

VOLUME ESPECÍFICO DE LNAPLs EM AQUÍFEROS: ALGORITMO E ESTIMATIVA DOS PARÂMETROS

S. S. Cota¹ e R. Kirchheim²

Resumo - Este trabalho baseia-se na implementação de um algoritmo para estimativa de volumes específicos de hidrocarbonetos leves a partir da espessura do produto observada em poços. O programa foi aplicado à área contaminada de um posto de abastecimento em Porto Alegre/RS. No trabalho, desenvolve-se considerações sobre a estimativa dos parâmetros do modelo à luz dos resultados obtidos.

Palavras-chave - contaminação de aquíferos, LNAPL, volume específico.

1. INTRODUÇÃO

O vazamento de tanques de gasolina em postos de abastecimento constitui-se um sério problema ambiental dos centros urbanos. A volatilidade desses líquidos faz com que seus vapores se espalhem ao redor do local do vazamento, acarretando queixas de moradores da vizinhança quando esses vapores os atingem através de inalações do solo ou do sistema de esgoto. Além disso, a gasolina se dissolve lentamente na água subterrânea, atingindo concentrações muito superiores aos limites de potabilidade de seus constituintes.

¹ Instituto de Pesquisas Hidráulicas, UFRGS, C.P. 15029, CEP 91530-080, Porto Alegre, RS, e-mail: stela_cota@if.ufrgs.br

² Instituto de Pesquisas Hidráulicas, UFRGS, C.P. 15029, CEP 91530-080, Porto Alegre, RS, e-mail: kirchheim@if.ufrgs.br

A estimativa precisa do volume de LNAPL é de fundamental importância no planejamento da remediação das áreas contaminadas, resultando em uma operação mais eficiente e econômica. Este trabalho apresenta a implementação de um modelo para a estimativa do volume específico a partir de dados de espessura do LNAPL presente em piezômetros. O método é empregado na determinação do volume específico de gasolina em uma área de abastecimento no município de Porto Alegre/RS. Para esse caso, analisa-se a estimativa dos parâmetros do modelo através de dados de literatura e do uso do banco UNSODA (Leij et al., 1996) de parâmetros de solo. No trabalho, o termo “óleo” será utilizado como sinônimo de LNAPL.

2. DETERMINAÇÃO DO VOLUME ESPECÍFICO DE LNAPL

O volume de óleo presente no solo, por unidade de área planimétrica de aquífero, é denominado “volume específico de óleo” (unidade $[L^3/L^2]$). Acima da linha d'água, as saturações do LNAPL e da água são variáveis ao longo do perfil do solo e dependem das pressões do LNAPL, da água e do ar, além da distribuição de tamanho de poros do meio. Durante algum tempo, houve a tendência de identificar a espessura de óleo observada em poços com seu volume específico no aquífero, devido à coincidência de suas unidades. Entretanto, hoje sabe-se que essa equivalência não é adequada.

Farr et. al. (1990) e Lenhard e Parker (1990) desenvolveram modelos similares para a estimativa do volume específico a partir de dados de espessura em piezômetros. Em ambos os modelos, são adotadas as seguintes condições: aquíferos homogêneos; equilíbrio hidrostático na distribuição de pressões do óleo e da água; desconsideração de histerese na relação saturação-pressão e de imobilização de fluidos não-molhantes por fluidos molhantes.

Esses modelos utilizam-se do trabalho de Parker et. al. (1987), que propõe a utilização de pressões capilares transformadas, resultantes da multiplicação das pressões capilares dos sistemas ar-água, ar-óleo e óleo-água por parâmetros de escala típicos de cada sistema. Esses parâmetros podem ser obtidos por ajuste de dados reais ou estimados através das tensões interfaciais dos fluidos envolvidos.

3. DESCRIÇÃO DO ALGORITMO

O volume específico de óleo no aquífero é calculado por integração numérica dos volumes de óleo de cada elemento ao longo da camada de solo que contém óleo de

forma contínua (Farr et. al., 1990; Lenhard e Parker, 1990). A espessura dessa camada de solo (CS) é calculada pela expressão

$$CS = \frac{\rho_{ro} \cdot \beta_{ao}}{\rho_{ro} \cdot \beta_{ao} - (1 - \rho_{ro}) \cdot \beta_{ow}} \cdot H_o \quad (1)$$

onde ρ_{ro} é a densidade do óleo relativa à água, β_{ao} e β_{ow} são parâmetros de escala das curvas de saturação e pressão capilar para as interfaces ar-óleo e óleo-água, respectivamente, e H_o é a espessura da camada de óleo presente em um poço de observação.

