

doi <http://dx.doi.org/10.18265/1517-0306a2022id7355>
ARTIGO ORIGINAL

SUBMETIDO 04/11/2022


APROVADO 09/01/2023

PUBLICADO ON-LINE 05/02/2023

PUBLICADO 10/10/2024

EDITORA ASSOCIADA
Mirella Leôncio Motta e Costa

Análise do transporte reativo de espécies químicas na zona saturada do solo através da Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC)

 André Luiz da Silva ^[1] *

 Fernando Fernandes Vieira ^[2]

[1] andre.silva@ifpb.edu.br
Instituto Federal de Educação,
Ciência e Tecnologia da
Paraíba (IFPB), Santa Rita,
Paraíba, Brasil

[2] fernando.desa@servidor.uepb.edu.br
Programa de Pós-Graduação
em Ciência e Tecnologia
Ambiental (PPGCTA),
Universidade Estadual da Paraíba
(UEPB), Campina Grande,
Paraíba, Brasil

* Autor para correspondência.

RESUMO: Atualmente existe uma ampla preocupação com a contaminação das águas subterrâneas. Devido à necessidade de lidar com problemas dessa natureza, faz-se necessário o desenvolvimento de pesquisas que possibilitem o entendimento da propagação de poluentes em meios porosos, motivando a necessidade do incremento de modelos matemáticos e códigos computacionais que simulem o transporte reativo multiespécies. Neste trabalho, objetivou-se a implementação de um modelo matemático computacional para a simulação numérica da migração bidimensional transiente de poluentes na região saturada do solo, contemplando os mecanismos de advecção, sorção e reação química. O modelo matemático foi discretizado utilizando o método numérico dos volumes finitos e validado utilizando uma solução analítica para um meio semi-infinito saturado. Os resultados demonstram que uma fonte de contaminante injetada no meio poroso saturado, com geometria definida, migra gradualmente em direção à profundidade e à largura do meio, devido ao fluxo convectivo e difusivo, concomitante com retardo do poluente, induzido pela sorção na matriz sólida. A concentração de contaminantes no meio poroso saturado apresenta flutuações cíclicas, conforme dinâmica dos parâmetros e alterações dos perfis. Em relação à taxa de reação química, observou-se que quanto maior o valor do coeficiente de reação, menor a concentração e a profundidade que o poluente atinge na zona saturada. O modelo computacional implementado apresenta uma ferramenta de apoio para a avaliação de impactos ambientais, sendo possível visualizar a extensão e o comportamento de uma pluma de contaminação e realizar inúmeras operações com baixo custo computacional, produzindo resultados numéricos aproximados dos fenômenos reais.

Palavras-chave: águas subterrâneas; meios porosos; modelagem matemática; simulação numérica; volumes finitos.

Analysis of the reactive transport of chemical species in the saturated zone



of the soil through Computational Fluid Dynamics (CFD)

ABSTRACT: *Currently there is a wide concern about contamination of groundwater. Due to the need to deal with problems of this nature, it will be necessary to develop research that enables the understanding of the spread of pollutants in porous media, motivating the need for an increase in mathematical models and computational codes that simulate the multispecies reactive transport. In this work, the objective was to implement a computational mathematical model for the numerical simulation of the two-dimensional transient migration of pollutants in the saturated region of the soil, considering the mechanisms of advection, sorption and chemical reaction. The mathematical model was discretized using the finite volume numerical method and validated using an analytical solution for a semi-infinite saturated medium. The results show that a contaminant source injected into the porous saturated medium, with a defined geometry, gradually migrates in the direction of the depth and width of the medium, due to convective and diffusive flow, concurrent with pollutant retardation, induced by sorption in the solid matrix. The concentration of contaminants in the porous saturated medium presents cyclical fluctuations, according to the dynamics of the parameters and changes in the profiles. In relation to the chemical reaction rate, it was observed that, the higher the value of the reaction coefficient, the lower the concentration and the depth that the pollutant reached in the saturated zone. The implemented computational model presents a support tool for the evaluation of environmental impacts, being possible to visualize the extent and behavior of a pollution plume and perform numerous operations with low computational cost, producing numerical results approximate of the real phenomena.*

Keywords: *finite volumes; groundwater; mathematical modeling; numerical simulation; porous medium.*

1 Introdução

Com a crescente dependência dos recursos hídricos para atender às necessidades domésticas, agrícolas e industriais, o acesso à água subterrânea limpa é um tema de preocupação em todo o mundo. Isso ocorre em virtude de as atividades antropogênicas liberarem uma miríade de poluentes que eventualmente encontram seu caminho para os aquíferos e contaminam as águas subterrâneas.

Notadamente com a pressão na disponibilidade hídrica superficial e o uso acentuado das captações subterrâneas para abastecimento, cresce o risco de contaminação das unidades aquíferas. Dessa forma, faz-se necessário integrar as intervenções antrópicas com os atributos naturais para avaliar o potencial de contaminação (Costa *et al.*, 2020).

Alguns exemplos de fontes poluidoras de águas subterrâneas podem ser citados, como: lixiviação de aterros não controlados contendo resíduos industriais e/ou domésticos, infiltração de pesticidas e de fertilizantes de áreas agrícolas e vazamento de uma ampla gama de contaminantes orgânicos. É possível mencionar ainda o vazamento ou derrame de hidrocarbonetos derivados do petróleo, também responsável por contaminações de aquíferos em todo o mundo (Fetter; Boving; Kreamer, 2017).

A degradação desses meios, que são comumente empregados para o descarte dos poluentes, gera malefícios que impedem, muitas vezes, a prospecção da vida; por isso, torna-se cada vez mais necessário entender e buscar formas que amenizem os impactos gerados pelo desenvolvimento desordenado (Antenor; Szigethy, 2020).

Devido ao interesse dos pesquisadores na avaliação das taxas de propagação de poluentes em compartimentos ambientais e na remediação natural, estabeleceu-se a necessidade do desenvolvimento e implementação de modelos matemáticos e códigos computacionais para simular o transporte reativo de múltiplas espécies.

É possível observar na comunidade científica dedicada ao estudo do transporte de poluentes que, no decorrer dos novos avanços nas técnicas de modelagem, os modelos mais comumente utilizados são modelos matemáticos baseados na conservação de massa, momento e energia, exigindo soluções de equações diferenciais parciais sob o limite especificado ou condições iniciais bem definidas do sistema aquífero (Sharma *et al.*, 2020).

Sarraute, Husson e Gomes (2019) investigaram o efeito da difusividade no transporte e destino de agrotóxicos. Os autores estudaram os coeficientes de difusão de seis pesticidas em meio poroso saturado e concluíram que a difusão na água é um parâmetro importante para a estimativa do destino ambiental de pesticidas quando a advecção não é dominante.

Perina (2022) estudou uma nova solução para o transporte de soluto advectivo-dispersivo de espécies, desenvolvida para um aquífero tridimensional de espessura e largura finita, extensão semi-infinita ao longo da direção do fluxo, porosidade dupla, sorção linear de equilíbrio e decaimento de primeira ordem. Concluiu-se que o uso pretendido do modelo foi orientar a seleção de parâmetros de transporte para verificar a precisão em meios mais complexos.

Chen *et al.* (2019) apresentaram um novo modelo semianalítico para simular as migrações de plumas de contaminantes sujeitos a sorção com taxa limitada. Com ele, demonstraram que o processo de sorção com taxa limitada pode ter um efeito profundo sobre o transporte de soluto no ambiente subterrâneo.

