

AVALIAÇÃO DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES NO SOLO ATRAVÉS DO MÉTODO DE LATTICE BOLTZMANN

Fábio Cunha Lofrano^{1*}; Dione Mari Morita²;
Fabio Sussumu Komori³; Marcelo Nelson Páez Carreño⁴

RESUMO

Estudos hidrodinâmicos de contaminantes na zona vadosa são escassos. As limitações inerentes aos ensaios de campo e de laboratório levaram ao desenvolvimento de técnicas de simulação computacional. Dentre elas, o método de Lattice Boltzmann se destaca por lidar bem com fluxos multifásicos e geometrias complexas, características essenciais à modelagem do escoamento em meios porosos. Foi utilizado um simulador baseado em MLB (o LBSim) para avaliar o potencial desse método em comparação com experimentos reais. Estes foram realizados em um microdispositivo cujas dimensões representam fielmente as observadas nos poros do solo. Observou-se uma grande convergência entre as simulações e os resultados obtidos com o dispositivo proposto.

ABSTRACT

Hydrodynamic studies of contaminants in the vadose zone are scarce. The inherent limitations of field and laboratory tests have led to the development of computational simulation techniques. The Lattice Boltzmann method stands out among the others for dealing well with multiphase flows and complex geometries, essential features to the modeling of flow in porous media. Based on comparisons with real experiments, the potential of this method was evaluated via LBSim software. Those were performed in a micro device that faithfully represents the dimensions of the soil pores. There was a great convergence between the simulations and the results obtained with the proposed device.

Palavras-chave: microfluídica; contaminação do solo; método de Lattice Boltzmann; LBSim.

¹ Mestrando do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da Escola Politécnica da USP. *fabio.lofrano@usp.br.

² Professora Associada do Departamento de Engenharia Hidráulica e Ambiental da Escola Politécnica da USP.

³ Doutorando do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Elétrica da Escola Politécnica da USP.

⁴ Professor Associado do Departamento de Engenharia de Sistemas Eletrônicos da Escola Politécnica da USP.

1 - INTRODUÇÃO

A contaminação do meio ambiente subterrâneo é um problema que gera crescentes preocupações e cujos efeitos comprometem a utilização de áreas urbanas, a produção de alimentos e o abastecimento público. Estima-se que o passivo ambiental brasileiro devido à contaminação do solo e das águas subterrâneas seja equivalente a R\$ 15 bilhões [1].

As pesquisas no meio subterrâneo têm se focado na zona saturada. No entanto, Yaron, Dror e Berkowitz [2], entre outros pesquisadores, destacam a importância e a carência de estudos acerca do transporte e da geoquímica de contaminantes na zona vadosa. Nela ocorrem fenômenos extremamente complexos, envolvendo fases sólida, líquida e gasosa, e que impactam a zona saturada. Além disso, o ser humano estabelece a maior parte de sua relação com o solo através desta zona.

A observação direta dos fenômenos que ocorrem no meio subterrâneo (mesmo em pequenas profundidades) é quase impraticável. Métodos *in-situ* costumam basear-se em medições indiretas, enquanto que ensaios de laboratório apresentam dificuldades em retratar fielmente o ambiente subterrâneo.

Por esta razão, modelos matemáticos para escoamento de fluidos em meios porosos vêm sendo utilizados desde quando Henry Darcy propôs a sua famosa equação em 1856. Contudo, soluções analíticas para problemas de dinâmica dos fluidos podem ser encontradas somente para condições de contorno (geometria) triviais.

Diferentemente dos métodos tradicionais (elementos finitos ou diferenças finitas), baseados nas equações de Navier-Stokes, uma nova abordagem vem ganhando destaque: o método de Lattice Boltzmann (MLB). Sua formulação reside em conceitos da mecânica estatística. Como principal vantagem, o MLB apresenta melhor suporte à simulação de escoamentos multifásicos, confinados em geometrias complexas (pouco regulares). Do ponto de vista computacional, é facilmente paralelizável, permitindo o aproveitamento de processadores de múltiplos núcleos e placas gráficas.

No presente artigo foi utilizado o programa LBSim (*Lattice Boltzmann Simulator*), que implementa algoritmos de simulação baseados em MLB [3], para verificar a utilização desta metodologia no estudo hidrodinâmico de contaminantes no solo.

2 - MATERIAL E MÉTODOS

O programa LBSim [3], baseado no MLB, foi empregado nas simulações. Entre suas aplicações documentadas, citam-se estudos em microfluídica [4] e em aquíferos

fraturados de gnaiss [5]. O MLB se baseia na discretização temporal e espacial (em células regulares) do domínio de simulação. A cada célula é atribuída uma função de distribuição de partículas (FDP), cujas velocidades são constantes e direções são ditadas segundo uma derivação das equações de Maxwell. A cada passo de tempo as FDP de todas as células são atualizadas, donde se extraem propriedades de interesse do escoamento, como velocidade, densidade e pressão. A implementação de um modelo proposto por [6] permite ao LBSim simular escoamentos multifásicos.