Assim, o volume específico de óleo V_o é calculado por

$$V_o = \int_{z_{inf}}^{z_{sup}} \phi S_o(z) dz \quad (2)$$

onde os limites de integração z_{inf} e z_{sup} são iguais, respectivamente, à profundidade da interface água-óleo no poço (z_{ow}) e à ($z_{ow}+CS$). O parâmetro ϕ é a porosidade do aquífero.

Para cada profundidade z entre z_{inf} e z_{sup} , a saturação de óleo S_o é estimada a partir das saturações de água e total de líquidos (S_w e S_t , respectivamente), através da expressão

$$S_o = S_t - S_w$$

O algoritmo assume que a saturação total de líquidos e a saturação de água são funções únicas das cargas capilares relativas às interfaces ar-óleo (h_{ao}) e água-óleo (h_{ow}), respectivamente. Assim,

$$\begin{aligned} \bar{S}_t &= f(\beta_{ao} \cdot h_{ao}) \\ \bar{S}_w &= f(\beta_{ow} \cdot h_{ow}) \end{aligned} \quad (3)$$

onde

$$\begin{aligned} h_{ao} &= \rho_{ro} \cdot (z - z_{ao}) \\ h_{ow} &= (1 - \rho_{ro}) \cdot (z - z_{ow}) \end{aligned}$$

onde z_{ao} e z_{ow} são, respectivamente, as profundidades das interfaces ar-óleo e óleo-água dentro do poço e o símbolo sobre S_w e S_t indica saturações efetivas. A expressão $\bar{S}_i = f(\beta_{jk} \cdot h_{jk})$ indica o uso de uma relação saturação e pressão capilar, transformada para sistema trifásico pela inclusão dos parâmetros de escala para as interfaces ar-óleo e

óleo-água (β_{ao} e β_{ow} , respectivamente). As relações saturação e pressão capilar mais utilizadas são os modelos de van Genuchten (1980) ou de Brooks-Corey (1964).

As saturações total de líquidos e de água em cada profundidade são calculadas a partir das saturações efetivas total de líquidos e de água através de

$$\begin{aligned}\bar{S}_t &= \frac{S_w + S_o - S_r}{1 - S_r} \\ \bar{S}_w &= \frac{S_w - S_r}{1 - S_r}\end{aligned}\tag{4}$$

onde S_r é a saturação residual do modelo de saturação – pressão capilar.

4. APLICAÇÃO A UM POSTO DE ABASTECIMENTO – PORTO ALEGRE/RS

Do ponto de vista geológico, a região na qual está situado o posto é formado por depósitos não-consolidados do tipo encosta e pelo próprio manto de alteração da rocha granítica de embasamento. Através de sondagens rasas, de até 3,5 m de profundidade, realizadas no local, observa-se a predominância de níveis argilosos e argilo-arenosos de baixa permeabilidade. Em todas as sondagens a partir de 2,5 m alcança-se níveis argilosos muito duros e compactos, com características de selante impermeável.

Os parâmetros do solo foram estimados com o auxílio do banco de dados para solos UNSODA. Pesquisou-se os valores dos parâmetros do modelo de van Genuchten (α , n , S_r) e a porosidade ϕ entre os solos similares ao da área de estudo. O parâmetro que mais mostrou variabilidade foi α , variando de 0,0004 a 0,408 cm^{-1} , sendo que o valor mais encontrado foi da ordem de 10^{-2} cm^{-1} . O parâmetro n apresentou-se bastante estável para os solos do tipo, permanecendo fixo em 1,005 para a maioria dos solos pesquisados. Entretanto, em alguns casos, esse valor passou de 2, alcançando até 2,945. A saturação residual S_r também apresentou alta variabilidade, na faixa de 0,027 a 0,63, com média de 0,36. A porosidade esteve entre 0,32 e 0,52, com média de 0,38.

Os parâmetros do líquido necessários para o modelo são a densidade relativa e os parâmetros de escala das curvas de saturação e pressão capilar para as interfaces ar-óleo (β_{ao}) e óleo-água (β_{ow}). A literatura aponta o valor de 0,74 g/cm^3 para a densidade da gasolina (Lenhard e Parker, 1990). Entretanto, tendo em vista o processo de perda de substâncias voláteis que a gasolina sofre no aquífero, estima-se que a densidade de uma gasolina no aquífero seja maior do que a gasolina fresca. Como previsto, a medição em laboratório da densidade da gasolina retirada da área revelou um valor de 0,82 g/cm^3 .

