

ANÁLISE DA INFLUÊNCIA DA MODIFICAÇÃO DE PARÂMETROS NA SIMULAÇÃO COMPUTACIONAL DE TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM MEIO POROSO SATURADO, UTILIZANDO O PMWIN.

Germana Cavalcante Menescal¹; Erika da Justa Teixeira Rocha²; Marco Aurélio Holanda de Castro³ & Ernesto da Silva Pitombeira⁴

Resumo – O processo de modelagem computacional de transporte de contaminantes em aquíferos envolve a utilização de parâmetros que podem afetar de forma significativa os resultados obtidos. Torna-se então necessária a análise de cada parâmetro envolvido na simulação. Neste trabalho foram simulados quatro cenários de transporte de contaminantes em meio poroso saturado, variando as dispersividades e a natureza do contaminante (substância conservativa ou não-conservativa). Os cenários foram modelados utilizando o método das diferenças finitas, através do software PMWIN - Processing Modflow for Windows. Os resultados obtidos apresentam a variação da concentração dentro do domínio adotado e o comportamento da pluma de contaminação é discutido.

Abstract – Computational simulation of mass transport in aquifers requires parameters input which may strongly affect the output of the model. Analysis of each parameter included in the simulation. In this study, the finite difference methodology was applied for the solution of a mass transport problem in a porous media, using PMWIN – Processing Modflow for Windows. Four scenarios were tested in order to study the behavior of the contamination “plume” considering changes in the dispersivity parameter and contaminant nature (conservative or non-conservative solute). The output of the simulation shows the distribution of the concentration through the domain once a single concentrated source of pollutant is injected in a point of the aquifer.

Palavras-Chave – Modelagem computacional; água subterrânea; transporte de contaminantes.

¹ Doutoranda em Recursos Hídricos do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Universidade Federal do Ceará; Campus do Pici, Bloco 713. CEP: 60.451-970; Fortaleza – Ceará. Fone/Fax: 85 3366.9589. germana@deha.ufc.br

² Doutoranda em Recursos Hídricos do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Universidade Federal do Ceará; Campus do Pici, Bloco 713. CEP: 60.451-970; Fortaleza – Ceará. Fone/Fax: 85 3366.9589. erikadajusta@gmail.com

³ Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Universidade Federal do Ceará; Campus do Pici, Bloco 713. CEP: 60.451-970; Fortaleza – Ceará. Fone: 85 3366.9625. marco@ufc.br

⁴ Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Universidade Federal do Ceará; Campus do Pici, Bloco 713. CEP: 60.451-970; Fortaleza – Ceará. Fone: 85 3366.9773. glauber@ufc.br

1. INTRODUÇÃO

De recurso natural inesgotável, a água vai passando a ser um bem escasso, com uma demanda crescente para uma oferta cada vez mais reduzida. As principais causas dessa redução são a degradação e o mau uso desse importante recurso.

O gerenciamento das águas subterrâneas se torna cada vez mais imprescindível para aumentar a disponibilidade hídrica da região Nordeste, em longo prazo. No entanto, gerir os recursos hídricos subterrâneos dessa região revela-se um grande desafio devido à falta generalizada de informações hidrogeológicas e ao embasamento cristalino (Menescal, Vieira e Castro 2005), justificando o uso de modelos de simulação de movimento de águas subterrâneas e transporte de contaminantes veiculados por elas.

Mas a solução analítica das equações que regem o fluxo hídrico e transporte de contaminantes na água subterrânea em muitos casos não pode ser encontrada, sendo necessária a utilização de soluções numéricas, onde a equação diferencial do transporte de contaminantes na água subterrânea é resolvida utilizando-se técnicas de aproximação numéricas, obtidas através da discretização do aquífero e conseqüente solução de um sistema de equações com as incógnitas obtidas nessa discretização.

O processo de modelagem computacional de transporte de contaminantes em aquíferos envolve a utilização de parâmetros que podem afetar de forma significativa os resultados obtidos. Torna-se então necessária a análise de cada parâmetro envolvido na simulação.

Neste trabalho foram simulados quatro cenários de transporte de contaminantes em meio poroso saturado, variando as dispersividades e a natureza do contaminante (substância conservativa ou não-conservativa). Os cenários foram modelados utilizando o método das diferenças finitas, através do software PMWIN - Processing Modflow for Windows.

