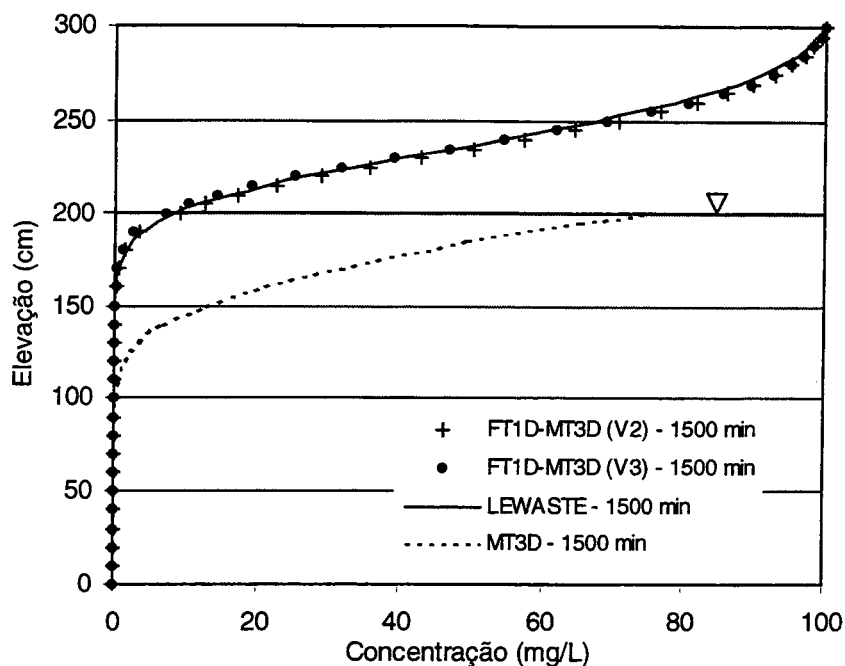


Figura 4.31 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 1500 min de simulação

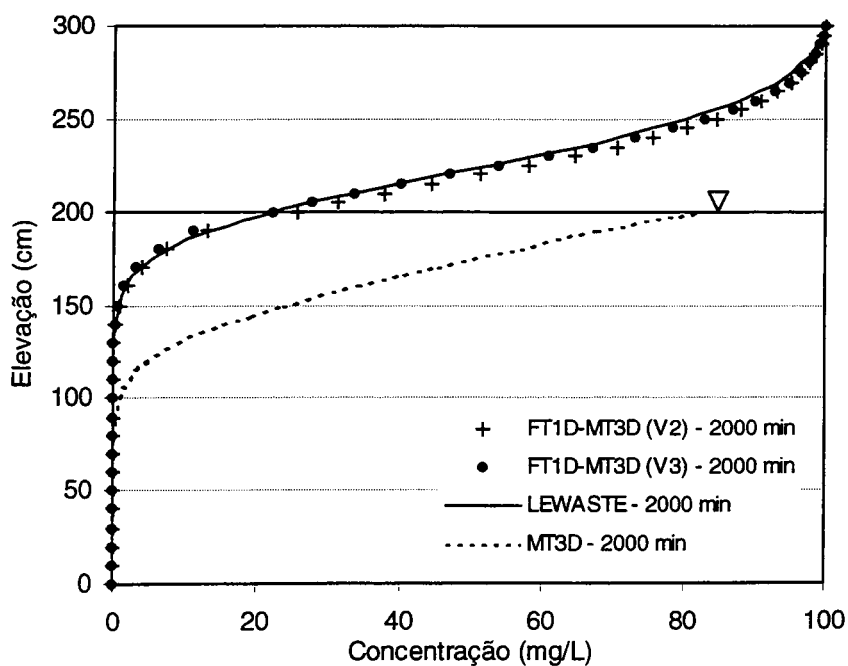


Figura 4.32 – Comparação entre os perfis de concentração obtidos por FT1D-MT3D (V2), FT1D-MT3D (V3), LEWASTE e MT3D, para o Exemplo 4-3, a 2000 min de simulação

Comparando-se os resultados obtidos com FT1D-MT3D com os obtidos com LEWASTE, observa-se que estes valores estão bastante próximos, tanto com V2 quanto com V3. Pode-se observar que há uma diferença entre esses resultados: os obtidos através de FT1D-MT3D parecem ter menor dispersão do que com LEWASTE. Isso pode ser visualizado na Figura 4.32, onde observa-se que a curva para LEWASTE é mais alongada do que a curva para FT1D-MT3D (V3). O formato da curva de LEWASTE reflete menores concentrações perto do topo do domínio e maiores concentrações na parte inferior da curva, sendo isto característico de uma situação de maior dispersão.

Algumas explicações são possíveis para justificar a maior dispersão de LEWASTE com relação a FT1D-MT3D. A primeira delas é a que o domínio não-saturado em FT1D-MT3D é unidimensional, enquanto que, para este exemplo, tem-se um domínio bidimensional em LEWASTE. Com isso, existem contribuições horizontais de contaminante no domínio de LEWASTE, através de advecção, que não são computados em FT1D-MT3D. Paralelamente, existem fluxos dispersivos longitudinais na direção horizontal como resposta das componentes horizontais da velocidade. Além disso, têm-se fluxos dispersivos transversais para a componente vertical da velocidade da fase aquosa. Do ponto de vista numérico, outra possível razão poderia ser uma maior dispersão numérica em LEWASTE do que em FT1D-MT3D. Entretanto, provavelmente, todos os fenômenos citados exercem menor ou maior influência neste caso.

4.6. Conclusões

Neste capítulo, foi desenvolvido um modelo de fluxo e transporte nas zonas não-saturada e saturada do solo, composto pelo acoplamento de um modelo unidimensional (vertical) de zona não-saturada e um modelo tridimensional de zona saturada. O objetivo é permitir a consideração do armazenamento e a simulação dos fenômenos de transporte passíveis de ocorrer na zona não-saturada do solo, com menor tempo computacional em relação aos modelos integrados da zona não-saturada e saturada.

Para realizar a conexão entre o modelo unidimensional de fluxo na zona não-saturada (FT1D) e o modelo de fluxo saturado (MODFLOW), foram avaliadas três metodologias: alteração instantânea do domínio não-saturado (Pikul et al. (1974) e Fedors (1997)), posição do topo do aquífero fixa e alteração gradual do domínio não-saturado (nova metodologia proposta). Para isso, três versões do programa FT1D/MODFLOW foram desenvolvidas

(versões V1, V2 e V3, respectivamente). A nova metodologia proposta se baseia na inclusão de um ciclo iterativo que permite o ajuste do perfil de pressões e da posição da condição de contorno inferior da zona não-saturada ao longo de toda simulação, através do uso conjunto de dois tipos de condições de contorno, carga fixa e fluxo fixo.

As principais conclusões obtidas durante o estudo das formas de conexão dos modelos de fluxo foram:

- Nas simulações utilizando a metodologia de alteração instantânea do domínio não-saturado (versão V1), foram observadas oscilações na posição do topo do aquífero, chegando a situações de instabilidade. Uma possível razão para este comportamento é a formação de um gradiente de umidade no sentido oposto ao do fluxo, como resposta à acomodação do perfil das pressões à nova posição da condição de contorno. Esta metodologia foi considerada não satisfatória, a não ser para situações em que a taxa de elevação do aquífero seja realmente pequena.
- As versões V2 e V3 não apresentaram problemas de instabilidades numéricas nos casos simulados. Ambas foram consistentes, convergindo para o valor de regime permanente dado por MODFLOW após grandes períodos de tempo.
- Comparando-se os resultados das simulações com os obtidos através do modelo de fluxo integrado nas zonas não-saturada e saturada FEMWATER, a versão V3 (nova metodologia) simulou melhor a elevação do aquífero do que V2. A tendência de V2 é apresentar uma elevação do aquífero mais rápida, enquanto V3 produz um perfil de elevação mais lento, mais próximo do obtido em FEMWATER.
- Em comparação com os resultados simulados por MODFLOW, verificou-se a grande diferença no tempo de elevação do aquífero quando se acrescenta o armazenamento da zona não-saturada. Com MODFLOW, a elevação é quase instantânea, enquanto que, com FT1D/MODFLOW, há um lapso de tempo entre o início da precipitação e o estado de equilíbrio do aquífero, sendo este lapso maior ou menor de acordo com a espessura da zona não-saturada, características hidrogeológicas do aquífero, entre outros fatores.
- O processo iterativo incluído na versão V3 mostrou-se estável e com boa convergência, sendo necessário, em média, de 6 a 7 iterações para atingir o erro preestabelecido para a diferença entre as elevações calculadas através dos dois modelos de fluxo (FT1D e MODFLOW).

- Os tempos de execução de FT1D/MODFLOW utilizando as versões V2 e V3 foram significativamente inferiores ao de FEMWATER, utilizando esquemas de discretização espacial e temporal semelhantes para os dois programas. Entre as versões de FT1D/MODFLOW, o tempo de execução da versão V2 foi menor do que o de V3, devido ao ciclo iterativo presente em V3.

Na conexão dos modelos de transporte não-saturado (FT1D) e saturado (MT3D), a posição do topo do aquífero no domínio não-saturado não foi alterada ao longo da simulação. Entretanto, o uso dos diferentes dados de fluxo provenientes das versões V2 e V3 de FT1D-MODFLOW geram duas soluções diferentes, sendo referenciadas como FT1D-MT3D (V2) e FT1D-MT3D (V3), respectivamente. A versão V1 de FT1D-MODFLOW não foi utilizada na simulação de transporte devido aos problemas de instabilidade observados durante a simulação de fluxo.

A análise dos resultados obtidos com a conexão dos modelos de transporte das zonas não-saturada e saturada gerou as seguintes conclusões:

- O programa FT1D-MT3D forneceu resultados comparáveis aos obtidos através do modelo de transporte integrado LEWASTE, tanto na simulação utilizando os resultados da versão V2 quanto com V3, sendo que V2 produziu concentrações ligeiramente superiores do que V3 para um mesmo tempo de simulação. Este fato deve-se às maiores velocidades da fase aquosa de V2 com relação à V3. Portanto, quando o interesse da análise se prende ao transporte, o acompanhamento da subida do aquífero parece exercer pouca influência.
- Os resultados obtidos através de FT1D-MT3D parecem ter menor dispersão do que os gerados com LEWASTE. Possivelmente, isto é devido ao uso de domínios unidimensionais em FT1D, enquanto LEWASTE utiliza domínios multidimensionais.
- Pôde-se verificar a grande diferença que o armazenamento na zona não-saturada provoca na evolução da pluma de concentração, mesmo no caso de uma zona não-saturada relativamente pouco espessa.
- O tempo de execução de FT1D-MT3D foi muito inferior ao obtido com LEWASTE. Verificou-se que o tempo de execução de LEWASTE foi extremamente alto, o que pode inviabilizar o uso deste modelo para casos mais complexos.

Recomenda-se que os modelos FT1D–MODFLOW (principalmente, a versão V3) e FT1D–MT3D sejam testados na simulação de outras situações, tais como precipitação espacial e temporalmente variante, presença de outros gradientes no aquífero (bombeamentos, por exemplo), heterogeneidades na zona não-saturada, variação espacial na condição de contorno de transporte na zona não-saturada, entre outros. Apesar do modelo não ter sido ainda testado para todas as situações possíveis, os resultados obtidos até agora atestam a aplicabilidade e confiabilidade dos modelos desenvolvidos, bem como as vantagens computacionais com relação aos modelos integrados.

5. ÁREAS RESIDUAIS COMO FONTES DE CONTAMINANTES NA ZONA NÃO-SATURADA

5.1. Introdução

No desenvolvimento dos modelos de transporte propostos neste trabalho (FT1D e FT1D-MT3D), bem como nas simulações de transporte realizadas nos capítulos anteriores, o contaminante foi sempre introduzido no domínio não-saturado através da condição de contorno de concentração fixa, aplicada ao topo do domínio. Apesar desta condição de contorno ser apropriada para a simulação de diversas situações, tais como pesticidas aplicados na superfície do solo e contaminantes diversos derivados de áreas de aterros e processos 'landfarmings', existem outras situações que não são bem contempladas através de condições de contorno na simulação de transporte. É o caso de solos contendo contaminantes dispersos que servem de fonte para a fase aquosa.

Neste capítulo é discutida a diferença entre os tipos de fontes de contaminantes dispersos presentes no solo (contaminantes em forma residual e adsorvidos no solo) e as implicações com relação à simulação dessas áreas. A literatura relativa à modelagem de fontes de NAPLs residuais é revisada e é proposta a inclusão deste tipo de fonte no modelo de transporte FT1D (apresentado e validado no Capítulo 2 deste trabalho). Um trabalho experimental de dissolução em colunas não-saturadas é apresentado para abordar a questão da dissolução de áreas residuais de NAPLs na zona não-saturada.

5.2. Lixiviação, dissolução e dessorção

Genericamente, um contaminante pode estar presente no solo em duas diferentes formas: adsorvido na matéria orgânica do solo ou em fase líquida residual* (NAPLs residuais) (Mercer e Cohen, 1990). Ambas as formas podem agir como fontes de contaminantes para a fase aquosa em contato com o solo através do processo de lixiviação. Para esses dois casos, entretanto, diferentes processos de transferência para a fase aquosa ocorrem. No caso do

* Neste trabalho, não será considerada a fase NAPL livre, refletindo a situação onde a fase líquida imiscível está presente em um grau de saturação suficiente que permita sua movimentação. Todo NAPL discutido será considerado imóvel.

contaminante estar adsorvido, a contaminação da fase aquosa se dá por dessorção a partir da matriz do solo. Por outro lado, se o contaminante estiver presente em fase residual, o processo passa a ser a dissolução dos glóbulos descontínuos de NAPL.

O termo *lixiviação* é usado para referenciar processos de transferência de um contaminante presente na matriz do solo (ou em qualquer outro extrato sólido) para a fase aquosa em contato com ela. Este processo reflete a capacidade da água em remover este contaminante do substrato sólido e transportá-lo consigo, tornando-o, portanto, móvel. Os testes de *lixiviação* buscam avaliar esta capacidade colocando em contato o substrato contaminado e a fase líquida, sob diversas condições, das mais agressivas (envolvendo agitação, calor, presença de ácidos diluídos, etc) até as que melhor reproduzem as condições naturais em que o processo ocorre (testes em colunas, por exemplo) (U.S.EPA, 1989). No entanto, estes testes, bem como o próprio conceito do processo, não diferenciam as formas em que o contaminante pode estar presente no solo.

A determinação experimental da presença de NAPLs no solo também não é muito fácil de se obter. Feenstra e Cherry (1996) afirmam que apenas a observação visual dos NAPLs no solo (os autores discutem especificamente sobre NAPLs densos – DNAPLs) ou a obtenção de concentrações na água próximas aos limites de solubilidade fornecem evidências inequívocas de que há a presença de NAPLs no local. Alguns testes de campo podem auxiliar no estudo, tais como a observação do solo através de luz ultravioleta, testes de agitação e análise do vapor do solo, mas, segundo os autores, nenhum desses testes fornece uma resposta inequívoca. Diversas evidências devem ser avaliadas em conjunto a fim de se obter uma resposta mais conclusiva e segura.

