

# PERDA DE SENSIBILIDADE DA VELOCIDADE DO CONTAMINANTE AO PARÂMETRO POROSIDADE NO TRANSPORTE COM RETARDO

Cota<sup>1</sup>, Stela; Sousa, Marcelo<sup>2</sup>

**Resumo** – A equação de transporte advectivo-dispersivo não incorpora a distinção entre porosidade total e efetiva, o que pode induzir a obtenção de alguns resultados artificiais e não-intuitivos na estimativa do retardamento por adsorção. Quando o coeficiente de adsorção do solo ( $K_d$ ) é elevado, a velocidade do contaminante passa a não depender da porosidade, o que não é realista. Para corrigir esse efeito, o coeficiente de adsorção pode ser corrigido pela relação entre as porosidades efetiva e total.

**Abstract** – The advection-dispersion equation does not incorporate the distinction between total and effective porosity, which may induce artificial and non-intuitive results on estimates of retardation due to sorption. For high soil-water partitioning coefficient ( $K_d$ ) values, the estimation of solute velocity does not depend on the porosity value, which is not realistic. In order to correct this effect, the  $K_d$  value can be corrected by the ratio between total and effective porosity.

**Palavras-Chave** – Modelagem, transporte, porosidade.

## INTRODUÇÃO

A maioria dos modelos matemáticos para predição do avanço de plumas dissolvidas resolve a chamada equação de transporte advectivo-dispersivo em meios porosos. Essa equação contém algumas inconsistências em sua formulação e sofre com problemas numéricos para sua solução (Konikow, 2011). Uma das questões apontadas pelo autor trata do uso inapropriado do parâmetro porosidade na equação de transporte advectivo-dispersivo, mostrada na Eq. 1 em três dimensões (Zheng e Wang, 1999):

$$\frac{\partial}{\partial x_i} \left( \phi \cdot D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial}{\partial x_i} (q_i \cdot C) = \frac{\partial (\phi \cdot C)}{\partial t} \quad (1)$$

onde os índices  $i$  e  $j$  de  $x$  descrevem diferentes dimensões do domínio;  $q_i$ , a descarga específica da água [ $L^3/L^2 \cdot T$ ];  $D_{ij}$ , o tensor de coeficientes de dispersão hidrodinâmica [ $L^2/T$ ];  $C$ , a concentração do contaminante [ $M/L^3$ ];  $\phi$ , a porosidade [ $L^3/L^3$ ]; e  $t$ , o tempo [ $T$ ].

Nessa equação, o termo do lado direito da Eq. 1 deve refletir o armazenamento do soluto no meio poroso e a porosidade utilizada deve ser a total. Do lado esquerdo, por

1 Centro de Desenvolvimento da Tecnologia Nuclear – CDTN/CNEN, CP 941, Belo Horizonte, MG

2 Dept. of Earth and Environmental Sciences, University of Waterloo, Waterloo, Ontario, Canada N2L 3G1, 1 519 888-4567, m2sousa@uwaterloo.ca

outro lado, estão os termos advectivos e a porosidade utilizada deve refletir a área disponível para o fluxo da água, ou seja, os poros interconectados. Assim, a porosidade utilizada para descrever esse fenômeno deve ser a porosidade efetiva. Se a porosidade escolhida pelo modelador for a porosidade total, a armazenagem do soluto no meio será bem caracterizada, mas a velocidade linear da água será subestimada. Por outro lado, ao utilizar a porosidade efetiva, a velocidade será bem estimada, mas a massa armazenada será subestimada. A única forma de solucionar esta questão é utilizar a abordagem chamada "dual porosity", que descreve explicitamente a difusão na matriz, mas que envolve uma modelagem com complexidade muito maior.

Neste artigo, discute-se uma situação em que a estimativa do retardamento por adsorção é afetada, de maneira artificial e não-intuitiva, pelo modo em que a porosidade é incorporada na equação de transporte.