2. METODOLOGIA

Para o estudo da contaminação da água subterrânea, é necessário saber todos os processos que controlam o movimento desse soluto. Os processos físicos que controlam o fluxo são a advecção e a dispersão hidrodinâmica. Perdas ou ganhos de massas de solutos são resultantes das reações químicas ou bioquímicas, ou ainda do decaimento radioativo.

O problema aqui estudado é composto de um aquífero confinado de dimensões 50 x 30 m², discretizado em uma malha de diferenças finitas com espaçamento de 2 m, no qual inicialmente não há contaminação. No tempo $t = 0$ uma carga de 1.000 mg/L de um contaminante é injetada no ponto superior esquerdo (ver Figura 1) durante o tempo de simulação que é de 100 dias, em regime de fluxo permanente.

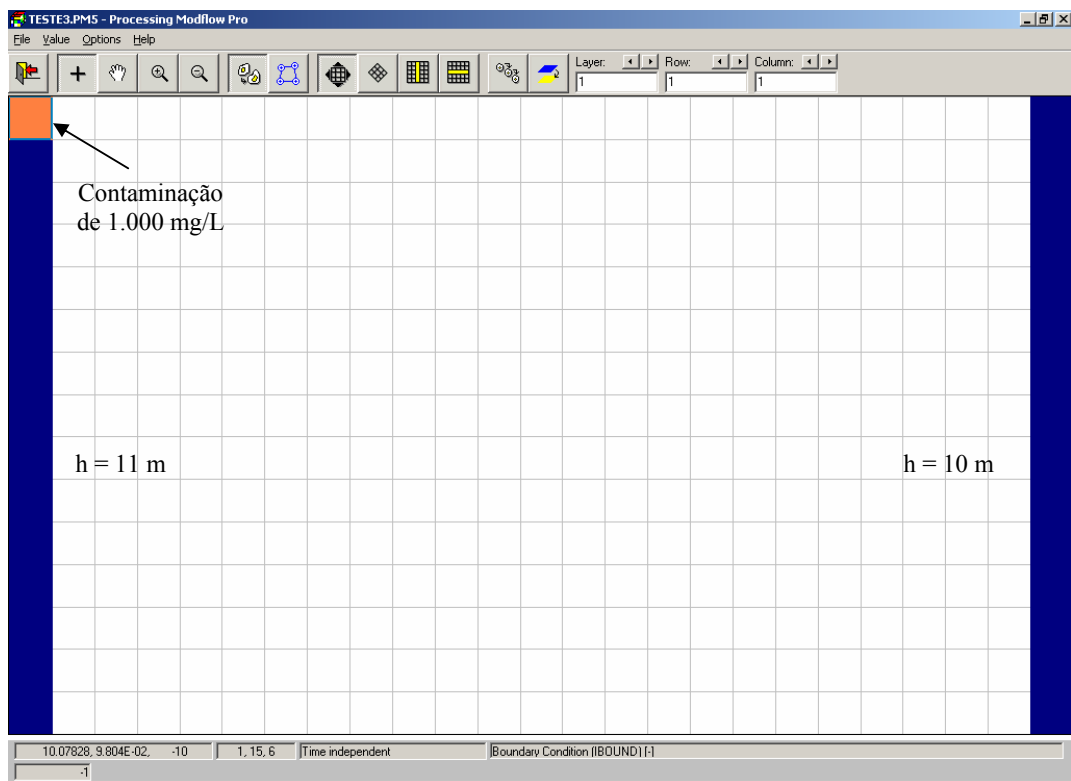


Figura 1. Malha de diferenças finitas traçada no PMWIN para o domínio considerado.

O meio poroso saturado é homogêneo, com porosidade $n = 0,30$ e condutividade hidráulica de $1,5$ m/dia para um gradiente hidráulico de 1 m, o que resulta em uma velocidade linear média na direção x (v_x) igual $0,1$ m/dia. Para obtenção desse gradiente hidráulico, foram fixadas cargas hidráulicas de 11 m no contorno oeste e 10 m no contorno leste. O escoamento se dá essencialmente na direção horizontal, e, portanto, desprezamos a componente vertical da velocidade. A velocidade v_x que compõe o termo advectivo da equação bidimensional de transporte é constante. O coeficiente de decaimento λ , nos cenários em que foi adotado, é igual a $0,2 \text{ dia}^{-1}$. O fator de retardo é igual a 1 .