Um dos métodos citados em Feenstra e Cherry (1996) é baseado na determinação da concentração hipotética da fase aquosa através das relações de equilíbrio entre as fases aquosa, gasosa e sólida (solo) e na comparação deste valor com a máxima concentração que o componente analisado pode ser encontrado em fase aquosa. A máxima concentração que o composto poderá atingir quando em equilíbrio com a água, para a situação que se está analisando, depende da solubilidade do composto puro em água e da fração molar do composto na fase NAPL, caracterizando o que se chama de solubilidade efetiva do composto j ($C_{max,j}$). Esta relação é dada através da analogia com a Lei de Raoult, que descreve a concentração na fase gasosa do composto em função de sua pressão de vapor, aplicada à solubilidade:

$$C_{\max,j} = fm_j C_{\text{sol},j} \quad (5.1)$$

onde fm_j é a fração molar do componente j na mistura de NAPLs e $C_{\text{sol},j}$ é o limite de solubilidade do componente j puro em água.

A partir do valor medido de concentração do contaminante no solo (C_s), dado em mg/kg de solo seco, a concentração hipotética na fase aquosa (C) pode ser determinada por:

$$C = \frac{C_s \cdot \rho_b}{K_d \cdot \rho_b + \phi \cdot S + H \cdot \phi \cdot S_g} \quad (5.2)$$

onde ρ_b é a densidade da matriz do solo ('bulk density') (g/cm^3), K_d é o coeficiente de partição solo-água (cm^3/g), ϕ é a porosidade, S é a saturação da fase aquosa, H é a forma adimensional da constante de Henry e S_g é a saturação da fase gasosa.

O valor de C calculado pode ser comparado à solubilidade efetiva do componente de interesse para se verificar a possível presença de NAPL na forma líquida. Se o valor de C calculado estiver acima da solubilidade efetiva, é muito provável que o NAPL esteja presente em forma líquida, já que concentração na fase aquosa não pode ultrapassar o limite de solubilidade. O grande complicador deste método é a dificuldade em se determinar a solubilidade efetiva de um componente de NAPL presente em uma área contaminada, pois este parâmetro é proporcional à fração molar do componente na mistura de NAPLs, sendo que a composição dessas misturas é geralmente de difícil determinação.

Vários modelos utilizam o termo lixiviação para designar a contaminação da fase aquosa por dessorção da matriz do solo, tal como o modelo de lixiviação na zona não-saturada VLEACH (Ravi e Johnson, 1996) e os procedimentos de análise de risco *Soil Screening Guidance* (U.S.EPA, 1996a, b), da U.S.EPA, e no guia para implementação do Tier 2 da norma técnica *Risk-Based Corrective Action – RBCA* (ASTM, 1994), desenvolvido pela Groundwater Services, Inc. (Groundwater Services, 1995). As equações que esses métodos e modelos utilizam se baseiam nas relações de equilíbrio de partição água-solo, não sendo adequado utilizá-los para situações em que o NAPL se encontre presente. Vale relatar que a documentação destes trabalhos não fornece uma advertência suficientemente explícita de que as equações utilizadas não se aplicam a áreas onde a presença de NAPLs foi detectada.

Portanto, para a avaliação de áreas residuais de NAPLs na zona não-saturada não é possível utilizar as ferramentas tradicionais que modelam a lixiviação de solos através de processos de dessorção, tais como o modelo VLEACH. Tal como foi visto no método de

avaliação da presença de NAPLs residuais, dado pela Eq. (5.2), a aplicação de equações de equilíbrio de dessorção à áreas residuais de NAPLs pode gerar concentrações muito superiores à concentração máxima que seria possível obter. Naturalmente, em se tratando de um NAPL puro, é fácil se detectar se a modelagem está gerando concentrações superiores ao limite de solubilidade, mas isso não é tão imediato quando o NAPL é uma mistura.

Se o objetivo da modelagem for a análise de risco de uma área, pode-se argumentar que este erro seria conservador, por gerar uma concentração superior à real. Entretanto, por razões econômicas, é preciso manter o nível de exagero de uma estimativa conservadora dentro de limites razoáveis. O exagero na conservação da estimativa também apresenta implicações com relação à remediação. Se a concentração estimada for utilizada para se obter o tempo de depleção da fonte de contaminante, pode-se atingir um resultado muito inferior ao tempo real para depleção da fonte. Esta última consideração também pode ser estendida à discussão sobre o uso de relações de equilíbrio na modelagem de dissolução de áreas residuais, como se verá a seguir.

5.3. Teoria da dissolução de fluidos imiscíveis

5.3.1. Taxa de transferência de massa entre as fases NAPL e aquosa

Na modelagem de dissolução de NAPLs, utilizam-se dois tipos de considerações para descrever a transferência de massa entre as fases NAPL e aquosa: equilíbrio instantâneo e reação de primeira ordem. No primeiro caso, considera-se que toda a água que entra em contato com o NAPL atinge instantaneamente a concentração limite, ou seja, a concentração efetiva na água para determinado componente presente em dada fração molar na fase NAPL (Eq. (5.1)). Esta abordagem apresenta indiscutíveis vantagens com relação à modelagem, mas não simula bem situações onde a saturação de NAPLs é pequena. Nesses casos, a transferência de massa pode ser controlada por difusão na fase aquosa, gerando taxas de dissolução bem menores do que as taxas encontradas em situações de equilíbrio (Feenstra e Guiguer, 1996).

No caso da modelagem utilizando-se a abordagem de reação de primeira ordem, a taxa de transferência de massa entre a fase NAPL e a aquosa é usualmente expressa através da equação

$$\left(\begin{array}{c} \text{Taxa de transferência} \\ \text{de massa} \end{array} \right) \approx \left(\begin{array}{c} \text{Área de} \\ \text{contato} \end{array} \right) \cdot \left(\begin{array}{c} \text{Diferença de} \\ \text{concentração} \end{array} \right) \quad (5.3)$$

que expressa a proporcionalidade entre a taxa de dissolução com a área de contato entre as fases e a diferença entre a máxima concentração que determinado composto pode atingir na fase aquosa (limite de solubilidade na fase aquosa) e a concentração da fase aquosa em contato. Diversos fatores compõem os termos da equação acima: solubilidade do composto puro, velocidade do fluxo aquoso, composição e grau de saturação do NAPL, características do solo, coeficiente de difusão molecular do composto na água, entre outros.

O primeiro destes fatores está relacionado com a força que impulsiona o composto a se dissolver na água, ou seja, com a diferença entre a concentração máxima do composto em água e a concentração da fase aquosa. Quanto maior é a solubilidade do composto e menor a concentração deste composto na água que o circunda, maior é o incentivo para que este composto se transfira do estado líquido para a fase aquosa. Outros parâmetros citados, tais como saturação do NAPL e as características do meio poroso, estão diretamente relacionados com a área de contato entre as fases, mas também exercem influência na constante que estabelece a proporcionalidade entre os dois lados da Eq. (5.3).

A taxa de transferência de massa entre as fases NAPL e aquosa (T) [$M/L^3.T$] é comumente expressa da forma:

$$T = A_c \cdot J_j = A_c \cdot k_l \cdot (C_{\max,j} - C) = K_l \cdot (C_{\max,j} - C) \quad (5.4)$$

onde J_j é o fluxo mássico [$M/L^2.T$] do componente j através da área de contato A_c [L^2] entre as fases, k_l é o coeficiente de transferência de massa [L/T], C é a concentração do componente j na fase aquosa [M/L^3]. O novo coeficiente de transferência de massa (K_l) [T^{-1}] da equação (5.4) é resultante da conjugação da área superficial de contato entre as fases ao coeficiente de transferência de massa (k_l).

A utilização da versão conjugada do coeficiente de transferência de massa (K_l) visa suprimir a necessidade de quantificar a área de contato entre as fases. Diversos fatores fazem com que a quantificação da área de contato entre as fases seja extremamente difícil (Miller et al., 1990): a inerente heterogeneidade dos meios porosos, que formam uma intrincada rede tridimensional de canais e poros, mais ou menos interligados entre si; a variedade das formas e tamanhos dos glóbulos de NAPL; a alteração da área superficial à medida que o NAPL se transfere a outras fases; entre outros.

Áreas com a presença de NAPLs residuais podem ser simuladas através da introdução da taxa de dissolução na equação de transporte descrita pela Eq. (2.18), gerando a equação:

$$\frac{\partial}{\partial t} \left(\phi \left(S + \frac{(1-\phi)}{\phi} \cdot \rho_s \cdot f_{oc} \cdot K_{oc} \right) C \right) = \frac{\partial}{\partial z} \left(\phi \cdot S \cdot D \cdot \frac{\partial C}{\partial z} \right) - \frac{\partial}{\partial z} (q \cdot C) + \phi \cdot S \cdot K_l \cdot (C_{max} - C) \quad (5.5)$$

onde C_{max} é a solubilidade efetiva na fase aquosa. Os demais parâmetros já foram definidos no Capítulo 2. Esta mesma equação pode ser utilizada para simular o equilíbrio entre as fases NAPL e aquosa. Para isso, basta se utilizar um valor do parâmetro K_l suficientemente alto.

É importante notar que os parâmetros ϕ e S devem ser multiplicados à taxa de transferência de massa (Eq. (5.4)) para transformar a unidade de volume de fase aquosa para volume do meio poroso, uma vez que a multiplicação desses dois parâmetros fornece o conteúdo volumétrico de água presente no solo (L^3 água / L^3 meio poroso). Isto é necessário visto que a Eq. (5.4) gera uma taxa de transferência de massa por unidade de volume de fase aquosa e a Eq. (5.5) é formulada em termos de unidade de volume de meio poroso.

Alguns autores não incluem essa correção de unidade em suas formulações de transporte, como se verá a seguir. Neste caso, entretanto, é necessário considerar que esta transformação é incluída no valor do coeficiente de transferência de massa (K_l). Assim, o valor do coeficiente no qual a transformação dos volumes está incluída deve ser menor do que o valor do coeficiente utilizado na Eq. (5.5) e sua unidade não é simplesmente $[L^{-1}]$, mas $[L^3 \text{ água} \cdot L^{-3} \text{ meio poroso} \cdot L^{-1}]$.

5.3.2. Modelos para determinação do coeficiente de transferência de massa

Embora a incorporação da área de contato ao coeficiente de transferência de massa venha reduzir o número de parâmetros a serem determinados para a descrição do processo de dissolução dos NAPLs, a quantificação deste coeficiente é ainda uma incógnita. Na verdade, este parâmetro agrega todos os fatores que influenciam o processo e que são de difícil estimativa. Normalmente, o valor deste parâmetro é obtido através de calibração de um modelo que inclua dissolução a partir de dados experimentais obtidos em laboratório ou em campo. Entretanto, este método não permite que se estenda o uso do modelo calibrado para condições ligeiramente diferentes das estudadas, tal como ocorre durante o processo de dissolução devido à alteração da distribuição de formas e tamanhos dos glóbulos de NAPL.

O modelo do filme estagnante foi um dos primeiros a proporem uma relação preditiva para o coeficiente de transferência de massa (Miller et al., 1990; Feenstra e Guiguer, 1996) através da consideração de que a transferência de massa ocorre devido à difusão molecular através de uma fina camada de fluido estagnado. Neste modelo, o coeficiente de transferência de massa para a equação de fluxo (sem a inclusão da área de contato entre as fases) é proporcional ao coeficiente de difusão molecular do componente em água e inversamente proporcional à espessura do filme estagnante. Embora conceitualmente interessante, este modelo falha ao não considerar a influência advectiva no processo de transferência de massa.

Outros tipos de modelos conceituais foram desenvolvidos (Miller et al., 1990; Feenstra e Guiguer, 1996; Powers et al., 1994b) baseados em estudos de transferência de massa em geometrias simples (esferas, leitos fluidizados, etc), mas a dificuldade de extrapolá-los a geometrias mais complexas, tal como é o caso dos meios porosos, faz com que eles sejam pouco práticos.

Uma forma que tem sido muito utilizada para se obter relações preditivas para o coeficiente de transferência de massa é através de equações de correlação utilizando números adimensionais (Miller et al., 1990). A metodologia utilizada na obtenção dessas correlações consiste em realizar experimentos de dissolução variando sistematicamente os parâmetros que influem no processo, estimar, através de ajuste de um modelo de transporte, os coeficientes de transferência de massa que correspondem a cada resultado obtido e relacionar esses resultados aos valores utilizados de cada parâmetro através de números adimensionais.

Uma compilação das correlações geradas através deste tipo de metodologia é apresentada na Tabela 5.1. Estas relações utilizam basicamente os números adimensionais Sherwood (Sh), Reynolds (Re) e Schmidt (Sc), que são definidos como:

$$Sh = \frac{K_l \cdot d_{50}^2}{D_m}; \quad Re = \frac{v \cdot d_{50}}{\mu}; \quad Sc = \frac{\mu}{D_m}$$

onde d_{50} é o diâmetro médio das partículas [L], D_m é o coef. de difusão molecular [L^2/T], v é a velocidade linear da fase aquosa [L/T] e μ é a viscosidade dinâmica da água [L^2/T].

Miller et al. (1990) realizaram experimentos de dissolução de tolueno em colunas saturadas de 9,0 cm de comprimento e 2,5 cm de diâmetro empacotadas com esferas de vidro de tamanho uniforme. Os autores variaram o tamanho das partículas, a velocidade da fase aquosa e a saturação do NAPL (Tricloroetileno – TCE). Como a duração dos experimentos foi pequena, os resultados refletem uma situação estática da dissolução. A expressão utilizada

para calcular o coeficiente de transferência também reflete o caráter estático dos dados gerados, uma vez que foi utilizada uma solução analítica unidimensional da equação de transporte com dissolução em estado estacionário. A mesma expressão também demonstra que o coeficiente de transferência de massa calculado não inclui a transformação do volume de água em volume de meio poroso, uma vez que essa transformação aparece explicitamente na equação de transporte utilizada. Assim, o valor de K_l calculado através da expressão de Miller et al. (1990) é apropriado para ser utilizado no modelo da Eq. (5.5).

Tabela 5.1 – Correlações de números adimensionais para cálculo do coeficiente de transferência de massa

Referência	Tipo de Experimento	Correlação*
Miller et al (1990)	Tolueno em esferas de vidro	$Sh = 12.Re^{0,75} .(\phi.S_o)^{0,60} .Sc^{0,50}$
Imhoff et al. (1993)	Tricloroetileno (TCE) em areia homogênea	$Sh = 340.(\phi.(1 - S_o).Re)^{0,71} .(\phi.S_o)^{0,87} .(x/d_{50})^{-0,31}$
Powers et al. (1994a)	Estireno e TCE em diferentes tipos de areia	$Sh = 4,13.Re^{0,598} .\delta^{0,673} .U^{0,369} .(S_o/S_o^i)^\beta$

* S_o é a saturação do NAPL; x é a distância; $\delta = d_{50}/d_M$, onde d_M é o tamanho de um grão médio de areia ($d_M = 0,05$ cm); U é o índice de uniformidade do meio poroso, sendo definido como $U = d_{60}/d_{10}$ (diâmetros de 10 e 60% passantes); S_o^i é a saturação inicial do NAPL; $\beta = 0,518 + 0,114.\delta + 0,10.U$

O estudo experimental de Imhoff et al. (1993) envolveu a completa dissolução de uma área residual de NAPLs em uma coluna de 8,25 cm de diâmetro e 3 e 7 cm de comprimento, preenchida com areia homogênea de 0,36 mm de diâmetro médio e completamente saturada. A expressão desenvolvida é válida para as faixas de $0 \leq (\phi.S_o) \leq 0,04$, $0,0012 \leq Re \leq 0,021$ e $1,4 \leq (x/d_{50}) \leq 180$. Neste caso, a transformação do volume de água em volume de meio poroso foi incluído no valor de K_l calculado. Para ser utilizado no modelo da Eq. (5.5), esta

expressão deve ser dividida por (ϕS) . Este trabalho foi desenvolvido de forma transiente, ao contrário do trabalho de Miller et al. (1990).