## APRESENTAÇÃO DO PROBLEMA

Quando as porosidades total ( $\phi_T$ ) e efetiva ( $\phi_{ef}$ ) são utilizadas, a velocidade de um contaminante dissolvido e sujeito à adsorção ( $V_{c2}$ ) pode ser estimada através da Eq. 2:

$$V_{c2} = \frac{V}{R} = \frac{\frac{q}{\phi_{ef}}}{1 + \frac{\rho_b \cdot K_d}{\phi_T}} \quad (2)$$

onde  $V$  é a velocidade linear da água;  $R$  é o coeficiente de retardo do contaminante;  $q$  é a descarga específica da água [ $L^3/L^2.T$ ];  $\rho_b$  é a densidade volumétrica ("bulk") do solo [ $M/L^3$ ];  $K_d$  é o coeficiente de adsorção do contaminante no solo [ $L^3/M$ ]. Como a equação de transporte só considera uma única porosidade ( $\phi$ ), a expressão utilizada para a estimativa da velocidade de um contaminante ( $V_{c1}$ ) passa a ser:

$$V_{c1} = \frac{V}{R} = \frac{\frac{q}{\phi}}{1 + \frac{\rho_b \cdot K_d}{\phi}} \quad (3)$$

Nas situações em que o retardo por adsorção do contaminante é alto ( $K_d$  alto), o termo  $\frac{\rho_b \cdot K_d}{\phi}$  se torna muito maior do que 1 e a Eq. 3 se torna equivalente a  $V_{c1} \cong \frac{q}{\rho_b \cdot K_d}$ . Com isso, a velocidade do contaminante estimada torna-se independente da porosidade, como pode-se observar nos dados da Tabela 1 para três valores de  $K_d$ . Os seguintes parâmetros foram considerados:  $\phi_T = 0.5$ ;  $\phi_{ef} = 0.15$ ;  $q = 1$  m/dia;  $\rho_b = 1.325$  g/cm<sup>3</sup>. Para o cálculo das velocidades do contaminante utilizando somente um valor de porosidade ( $V_{c1}$ ), os valores de porosidade utilizados variam entre  $\phi_T$  e  $\phi_{ef}$ .

Tabela 1 – Estimativa de velocidade do contaminante utilizando uma e duas porosidades

Kd	0.01 cm <sup>3</sup> /g			10 cm <sup>3</sup> /g			1000 cm <sup>3</sup> /g		
Cálculo utilizando duas porosidades (Eq. 2)									
R	1.027			28			2651		
V	6.667			6.667			6.667		
V <sub>c2</sub>	6.495			0.2424			0.0025		
Cálculo utilizando uma porosidade (Eq. 3)									
Porosidade	R	V	V <sub>c1</sub>	R	V	V <sub>c1</sub>	R	V	V <sub>c1</sub>
0.5	1.027	2.000	1.948	28	2.000	0.0727	2651	2.000	0.00075
0.4	1.033	2.500	2.420	34	2.500	0.0733	3314	2.500	0.00075
0.3	1.044	3.333	3.192	45	3.333	0.0738	4418	3.333	0.00075
0.2	1.066	5.000	4.689	67	5.000	0.0743	6626	5.000	0.00075
0.15	1.088	6.667	6.126	89	6.667	0.0746	8834	6.667	0.00075

Esse efeito também é encontrado nas simulações numéricas que utilizam apenas uma porosidade. A Figura 1 mostra a velocidade de um contaminante obtido através da simulação de uma coluna de argila saturada ( $q = 0,12$  cm/dia) com adsorção ( $K_d = 10$  cm<sup>3</sup>/g) utilizando o modelo HYDRUS (Simunek et al., 2005). A velocidade do traçador obtida utilizou a Eq. 2 com porosidade total igual a 50% e porosidades efetivas dadas no gráfico. A velocidade de um traçador conservativo (sem retardo) foi obtida numericamente para comparar com a velocidade do traçador reativo obtida pelo modelo.

Enquanto a velocidade do contaminante obtida com duas porosidades aumenta com a redução da porosidade efetiva, mantendo a proporção dada pelo coeficiente de retardo (neste caso, 27.5), a velocidade do contaminante obtida com uma única porosidade não mostra variação. A razão é que o aumento da velocidade linear da água (com a redução da porosidade) é compensado pelo aumento do coeficiente de retardo, na mesma proporção, fazendo com o valor fique praticamente constante.

## CONCLUSÕES

O efeito apresentado neste artigo é inerente à formulação inadequada da equação de transporte advectivo-dispersivo envolvendo adsorção e é mais importante em casos em que as porosidades total e efetiva são significativamente diferentes. Em função desse efeito, o uso de valores menores de porosidade não necessariamente resultam em estimativas mais conservadoras da velocidade de contaminantes.