Com relação aos parâmetros de escala β_{ao} e β_{ow} , Lenhard e Parker (1990) utilizam valores de 3,2 e 1,5 para a gasolina fresca. No entanto, Farr et al. (1990), através de medições de tensões interfaciais na gasolina envelhecida (evaporação de 60% de seu volume inicial), encontraram valores de 1,43 e 3,26 para β_{ao} e β_{ow} , respectivamente.

A Tabela 1 traz os valores assumidos na simulação do caso estudado, sendo que estes refletem os valores mais encontrados na literatura para cada um dos parâmetros. Utilizou-se a densidade relativa medida para a amostra de gasolina da área e os parâmetros de escala para a gasolina envelhecida. Com esses valores, o algoritmo calculou que o volume específico na área seria de $0,01 \text{ cm}^3/\text{cm}^2$. Este valor não parece ser razoável, pois equivale a 100 mL de gasolina por m^2 de área, o que é muito inferior ao esperado.

Tabela 1 – Parâmetros utilizados no cálculo do volume específico.

α	$0,05 \text{ cm}^{-1}$	r	0,37	β_{ao}	1,43	ρ_{ro}	0,82
n	1,005		0,37	β_{ow}	3,26	H_o	19,5 cm

Acredita-se que a incerteza nos valores dos parâmetros do solo possa ser responsável por esse resultado. Para avaliar-se essa hipótese, pesquisou-se, para cada parâmetro, entre os extremos de variação encontrados no banco de dados UNSODA, para o mesmo tipo de solo analisado. O objetivo era buscar valores que gerassem volumes específicos máximos e mínimos. Para os mesmos valores dos parâmetros do líquido, obteve-se diferenças de quase 5 ordens de magnitude no volume específico, variando entre $0,002$ e $8,102 \text{ cm}^3/\text{cm}^2$.

5. CONCLUSÃO

A utilização do algoritmo para cálculo do volume específico de gasolina em aquíferos foi aplicado à área contaminada de um posto de gasolina na cidade de Porto Alegre/RS. Utilizou-se dados de literatura para a estimativa dos parâmetros do modelo, mas o resultado obtido não foi razoável em relação ao esperado.

Considera-se que a principal responsável por esse resultado seja a incerteza envolvida na estimativa dos valores dos parâmetros de solo. Realizar a classificação do solo utilizando apenas a recursos visuais pode gerar muita divergência na estimativa.

Além disso, o uso do banco de dados UNSODA é bastante dificultado pela grande diferença encontrada para os valores dos parâmetros dentro de uma mesma classificação de solo. Assim, é recomendável que se utilize a análise granulométrica para nortear a classificação do solo e a busca dos parâmetros no banco de dados. Alternativamente, pode-se obter diretamente a curva de saturação – pressão capilar a partir de amostras de solo, sendo esta hipótese preferível.

Outra fonte de incerteza na determinação do volume específico é a estimativa dos parâmetros da gasolina, principalmente no que se refere aos parâmetros de escala. A diferença entre os valores desses parâmetros para a gasolina fresca e a envelhecida sugere a necessidade de medições diretas das tensões interfaciais para uma estimativa mais confiável, especialmente quando considera-se que a composição da gasolina no Brasil é alterada pela adição de etanol.

6. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- BROOKS, R.H.; COREY, A.T. Hydraulic properties of porous media, Colorado State University, **Hydrology Papers n.3**, Mar. 1964. 27p.
- FARR, A.M.; HOUGHTALEN, R.J.; McWHORTER, D.B. Volume estimation of light nonaqueous phase liquids in porous media, **Ground Water**, v.28, n.1, p.48-56, Jan.-Feb. 1990.
- LEIJ, F.J.; ALVES, W.J.; VAN GENUCHTEN, M.T.; WILLIAMS, J.R. **UNSODA, v. 1.0, User's manual**, EPA/600/R-96/095, Aug. 1996. 113p.
- LENHARD, R.J.; PARKER, J.C. Estimation of free hydrocarbon volume from fluid levels in monitoring wells, **Ground Water**, v.28, n.1, p.57-68, p.418-426, Jan.-Feb. 1990.
- PARKER, J.C; LENHARD, R.J.; KUPPUSAMY, T. A parametric model for constitutive properties governing multiphase flow in porous media, **Water Resources Research**, v.23, n.4, p.618-624, Apr. 1987.
- VAN GENUCHTEN, M.T. A closed-form equation for predicting the hydraulic conductivity of unsaturated soils, **Soil Sci. Soc. Am. J.**, v.44, p.892-898, 1980.