Powers et al. (1994a) realizaram experimentos de dissolução transiente de áreas residuais de estireno e TCE, em meio saturado, utilizando quatro tipos de areia (d_{50} de 0,45, 0,71, 0,80 e 1,20 mm). Também houve variação no grau de saturação do NAPL (de 3,9 a 6,5%) e na velocidade da fase aquosa (3 a 15 m/d), buscando atingir velocidades típicas encontradas em operações de remediação envolvendo bombeamento em aquíferos arenosos. Tal como em Imhoff et al. (1993), a expressão fornecida neste trabalho deve ser dividida por (ϕS) antes de ser utilizada no modelo da Eq. (5.5).

A literatura fornece ainda outras relações além das descritas na Tabela 5.1 (Geller e Hunt, 1993; Guiguer e Frind, 1994; Powers et al., 1994b), entre empíricas e conceituais. Entretanto, as relações citadas foram selecionadas por apresentarem uma maior generalidade e por utilizarem somente parâmetros de fácil estimativa. Vale ressaltar que todos os modelos empíricos discutidos foram desenvolvidos especificamente para solos saturados e utilizando compostos simples para a fase NAPL. Modelos específicos para a dissolução em zona não-saturada e com misturas de NAPLs não estão disponíveis na literatura.

5.4. Modelagem computacional da dissolução de NAPLs residuais

5.4.1. Inclusão da dissolução no modelo FT1D

A equação de transporte discretizada, implementada no modelo de transporte FT1D (Eq. (2.36)), foi alterada para simular a dissolução de áreas residuais de NAPL através do termo de fonte externa, obtendo-se a Eq. (5.6). O programa calcula este termo apenas para as células nas quais foi especificada a existência de uma quantidade de NAPL no solo maior do que zero. Para a entrada de dados relativos à dissolução, devem ser especificados inicialmente o teor de NAPL para cada célula do domínio não-saturado (em mg/kg de solo seco) e a solubilidade efetiva do contaminante (C_{max}).

$$\begin{aligned}
& \left(-\frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_i - z_{i-1})} - \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_i^{t+1} + q_{i-1}^{t+1})}{\Delta z_i} \right) \cdot C_{i-1}^{t+1} + \\
& \left(+\frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_{i+1} - z_i)} + \frac{\bar{D}_{i-1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_i - z_{i-1})} - \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_i^{t+1} + q_{i-1}^{t+1})}{\Delta z_i} + \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_{i+1}^{t+1} + q_i^{t+1})}{\Delta z_i} \right) \cdot C_i^{t+1} + \\
& \left(+\frac{\phi_i \cdot R_i^{t+1} \cdot S_i^{t+1}}{\Delta t} + \phi_i \cdot S_i^{t+1} \cdot (K_l)_i^{t+1} \right) \\
& \left(-\frac{\bar{D}_{i+1/2}^{t+1}}{\Delta z_i \cdot (z_{i+1} - z_i)} + \frac{1}{4} \cdot \frac{(q_{i+1}^{t+1} + q_i^{t+1})}{\Delta z_i} \right) \cdot C_{i+1}^{t+1} = \left(\frac{\phi_i \cdot R_i^t \cdot S_i^t \cdot C_i^t}{\Delta t} \right) + \phi_i \cdot S_i^{t+1} \cdot (K_l)_i^{t+1} \cdot C_{\max}
\end{aligned} \tag{5.6}$$

O programa permite que o usuário entre com o valor do coeficiente de transferência de massa ou que solicite que este valor seja estimado. Entrando com um valor de K_l suficientemente grande, pode-se simular a dissolução em equilíbrio. Assim, a concentração da fase aquosa nas células onde houver fase NAPL presente, qualquer que seja sua saturação, atingirá o limite de solubilidade. Ao se escolher um valor de K_l , este é mantido fixo ao longo de toda a simulação. A estimativa do coeficiente de transferência de massa (K_l) pode ser feita através de três opções: modelos de Miller et al. (1990), Imhoff et al. (1993) e Powers et al. (1994a) (Tabela 5.1). O uso conjunto dessas opções permite que se possa ter uma faixa de valores possíveis de concentrações geradas pela fonte de NAPL residual, permitindo o estudo de possíveis cenários para a área em questão.

Os valores de saturação do NAPL (S_o) utilizados na estimativa dos coeficientes de transferência de massa serão obtidos através da massa de NAPL no solo (C_s), em mg/kg solo seco, através da Eq. (5.7) (U.S.EPA, 1996c)*.

$$S_o = \frac{10^{-6} \cdot C_s \cdot \rho_b}{\phi \cdot \rho_o} \tag{5.7}$$

onde ρ_b é a densidade volumétrica do solo ($\rho_b = \rho_s \cdot (1 - \phi)$) [M solo/L³ meio poroso] e ρ_o é a densidade do NAPL [M/L³]. Quando a massa de NAPL no solo é tomada como sendo a massa total de NAPL, ou seja, a soma das massas do NAPL nas quatro fases presentes no solo

* A equação original desta referência ("Exhibit IV-9") foi dividida pela porosidade para que o resultado seja dado em termos de saturação de óleo [L³ óleo/L³ poros].

(residual, adsorvida, gasosa e aquosa), a Eq. (5.7) subentende que a soma das massas de NAPL nas fases adsorvida, gasosa e aquosa é desprezível em comparação com a massa na fase residual. Segundo Domenico e Schwartz (1997), esta consideração é bastante razoável, entretanto, utilizando a consideração de equilíbrio entre as fases, é possível isolar a massa de NAPL contida na fase residual através da expressão:

$$C_r = C_s - C_{aq} - C_{ads} - C_{gas} = C_s - C_{\max} \left(\frac{\phi \cdot S}{\rho_b} + K_d + \frac{\phi \cdot S_g \cdot H}{\rho_b} \right)$$

onde C_r , C_{aq} , C_{ads} e C_{gas} são as massas do NAPL (em termos de mg/kg solo seco) nas fases residual, aquosa, adsorvida e gasosa, respectivamente.

Ao longo da simulação, a fonte de NAPL pode ser deplecionada ou mantida constante (fonte infinita), segundo a opção do usuário. A taxa de depleção da fonte varia de acordo com a taxa de dissolução utilizada, que, por sua vez, depende do modelo para o cálculo do coeficiente de transferência de massa ou do valor escolhido. A depleção é simulada através de um balanço de massa em cada célula, ao fim de cada período de simulação, onde é contabilizada a massa dissolvida neste período. Para o período de simulação seguinte, a saturação do NAPL e os valores do coeficiente de transferência de massa, para cada célula do domínio, são reavaliados.

Os valores de saturação da fase aquosa, que são geradas pelo módulo de fluxo de FT1D, podem sofrer alterações pela presença de áreas de NAPL residual. Apesar da fase NAPL não ser mobilizada pela água, a área disponível para o fluxo da fase aquosa é menor do que no caso da ausência da fase NAPL, gerando saturações menores para a fase aquosa. Com isso, obtêm-se maiores velocidades lineares para a fase aquosa, o que leva a maiores fluxos advectivos no transporte e alterações na taxa de dissolução, além de outras implicações. Para considerar este efeito no fluxo da fase residual, seria necessário resolver as equações de fluxo e transporte acopladas, uma vez que a saturação do NAPL é reduzida à medida que a fonte é deplecionada. Para simplificação, vai-se considerar que a saturação residual é pequena o suficiente para que este efeito seja negligenciável.

5.4.2. Verificação do cálculo de dissolução em FT1D

A implementação da dissolução de áreas residuais de NAPLs foi comparada com a solução analítica, em regime permanente, para a equação de transporte incluindo advecção,

dispersão hidrodinâmica e dissolução (Eq. (5.5)), em zona saturada e com velocidade constante. Esta solução (van Genuchten e Alves (1982) apud Miller et al. (1990)) é dada por:

$$C(z) = C_{sol} \cdot \left(1 - \exp \left(\left(\frac{z}{2 \cdot D} \right) \left(v - \sqrt{v^2 + 4 \cdot D \cdot K_l} \right) \right) \right) \quad (5.8)$$

onde v é a velocidade linear da fase aquosa ($v = q/\phi$) e D é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal ($D = D_m + \alpha_L v$).

Para esta validação, o módulo de transporte do modelo FT1D foi alterado para se obter uma solução permanente, igualando a zero a derivada temporal da Eq. (5.5). A Figura 5.1 foi gerada através da simulação de vários valores de K_l para as seguintes condições: porosidade de 40%, velocidade de Darcy de 0,28 cm/min (velocidade linear de 0,7 cm/min), dispersividade longitudinal de 10 cm e coeficiente de difusão molecular de $4,8 \cdot 10^{-4}$ cm²/min. Em FT1D, utilizou-se a opção de saturação ($S=1$) e descarga específica constantes, não sendo executada a subrotina de fluxo. Os valores de concentração normalizada (C/C_{sol}) são dados em função de K_l para vários pontos de uma coluna unidimensional (z).

O mesmo caso foi simulado utilizando-se os três modelos de estimativa de K_l (Miller et al. (1990), Imhoff et al. (1993) e Powers et al. (1994a)) para vários valores de Reynolds, para o ponto localizado a 10 cm do topo do domínio, com saturação de NAPL de 0,005. A Figura 5.2 traz os valores de concentração normalizada (C/C_{sol}) em função de Re para os três modelos, calculados utilizando o modelo FT1D e com a solução analítica dada pela Eq. (5.8).

Nas duas situações, pode-se verificar que FT1D simulou corretamente a dissolução e o transporte para toda a faixa de valores avaliada. Na Figura 5.2 é possível verificar que o modelo de Imhoff et al. (1993) estima valores de coeficiente de transferência de massa bem inferiores aos valores calculados através dos outros modelos. A diferença entre os valores estimados para o coeficiente é consequência das diferenças nas escolhas feitas em cada trabalho quanto à metodologia experimental, ao modelo de transporte e ao método de ajuste do modelo aos dados experimentais obtidos. A simulação utilizando os diferentes modelos pode fornecer uma faixa de valores possíveis para as concentrações a serem atingidas na fase aquosa, bem como o tempo de depleção das fontes, permitindo que se avaliem cenários limites para a área em estudo.

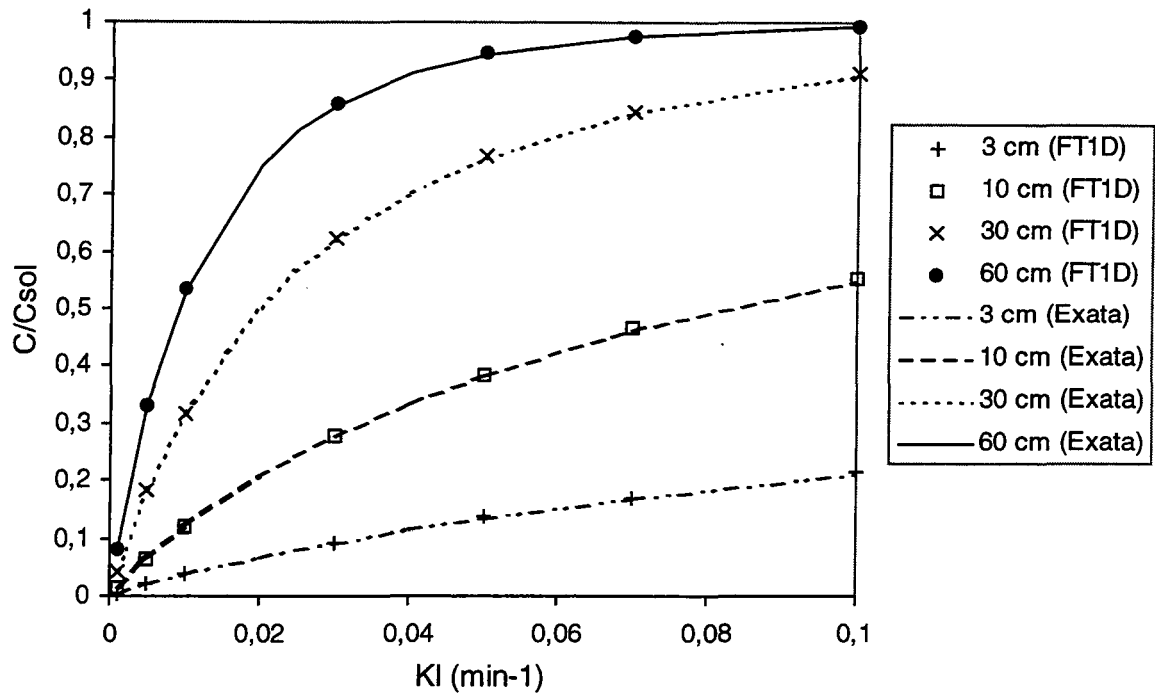


Figura 5.1 – Comparação da solução de FT1D com a solução analítica (Exata) para o problema de dissolução, para diversos comprimentos.

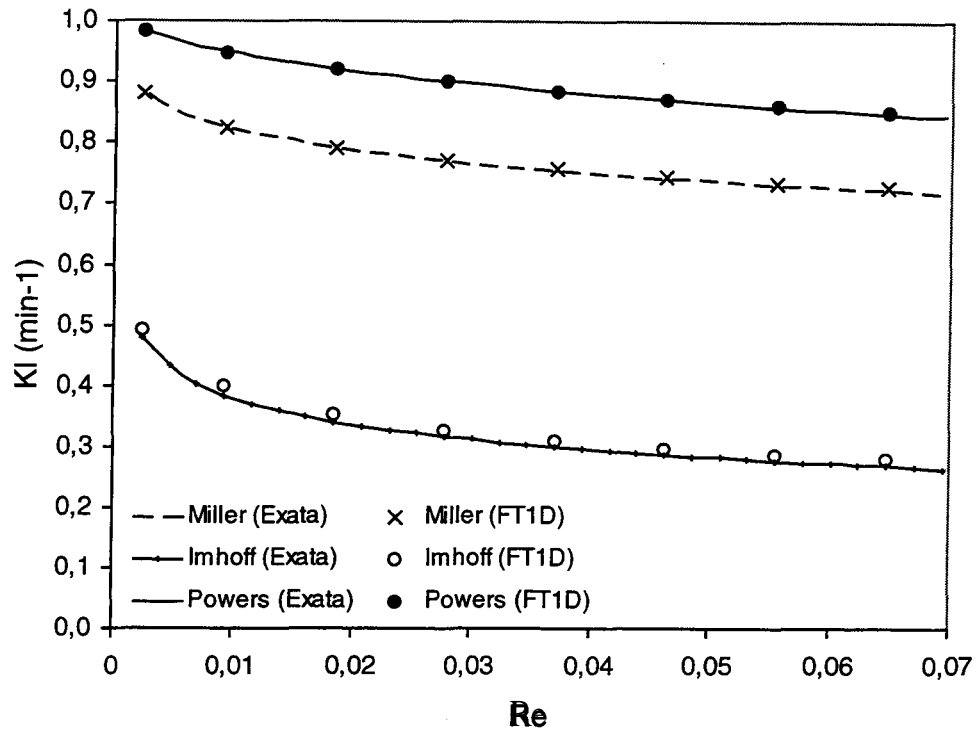


Figura 5.22– Comparação da solução de FT1D com a solução analítica (Exata) para o problema de dissolução, em função de Re , para 10 cm de comprimento.