Para solucionar esse problema, quando modelos de transporte com uma única porosidade são utilizados, as seguintes medidas são recomendadas: (1) utilizar a porosidade efetiva, para que a advecção seja bem estimada; (2) multiplicar o  $K_d$  a ser

utilizado pela relação  $\phi_{ef}/\phi_T$  de forma a corrigir o coeficiente de retardo estimado pelo modelo para o uso da porosidade total. Essa solução foi testada apenas para soluções analíticas e numéricas simples com adsorção representada pela isoterma linear de Freundlich e deve ainda ser testada para outras situações, como outras reações que compõem o retardo (adsorção na fase gasosa, por exemplo). Outra situação que deve ser observada é que o Kd modificado deve refletir as zonas de diferentes porosidades em domínios heterogêneos.

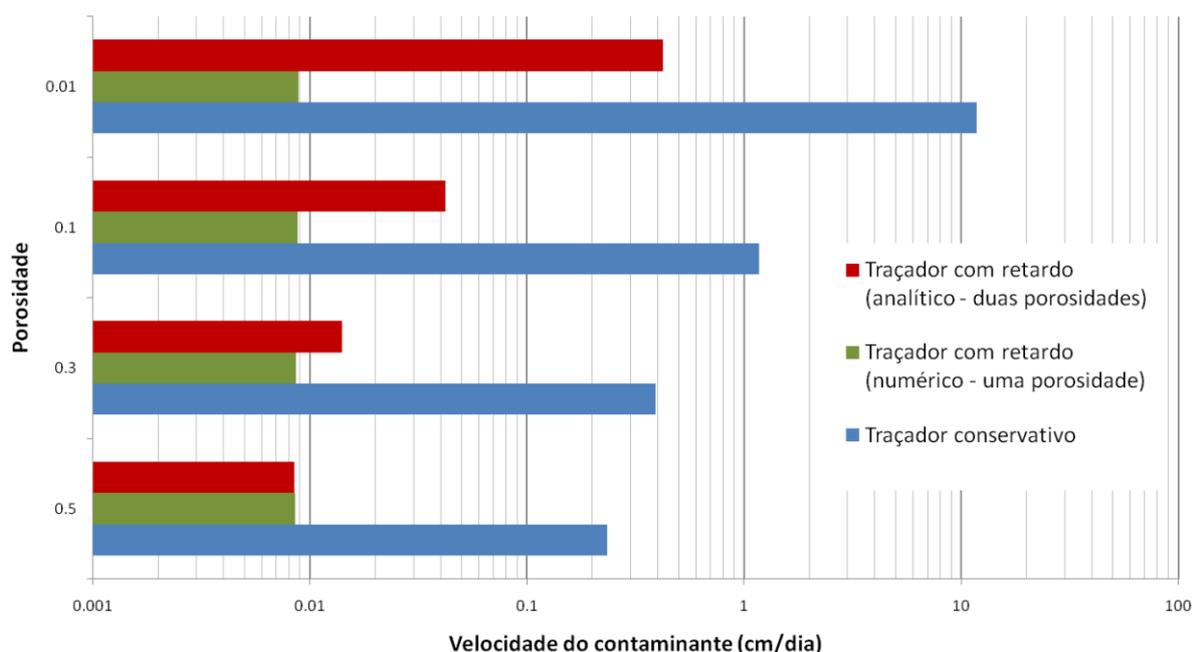


Figura 1 – Comparação de velocidades de solutos calculadas numericamente e analiticamente

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Konikow, L.F., 2011. The secret to successful solute-transport modeling. *Ground water*, vol. 49, no. 2, pp 144-159.

Simunek, J., Van Genuchten, M.T., Sejna, M., 2005. *The Hydrus 1D Software Package for Simulating the One Dimensional Movement of Water, Heat and Multiple Solutes in Variably Saturated Media*, p. 240. University of California, Riverside, California, USA.

Zheng, C., Wang, P.P. 1999. *MT3DMS: A Modular Three-Dimensional Multispecies Transport Model for Simulation of Advection, Dispersion, and Chemical Reactions of Contaminants in Groundwater Systems; Documentation and User's Guide*, US Army Corps of Engineers, Contract Report SERDP-99-1.