O espalhamento do contaminante na direção do fluxo é conhecido como dispersão longitudinal (D_x), ao passo que o espalhamento em direções perpendiculares ao fluxo é chamado de dispersão transversal (D_y). Segundo Freeze & Cherry (1979), normalmente a dispersão longitudinal é muito maior do que a dispersão transversal. Com base nisto, os valores de dispersividades e a natureza do contaminante foram modificados para modelarmos os quatro cenários constantes na Tabela 1, mantendo os demais parâmetros inalterados para todas as simulações.

Tabela 1. Cenários simulados.

Cenários	Dispersividades	Tipo de substância
Cenário 01	$D_x = 10 \text{ m}$	Não-conservativa $\lambda = 0,2$
	$D_y = 10 \text{ m}$	
Cenário 02	$D_x = 10 \text{ m}$	Conservativa $\lambda = 0$
	$D_y = 10 \text{ m}$	
Cenário 03	$D_x = 10 \text{ m}$	Não-conservativa $\lambda = 0,2$
	$D_y = 1 \text{ m}$	
Cenário 04	$D_x = 10 \text{ m}$	Conservativa $\lambda = 0$
	$D_y = 1 \text{ m}$	

O *PMWIN – Processing Modflow for Windows* é um programa de simulação de fluxo de água subterrânea e transporte de contaminantes baseado no código do MODFLOW (1988) com uma interface muito mais amigável e baseada no *Windows*. A vantagem do PMWIN sobre a versão original do Modflow encontra-se exatamente na facilidade com a qual essa ferramenta pode ser utilizada. O pacote de transporte de contaminantes que foi empregado neste trabalho foi o MT3D. Este modelo de transporte usa uma abordagem mista de Euler-Lagrange para a solução da equação advectiva-dispersiva-reativa de transporte (Chiang e Kinzelbach, 2003).

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

As figuras a seguir apresentam o caminhamento da pluma para cada cenário e os valores de concentração em cada uma das quatro células escolhidas para comparação dos diferentes cenários.

A figura 2 é representativa do primeiro cenário simulado, onde as dispersividades longitudinal e transversal são iguais ($D_x = D_y = 10 \text{ m}$) e há reação de decaimento, com $\lambda = 0,2 \text{ dia}^{-1}$. O formato arredondado e simétrico da pluma é devido à igualdade nos valores dessas dispersividades. No entanto, a velocidade de propagação da pluma na direção x é aumentada por causa da componente advectiva que ocorre essencialmente nessa direção.

A concentração do contaminante nas células é influenciada pela velocidade da água subterrânea, pelas componentes dispersivas e pela distância em que se encontram da fonte de contaminação, para os casos onde há reações de decaimento.

Na célula 01, o principal mecanismo de propagação da contaminação é a componente transversal da dispersividade. Outro fator que possui influência nessa concentração é o decaimento do soluto enquanto é espalhado na direção dessa célula.

Na célula 02, que apresenta maior sensibilidade às variações feitas, a concentração é devida à proximidade da fonte emissora de contaminação, aumentada pela influência da componente

longitudinal de dispersão e da velocidade da água subterrânea, fato que pode também ser observado na célula 03. Mas, devido à distância percorrida pelo contaminante até chegar à célula 03, é importante ressaltar a influência da reação de decaimento, levando a uma concentração menor do que a apresentada pela célula 02.

A célula 04 é a mais distante da fonte emissora, sendo, portanto, a célula que sofre menor influência em eventuais modificações de parâmetros de dispersividade longitudinal e velocidade no sentido do fluxo. Como consequência dessa distância, este é o ponto de menor concentração.