O processo de depleção da fonte de NAPL residual implementado no modelo FT1D foi avaliado através de um caso-exemplo publicado em Powers et al. (1994a). Neste caso, dados experimentais da completa dissolução de uma coluna de 3,94 cm de comprimento, contaminada com estireno, foram comparados com a simulação através do modelo GANGLIA, utilizando os modelos de Miller et al. (1990), Imhoff et al. (1993) e Powers et al. (1994a) para a estimativa do coeficiente de transferência de massa. A saturação inicial do estireno é 12,16% (24.474 mg/kg), a velocidade de Darcy da fase aquosa é 3,5 m/dia e o solo utilizado é a areia “Wagner 50”. Os demais valores dos parâmetros, podem ser obtidos na citada referência.

A simulação deste caso através de FT1D é mostrada na Figura 5.3. O módulo de fluxo do modelo não foi utilizado, pois se escolheu a opção de saturação e velocidade fixos ($S = 1$ e $q = 3,52$ m/d). A linha referente à consideração de equilíbrio não foi obtida através de simulação e sim através do cálculo do tempo necessário para total dissolução da massa inicial de contaminante com a fase aquosa atingindo o limite de solubilidade. Este valor pode ser estimado através da expressão abaixo:

$$t = \frac{L \cdot \rho_s \cdot (1 - \phi) \cdot 10^{-3} \cdot C_s}{q \cdot C_{sol}} \quad (5.9)$$

onde L é o comprimento da coluna. Para este caso, o tempo calculado foi de 2.868,6 minutos ou, em termos de volume de água injetada no meio poroso, 480 volumes de poros*.

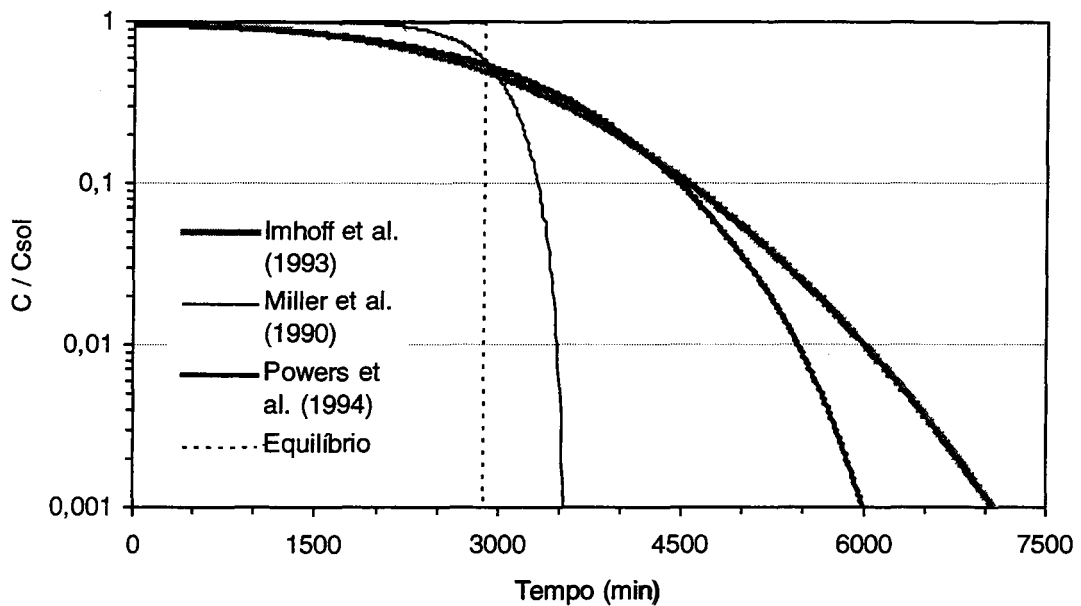


Figura 5.3 – Resultados de simulação com FT1D para um caso de dissolução completa de estireno de Powers et al. (1994a).

* A equivalência entre o tempo de dissolução e o número de volumes de poros (VP) que atravessa o meio poroso neste tempo pode ser obtida através da expressão: $t = VP \cdot \phi \cdot L / q$

Os dados experimentais para este caso, bem como as simulações com o modelo GANGLIA, são apresentados de forma gráfica em Powers et al. (1994a) (Figura 8), em função do número de volume de poros. Apesar da dificuldade de leitura do gráfico, pode-se estimar que o tempo necessário para que a concentração normalizada da fase aquosa se reduza a 0,001 foi de 3.525 min (590 volumes de poros) utilizando o modelo de Miller et al. (1990), 6.094 min (1.020 volumes de poros) com o modelo de Powers et al. (1994a) e 7.289 min (1.220 volumes de poros) com o modelo de Imhoff et al. (1993).

Como pode-se ver na Figura 5.3, as estimativas através de FT1D foram bastante aproximadas destes valores, para todos os modelos utilizados (3.540 min com Miller et al. (1990), 6.000 min com Powers et al. (1994a) e 7.070 min com Imhoff et al. (1993)). As diferenças podem ser devidas à imprecisão na leitura dos valores do gráfico e à desconsideração da diferença na saturação da fase aquosa causada pela presença da fase residual. O modelo GANGLIA calcula a saturação da água como sendo $(1 - S_o)$, enquanto FT1D utiliza o valor de saturação fornecido pelo usuário. Essa diferença de abordagem pode gerar maiores taxas de dissolução em FT1D do que as calculadas por GANGLIA, já que a velocidade linear é menor em FT1D.

5.5. Dissolução em colunas não-saturadas

Os problemas de lixiviação de solos são geralmente tratados como sendo problemas de dessorção, sendo modelados através das relações de equilíbrio das fases adsorvida, aquosa e gasosa. Nestes casos, é feita a consideração de que não há a presença de NAPLs na região de estudo. Raros são os trabalhos que abordam a presença de NAPLs residuais na zona não-saturada, principalmente devido à dificuldade de análise gerada pela presença da fase gasosa. Com isso, o fenômeno da dissolução na zona não-saturada não é bem estudado.

Neste trabalho experimental, foram realizados ensaios de lixiviação de NAPL (tolueno) em colunas não-saturadas para diferentes saturações de NAPL, tamanhos de coluna e velocidades da fase aquosa, visando gerar subsídios para se discutir o processo de dissolução em zona não-saturada. Inicialmente, são descritos a metodologia utilizada na geração dos dados e a análise dos resultados obtidos. No próximo item, os resultados produzidos serão comparados com os simulados através do modelo FT1D, modificado para incluir fontes residuais de NAPLs, e utilizando os modelos de estimativa do coeficiente de transferência de massa listados na Tabela 5.1.

5.5.1. Metodologia experimental

Durante os ensaios, foi avaliada a concentração de tolueno na água infiltrante como resultado da dissolução de tolueno residual retido no solo. Em alguns ensaios, foi utilizada uma mistura de tolueno e xilenos, sendo que o único composto analisado foi o tolueno, devido a dificuldades de separação da mistura de isômeros de xileno na técnica analítica empregada. Como contaminantes, utilizaram-se produtos Merck: tolueno GR for analysis ACS, ISSO (pureza >99,5%) e xileno extra puro (mistura isomérica Ph HelvVI).

A Tabela 5.2 traz uma compilação de valores de limite de solubilidade para o tolueno puro em água, a 25°C, provenientes de várias fontes bibliográficas, tendo sido a maioria deles resumida em Montgomery e Welkom (1989). É de se notar a grande variabilidade dos valores encontrados pelos diversos autores, variando de 490 a 627 mg/l, com média de 550 mg/l e desvio padrão de 41 mg/l (7,5% da média). Esta variabilidade pode refletir fatores como perdas por evaporação, diferença entre os métodos analíticos utilizados, tempo de espera para atingir o equilíbrio, presença de impurezas no solvente, número insuficiente de réplicas, além de outros. Provavelmente, os mais importantes desses fatores são os métodos analíticos empregados, que têm sido aprimorados com o passar dos anos, e as perdas por volatilização.

Tabela 5.2 – Valores de solubilidade do tolueno em água, a 25°C, a partir de vários autores.

Ano da publicação	Solubilidade (mg/l)	Referência
1949	530	Montgomery e Welkom (1989)
1951	627	Montgomery e Welkom (1989)
1963	490	Montgomery e Welkom (1989)
1963	627	Montgomery e Welkom (1989)
1966	515	Montgomery e Welkom (1989)
1973	573	Montgomery e Welkom (1989)
1975	534,8	Montgomery e Welkom (1989)
1976	554	Montgomery e Welkom (1989)
1981	506,7	Montgomery e Welkom (1989)
1984	524	Banerjee (1984)
1985	535	Montgomery e Welkom (1989)
1986	535	Montgomery e Welkom (1989)
1988	580	Montgomery e Welkom (1989)
1997	567,07	Fernandes (1997)

Devido à grande discrepância dos valores de literatura para a solubilidade de produtos orgânicos em água, a solubilidade do tolueno a 25°C foi avaliada, bem como a das misturas de tolueno e xileno a 1:1 v/v (volume/volume) e 1:2 v/v. Em frascos de vidro de 1,8 ml, foram adicionados 1,5 ml de água destilada e 0,2 ml de tolueno puro ou das misturas tolueno-xileno preparadas anteriormente. Os ensaios foram feitos em cinco réplicas para cada uma das 3 solubilidades avaliadas. Os frascos foram tampados com tampa de rosca e septo de silicone com face de Teflon e agitados por uma hora. As amostras foram deixadas por 24 horas em estufa termostaticada a 25°C ± 1°C. Após este período, os frascos foram colocados invertidos em uma centrífuga, sendo centrifugados por 15 minutos para a completa separação das fases. Sem inverter os frascos, alíquotas de 2 µl da fase aquosa foram tomadas para serem analisadas por cromatografia gasosa.

Para os ensaios de lixiviação, utilizaram-se colunas de PVC de 15 cm de diâmetro nominal (14,5 cm de diâmetro interno) e comprimentos de 60 e 110 cm, terminando a parte inferior com tampões de PVC. Os tampões foram perfurados (3 a 4 furos de 5 mm de diâmetro) para permitir a saída da água. Os furos foram dotados de pequenos tubos de PVC flexível para ajudar a conduzir a água para fora da coluna. Uma tela metálica foi adaptada no fundo do tampão com o objetivo de reter o solo.

A possibilidade de subida do nível da água dentro da coluna, que poderia ocorrer caso os furos não dessem vazão à quantidade de água infiltrante, foi monitorada pela instalação de um piezômetro nivelado na parte inferior do tubo e conectado a um tubo de vidro paralelo à coluna que permitiria a verificação da subida do nível da água dentro da coluna. Entretanto, não foi verificada a subida da água, tendo sido, portanto, suficientes os furos no tampão para manter a coluna não-saturada. Entende-se que, neste caso, a condição de contorno inferior tenha sido mantida como carga nula na linha inferior da coluna, caracterizando uma superfície de lençol freático não variante.

O solo utilizado para empacotar a coluna foi areia média lavada, tendo sido seca ao ar por uma semana e passada por peneira de 2 mm para retirada de partículas maiores. Testes de empacotamento demonstraram que a porosidade de 40% seria razoável de se obter para este tipo de areia. Assim essa porosidade foi estipulada como sendo a porosidade de trabalho para todos os experimentos. A densidade dos grãos foi avaliada através do método do balão volumétrico (Cauduro et al., 1990), sendo obtido o valor de 2,74 g/cm³. A condutividade hidráulica saturada da areia foi medida em laboratório, utilizando o método do permeâmetro de carga constante, tendo sido determinada como sendo 5,30 cm/min. A análise

granulométrica da areia mostrou uma fração de silte e argila inferior a 0,4% e um diâmetro médio (d_{50}) de 0,5 mm, conforme mostra a curva granulométrica (Figura 5.4).

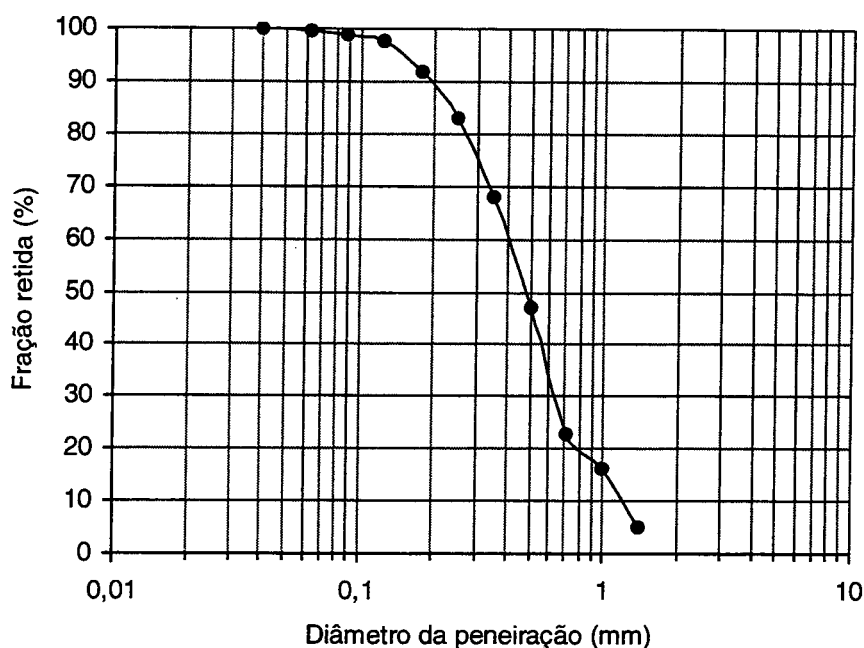


Figura 5.4 – Curva granulométrica da areia média utilizada.

A curva de retenção da areia foi determinada utilizando funis de tensão (Cauduro et al., 1990) para tensões até 100 cm, sendo as amostras empacotadas na porosidade de 40%. Utilizando o programa de ajuste não-linear RETC (van Genuchten et al., 1991), os dados de saturação e pressão capilar foram ajustados ao modelo de van Genuchten. A Figura 5.5 mostra os dados experimentais para a curva de retenção, bem como o modelo de van Genuchten ajustado (parâmetros indicados na figura). Nota-se por esta figura que a areia apresentou um valor de S_m (saturação máxima atingida pela fase aquosa) bastante baixa, cerca de 85% da porosidade, devido à alta permeabilidade da areia, sendo o restante da porosidade ocupada pelo ar.

Para o empacotamento da coluna, a quantidade de areia seca necessária para se obter uma porosidade de 40% no volume desejado foi pesada e dividida em 2 a 4 porções de igual massa, com o objetivo de facilitar o manuseio. A água e o contaminante utilizados no empacotamento da coluna foram resfriados para minimizar as perdas por volatilidade. Os volumes de água e de contaminante equivalente às saturações desejadas foram medidos e divididos em igual número de porções em que a massa de areia foi dividida. A cada uma das

porções de areia foi acrescentada uma porção de água, sendo a areia homogeneizada. Posteriormente, o mesmo foi feito com uma porção de contaminante. O tempo de homogeneização do contaminante na areia foi reduzido, para minimizar as perdas por evaporação. A porção de areia umedecida e contaminada foi adicionada à coluna e compactada até atingir a altura equivalente à massa de solo pesada. Esse processo foi repetido com todas as porções de areia até que o empacotamento atingisse o comprimento da coluna desejado.