Além do desenvolvimento de pesquisas essencialmente conceituais, o estado da arte aponta a vertente de validações e aplicações experimentais de modelos matemáticos computacionais. Como exemplo, tem-se Banaei, Javid e Hassani (2021), que propuseram um modelo numérico bidimensional para simular o fluxo de águas subterrâneas e o transporte de poluentes através de meios porosos. Além de considerarem os efeitos de sorção, retardo e volatilização no contaminante, os pesquisadores validaram o modelo com vários casos de testes analíticos e experimentais no distrito rural de Jajrud, localizado perto da cidade de Teerã, no Irã. O resultado revelou que a advecção foi considerada como principal processo no transporte de contaminantes na forma reativa e não reativa, devido à alta velocidade do fluxo hídrico nessa região.

O cenário mostra-se favorável para o desenvolvimento de pesquisas nesse tema inicialmente apresentado, fortalecendo a crescente demanda por métodos preditivos que colaborem para a dinâmica, o controle e o monitoramento dos múltiplos sistemas e matrizes ambientais.

Nesse sentido, o presente trabalho propõe a implementação de um modelo matemático computacional para a simulação numérica da propagação bidimensional transiente de poluentes na região saturada do solo, considerando os mecanismos de advecção e de sorção, além das reações químicas, com validação através de uma solução analítica.

No restante do artigo, a seção 2 apresenta uma revisão da literatura, incluindo os principais modelos matemáticos, numéricos e computacionais existentes para simular a propagação de poluentes. A seção 3 descreve a metodologia utilizada, incluindo

os principais mecanismos físicos e químicos considerados e as técnicas numéricas empregadas. A seção 4 apresenta os resultados obtidos e os discute. Por fim, a seção 5 apresenta as conclusões e sugestões para futuros trabalhos.

2 Referencial teórico

A Dinâmica dos Fluidos Computacional (DFC), ou *Computational Fluid Dynamics* (CFD), é uma área que utiliza técnicas computacionais para simulações de problemas de transferência de calor e mecânica dos fluidos (Fortuna, 2000; Versteeg; Malalasekera, 1995).

Uma forma de resolver as EDP (Equações Diferenciais Parciais) é pelo método numérico, para conseguir estas soluções, os métodos numéricos mais utilizados são o Método de Volumes Finitos (MVF), o de Elementos Finitos (MEF) e o de Diferenças Finitas (MDF). Historicamente, o MDF foi sempre empregado na área de mecânica dos fluidos, enquanto MEF foi para a área estrutural na solução de problemas de elasticidade, porém, tanto o MDF como o MEF não são conservativos em nível discreto, enquanto o MVF realiza um balanço de conservação da propriedade para cada volume elementar para obter a correspondente equação aproximada (Maliska, 2014, p. 4-5).

Sobre o Método dos Volumes Finitos, conforme Maliska (2014), qualquer método que obtenha as equações aproximadas levando em consideração e satisfazendo a conservação das propriedades em nível de volumes elementares é um MVF. O MVF tem sido amplamente empregado nas mais diversas áreas do conhecimento científico nas últimas décadas devido à sua abordagem conservativa, que favorece o desenvolvimento de programas para problemas de dinâmica dos fluidos computacional.

Os métodos numéricos e as soluções de equações diferenciais para problemas do transporte de poluentes utilizando o MVF foram estudados extensivamente por muitos pesquisadores contemporâneos, como Ahmadi, Kilanehei e Nazari-Sharabian (2021), Ahusborde *et al.* (2019), Liu *et al.* (2020), Naveen *et al.* (2019) e Rao, Zhao e Liu (2022).

Do ponto de vista acadêmico, o desenvolvimento de abordagens e formulações alternativas para um mesmo método enriquece e amplia a discussão sobre as múltiplas metodologias.

Seguindo a temática, os seguintes trabalhos podem ser mencionados: uma simulação numérica de efeitos de fraturas em diferentes escalas nas distribuições de saturação em inundações de água através do método de volumes finitos (Tang *et al.*, 2022); um estudo sobre a simulação numérica de reações fluido-fluido-sólido em meios porosos, cujas equações de transporte de soluto e reação química foram discretizadas por um esquema de volumes finitos (Liu; Mostaghimi, 2018); métodos combinados de elementos finitos e volumes finitos para fluxo e transporte em meios porosos (Moutea; Amri, 2021); a análise numérica de um esquema de volumes finitos para o controle da poluição das águas subterrâneas (Choquet; Diédhiou; El Dine, 2020); a utilização da rede neural de volumes finitos para modelagem do transporte de contaminantes de subsuperfície (Praditia *et al.*, 2021).

Em termos da matriz ambiental, a região saturada do solo é heterogênea em algum grau. Visando simular plumas de poluentes, é preciso conhecer suas características e os mecanismos que influenciam o transporte de solutos nesse meio.

Segundo Bear e Cheng (2010), o solo abaixo da superfície pode ser dividido verticalmente em várias zonas essencialmente horizontais, de acordo com a proporção do espaço vazio que é preenchido com água. Diante disso, é possível compreender duas zonas principais:

- zona saturada, onde todo o espaço vazio é ocupado por água;
- zona não saturada, ou zona de aeração ou zona vadosa, onde apenas parte do espaço vazio é ocupado por água, sendo o restante ocupado por uma fase gasosa.

Existem dois tipos diferentes de processos de transporte nesse meio: a advecção e a difusão. A advecção denota o transporte de uma partícula puramente deslocada de um lugar para outro pelo fluxo do campo. A difusão é um processo que se origina na diferença de concentração; há uma tendência para equalizar os gradientes no meio, a qual pode ser expressa pela Lei de Fick (Holzbecher, 2012).

Os efeitos dos processos químicos que podem ocorrer entre a zona saturada e a solução contaminada durante a migração de solutos em um meio poroso é de grande importância. Isso porque, de maneira geral, causam retardamento no fenômeno do transporte (Vasconcelos, 2008).

Os processos de sorção podem ser divididos em adsorção/dessorção e absorção. O primeiro refere-se ao acúmulo de contaminante na superfície do sólido (solo), enquanto a absorção implica maior ou menor penetração no sólido pelo contaminante (Bear; Cheng, 2010).

3 Modelagem matemática

Nesta seção são esclarecidas todas as descrições do desenvolvimento metodológico matemático, computacional e numérico proposto no trabalho. O ponto inicial no desenvolvimento do modelo matemático é a obtenção das equações diferenciais que descrevem o transporte de poluentes em um meio poroso.

O transporte de poluentes reativos em águas subterrâneas, supondo as interações químicas e considerando o fluxo bidimensional transiente e na direção x , foi simulado através da equação de advecção-difusão-reação, conforme decomposição de Reynolds descrita por Holzbecher (2012) (Equação 1):

$$R \frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = \frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) - kCR \quad (1)$$

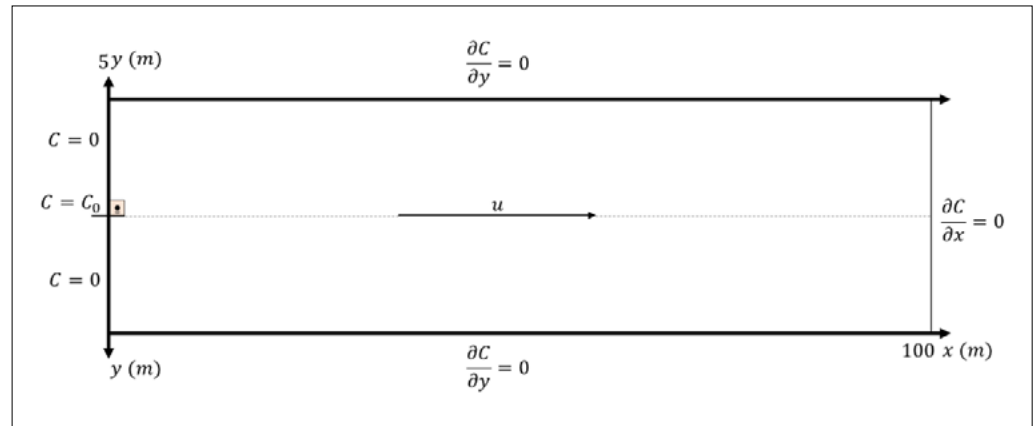
Nessa equação, C representa a concentração do poluente ($mg.L^{-1}$), uC representa a velocidade na fase líquida no meio poroso ($m.dia^{-1}$), $D_{HL}(m)$ e $D_{HT}(m)$ os coeficientes de difusão hidrodinâmica longitudinal e transversal, respectivamente, kC o coeficiente de reação química (dia^{-1}) e R o fator de retardo da pluma (adimensional).