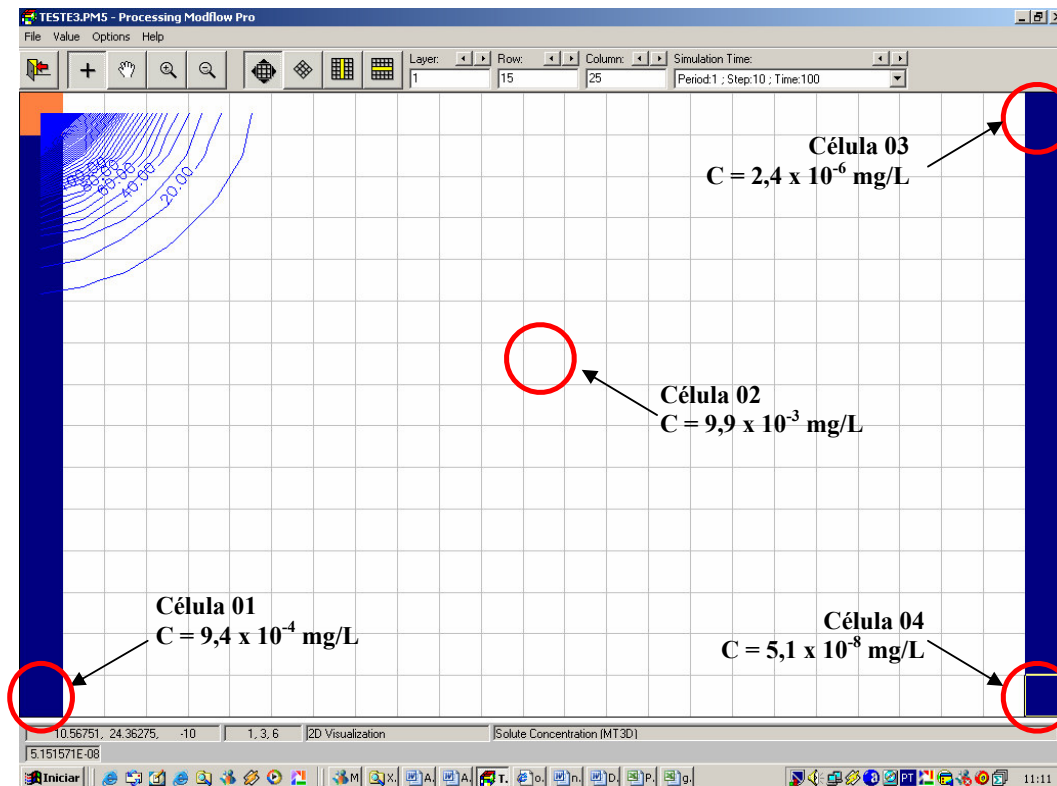


Figura 2. Cenário 01: Distribuição da concentração no domínio e indicação das células escolhidas para comparação.

A figura 3 mostra o segundo cenário simulado, onde as dispersividades longitudinal e transversal são iguais ($D_x = D_y = 10 \text{ m}$) e não há reação de decaimento, ($\lambda = 0 \text{ dia}^{-1}$). O formato continuou arredondado, porém a simetria da pluma foi alterada por causa da natureza conservativa do poluente. Aqui também a velocidade de propagação da pluma na direção x é aumentada por causa da componente advectiva que ocorre essencialmente nessa direção.

A mesma tendência de concentrações encontrado na simulação anterior pode ser observado para este cenário. Entretanto, a natureza conservativa da substância faz com que o espalhamento da

pluma seja muito mais abrangente no mesmo intervalo de tempo, com isso as células possuem concentrações consideravelmente maiores que no cenário anterior.