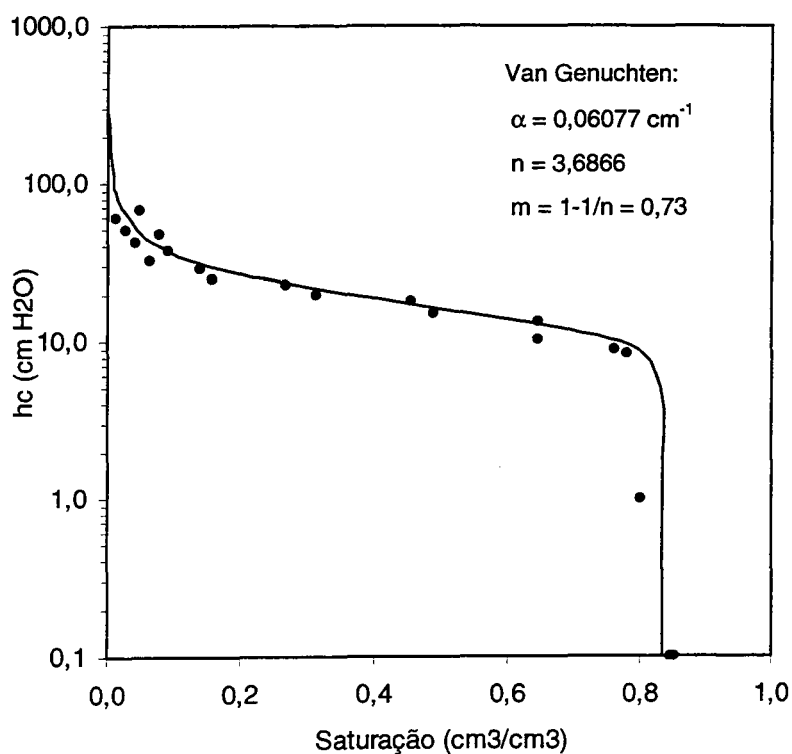


Figura 5.5 – Curva de retenção experimental (pontos) e ajustada (linha) para a areia média.

O ensaio de lixiviação foi desenvolvido pela aplicação de uma chuva artificial e pela coleta de amostras de água que saíam da coluna, na sua parte inferior. Toda água utilizada foi previamente destilada e deionizada. As chuvas foram simuladas através da aplicação de vazões equivalentes às taxas de chuvas reais aplicadas à área da coluna. Dado o pequeno diâmetro da coluna, as vazões foram pequenas, sendo necessário que a água fosse espalhada através de aspersão utilizando ar comprimido. A vazão da água foi controlada através de uma válvula tipo agulha, para gás, sendo que a carga de água do reservatório que alimentava a válvula foi mantida constante durante o experimento. Assim, a condição de contorno para a água no topo da coluna foi estipulada como sendo a de taxa fixa. A configuração do experimento pode ser visualizada na Figura 5.6.



Figura 5.6 - Experimento de lixiviação de tolueno em colunas

Para cada coluna, foram aplicadas três taxas de precipitação diferentes (0,09, 0,18 e 0,27 cm/min), sendo cada coluna feita em duas réplicas. Esses valores foram escolhidos para atender as necessidades da configuração do experimento elaborado. É importante notar que essas taxas são elevadas em relação às encontradas normalmente, gerando velocidades da fase aquosa no solo bastante altas.

Durante cada ensaio, ou seja, quando a taxa de precipitação foi mantida fixa, um mínimo de 5 amostras foram colhidas na saída da coluna, tomando-se o cuidado de verificar se a vazão de saída atingira o regime permanente antes de iniciar as coletas. O espaçamento entre as coleta das amostras foi variável, sendo, em média, de 10 minutos. Em geral, os ensaios com as três taxas de precipitação foram realizados em seqüência da menor para a maior taxa e o tempo total de cada ensaio foi variável de acordo com o tempo necessário para a estabilização do fluxo. Em média, o tempo total de lixiviação para cada coluna não ultrapassou 300 minutos. As temperaturas da água e do ambiente foram monitoradas ao longo dos experimentos, permanecendo, em média, em $25\pm 2^{\circ}\text{C}$.

As amostras de água foram armazenadas em frascos de 1,8 ml com tampa rosqueada e septo de silicone revestido por teflon em uma das faces. Os frascos foram preenchidos totalmente, tampados e verificados quanto à presença de bolhas de ar. As amostras foram armazenadas em geladeira a temperaturas inferiores a 10°C por, no máximo, 3 dias, antes de serem analisadas por cromatografia gasosa.

As análises das amostras de água foram feitas por injeção direta da amostra em cromatógrafo gasoso. As características do cromatógrafo, coluna e do método utilizado são mostradas na Tabela 5.3. O método de injeção direta da solução de água e contaminante pode ser utilizado quando a concentração na água é alta, embora esse método seja muito sensível a erros de injeção e apresente um limite de detecção alto, assumido como sendo 10 mg/l. Para detectar concentrações mais baixas é necessário se utilizar os métodos “purge-and-trap”, “headspace” ou extração por solvente. Para minimizar as perdas na injeção, utilizou-se uma seringa Hamilton “gastight” de 10 μl . Além disso, cada amostra foi injetada no mínimo duas vezes, sendo a média e desvio padrão determinados.

Tabela 5.3 – Características do método de análise de tolueno utilizado.

Marca e modelo do cromatógrafo gasoso	Varian 3700
Coluna	60/80 Carbopack – 0,30% Carbowax 20M 0,1% H ₃ PO ₄ – 3'x 4 mm (D.I.)
Detector	FID
Gás de arraste	Hélio
Vazão gás de arraste	40 ml/min
Vazão H ₂	40 ml/min
Vazão O ₂	400 ml/min

A curva de calibração da análise foi construída a partir da injeção de 5 a 7 padrões do contaminante de interesse, dentro da faixa de concentrações de 10 a 500 mg/l. Os padrões foram preparados pela diluição em água de uma solução primária preparada pela adição de 1,000 g de tolueno a 100 ml de um solvente miscível em água (utilizou-se etanol). Cada padrão foi injetado, no mínimo, três vezes para considerar os erros de injeção. O desvio padrão das injeções dos padrões, bem como das amostras, esteve abaixo de 7%, tendo como média 1,7%. O coeficiente de correlação do ajuste dos pontos foi sempre superior a 0,99. A Figura 5.7 abaixo mostra uma curva de calibração típica.

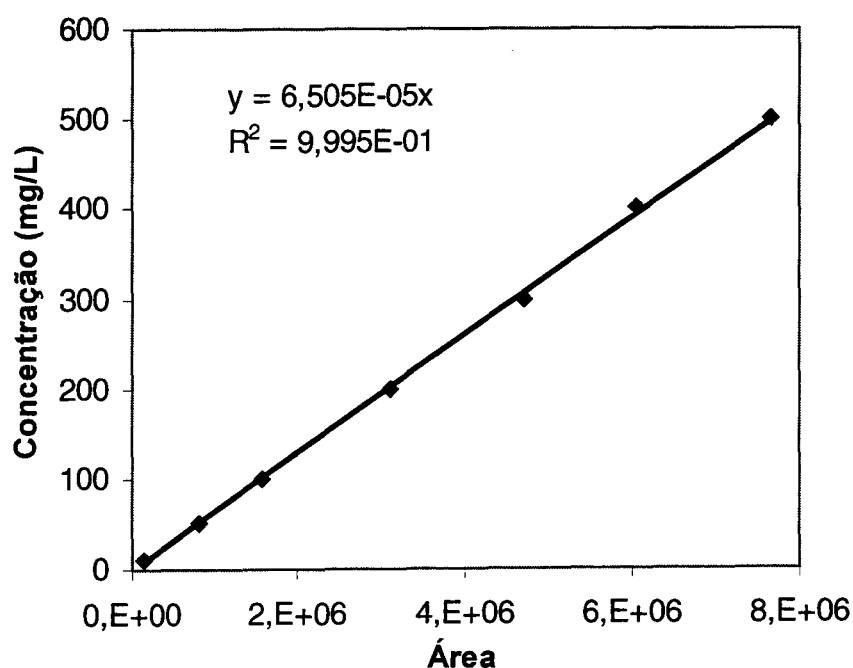


Figura 5.7 – Curva de calibração da análise de tolueno por cromatografia gasosa.

5.5.2. Resultados e discussões

Os ensaios para determinação dos limites de solubilidade do tolueno puro e em mistura com xilenos a 1:1 e 1:2 v/v são mostrados na Tabela 5.4. A solubilidade do tolueno puro medida (594 mg/l) esteve dentro da faixa de valores de literatura compilados na Tabela 5.2 (490 – 627 mg/l), ficando 8% acima da média dos valores compilados (550 mg/l). A fração molar do tolueno nas misturas de 1:1 e 1:2 v/v foi de 0,538 e 0,368, respectivamente. Utilizando a solubilidade medida para o tolueno puro na Eq. (5.1), juntamente com as frações molares, obtém-se as solubilidades teóricas de 319 e 219 mg/l para as misturas 1:1 e 1:2 v/v, respectivamente.

Pode-se observar que, enquanto a solubilidade medida para a mistura de 1:2 v/v (216 mg/l) correspondeu ao obtido teoricamente, a solubilidade medida para a mistura 1:1 v/v foi 10% superior ao calculado (354 mg/l). Isto pode ser explicado como um desvio da idealidade, representado por um coeficiente de fugacidade superior a um para o tolueno na mistura tolueno-xilenos. Banerjee (1984) encontrou desvios do comportamento ideal da solubilidade de compostos em misturas orgânicas da ordem de 7%. Resultados similares foram obtidos por Broholm e Feenstra (1995). Estes autores concluíram que os desvios da idealidade são da ordem de magnitude dos erros de determinação da solubilidade. Os resultados obtidos neste trabalho também confirmam essa afirmativa.

Tabela 5.4 – Resultado dos ensaios de solubilidade do tolueno puro a 25°C.

Amostra	Tolueno puro	Tolueno/Xilenos 1:1 v/v	Tolueno/Xilenos 1:2 v/v
1	570	372	201
2	593	349	217
3	604	357	214
4	594	348	223
5	608	346	227
Média	594	354	216
Desvio Padrão	15	10	9
% D.P./Média	2,5	2,8	4,1

Foram realizados testes de lixiviação em 6 diferentes situações, variando o tipo de contaminante (puro ou em mistura), a saturação do contaminante e o comprimento da coluna de solo. Para cada uma delas, foi avaliada a concentração do tolueno na fase aquosa, na saída da coluna, para três diferentes taxas de precipitação aplicadas. A Tabela 5.5 resume as condições avaliadas em cada teste realizado.

Tabela 5.5 – Condições avaliadas nos testes de lixiviação.

Teste	Comprimento da coluna (cm)	NAPL	Saturação do NAPL
1	100	Tolueno	5,0%
2	100	Tolueno	2,0%
3	50	Tolueno	0,5%
4	100	Tolueno/Xilenos 1:1 v/v	2,0%
5	100	Tolueno/Xilenos 1:2 v/v	2,0%
6	50	Tolueno/Xilenos 1:2 v/v	2,0%

Os resultados obtidos nos Testes 1 até 6 estão resumidos da Tabela 5.6 à Tabela 5.11, respectivamente. Nestas tabelas, são mostrados os valores de concentração medidos nas amostras em cada teste. Em geral, 5 amostras foram recolhidas para cada taxa de precipitação aplicada, mas algumas dessas amostras foram perdidas por razões diversas. Nas tabelas, também são mostradas as médias obtidas para cada taxa de precipitação em cada teste realizado, acompanhadas do desvio padrão dado de forma absoluta e em percentagem com relação à média.

A Tabela 5.6 e a Tabela 5.7 mostram resultados próximos da solubilidade para os Testes 1 e 2, respectivamente, sendo que estes testes simularam situações com as maiores saturações (5 e 2%, respectivamente) e a maior coluna entre as estudadas (100 cm). Apesar das concentrações apresentarem uma tendência para se elevar com o aumento da vazão, não há evidências para se concluir que essa tendência seja real. Na verdade, o valor da menor concentração média obtida nos ensaios dos Testes 1 e 2 (534 mg/l) é apenas 10% inferior ao

limite de solubilidade medido, podendo ser esta diferença inerente ao erro experimental. Portanto, é bastante provável que a dissolução tenha atingido o equilíbrio nestes testes.

No teste de lixiviação no. 3, cujos resultados são mostrados na Tabela 5.8, obteve-se uma situação diferente da obtida nos Testes 1 e 2. Neste caso, foi simulada uma coluna de 50 cm de comprimento, com saturação residual de 0,5% de tolueno puro. As médias obtidas para as repetições do Ensaio 1 corresponderam a 38,5 e 43,3% do limite de solubilidade para o tolueno puro e, para o Ensaio 2, ambas corresponderam a ~27% da solubilidade (26,8 e 26,9%). Assim, neste teste, aparentemente o equilíbrio não foi atingido. Para isso, do ponto de vista físico, podem ter concorrido dois fatores: a saturação mais baixa dificultou a transferência de massa, fazendo com que a dissolução seja limitada pela difusão, ou o comprimento da coluna não foi suficiente para que a concentração atingisse o limite de solubilidade. Outra possibilidade é de que o tolueno tenha sido deplecionado pela dissolução ou por evaporação, apesar do pouco tempo de ensaio e dos cuidados tomados no empacotamento da coluna.

Uma redução da concentração com o aumento da velocidade da fase aquosa foi observada nos dados do Teste 3. Esta redução pode ser analisada através da conseqüente redução do tempo de contato da água com a fase NAPL. Quanto maior a velocidade da água, menor será o tempo de contato entre as fases e menor será a concentração atingida. É interessante notar que, quando a velocidade da fase aquosa aumenta, outro fenômeno ocorre em sentido oposto a este. Ao se aumentar a velocidade da fase aquosa, ocorre maior efeito advectivo e, com isso, maior renovação das áreas de contato entre as fases. Este efeito tende a aumentar localmente a taxa de transferência de massa. Este fator é simulado com o aumento do coeficiente de transferência de massa, como pode ser observado nas expressões empíricas da Tabela 5.1. Qual dos dois efeitos será preponderante depende das características de cada situação. No caso analisado, parece que o aumento do valor do coeficiente de transferência de massa não foi suficiente para sobrepôr o menor tempo de contato, devido ao tamanho reduzido da área de NAPL.

Os três testes seguintes avaliam a influência de misturas de NAPLs na dissolução de determinado composto. Duas misturas foram estudadas: 1:1 v/v (0,538 mol tolueno/mol mistura) e 1:2 v/v (0,368 mol tolueno/mol mistura) de tolueno e xilenos. O comprimento da coluna e a saturação de NAPL utilizados nos Testes 4 e 5 equivalem às condições utilizadas no Teste 2. Como foram obtidas concentrações próximas ao equilíbrio naquele teste, era de se esperar que as concentrações das amostras também atingissem valores próximos à

solubilidade efetiva do tolueno em cada uma das duas misturas. Entretanto, isso não foi exatamente observado, como pode-se verificar através da análise da Tabela 5.9 e da Tabela 5.10.

Para o Teste 4, que utiliza a mistura 1:1 v/v em coluna de 100 cm, as concentrações obtidas para cada ensaio e repetição foram de 22,0 a 26,6% (24,5%, em média) menores do que a solubilidade efetiva medida para esta mistura (354 mg/l). Se for considerada a solubilidade efetiva teórica para a mistura com fração molar de 0,538 para o tolueno (319 mg/l), a diferença é um pouco menor, de 12,7 a 17,7% (15,4%, em média). No Teste 5 foram utilizadas as mesmas condições do Teste 4, com exceção de que a mistura de tolueno e xileno utilizada foi de 1:2 v/v. Os resultados deste teste também revelaram a mesma situação observada no Teste 4. Neste caso, as concentrações variaram de 19,9 a 26,4% (22,2%, em média) abaixo da solubilidade efetiva medida para a mistura com fração molar de 0,368 com relação ao tolueno (216 mg/l).