O problema resolvido foi a solução numérica, bidimensional, transiente, com decaimento de 1ª ordem, velocidade constante e horizontal, com retardo.

O domínio estudado foi simulado em uma área conceitual e simétrica com 10 m de largura e 100 m de profundidade. Utilizou-se uma malha de cálculo cartesiana, igualmente espaçada, de 500 × 1000 volumes de controle. As condições iniciais foram especificadas em termos de concentração atribuída ao soluto $C(x,y,0) = C_0(x,y)$; as condições de contorno apresentam, na injeção do contaminante, concentrações especificadas tipo Dirichlet e fluxos especificados nos demais contornos tipo Neumann, conforme ilustrado na Figura 1.

Figura 1 ►

Geometria, condições iniciais e de contorno delineadas no modelo.
Fonte: dados da pesquisa



A obtenção das equações aproximadas pelo método dos volumes finitos se deu através da integração da equação na forma conservativa sobre o volume elementar, no tempo e no espaço, onde (e, w, n, s) são as interfaces de um volume finito bidimensional em qualquer das direções leste, oeste, norte e sul, respectivamente. Assim, a Equação 1 pode ser reescrita na forma da Equação 2:

$$\begin{aligned} & \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dt + \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial x} (uC) dx dy dt \\ &= \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] dx dy dt \quad (2) \\ & - \int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R(kC) dx dy dt \end{aligned}$$

Integrando o termo transiente da Equação 2 no tempo e no espaço, obtém-se a Equação 3, a seguir, em que C_P denota a concentração avaliada no ponto P no volume de controle e C_P^0 , no tempo inicial.

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R \frac{\partial C}{\partial t} dx dy dt \Rightarrow R \Delta x \Delta y (C_P - C_P^0) \quad (3)$$

Optou-se pela utilização do método *upwind* na avaliação do termo advectivo. Integrando o termo da velocidade da Equação 2 no tempo e no espaço, tem-se a Equação 4:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n \frac{\partial}{\partial x} (uC) dx dy dt \Rightarrow (uC|_e - uC|_w) \Delta y \Delta t \quad (4)$$

Portanto, para u velocidade de escoamento na direção de x (m.dia^{-1}), > 0 , $C_w = C_e$ e $C_e = C_p$.

Integrando o termo dispersivo na direção longitudinal e transversal partindo da Equação 2 no tempo e no espaço, tem-se a Equação 5:

$$\begin{aligned} & \int_t^{\Delta t} \int_w^e \int_s^n \left[\frac{\partial}{\partial x} \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \right) \right] dx dy dt \\ \Rightarrow & \left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta t + \left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta t \end{aligned} \quad (5)$$

Arranjando a aproximação das derivadas do termo difusivo nas faces por diferenças centrais, as Equações 6 e 7, apresentadas a seguir, foram obtidas, em que C_E , C_W , C_N e C_S representam as concentrações avaliadas nos volumes de controle adjacentes ao ponto central (C_P) em um domínio bidimensional.

$$\left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_e - D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x} \Big|_w \right) \Delta y \Delta t = D_{HL} \left(\frac{C_E - C_P}{\Delta x} - \frac{C_P - C_W}{\Delta x} \right) \Delta y \Delta t \quad (6)$$

$$\left(D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_n - D_{HT} \frac{\partial C}{\partial y} \Big|_s \right) \Delta x \Delta t = D_{HT} \left(\frac{C_N - C_P}{\Delta y} - \frac{C_P - C_S}{\Delta y} \right) \Delta x \Delta t \quad (7)$$

Integrando o termo da constante responsável pelas reações químicas no tempo e no espaço, obtém-se a Equação 8, dada por:

$$\int_t^{t+\Delta t} \int_w^e \int_s^n R(kC) dx dy dt \Rightarrow RkC_P \Delta x \Delta y \Delta t \quad (8)$$

A notação utilizada na técnica dos volumes finitos suscita uma equação geral para as concentrações, expressa pela Equação 9, onde B é o termo fonte e Sp , o termo de geração.

$$A_P C_P = A_E C_E + A_W C_W + A_N C_N + A_S C_S + B + Sp \quad (9)$$

$$\text{Na equação } A_p = \frac{R \Delta x \Delta y}{\Delta t} + u \Delta y + 2D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x} + 2D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y} + kR \Delta x \Delta y, A_E = D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x},$$

$$A_w = u \Delta y + D_{HL} \frac{\Delta y}{\Delta x}, A_N = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}, A_S = D_{HT} \frac{\Delta x}{\Delta y}, B = \frac{\Delta x \Delta y R}{\Delta t} C_p^o, S_p = kR \Delta x \Delta y.$$

A Equação 9 é válida para todos os volumes internos utilizados na discretização. Para os demais domínios, determinou-se uma equação particular. Portanto, para os volumes de controle situados nas fronteiras da geometria do modelo, a discretização foi realizada de forma análoga ao procedimento adotado anteriormente, respeitando-se, contudo, as respectivas condições de contorno descritas no início desta seção, ilustradas na Figura 1.

O *solver* empregado em todas as simulações foi o método iterativo ponto a ponto de Gauss-Seidel. Além disso, a implementação computacional foi feita através de um código escrito em linguagem de programação FORTRAN, devido a seu reconhecido desempenho nas iterações numéricas.

Para validação, a Equação 10, a seguir, foi reduzida a partir da Equação 1. O propósito dessa modificação foi comparar a solução numérica e unidimensional encontrada à solução analítica, que tem como característica um meio semi-infinito sem retardo.

$$\frac{\partial C}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(uC) = \frac{\partial}{\partial x}\left(D_{HL} \frac{\partial C}{\partial x}\right) - kC \quad (10)$$

O método foi validado utilizando como referência a solução analítica para problemas unidimensionais de transporte reativo proposta por Bear (1979), conforme Equação 11:

$$C(x, t) = \left(\frac{C_o}{2}\right) \exp\left\{\frac{x}{2\alpha_L} \left[1 - \left(1 + \frac{4k\alpha_L}{v}\right)^{\frac{1}{2}}\right]\right\} \operatorname{erfc} \quad (11)$$

Nessa equação, C_o é a concentração inicial (mg/L), α_L é a dispersividade longitudinal (m), v é a velocidade da água ($m.dia^{-1}$), k é a constante de reação química (dia^{-1}) e t é o tempo (dia).

O transporte reativo transiente, supondo decaimento de primeira ordem, sem retardo, foi resolvido numericamente, utilizando dados dos parâmetros dos mecanismos de transporte de poluentes e comparado com a resolução da solução analítica nas mesmas condições. A condição inicial é $C(x,0) = 0$ e as condições de contorno são $C(0,t) = 1000mg.L^{-1}$ e derivada nula à jusante.

Na simulação de validação do método, foi analisada a influência da velocidade do fluxo da água no transporte da pluma de contaminação na zona saturada do solo. Para essa análise, foram atribuídos diferentes valores ao fluxo (u): $0,05 (m.dia^{-1})$, $0,10 (m.dia^{-1})$, $0,15 (m.dia^{-1})$. Os outros parâmetros, relativos aos mecanismos de transporte, foram mantidos constantes, conforme a Tabela 1.