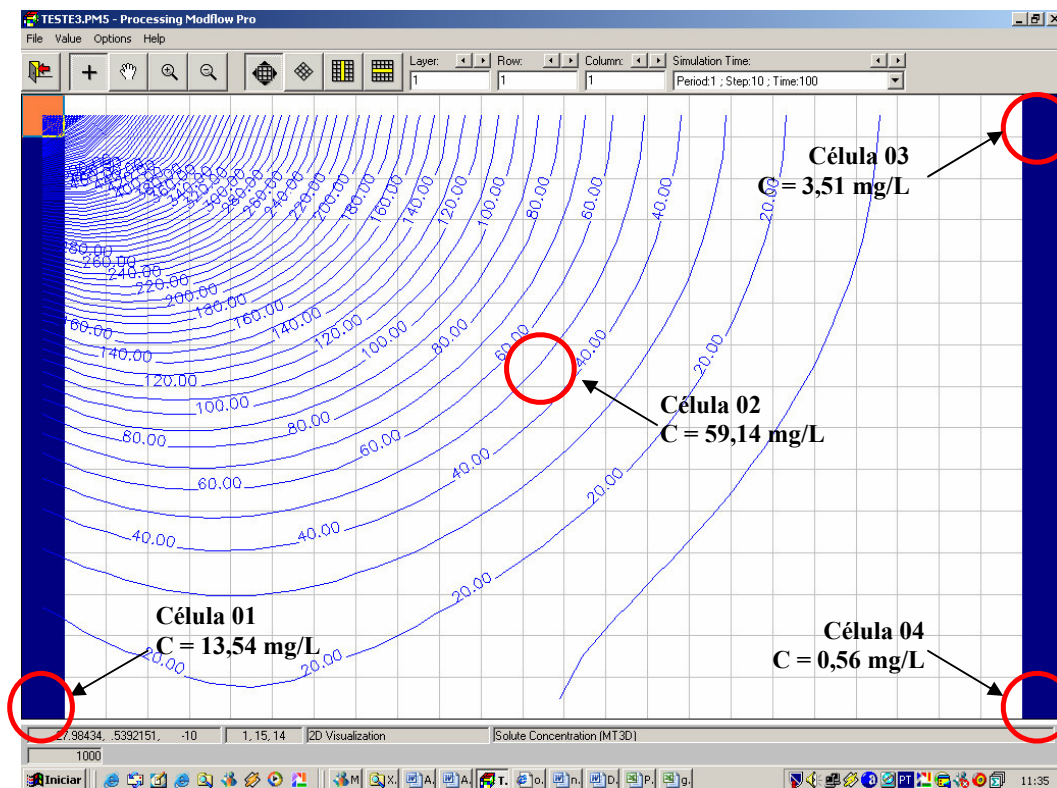


Figura 3. Cenário 02: Distribuição da concentração no domínio e indicação das células escolhidas para comparação.

A simulação do terceiro cenário é mostrada na figura 4. Para este caso, a dispersividade longitudinal é dez vezes maior do que a dispersividade transversal, com valores de 10 m e 1 m, respectivamente. Há reação de decaimento, com $\lambda = 0,2 \text{ dia}^{-1}$. O formato da pluma de contaminação é assimétrico, tendendo a se propagar na direção do escoamento. Além da diferença entre as dispersividades, a componente advectiva contribui para esse quadro.

Na célula 01, o principal mecanismo de propagação da contaminação é a componente transversal da dispersividade, que neste caso é muito menor do que os fatores que contribuem para o caminhamento da pluma na direção x. Outro fator que possui influência nessa concentração é o decaimento do soluto enquanto é espalhado na direção dessa célula.

Na célula 02, que apresenta maior sensibilidade às variações feitas, a concentração é devida à proximidade da fonte emissora de contaminação, aumentada pela maior influência da componente longitudinal de dispersão e da velocidade da água subterrânea, fato que pode também ser observado na célula 03. Mas, devido à distância percorrida pelo contaminante até chegar à célula 03, é

importante ressaltar a influência da reação de decaimento, levando a uma concentração menor do que a apresentada pela célula 02, apesar do aumento da componente longitudinal da dispersividade. Essa mudança ocasionou uma concentração na célula 03 mais próxima àquela observada na célula 02, fato que não ocorre na primeira simulação.

A célula 04 é a mais distante da fonte emissora, sendo, portanto, a célula que sofre menor influência nas modificações feitas nos parâmetros de dispersividade longitudinal. Como consequência dessa distância, este é o ponto de menor concentração.