O teste 6 simulou uma coluna menor do que as anteriores (50 cm), mas com a mesma saturação (2%) e utilizando a mistura de tolueno/xilenos a 1:2 v/v. Os resultados também foram similares aos obtidos nos Testes 4 e 5. As concentrações estiveram na faixa de 15,7 a 29,6% abaixo do limite de solubilidade da mistura, com média de 23,7%. O fato do comprimento da coluna utilizada ser a metade da anterior parece não ter exercido influência nos resultados. Isto, à primeira vista, parece ser um contrasenso, principalmente quando se compara este resultado com o obtido no Teste 3. Entretanto, a saturação utilizada no Teste 6 é 4 vezes maior do que a utilizada no Teste 3. Portanto, parece que a saturação exerce um papel mais importante do que o comprimento da coluna (ou seja, o tempo de residência da fase aquosa) na concentração do contaminante atingida na fase aquosa.

Os resultados obtidos nos Testes 4, 5 e 6 mostram evidências de que a transferência de massa pode ser também limitada pela difusão do contaminante dentro da fase NAPL. Entretanto, este resultado pode ter sido influenciado pela alteração da solubilidade efetiva do tolueno na mistura devido à mudança da fração molar do tolueno durante a dissolução. Não se verificou uma diferença apreciável entre os resultados obtidos para as duas misturas de NAPLs. Na média, os resultados foram de 24,5, 22,2 e 23,7% para os três testes, respectivamente, sendo que os dois últimos utilizaram misturas com menor teor de tolueno. Provavelmente, este fato decorreu do uso de uma saturação alta do ponto de vista da dissolução (2%), que pode ter uma predominância sobre este fator tal como ocorreu com o tempo de retenção da fase aquosa.

No procedimento experimental adotado, alguns fatores podem ter exercido influência nos resultados obtidos. Entre eles, pode-se citar: a forma de mistura da fase NAPL no solo, por não corresponder ao processo natural de deslocamento da fase molhante pela não-molhante (NAPL); a alteração da saturação da fase NAPL por evaporação durante o processo de empacotamento da coluna e para a fase gasosa do solo, durante os ensaios; as trocas de contaminante entre as fases aquosa e gasosa por partição; os ensaios podem ter se tornado transientes ao invés de estacionários se o tempo de duração dos ensaios tiver sido muito longo; entre outros.

Tabela 5.6 – Resultados obtidos no Teste 1 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 5% de tolueno); valores de concentração dados em mg/l.

Ensaio 1: precipitação de 0,09 cm/min (54,5 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	543	2	1	571
	2	544		2	601
	3	520		3	554
	4	547		4	609
	5	524		5	581
Média		536			583
Desvio Padrão		13			23
% D.P./Média		2,4			3,9
Ensaio 2: precipitação de 0,18 cm/min (109,0 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	517	2	1	582
	2	557		2	589
	3	541		3	589
	4	560		4	570
	5	535		5	586
Média		542			583
Desvio Padrão		18			15
% D.P./Média		3,2			2,6
Ensaio 3: precipitação de 0,27 cm/min (163,6 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	549	2	1	607
	2	539		2	577
	3	552		3	574
	4	559		4	594
	5	571		5	586
Média		554			588
Desvio Padrão		12			6
% D.P./Média		2,2			1,0

Tabela 5.7 – Resultados obtidos no Teste 2 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 2% de tolueno); valores de concentração dados em mg/l.

Ensaio 1: precipitação de 0,09 cm/min (54,5 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	531	2	1	543
	2	538		2	569
	3	529		3	549
	4	536		4	530
	5	535		5	565
Média		534			551
Desvio Padrão		4			16
% D.P./Média		0,7			2,9
Ensaio 2: precipitação de 0,18 cm/min (109,0 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	552	2	1	577
	2	552		2	568
	3	546		3	592
	4	564		4	579
	5	556		5	577
Média		554			579
Desvio Padrão		7			9
% D.P./Média		1,2			1,5
Ensaio 3: precipitação de 0,27 cm/min (163,6 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	570	2	1	574
	2	567		2	571
	3	567		3	566
	4	574		4	566
	5	586		5	571
Média		573			569
Desvio Padrão		8			3
% D.P./Média		1,4			0,6

Tabela 5.8 – Resultados obtidos no Teste 3* (coluna de 50 cm de comprimento e saturação de 0,5% de tolueno); valores de concentração dados em mg/l.

Ensaio 1: precipitação de 0,09 cm/min (54,5 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	231	2	1	266
	2	227		2	267
	3	228		3	254
	4	235		4	252
	5	222		5	248
Média		229			257
Desvio Padrão		5			8
% D.P./Média		2,1			3,3
Ensaio 2: precipitação de 0,18 cm/min (109,0 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	169	2	1	155
	2	170		2	169
	3	157		3	164
	4	156		4	153
	5	145			
Média		159			160
Desvio Padrão		10			8
% D.P./Média		6,5			4,7

* Não foi realizado o ensaio para a taxa de precipitação de 0,27 cm/min neste teste.

Tabela 5.9 – Resultados obtidos no Teste 4 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 2% de mistura tolueno e xilenos a 1:1 v/v); valores de concentração dados em mg/l.

Ensaio 1: precipitação de 0,09 cm/min (54,5 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	264	2	1	258
	2	287		2	260
	3	274		3	256
	4	280		4	260
	5	276		5	271
Média		276			261
Desvio Padrão		8			6
% D.P./Média		3.0			2.3
Ensaio 2: precipitação de 0,18 cm/min (109,0 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	248	2	1	256
	2	271		2	263
	3	276		3	254
	4	270		4	271
	5	264		5	258
Média		266			260
Desvio Padrão		11			7
% D.P./Média		4.1			2.6
Ensaio 3: precipitação de 0,27 cm/min (163,6 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	276	2	1	271
	2	269		2	271
	3	280		3	-
	4	270		4	266
	5	266		5	270
Média		272			270
Desvio Padrão		6			2
% D.P./Média		2.1			0.8

Tabela 5.10 – Resultados obtidos no Teste 5 (coluna de 100 cm de comprimento e saturação de 2% de mistura tolueno e xilenos a 1:2 v/v); valores de concentração dados em mg/l.

Ensaio 1: precipitação de 0,09 cm/min (54,5 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	156	2	1	173
	2	160		2	166
	3	173		3	180
	4	152		4	174
	5	156		5	163
Média		159			171
Desvio Padrão		8			7
% D.P./Média		5.0			4.0
Ensaio 2: precipitação de 0,18 cm/min (109,0 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	164	2	1	175
	2	161		2	175
	3	160		3	169
	4	174		4	175
	5	171		5	-
Média		166			173
Desvio Padrão		6			3
% D.P./Média		3.7			1.6
Ensaio 3: precipitação de 0,27 cm/min (163,6 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	170	2	1	171
	2	166		2	176
	3	172		3	164
	4	168		4	-
	5	168		5	170
Média		169			170
Desvio Padrão		2			5
% D.P./Média		1.4			2.9

Tabela 5.11 – Resultados obtidos no Teste 6 (coluna de 50 cm de comprimento e saturação de 2% de mistura tolueno e xilenos a 1:2 v/v); valores de concentração dados em mg/l.

Ensaio 1: precipitação de 0,09 cm/min (54,5 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	157	2	1	156
	2	168		2	151
	3	171		3	151
	4	169		4	150
	5	107			
Média		154			152
Desvio Padrão		27			3
% D.P./Média		17,6			1,9
Ensaio 2: precipitação de 0,18 cm/min (109,0 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	176	2	1	158
	2	163		2	164
	3	176		3	162
	4	183		4	161
	5	186		5	153
Média		177			160
Desvio Padrão		9			4
% D.P./Média		5,1			2,6
Ensaio 3: precipitação de 0,27 cm/min (163,6 mm/h)					
Repetição	Amostra	Concentração	Repetição	Amostra	Concentração
1	1	174	2	1	163
	2	187		2	162
	3	187		3	169
	4	183		4	159
	5	178		5	164
Média		182			164
Desvio Padrão		6			4
% D.P./Média		3,1			2,2

5.5.3. Simulação da dissolução de colunas não-saturadas

O modelo FT1D foi utilizado para avaliar os resultados experimentais obtidos. O fluxo foi simulado utilizando a consideração de regime permanente, sendo que os perfis de saturação e velocidade da fase aquosa foram obtidos através do método direto para as colunas de 50 cm e através do método aproximado para as colunas de 100 cm. Os perfis de saturação ao longo das colunas de 50 e 100 cm são mostrados na Figura 5.8, para as taxas de precipitação (Q) de 0,09, 0,18 e 0,27 cm/min. Nesta figura, pode-se observar que a saturação mínima para as três taxas de precipitação foi de 0,288, 0,354 e 0,398, respectivamente. A saturação máxima não passou de 85% da porosidade devido ao formato da curva de retenção do solo utilizado (Figura 5.5).

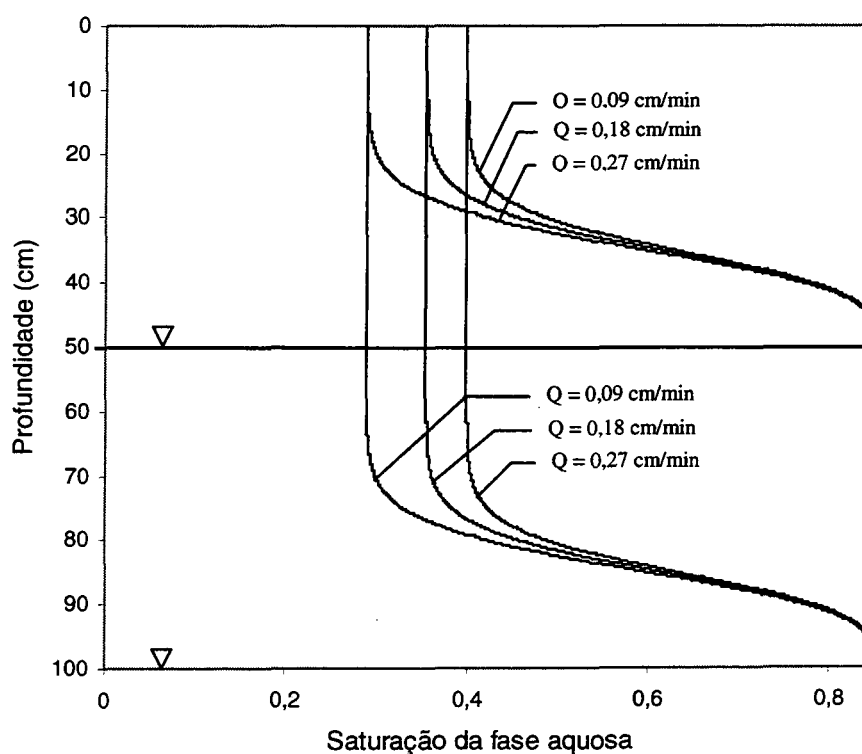


Figura 5.8 – Condições de saturação da fase aquosa para as colunas de 50 e 100 cm de comprimento.

Com relação ao transporte, os valores dos parâmetros mantidos fixos em todas as simulações estão descritos na Tabela 5.12. A Tabela 5.13 mostra os resultados das simulações com FT1D correspondentes aos testes de dissolução com tolueno puro (Testes 1 a 3) apresentados no item anterior. As concentrações apresentadas referem-se à saída das colunas, ou seja, 100 cm para os Testes 1 e 2 e 50 cm para o Teste 3. As simulações foram conduzidas sem considerar a depleção das fontes ou as reações de retardo. Três concentrações são apresentadas para cada teste e taxa de precipitação, referentes ao uso de cada um dos três modelos de estimativa do coeficiente de transferência de massa incluídos em FT1D.

Em geral, os resultados das simulações estão de acordo com os resultados experimentais. Conforme discutido no item anterior, concentrações próximas à solubilidade foram obtidas em quase todos os testes utilizando tolueno puro, com exceção do Teste 3 (coluna de 50 cm e 0,5% de saturação). Para este teste, foram obtidas concentrações médias de 41 e 27% da solubilidade para as taxas de precipitação de 0,09 e 0,27 cm/min, respectivamente. Os resultados da simulação para o Teste 3, apresentados na Tabela 5.13, mostraram que as concentrações atingiram a solubilidade ou estiveram próximas à solubilidade. Para o modelo de Imhoff et al. (1993), as concentrações na saída da coluna foram ligeiramente inferiores à solubilidade para as duas taxas simuladas, sendo que o aumento da velocidade da fase aquosa com o uso de uma maior taxa de precipitação gerou uma redução na concentração efluente.

Em vista da diferença entre os resultados simulados e experimentais para o Teste 3, duas hipóteses se apresentam: os modelos de estimativa do coeficiente de transferência de massa são superestimados para o uso em zona não-saturada ou a depleção do tolueno por evaporação ou por dissolução até o tempo de amostragem foi suficiente para tornar a taxa de dissolução dinâmica.

A primeira hipótese pode ser significativa pois, se a taxa de dissolução é proporcional à área de contato entre as fases aquosa e NAPL, é de se esperar que se desenvolvam menores taxas em uma situação onde a área de contato seja reduzida pela menor saturação da fase aquosa. Neste caso, utilizar os modelos empíricos desenvolvidos para solos completamente saturados em simulações de dissolução em solos não-saturados pode levar a taxas mais altas do que as reais.

Tabela 5.12 – Valores dos parâmetros de transporte utilizados nas simulações

Parâmetro	Unidade	Valor
Densidade do tolueno (ρ_o)	g/cm ³	0,87
Densidade da água (ρ_w)	g/cm ³	1,0
Viscosidade da água (μ)	cm ² /min	0,54
Difusão molecular do tolueno em água (D_m)	cm ² /min	4,8.10 ⁻⁴
Diâmetro médio (d_{50})	cm	0,05
Diâmetro de 10% passante (d_{10})	cm	0,02
Diâmetro de 60% passante (d_{60})	cm	0,055
Dispersividade (α_L)	cm	5,0 (colunas de 50 cm) 10,0 (colunas de 100 cm)

Tabela 5.13 – Resultados da simulação da dissolução das colunas experimentais (Testes 1, 2 e 3), utilizando o modelo FT1D

Teste 1	Miller et al (1990)	Imhoff et al. (1993)	Powers et al. (1994a)
0,09 cm/min	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml
0,18 cm/min	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml
0,27 cm/min	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml

Teste 2	Miller et al (1990)	Imhoff et al. (1993)	Powers et al. (1994a)
0,09 cm/min	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml
0,18 cm/min	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml
0,27 cm/min	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml	0,594 mg/ml

Teste 3	Miller et al (1990)	Imhoff et al. (1993)	Powers et al. (1994a)
0,09 cm/min	0,593 mg/ml	0,557 mg/ml	0,594 mg/ml
0,18 cm/min	0,594 mg/ml	0,525 mg/ml	0,594 mg/ml

A segunda alternativa para explicar a diferença entre os resultados experimental e simulado também parece importante. Perdas da massa de contaminante por evaporação são inevitáveis ao se manipular uma substância tão volátil como o tolueno, apesar dos cuidados que foram tomados para minimizá-las. Infelizmente, essas perdas são de difícil estimativa.

A zona residual pode também ser deplecionada pela própria dissolução durante os ensaios. A Figura 5.9 mostra a evolução da concentração normalizada na saída da coluna do Teste 3 considerando a depleção do tolueno com uma taxa de precipitação de 0,09 cm/min. Como pode-se observar, seriam necessários cerca de 1.700 minutos para deplecionar a área residual a ponto de reduzir a concentração para 40% da solubilidade. Entretanto, para o Teste 3, o tempo total de ensaios não ultrapassou 180 minutos. Portanto, as perdas por dissolução parecem ser desprezíveis neste caso.