Tabela 1 ►

Dados de entrada para simulação da validação do método.
Fonte: dados da pesquisa

Parâmetro	Valor	Descrição	Unidade
nx	1000	Número de volumes	x
lx	100	Distância	m
C_0	1000	Concentração inicial	$mg.L^{-1}$
k	0,010	Taxa de reação química	dia^{-1}
α	0,60	Dispersividade	m
t	120	Tempo da simulação	dia

Após a modelagem na validação do método, objetivou-se verificar a influência dos parâmetros empregados na simulação numérica representada pela equação geral do transporte reativo de contaminantes. Nesse sentido, foram realizadas análises paramétricas.

Foram simulados para todos os casos, utilizando quatro tempos distintos: 60 dias, 90 dias, 120 dias e 150 dias, além do passo temporal (t) igual a 1 dia.

Os resultados foram representados por gráficos na seção longitudinal, ou seja, na profundidade do aquífero, e na seção transversal, que corresponde à largura. Foi analisada a influência e a relevância de cada parâmetro em relação aos demais e ao transporte do contaminante no meio poroso. Os parâmetros analisados foram os seguintes: coeficiente de retardo da pluma (R), coeficiente de reação química (k), velocidade do fluxo da água (u).

Para estudar o efeito da variação das propriedades citadas, foi utilizado um planejamento experimental paramétrico, no qual foram simulados valores representativos para cada parâmetro, conforme os dados da Tabela 2, em que os múltiplos casos analisaram a influência das variáveis. O Caso (1) avaliou o retardo da pluma, o Caso (2), as reações químicas e o Caso (3), a velocidade do fluxo.

Tabela 2 ►

Dados da análise paramétrica.
Fonte: dados da pesquisa

Caso(s)	Retardo (R) -	Reações químicas (k) dia^{-1}	Velocidade (u) $m.dia^{-1}$
(1) Retardo da pluma (R)	1,00	0,000	0,05
	2,00	0,000	0,05
(2) Reações químicas (k)	1,00	0,010	0,05
	1,00	0,000	0,05
(3) Velocidade do fluxo (u)	1,00	0,000	0,10
	1,00	0,000	0,05

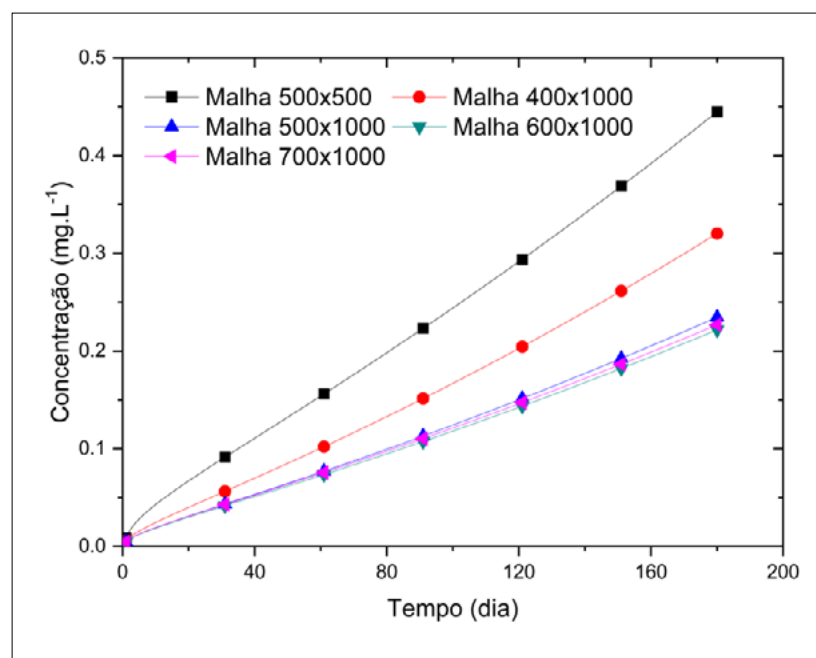
No estudo paramétrico, considerou-se uma seção hipotética vertical e horizontal da zona saturada. O plano longitudinal foi representado a uma distância de 0,49 m após a zona de lançamento; já o perfil transversal, na posição de 4,95 m após a origem da poluição. Dessa forma, foi possível verificar o comportamento gradativo do poluente em função dos mecanismos de transporte na zona saturada do solo.

A convergência do modelo foi alcançada atingindo a estabilidade nas simulações numéricas a partir da tolerância relativa de 1×10^{-10} (adimensional). Portanto, essa foi a tolerância utilizada devido à estabilidade, à convergência e ao custo computacional não proibitivo.

4 Resultados e discussões

O primeiro resultado denota a análise de convergência da malha. A malha igualmente espaçada de cálculo cartesiano selecionada para o trabalho foi a de 500×1000 nós ou volumes de controle. Essa escolha está fundamentada na análise do perfil das concentrações médias do poluente em função do tempo de simulação em diferentes malhas testadas. Conforme ilustrado na Figura 2, a malha de 500×1000 apresenta estabilidade diante de malhas superiores, o que justifica sua escolha.

Figura 2 ►
Critério de convergência da malha.
Fonte: dados da pesquisa



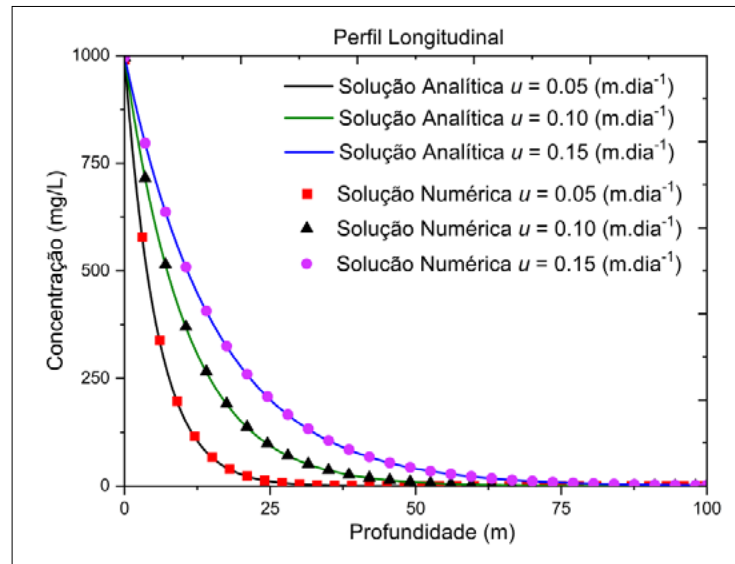
A primeira simulação, conforme descrição metodológica, teve o intuito de validar o modelo, comparando os resultados numéricos com a solução analítica. Nesse sentido, foi verificada a influência da velocidade de escoamento (u), considerando os três valores mencionados: $0,05 \text{ (m.dia}^{-1}\text{)}$, $0,10 \text{ (m.dia}^{-1}\text{)}$ e $0,15 \text{ (m.dia}^{-1}\text{)}$, deixando os outros parâmetros constantes, conforme a Tabela 1 apresentada anteriormente.

A solução obtida é ilustrada na Figura 3. Nela, é possível observar que os resultados numéricos concordam adequadamente com as soluções analíticas. O perfil analisado considera a concentração longitudinal do poluente em função da influência da velocidade do fluido na zona saturada do solo (u).

Figura 3 ►

Comparação entre as soluções analítica e numérica para o perfil de concentração longitudinal em função da influência de u .

Fonte: dados da pesquisa



Em relação aos resultados da análise paramétrica, o primeiro parâmetro analisado foi a influência do efeito do fator de retardo da pluma (R). A análise foi feita a partir das simulações, considerando isotermas de sorção linear com valores assumidos, conforme descrito no Caso (1), apresentado na Tabela 2. Com isso, demonstrou-se o comportamento da pluma de contaminação nas seções longitudinal, transversal e no contorno do aquífero poluído.