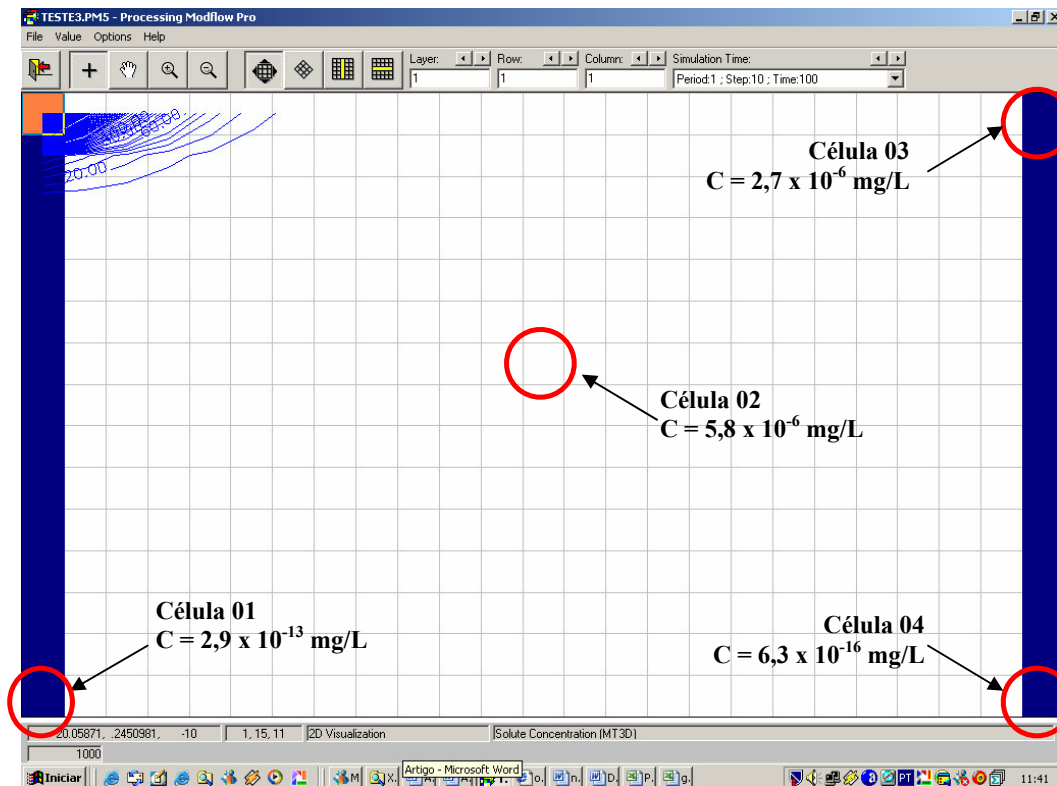


Figura 4. Cenário 03: Distribuição da concentração no domínio e indicação das células escolhidas para comparação.

A simulação do quarto cenário é exposta na figura 5. Para este caso, a dispersividade longitudinal é dez vezes maior do que a dispersividade transversal, com valores de 10 m e 1 m, respectivamente e não há reação de decaimento, com $\lambda = 0 \text{ dia}^{-1}$. O formato da pluma de contaminação é assimétrico, tendendo a se propagar na direção do escoamento. Assim como o observado no terceiro cenário, além da diferença entre as dispersividades, a componente advectiva contribui para esse quadro.

Na célula 01, o principal mecanismo de propagação da contaminação é a componente transversal da dispersividade, que neste caso é muito menor do que os fatores que contribuem para

o caminhamento da pluma na direção x. A maior concentração encontrada, com relação à terceira simulação, se deve ao fato de não haver nenhuma reação de decaimento.