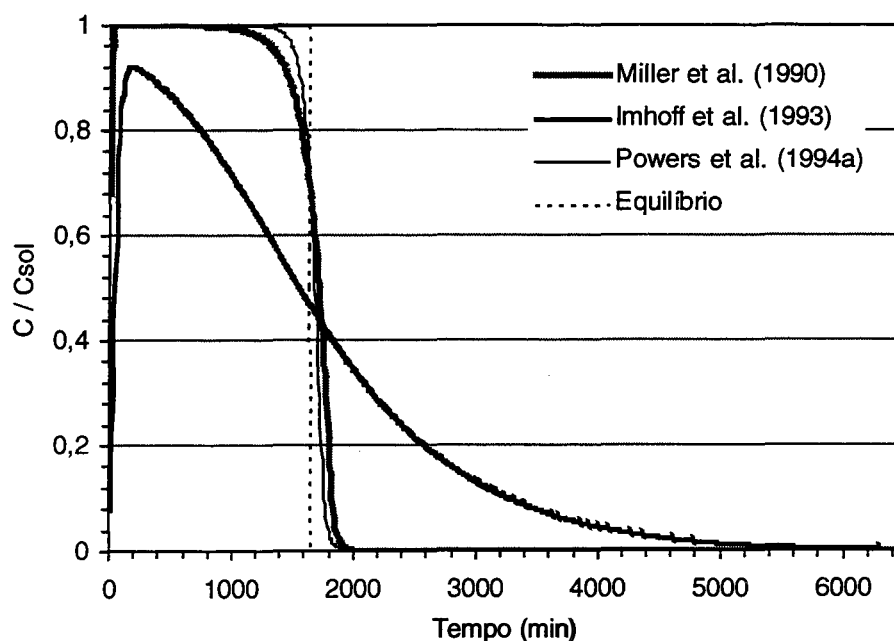


Figura 5.9 - Evolução da concentração da fase aquosa na saída da coluna para o Teste 3, considerando a depleção da fonte.

Em princípio, o modelo FT1D não pode simular a dissolução de zonas residuais compostas por misturas de NAPLs, tal como é o caso dos Testes 4 a 6. Além dos modelos de previsão do coeficiente de transferência de massa terem sido desenvolvidos para substâncias puras, a depleção dessas fontes seria complicada pelo acoplamento da equação de transporte de cada componente. Este acoplamento se dá através da fração molar do componente, que é utilizada no cálculo da solubilidade efetiva através da Equação de Raoult (Eq. (5.1)). As substâncias com maior tendência para se solubilizar são removidas prioritariamente da mistura, fazendo com que as frações molares dos componentes se alterem ao longo da simulação.

5.6. Conclusões

Nesta seção, o modelo de transporte FT1D foi alterado para incluir a simulação de fontes residuais de NAPL na zona não-saturada. A taxa de transferência de massa do contaminante para a fase aquosa foi modelada através de uma reação de primeira ordem. O coeficiente de transferência de massa foi simulado através dos modelos empíricos Miller et al. (1990), Imhoff et al. (1993) e Powers et al. (1994a), desenvolvidos através de dados de dissolução saturada. O modelo permite considerar a depleção das fontes residuais ao longo da simulação, levando à redução do coeficiente de transferência de massa e, conseqüentemente, da concentração atingida na fase aquosa.

O módulo de dissolução de FT1D utiliza as seguintes simplificações: os modelos de previsão do coeficiente de transferência de massa desenvolvidos empiricamente para a zona saturada e para NAPLs puros podem ser aproximados para a zona não-saturada; a depleção das áreas de NAPLs por vaporização é pequena. Estas considerações são bastante fortes e não se aplicarão em várias situações práticas. Apesar dessas limitações, o modelo pode ser utilizado para se obter estimativas da variação da concentração da fase aquosa com a depleção de áreas residuais. Com base nos resultados utilizando diferentes modelos de dissolução incluídos no modelo, pode-se gerar uma faixa de valores possíveis de tempo necessário para a depleção das fontes.

Como todas as considerações geram concentrações maiores do que as que devem ser encontradas, pode-se assumir que as considerações são conservadoras com relação à concentração da fase aquosa no início da simulação. Com relação ao tempo para depleção da fonte, entretanto, pode-se encontrar duas situações opostas. O tempo real pode ser maior do

que o estimado, caso a taxa de dissolução real seja inferior à taxa estimada, ou menor, por não se considerar a depleção por evaporação.

O trabalho experimental não foi conclusivo para se determinar o comportamento da dissolução de fontes residuais na zona não-saturada. O principal motivo foi a interferência da partição dos NAPLs com a fase gasosa presente no solo, fazendo com que a depleção das fontes seja mais rápida do que o seria apenas com a dissolução. Outro complicador é a incerteza referente à transferência de contaminante para a fase aquosa por partição com fase gasosa. A presença da fase gasosa é um problema constante em experimentos na zona não-saturada. Uma possibilidade de contornar este problema é utilizar NAPLs com pressão de vapor bastante baixa, para minimizar a evaporação destes componentes para a fase gasosa.

Nos ensaios de dissolução de misturas binárias de NAPLs (tolueno e xilenos), a fase aquosa, ao deixar as colunas, não atingiu o limite de solubilidade efetivo para o tolueno. Em situações utilizando tolueno puro nas quais a solubilidade foi atingida, foram obtidas concentrações de 22,2 a 23,7% (em média, 23,5%) menores do que a solubilidade ao se utilizar as misturas. Os resultados obtidos nos testes com as misturas mostraram evidências de que a transferência de massa pode ser também limitada pela difusão do contaminante dentro da fase NAPL. Entretanto, este resultado pode ter sido influenciado pela alteração da solubilidade efetiva do tolueno na mistura devido à mudança da fração molar do tolueno durante a dissolução.

6. CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

6.1. Conclusões

Este trabalho abordou a modelagem de transporte de zonas não-saturadas contaminadas por NAPLs residuais. Ao longo do trabalho foram desenvolvidos os seguintes modelos: fluxo e transporte unidimensional em zona não-saturada com a estimativa de dissolução de áreas de NAPLs residuais (FT1D) e fluxo e transporte multidimensional nas zonas não-saturada e saturada, pela adição de domínios não-saturados verticais a modelos de fluxo e transporte em zona saturada (FT1D-MODFLOW/V2, FT1D-MODFLOW/V3 e FT1D-MT3D). As principais conclusões e contribuições geradas pelo trabalho foram:

- O modelo FT1D, implementado em diferenças finitas, simula o fluxo e o transporte não-saturados em colunas verticais de solo heterogêneo, através de discretização temporal implícita e espacial localizando as variáveis nos nódulos entre as células. O módulo de fluxo utiliza a equação de Richards na forma mista, sendo a linearização realizada através do método Picard. O transporte simula os processos advectivo e dispersivo com adsorção dada pela isoterma linear de Freundlich e dissolução modelada como reação de primeira ordem. A solução das matrizes lineares tridiagonais foi obtida através de decomposição LU. A validação do modelo foi realizada através da comparação dos resultados obtidos com os gerados por modelos similares, tendo sido bem sucedida.
- Para a simulação de dissolução, o coeficiente de transferência de massa foi estimado através dos modelos de Miller et al. (1990), Imhoff et al. (1993) e Powers et al. (1994a). O modelo permite considerar a depleção das fontes residuais por dissolução ao longo da simulação, levando à redução do coeficiente de transferência de massa e, conseqüentemente, da concentração atingida na fase aquosa. O módulo de dissolução de FT1D utiliza as seguintes simplificações: os modelos de previsão do coeficiente de transferência de massa desenvolvidos empiricamente para a zona saturada e para NAPLs puros podem ser aproximados para a zona não-saturada; a taxa de depleção das áreas de NAPLs por vaporização é pequena.
- Os dados de dissolução não-saturada obtidos experimentalmente não foram conclusivos para se determinar o comportamento da dissolução de fontes residuais na zona não-saturada., uma vez que, na maioria dos ensaios realizados, a concentração na fase aquosa atingiu valores próximos à solubilidade. Além disso, houve interferência da partição dos

NAPLs com a fase gasosa presente no solo, fazendo com que a depleção das fontes seja mais rápida do que o seria apenas com a dissolução. Nos ensaios de dissolução de misturas binárias de NAPLs, os resultados obtidos mostraram evidências de que a transferência de massa pode ser também limitada pela difusão do contaminante dentro da fase NAPL.

- Na análise da adequação do uso de fluxo permanente na zona não-saturada, as simulações realizadas utilizando a consideração de fluxo permanente superestimaram a massa de contaminante que passou pelo ponto analisado na maioria dos casos analisados, sendo que a massa estimada para o solo arenoso chegou a ser ~ 18 vezes maior do que a estimada com fluxo transiente. Com o solo silte-argiloso, os resultados foram equivalentes aos produzidos com o uso do fluxo transiente, com erro máximo de 14%. Entretanto, foram obtidos alguns valores ligeiramente inferiores, o que é uma situação não desejável.
- Os casos em que os erros do uso do fluxo permanente foram maiores ocorreram quando o perfil de umidade de equilíbrio foi muito diferente do perfil de equilíbrio inicial ou quando o tempo para atingir o estado permanente foi muito longo. De modo geral, grandes taxas de precipitação, baixas condutividades hidráulicas e zonas não-saturadas espessas geraram as maiores superestimativas. Entretanto, este resultado não pode ser generalizado pois depende das condições de contorno e iniciais utilizadas.
- Do ponto de vista numérico, a obtenção da solução de fluxo permanente pelo método direto não foi possível em alguns casos devido a problemas de não convergência do método numérico. Nos casos em que a solução direta do fluxo permanente não foi possível, o tempo computacional necessário para atingir a solução permanente por aproximação foi maior do que o tempo gasto na simulação transiente. O uso da solução permanente por aproximação pode ser mais atraente quando se deseja simular diversas situações de transporte com a mesma solução de fluxo ou quando o tempo de simulação é muito grande.
- O uso do método de fluxo permanente com perfis de saturação e descarga específica uniformes gerou valores de grau de adequação da estimativa comparáveis, em magnitude, aos produzidos pelo método de fluxo permanente direto ou por aproximação, embora, nos casos em que a superestimativa já era alta, ela tenha sido em muito aumentada para baixos valores de saturação. Para altas saturações, valores menores do que 1 foram obtidos para os casos em que o grau de superestimativa foi baixo. Apesar deste método ser extremamente prático, por não necessitar de valores de parâmetros de difícil estimativa,

recomenda-se cautela ao utilizá-lo, iniciando com saturações baixas e comparando esses resultados com os obtidos com saturações mais altas.

- A técnica de análise fatorial mostrou-se de grande utilidade para realizar-se rapidamente uma análise de sensibilidade dos parâmetros do modelo e localizar-se casos mais problemáticos. Pode-se refinar a análise aplicando a análise de sensibilidade tradicional a estes casos. Entretanto, para situações onde há a presença de valores máximos ou mínimos dentro da faixa de valores avaliada, a análise fatorial pode ser de interpretação mais difícil.
- O modelo de fluxo e transporte vertical FT1D foi acoplado com sucesso aos modelos de zona saturada MODFLOW (fluxo) e MT3D (transporte). Com este novo modelo, pode-se considerar o efeito do armazenamento e a simulação dos fenômenos de transporte passíveis de ocorrer na zona não-saturada do solo, com maior eficiência computacional em relação aos modelos integrados da zona não-saturada e saturada.
- Para realizar a conexão entre o modelo de fluxo na zona não-saturada (FT1D) e o modelo de fluxo saturado, foi proposta uma nova metodologia (versão V3 de FT1D-MODFLOW), sendo esta avaliada ao lado de outras metodologias propostas na literatura. A nova metodologia se baseia na inclusão de um ciclo iterativo que permite o ajuste do perfil de pressões e da posição da condição de contorno inferior da zona não-saturada ao longo de toda simulação, através do uso conjunto de dois tipos de condições de contorno, carga fixa e fluxo fixo.
- Comparando-se os resultados das simulações com os obtidos através do modelo de fluxo integrado nas zonas não-saturada e saturada FEMWATER, a versão V3 apresentou resultados bastante satisfatórios, simulando bem a elevação do aquífero e convergindo para a solução de equilíbrio dada por MODFLOW. Apesar disso, foi observada certa discrepância entre esses resultados para grandes tempos de simulação. O processo iterativo incluído nesta versão mostrou-se estável e com boa convergência, sendo necessário, em média, de 6 a 7 iterações para atingir o erro preestabelecido para a diferença entre as elevações calculadas através dos dois modelos de fluxo (FT1D e MODFLOW).
- O algoritmo de conexão dos modelos de fluxo de Pikul et al. (1974) propõe a alteração instantânea do domínio não-saturado ao fim de um período de simulação. Durante a avaliação deste método, entretanto, foram observadas oscilações na posição do topo do aquífero, atingindo situações de instabilidade. Acredita-se que a razão para este

comportamento é a formação de um gradiente de umidade no sentido oposto ao do fluxo, como resposta à acomodação do perfil de pressões à nova posição da condição de contorno. Esta metodologia foi considerada não satisfatória, a não ser para situações em que a taxa de elevação do aquífero seja realmente pequena.

- A versão V2 de FT1D-MODFLOW, que utiliza a carga fixa no fim do domínio não-saturado, não apresentou problemas de instabilidades numéricas nos casos simulados e os resultados convergiram para a solução permanente dada por MODFLOW. Observou-se que a tendência de V2 é apresentar uma elevação do aquífero mais rápida do que a versão V3, devido às maiores taxas de recarga geradas pelo uso da condição de contorno de carga fixa no limite inferior do domínio não-saturado e à manutenção da posição deste contorno ao longo da simulação.
- O programa FT1D-MT3D, de transporte, forneceu resultados comparáveis aos obtidos através do modelo de transporte integrado LEWASTE. A simulação utilizando os dados da versão V2 de FT1D-MODFLOW produziu concentrações ligeiramente superiores do que com os dados de V3 para um mesmo tempo de simulação. Este fato deve-se às maiores velocidades da fase aquosa de V2 com relação à V3. Portanto, quando o interesse da análise se prende ao transporte, o acompanhamento da subida do aquífero parece exercer pouca influência. Os resultados obtidos através de FT1D-MT3D parecem ter menor dispersão do que os gerados com LEWASTE. Possivelmente, isto é devido ao uso de domínios unidimensionais em FT1D, enquanto LEWASTE utiliza domínios multidimensionais.
- Os tempos de execução de FT1D-MODFLOW utilizando as versões V2 e V3 foram significativamente inferiores ao de FEMWATER, utilizando esquemas de discretização espacial e temporal semelhantes para os dois programas. Entre as versões de FT1D-MODFLOW, o tempo de execução da versão V2 foi menor do que o de V3, devido ao ciclo iterativo presente em V3. O mesmo comportamento foi verificado com relação ao modelo FT1D-MT3D, comparado com LEWASTE. Observou-se que o tempo de execução dos modelos de fluxo e transporte integrado (FEMWATER e LEWASTE) foi muito alto, o que pode inviabilizar o uso deste modelo para casos mais complexos.
- Em comparação com os resultados simulados por MODFLOW e MT3D, verificou-se a grande diferença no tempo de elevação do aquífero e na evolução da pluma de concentração quando se acrescenta o armazenamento da zona não-saturada, mesmo no caso de uma zona não-saturada relativamente pouco espessa. O lapso de tempo entre o

início da precipitação e o estado de equilíbrio do aquífero varia de acordo com a espessura da zona não-saturada, características hidrogeológicas do aquífero, entre outros.