Figura 4 ▼

Influência do retardo no perfil de concentração longitudinal.

Fonte: dados da pesquisa

Foi observado que tanto na seção longitudinal, ilustrada na Figura 4, quanto na seção transversal, apresentada na Figura 5, existe uma notória tendência de a pluma de contaminação ficar mais próxima da fonte poluidora com o acréscimo do fator de retardo, atribuído ao aumento da capacidade do solo em adsorver o contaminante. Ou seja, quanto maior o fator de retardo, menor a profundidade alcançada pelo contaminante e menor a concentração do poluente no corpo hídrico subterrâneo.

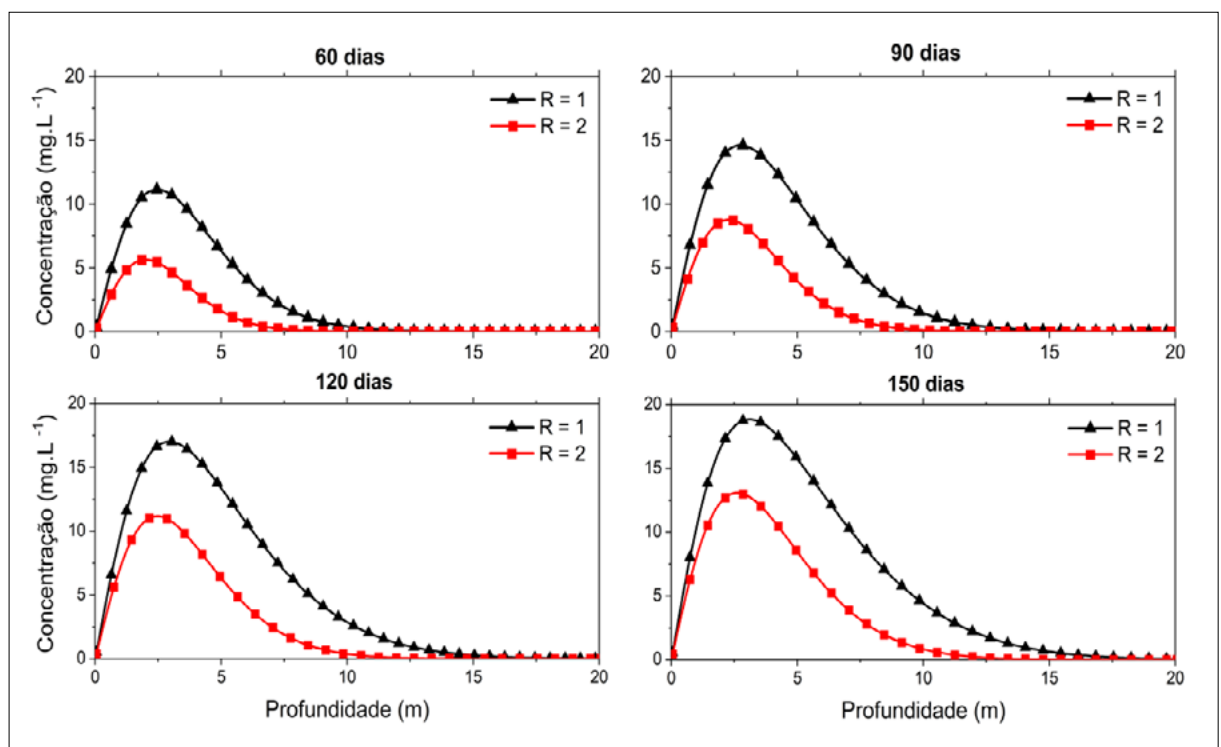
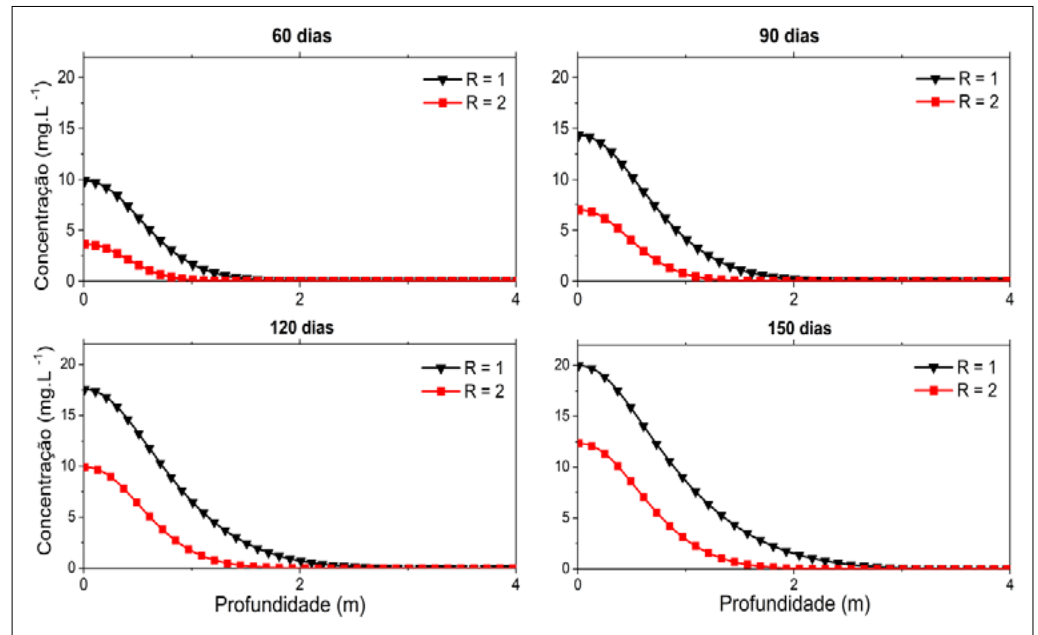
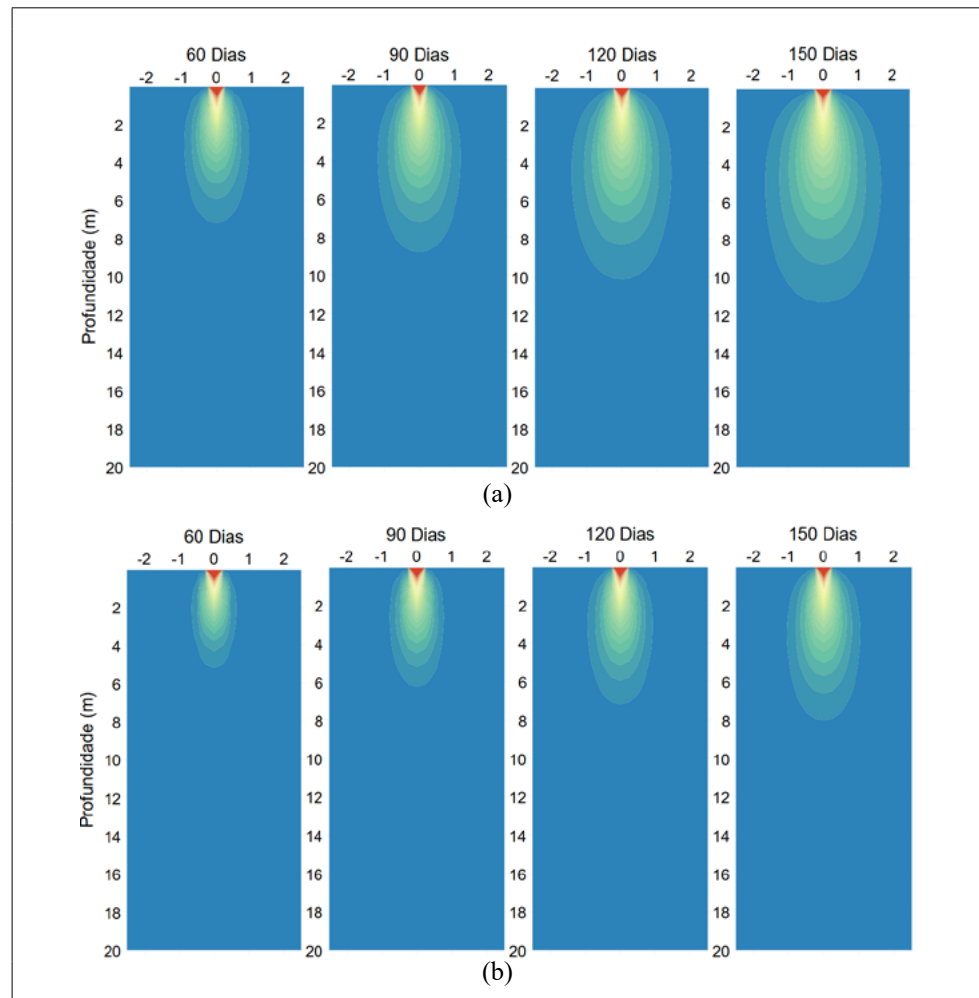