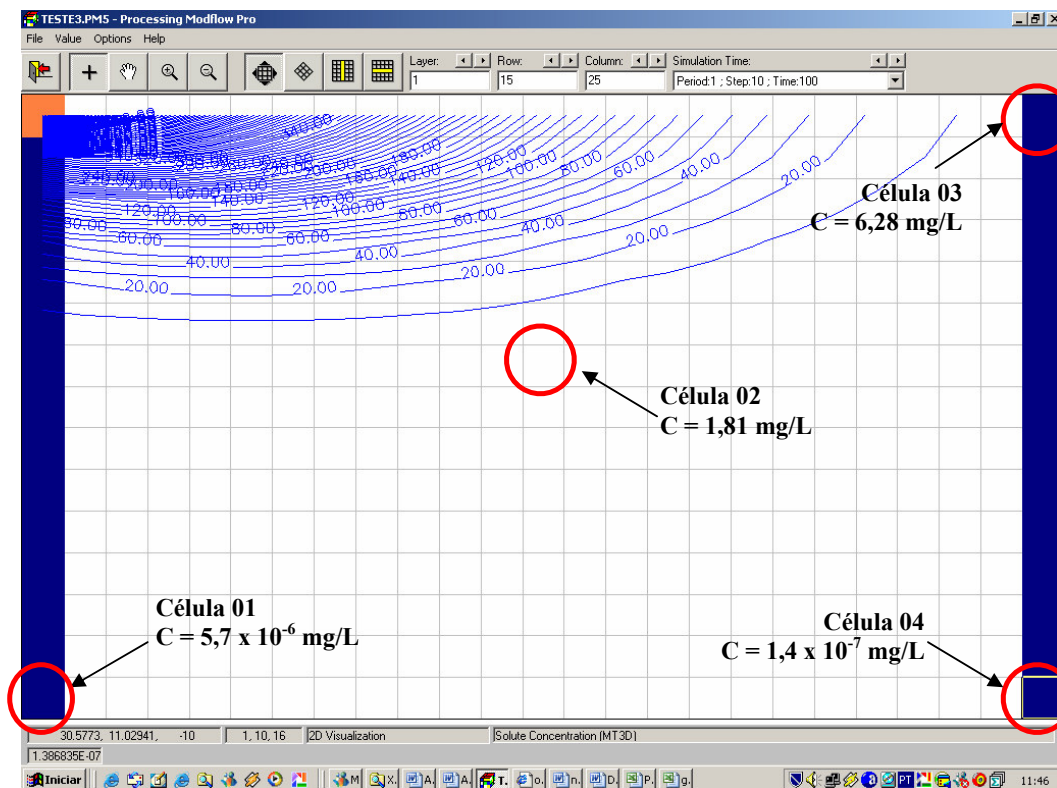


Figura 5. Cenário 04: Distribuição da concentração no domínio e indicação das células escolhidas para comparação.

Devido à diferença entre a dispersividade longitudinal e transversal, as células que mais foram influenciadas por esta mudança são as células 02 e 03, respectivamente. A natureza conservativa da substância faz com que o espalhamento da pluma seja muito mais abrangente, no mesmo intervalo de tempo, com isso as células possuem concentrações consideravelmente maiores que no cenário anterior. Este é o cenário que apresentou a maior assimetria na pluma de contaminação, que se propaga essencialmente na direção do escoamento.

De forma semelhante ao encontrado em todas as simulações anteriores, a célula 04 é a que sofre menor influência nas modificações feitas nos parâmetros de dispersividade longitudinal. Somente eventuais alterações no sentido transversal ao fluxo é que acarretariam mudanças significativas de concentração nesse ponto.

4. CONSIDERAÇÕES FINAIS

Atualmente centenas de modelos foram desenvolvidos para resolver os mais diferentes tipos de problemas relacionados às águas subterrâneas, baseados em vários métodos numéricos e modelos conceituais. A seleção de um método numérico ou modelo genérico para um local específico depende de vários fatores, como precisão, eficiência, custo e utilidade (Menescal, 2003).

Entre os métodos numéricos mais utilizados atualmente para se resolver as equações diferenciais que governam o fluxo subterrâneo, o *Método das Diferenças Finitas* é o mais antigo, o mais divulgado e provavelmente o mais bem entendido pelos engenheiros.

A utilização do PMWIN permitiu a obtenção de resultados com a modificação dos parâmetros escolhidos, de forma rápida, precisa e simples, podendo possibilitar ao usuário que assim o desejar fazer uma abordagem muito mais detalhada do sistema aquífero estudado.

As alterações promovidas no parâmetro de dispersividade provocaram uma assimetria da pluma de contaminação, com tendência de propagação no sentido da maior dispersividade (sentido do fluxo).

Nas simulações onde o contaminante foi considerado conservativo, a propagação da pluma de contaminação foi muito mais abrangente, fato que acarretou em concentrações muito maiores nas células escolhidas para essa comparação.

AGRADECIMENTOS

À Coordenação Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior – CAPES e à Fundação Cearense de Apoio ao Desenvolvimento Científico e Tecnológico – FUNCAP, pelo suporte financeiro.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- CHIANG, W.H., Kinzelbach, W., 2003. 3D-Groundwater Modeling with PMWIN. Springer-Verlag Berlin Heidelberg. Germany.
- FREEZE, R.A., Cherry, J.A., 1979. Groundwater. Prentice Hall, Inc.
- MENESCAL, G.C., 2003. Simulação Computacional do Transporte de Contaminantes em Aquíferos. Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Ceará.
- MENESCAL, G. C., Vieira, V.P.P.B, Castro, M.A.H., 2005. Gestão de Águas Subterrâneas no Estado do Ceará. In: Anais do XVI Simpósio Brasileiro de Recursos Hídricos. João Pessoa.