6.2. Recomendações

Como recomendações para desenvolvimentos futuros, podem-se sugerir:

- Implementação de interfaces gráficas para auxiliar nos processos de entrada e saída de dados para os modelos desenvolvidos.
- Alterar o módulo de fluxo de FT1D para considerar a influência de áreas de NAPLs residuais na determinação de saturação da fase aquosa.
- Testar os modelos FT1D–MODFLOW/V2, FT1D–MODFLOW/V3 e FT1D–MT3D para na simulação de situações tais como precipitação espacial e temporalmente variante, presença de outros gradientes no aquífero (bombeamentos, por exemplo), heterogeneidades na zona não-saturada, variação espacial na condição de contorno de transporte na zona não-saturada, entre outros.
- Alterar o procedimento experimental para o estudo de lixiviação de NAPLs residuais com a utilização de NAPLs de baixa pressão de vapor para se evitar os problemas associados com a volatilização dos constituintes.
- Avaliar a importância da remobilização da fase residual na zona não-saturada.
- Realizar estudos de dissolução em zona saturada e não-saturada para propor relações empíricas para estimativa do coeficiente de transferência de massa para misturas de NAPLs.
- Avaliar a influência do valor da dispersividade na simulação de dissolução de zonas de NAPLs residuais.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- American Society for Testing and Materials, *Emergency Standard Guide for Risk-Based Corrective Action Applied at Petroleum Release Sites*, ASTM-ES 38-94, Julho, 1994.
- ANDERSON, M.P., e G.M. WOESSNER, *Applied Groundwater Modelling*, Academic Press, San Diego, 1992.
- BANERJEE, S., *Solubility of Organic Mixtures in Water*, Environmental Science and Technology, vol. 18, n^o. 8, pag. 587-591, 1984.
- BEAR, J., e A. VERRUIJT, *Modeling Groundwater Flow and Pollution*, D. Reidel Publ. Co., 1987.
- BOX, G.E.P. *Statistics for Experimenters: an Introduction to Design, Data Analysis, and Model Building*, John Wiley, 1978.
- BRESLER, E., *Simultaneous Transport of Solutes and Water under Transient Unsaturated Flow Conditions*, Water Resources Research, vol. 9, n^o. 4, pag. 975-986, agosto, 1973.
- BROHOLM, K, e S. FEENSTRA, Laboratory Measurements of the Aqueous Solubility of Mixtures of Chlorinated Solvents, Environmental Toxicology and Chemistry, vol. 14, no. 1, pag. 9-15, 1995.
- BROOKS, R.H., e A.T. COREY, *Hydraulics Properties of Porous Media*, Colorado State University, Hydrology Papers n^o. 3, março, 1964.
- BROOKS, R.H., e A.T. COREY, *Properties of Porous Media Affecting Fluid Flow*, Journal of the Irrigation and Drainage Division, junho, 1966.
- BURDINE, H.T., *Relative Permeability Calculations from Pore-Size Distribution Data*, Trans. Soc. Pet. Eng. AIME, vol. 198, pag. 71-77, 1953.
- CAUDURO, F.A., R. DORFMAN e J.B. SANTALO, *Manual de Ensaio de Laboratório e de Campo para Irrigação e Drenagem*, PRONI - IPH - UFRGS, Porto Alegre, 212p., 1990.
- CELIA, M.A, E.T. BOULOUTAS e R.L. ZARBA, *A General Mass-Conservative Numerical Solution for the Unsaturated Flow Equation*, Water Resources Research, vol. 26, n^o. 7, 1483-1496, julho, 1990.
- DOMENICO, P.A., e F.W. SCHWARTZ, *Physical and Chemical Hydrogeology*, 2a. Edição, John Wiley & Sons, 506p., 1997.

- FEDORS, R.W., *An Improved 1-Dimensional Unsaturated Flow Simulator for Linkage to MODFLOW*, Civil Engineering Dept., Colorado State University, 1997. (documento não publicado)
- FEENSTRA, S., e J.A. CHERRY, *Diagnosis and Assessment of DNAPL Sites*, in: PANKOW, J.F., e J.A. CHERRY, *Dense Chlorinated Solvents and other DNAPLs in Groundwater: History, Behavior, and Remediation*, Cap. 13, Waterloo Press, 522p., 1996.
- FEENSTRA, S., e N. GUIGUER, *Dissolution of Dense Non-Aqueous Phase Liquids (DNAPLs) in the Subsurface*, in: PANKOW, J.F., e J.A. CHERRY, *Dense Chlorinated Solvents and other DNAPLs in Groundwater: History, Behavior, and Remediation*, Cap. 7, Waterloo Press, 522p., 1996.
- FERNANDES, M. *Influência do Etanol na Solubilidade de Hidrocarbonetos Monoaromáticos em Aquíferos Contaminados com Gasolina*. Tese de Mestrado, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, SC, 1997.
- FREEZE, R.A., e J.A. CHERRY, *Groundwater*, Prentice Hall, 1979.
- GELLER, J.T., e J.R. HUNT, *Mass Transfer from Nonaqueous Phase Organic Liquids in Water-Saturated Porous Media*, Water Resources Research, vol. 29, no. 4, pag. 833-845, abril, 1993.
- Groundwater Services, *Tier 2 - Guidance Manual for Risk-Based Corrective Action*, 1995.
- GUIGUER, N., e E.O. FRIND, *Dissolution and Mass Transfer Processes for Residual Organics in the Saturated Groundwater Zone*, Transport Reactive Processes in Aquifers, pag. 475-480, 1994.
- GUTAB, S.A., *A Finite Element Model of Artificial Recharge with an Impedance Layer above the Water Table*, Ph.D. Dissertation, Colorado State University, Fort Collins, Colorado, USA, 355p., 1988.
- HARBAUGH, A.W., e M.G. McDONALD, *User's Documentation for MODFLOW-96, an Update to the U.S. Geological Survey Modular Finite-Difference Ground Water Flow Model*, U.S. Geological Survey, Open-File Report 96-485, 1996.
- HAVERKAMP, R., M. VAUCLIN, J. TOUMA, P.J. WIERENGA e G. VACHAUD, *A Comparison of Numerical Simulation Models for One-Dimensional Infiltration*, Soil Science Am. J., v.41, p. 285-294, 1977.

- HEALY, R.W., *Simulation of Solute Transport in Variably Saturated Porous Media with Supplemental Information on Modifications to the U.S. Geological Survey's Computer Program VS2DT*, U.S. Geological Survey Water-Resources Investigations, Report 90-4025, 1990.
- HORNBERGER, G.M., I. REMSON e A.A. FUNGAROLI, *Numeric Studies of a Composite Soil Moisture Groundwater System*, Water Resources Research, vol. 5, pag. 797-802, agosto, 1969.
- HUYAKORN, P.S., e G.F. PINDER, *Computational Methods in Subsurface Flow*, Academic Press, 1983.
- IMHOFF, P.T., P.R. JAFFE e G.F. PINDER, *An Experimental Study Complete Dissolution of a Nonaqueous Phase Liquid in Saturated Porous Media*, Water Resources Research, vol. 30, n°2, pag. 307-320, fevereiro, 1993.
- MARINELLI, F., e D.S. DURNFORD, *Semianalytical Solution to Richards' Equation for Layered Porous Media*. ASCE J. of Irrigation and Drainage Engr., vol. 124, n° 6, 290-299, 1998.
- MCDONALD, M.G., e A.W. HARBAUGH, *A Modular Three-Dimensional Finite-Difference Ground Water Flow Model*, U.S. Geological Survey, Open-File Report 83-875, Chapter A1, 1988.
- MERCER, J.W., e R.M. COHEB, *A Review of Immiscible Fluids in the Subsurface: Properties, Models, Characterization and Remediation*, Journal of Contaminant Hydrology, vol. 6, pag. 107-163, 1990.
- MILLER, I., *Probability and Statistics for Engineers*, Englewood Cliffs: Prentice Hall, 259p., 1977.
- MILLER, C.T., M.M. POIRIER-McNEILL e A.S. MAYER, *Dissolution of Trapped Nonaqueous Phase Liquids: Mass Transfer Characteristics*, Water Resources Research, vol. 26, no.11, pag. 2783-2796, novembro, 1990.
- MONTGOMERY, J.H., e L.M. WELKOM, *Groundwater Chemicals Desk Reference*, Lewis Publ., 1991.
- MUALEM, Y., *A New Model for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Porous Media*, Water Resources Research, vol. 12, pag. 513-522, 1976.

- NOFZIGER, D.L., K. RAJENDER, S.K. NAYUDU e P.-Y. SU, *CHEMFLO: One-Dimensional Water and Chemical Movement in Unsaturated Soils*, Office of Research Laboratory, Environmental Protection Agency, Agosto, 1989.
- PANKOW, J.F., e J.A. CHERRY, *Dense Chlorinated Solvents and other DNAPLs in Groundwater: History, Behavior, and Remediation*, Waterloo Press, 522p., 1996.
- PARLANGE, J.Y, *Theory of Water Movement in Soils. 1. One Dimensional Absortion*, Soil Science, vol. 111, pag. 134-137, 1971a.
- PARLANGE, J.Y, *Theory of Water Movement in Soils. 2. One Dimensional Infiltration*, Soil Science, vol. 111, pag. 170-174, 1971b.
- PERROCHET, P., e D. BEROD, *Stability of the Standard Crank-Nicolson-Galerkin Scheme Applied to the Diffusion-Convection Equation: Some New Insights*, Water Resources Research, vol. 29, no. 9, pag. 3291-3297, 1993.
- PHILIP, J.R., *The Theory of Infiltration. 1. The Infiltration Equation and Its Solution*, Soil Science, vol. 83, pag. 345-357, 1957.
- PHILIP, J.R., *On Solving the Unsaturated Flow Equation: 1. The Flux Concentration Relation*, Soil Science, vol. 116, n° 5, pag. 328-335, 1973.
- PHILIP, J.R., e J.H. KNIGHT, *On Solving the Unsaturated Flow Equation: 3. New Quasi-Analytical Technique*, Soil Science, vol. 117, n° 1, pag. 1-13, janeiro, 1974.
- PIKUL, M.F., R.L. STREET e I. REMSON, *A Numerical Model based on Coupled One-dimensional Richards and Boussinesq Equations*, Water Resources Research, vol. 10, pag. 295-302, abril, 1974.
- POWERS, S.E., L.M. ABRIOLA e W.J. WEBER Jr., *An Experimental Investigation of Nonaqueous Phase Liquid Dissolution in Saturated Subsurface Systems: Transient Mass Transfer Rates*, Water Resources Research, vol. 30, n° 2, pag. 321-332, fevereiro, 1994a.
- POWERS, S.E., L.M. ABRIOLA, J.S. DUNKIN e W.J. WEBER Jr., *Phenomenological Models for Transient NAPL-Water Mass-Transfer Processes*, Journal of Contaminant Hydrology, vol. 16, pag. 1-33, 1994b.
- PRESS, W.H., S.A. TEUKOLSKY, W.T. VETTERLING e B.P. FLANNERY, *Numerical Recipes in FORTRAN: The Art of Scientific Computing*, 2a. Edição, Cambridge University Press, 933p., 1992.

- RAVI, V., e J.A. JOHNSON, *A One-Dimensional Finite Difference Vadose Zone Leaching Model, Version 2.2*, Center of Subsurface Modeling Support, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, 1996.
- RAVI, V., e J.R. WILLIAMS, *Estimation of Infiltration Rate in the Vadose Zone: Compilation of Simple Mathematical Models*, EPA/600/R-97/128a, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, Fevereiro, 1998.
- REMSON, I., G.M. HORNBERGER e F.J. MOLZ, *Numerical Methods in Subsurface Hydrology*, Wiley-Interscience, 1971.
- SIMUNEK, J., K. HUANG, e M.T. VAN GENUCHTEN, *The HYDRUS code for simulating the One-Dimensional Movement of Water, Heat, and Multiple Solutes in Variably-Saturated Media, Version 6.0*, Research Report No. 144, U.S. Salinity Laboratory, U.S. Department of Agriculture, maio, 1998.
- U.S. EPA, *Methods for the Determination of Organic Compounds in Drinking Water*, EPA/600/4-88/039, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, 1988.
- U.S. EPA, *Stabilization/Solidification of CERCLA and RCRA Wastes – Physical Tests, Chemical Testing Procedures, Technology Screening, and Field Activities*, EPN62516-891022, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, maio, 1989.
- U.S. EPA, *Test Methods for Evaluating Solid Waste, Physical/Chemical Methods, SW-846*, 3ª Edição, Office of Solid Waste, U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, 1994.
- U.S. EPA, *National Primary Drinking Water Regulations, Volatile Organic Chemicals – Technical Version*, EPA/811/F-95/004-T, U.S. Environmental Protection Agency, outubro, 1995.
- U.S. EPA, *Soil Screening Guidance: Technical Background Document*, EPA/540/R-95/128, U.S. Office of Solid Waste and Emergency Response, Environmental Protection Agency, maio, 1996a.
- U.S. EPA, *Soil Screening Guidance: User's Guide*, EPA/540/R-96/018, Office of Solid Waste and Emergency Response, U.S. Environmental Protection Agency, julho, 1996b.

- U.S. EPA, *How to Effectively Recover Free Product at Leaking Underground Storage Tank Sites: A Guide for State Regulators*, EPA/510-R-96-001, U.S. Environmental Protection Agency, setembro, 1996c.
- U.S. EPA, *Cleaning Up the Nation's Waste Sites: Markets and Technology Trends, 1996 Edition, Executive Summary*, EPA/542/R-96/005A, abril, 1997.
- VAN GENUCHTEN, M.Th., *Mass Transport in Saturated-Unsaturated Media: One-Dimensional Solutions*, Research Report N°. 78-WR-11, Water Resources Program, Princeton University, 1978.
- VAN GENUCHTEN, M.Th., *A Closed-Form Equation for Predicting the Hydraulic Conductivity of Unsaturated Soils*, Soil Science Society American Journal, vol. 44, 1980.
- VAN GENUCHTEN, M.Th., F.J. LEIJ e S.R. YATES, *The RETC Code for Quantifying the Hydraulic Functions of Unsaturated Soils*, EPA/600/2-91/065, U.S. Environmental Protection Agency, 1991.
- VOGEL, T., K. HUANG, e M.Th. van GENUCHTEN, *The HYDRUS Code for Simulating One-Dimensional Water Flow, Solute Transporte, and Heat Movement in Variably-Saturated Media, Version 5.0*, Research Report N°. 140, U.S. Salinity Laboratory, U.S. Department of Agriculture, agosto, 1996.
- WILSON, J.L., e L.W. GELHAR, *Analysis of Longitudinal Dispersion in Unsaturated Flow. 1. The Analytical Method*, Water Resources Research, v. 17, n.1, p. 122-130, fevereiro, 1981.
- YEH, G.T., S. SHARP-HANSEN, B. LESTER, R. STROBL e J. SCARBROUGH, *3DFEMWATER/3DLEWASTE: Numerical Codes for Delineating Wellhead Protection Areas in Agricultural Regions Based on the Assimilative Capacity Criterion*, Office of Research and Development, U.S. Environmental Protection Agency, EPA/600/R-92/223, Julho, 1992.
- ZHEN, C., *MT3D - A Modular Three-Dimensional Transport Model for Simulations of Advection, Dispersion and Chemical Reactions of Contaminantes in Groundwater Systems*, U.S. Environmental Protection Agency, outubro, 1990.