Figura 5 ►
Influência do retardo no perfil de concentração transversal.
Fonte: dados da pesquisa



Em seguida foram representados campos de concentração do contaminante, ilustrados na Figura 6, descrevendo o comportamento qualitativo da pluma de contaminação de forma gradativa em relação ao tempo, e a influência do fator de retardo na zona saturada do solo.

Figura 6 ►
Influência do coeficiente de retardo sobre o contorno da pluma de contaminação transiente. (a) Retardo da pluma (sem retardo).
(b) Retardo da pluma ($R=2$).
Fonte: dados da pesquisa



Buscou-se avaliar o comportamento do contaminante reativo na zona saturada do solo, comparando duas hipóteses descritas no Caso (2), conforme Tabela 2, com o poluente. Uma das simulações apresentando uma taxa de reação química (k) de 0,010 (dia⁻¹) e a outra simulação com o poluente inerte.

Foi observado nos perfis longitudinal e transversal – ilustrados nas Figuras 7 e 8, respectivamente – que quanto maior o coeficiente de reação química, menor foi a concentração e a profundidade que o poluente atingiu, em virtude de os processos químicos retardarem o fenômeno de transporte na zona saturada.

Figura 7 ►

Influência da constante cinética na dinâmica transiente do perfil de concentração longitudinal.
Fonte: dados da pesquisa

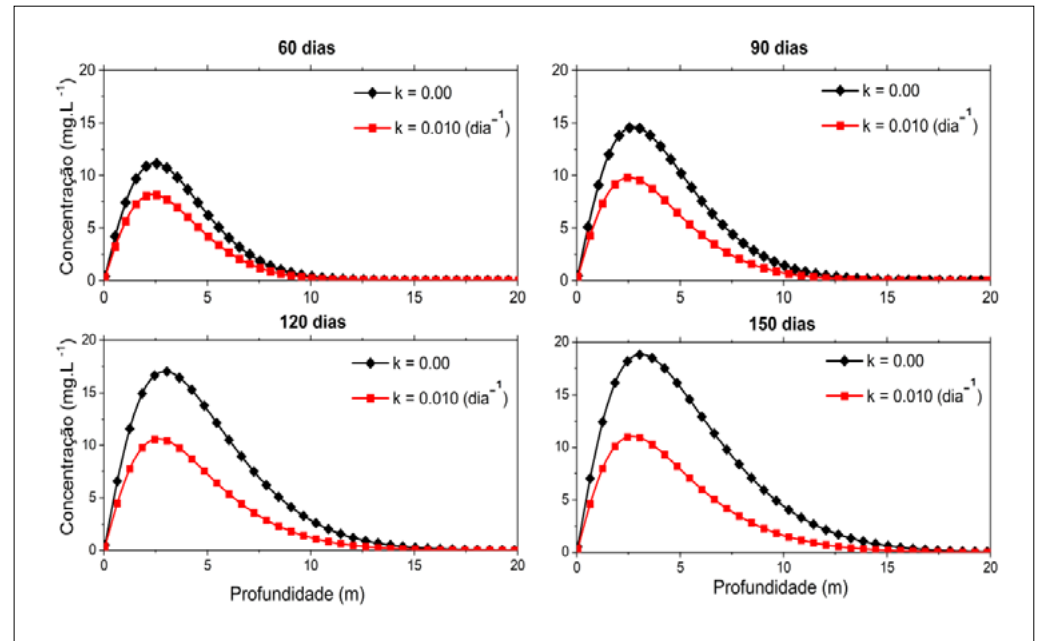


Figura 8 ►

Influência da constante cinética na dinâmica transiente do perfil de concentração transversal.
Fonte: dados da pesquisa

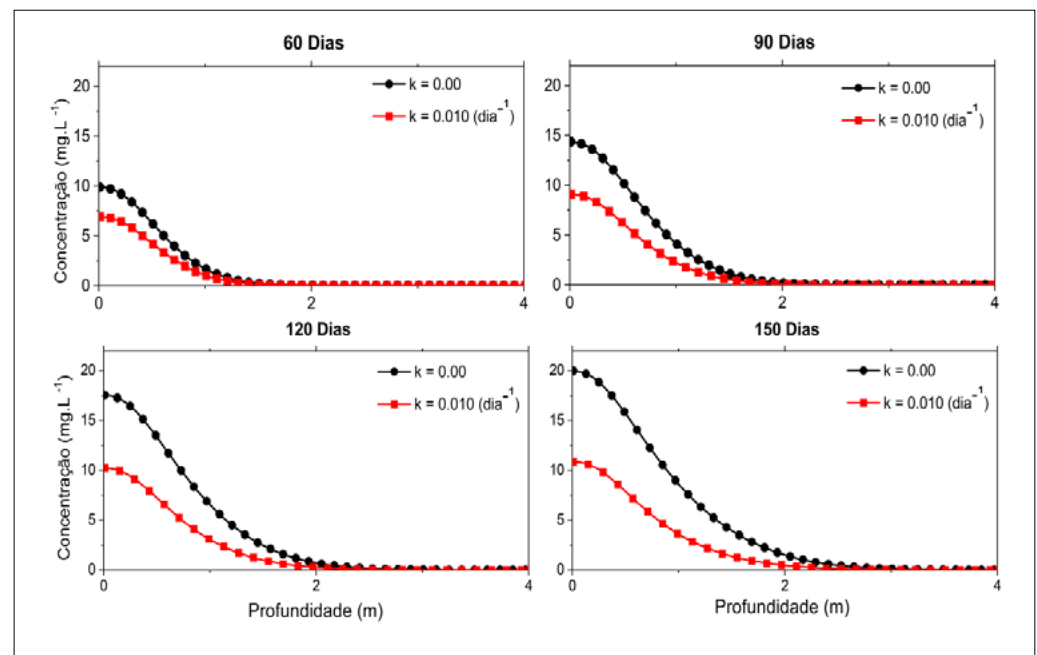
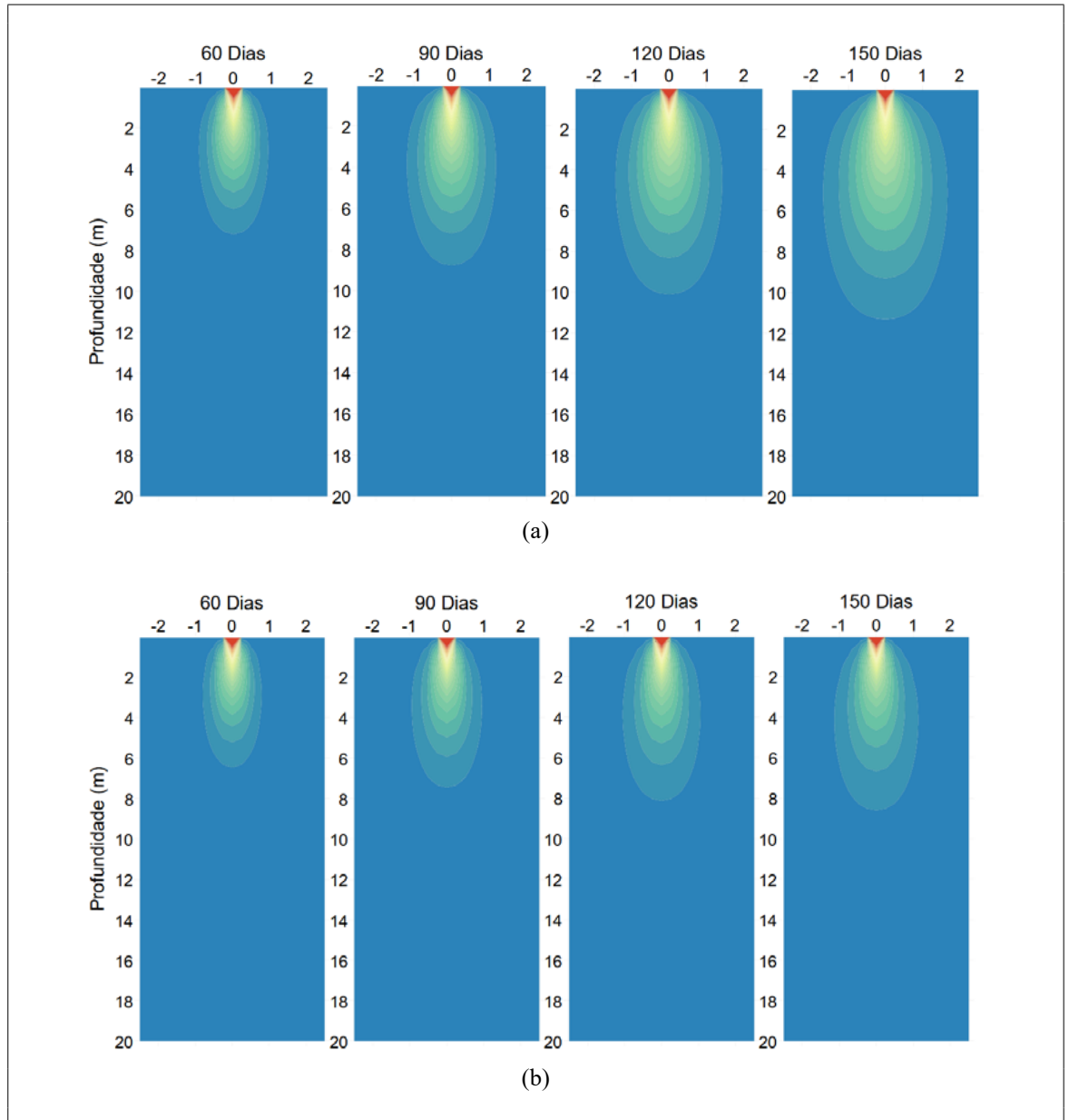