Realizaram-se dois testes: (1) simulação de regime transiente e (2) convergência entre a simulação e um ensaio real. Para este, um microcanal foi construído segundo técnicas de microfabricação detalhadas em [7]. Com dimensões equiparáveis às reais de um solo, o microcanal foi saturado com óleo lubrificante e submetido ao fluxo de água, formando um sistema bifásico.

3 - RESULTADOS E DISCUSSÃO

A Figura 1 exibe os resultados da evolução temporal do escoamento de um fluido em um meio poroso previamente saturado com outro fluido. Percebe-se a formação de um caminho preferencial ao fluxo do fluido penetrante.

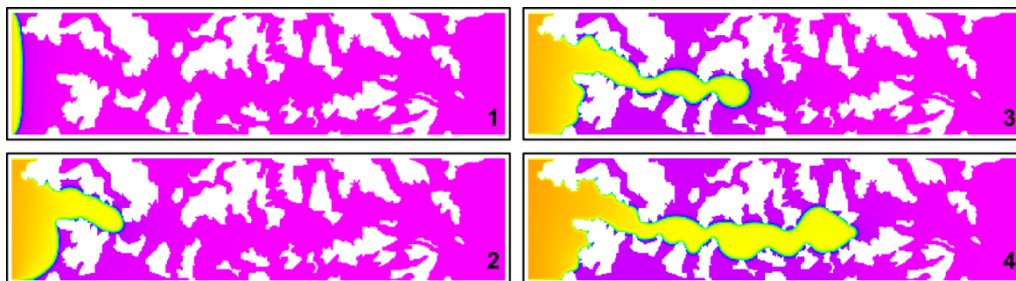


Figura 1. Simulação de regime transiente de escoamento bifásico.

A comparação entre um ensaio real, em microcanal, e sua correspondente simulação é mostrada na Figura 2.

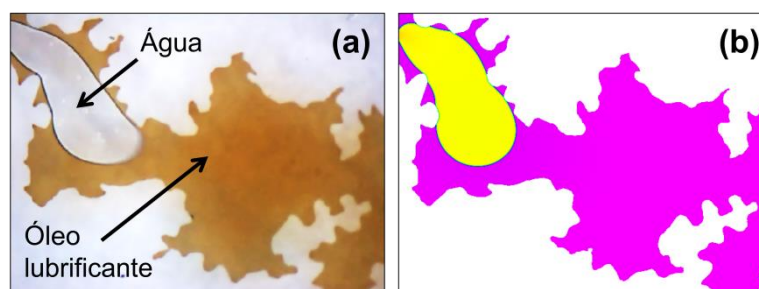


Figura 2. Comparação entre (a) um ensaio real e (b) sua correspondente simulação.

É evidente a semelhança geométrica alcançada pelo MLB em relação ao ensaio real.

4 - CONCLUSÕES

Com base nos resultados obtidos, é possível concluir que o LBSim (*Lattice Boltzmann Simulator*), desenvolvido por Komori [3], se presta à investigação dos fenômenos relacionados ao transporte de contaminantes no meio subterrâneo. Além disso, pode-se concluir que os resultados obtidos são reprodutíveis com os encontrados em ensaios físicos.

5 - AGRADECIMENTOS

À CAPES, pela bolsa de mestrado concedida a Fábio Lofrano. Ao Prof. Podalyro Amaral de Souza, pelas orientações relativas ao fluxo em meios porosos.

6 - REFERÊNCIAS

- [1] ABAS. Casos de áreas contaminadas no país demandam ações imediatas. 22 set. 2011. Disponível em: <http://www.abas.org/noticia-187_casos-de-areas-contaminadas-no-pais-demandam-acoes-imediatas>. Acesso em: 01 jun. 2013.
- [2] YARON, B.; DROR, I.; BERKOWITZ, B. Contaminant geochemistry – a new perspective. *Naturwissenschaften*, v. 97, p. 1-17, 2010.
- [3] KOMORI, F.S. **Desenvolvimento de um simulador computacional de dinâmica de fluidos utilizando o método de Lattice Boltzmann**. 2012. 87 p. Dissertação (Mestrado) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.
- [4] KOMORI, F.S.; MIELLI, M.Z.; CARREÑO, M.N.P. Simulator for Microfluidics Based on the Lattice Boltzmann Method. *ECS Transactions*, v. 39, n. 1, p. 461-468, 2011.
- [5] ABDELAZIZ, R.; PEARSON, A.; MERKEL, B. Lattice Boltzmann modeling for tracer test analysis in a fractured Gneiss aquifer. *Natural Science*, v.5, n. 3, p. 368-374, 2013.
- [6] SHAN, X.; CHEN, H. Lattice Boltzmann model for simulating flows with multiple phases and components. *Physical Review E*, v. 47, n. 3, p. 1815-1819, 1993.
- [7] TOLEDO, M.P. **Desenvolvimento de um dispositivo para avaliação do transporte de combustíveis no meio subterrâneo**. 2013. 119 p. Tese (Doutorado) - Escola Politécnica, Universidade de São Paulo, São Paulo, 2012.