Figura 9 ▼

Em seguida, foram representados contornos de concentração do contaminante na Figura 9, ilustrando a dinâmica qualitativa do coeficiente de reação química no aquífero simulado.

Influência da constante cinética de reação química sobre o contorno da pluma de contaminação transiente. (a) sem reação. (b) $k = 0,010$ (dia⁻¹).

Fonte: dados da pesquisa



Para avaliar a importância da velocidade (u) na migração de solutos em meios porosos saturados, o coeficiente foi modificado de duas formas: com velocidade do fluxo de água a 0,05 (m.dia⁻¹) e a 0,10 (m.dia⁻¹), conforme apresentado no Caso (3) da Tabela 2. Nas duas situações, foram investigados o comportamento da pluma de contaminação nas seções longitudinal e transversal e o desempenho qualitativo da pluma do poluente no aquífero. A simulação foi realizada sem taxa de reação química e fator de retardo, e os outros parâmetros ficaram constantes, conforme os dados disponíveis na Tabela 2.

Figura 10 ▼
Influência da velocidade na seção longitudinal.
Fonte: dados da pesquisa

Os perfis de concentração longitudinal, transversal e o contorno de pluma estão apresentados nas Figuras 10, 11, e 12, respectivamente. Foi observado que o aumento da velocidade de escoamento da água acarreta a ampliação da distância percorrida pela pluma de contaminação no meio poroso, assim como o aumento na concentração do poluente no aquífero subterrâneo.

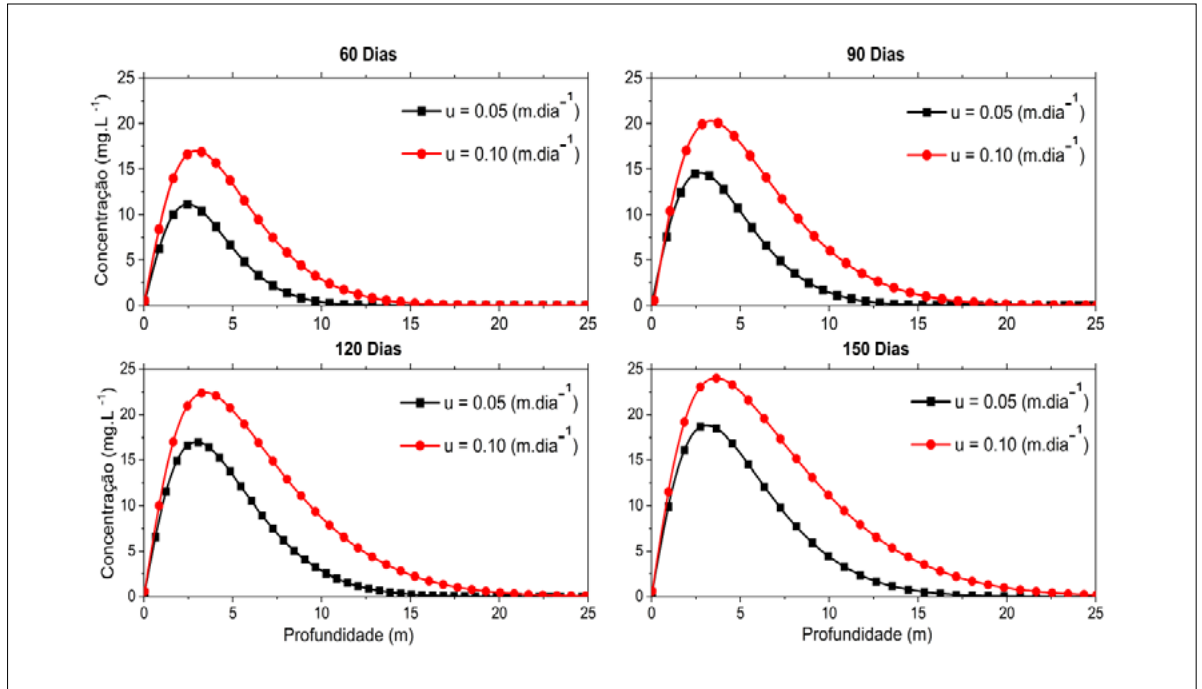


Figura 11 ▼
Influência da velocidade na seção transversal.
Fonte: dados da pesquisa

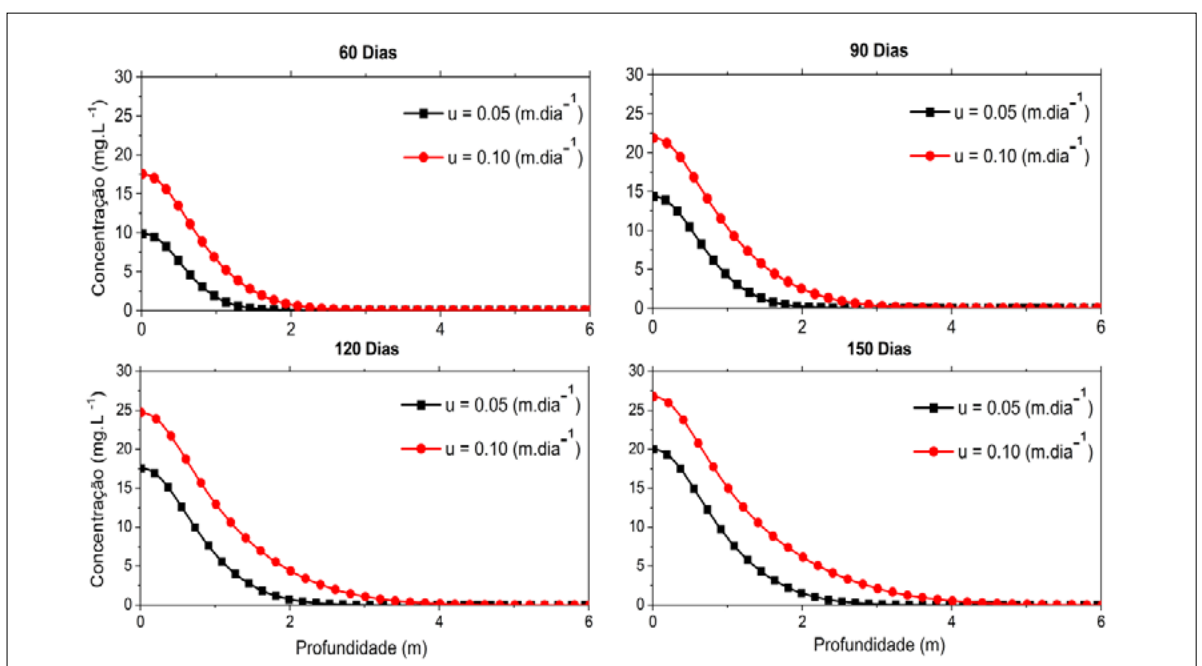


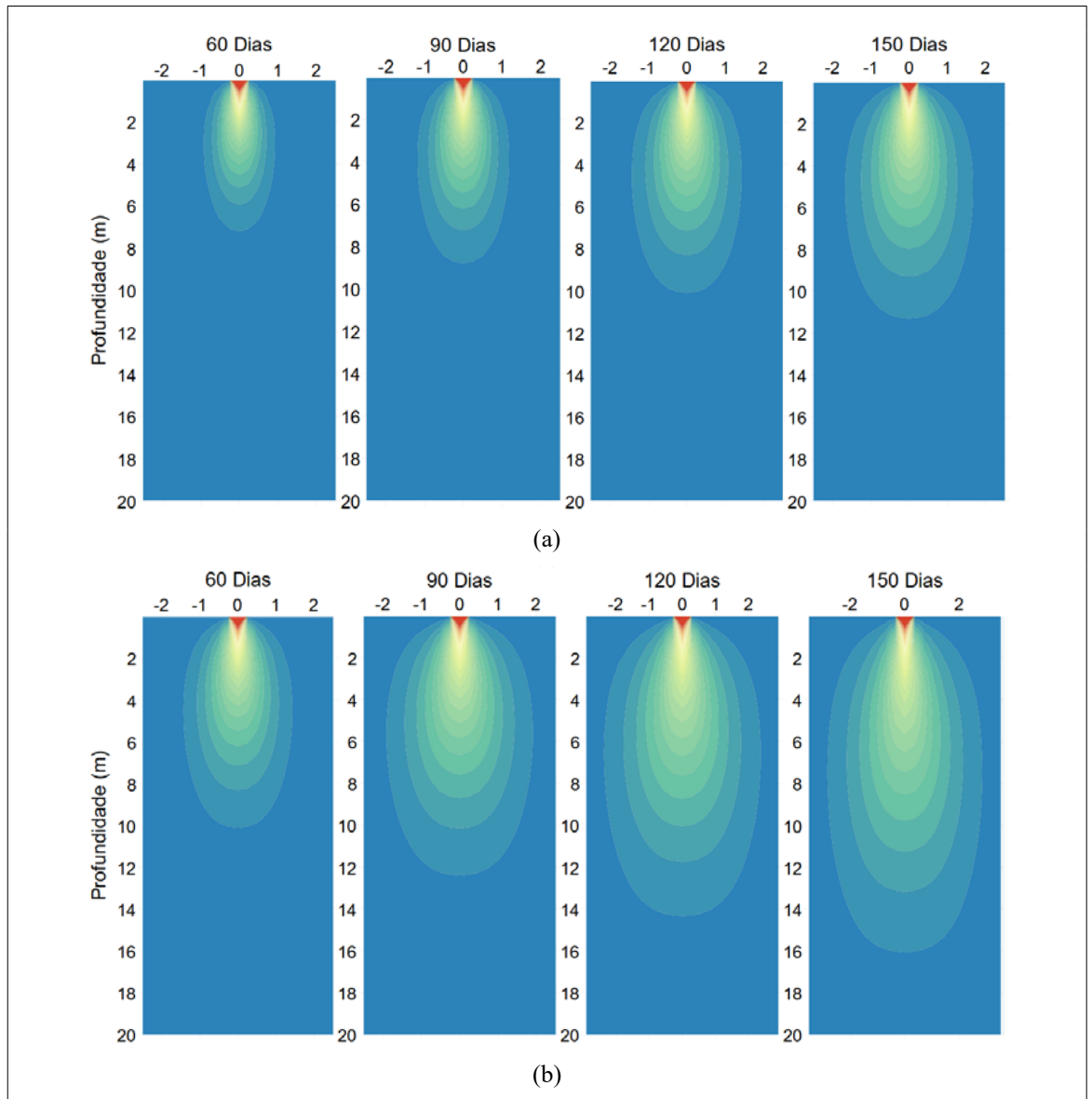
Figura 12 ▼

Influência da velocidade no contorno da pluma de contaminação.

(a) $u=0,05\text{m.dia}^{-1}$.

(b) $u=0,10\text{m.dia}^{-1}$.

Fonte: dados da pesquisa



Foi observado que tanto na seção longitudinal quanto na seção transversal o aumento da velocidade da água ocasionou um maior alcance do contaminante, atingindo maiores profundidades e gerando maiores impactos na zona saturada do solo simulado devido à predominância da advecção no meio.

A Figura 12, apresentada anteriormente, ilustra o comportamento qualitativo das plumas de contaminação em comparação com as duas simulações citadas, permitindo verificar o desempenho da influência da velocidade (u) dentro da zona saturada do solo no decorrer do tempo de exposição no corpo hídrico subterrâneo.

[1] Configurações da máquina utilizada nas simulações:
Processador: Core(TM) i7-7700HQ CPU @ 2.80GHz;
Memória RAM: 16.0 GB.

O custo computacional médio utilizado em cada simulação deste trabalho foi de 22 min¹, demonstrando excelentes resultados, visto que a predição máxima foi de 150 dias em cada análise completa, desde o lançamento do poluente no aquífero.

5 Considerações finais

Neste estudo, um modelo numérico foi apresentado para realizar simulações do transporte de contaminantes em condições transitórias, através de meios porosos saturados. Dentro do modelo, as equações foram resolvidas numericamente usando o Método dos Volumes Finitos, que apresentou um desempenho satisfatório na discretização do problema do transporte bidimensional, transiente e reativo.

Os resultados apresentados foram validados numericamente utilizando uma solução analítica para um meio semi-infinito saturado e apresentaram coerência física, sendo passíveis de comparações numéricas e experimentais.

O desempenho e a precisão do modelo foram examinados com sucesso por múltiplos casos no teste paramétrico, o que indicou que o modelo numérico atual tem capacidade suficiente de previsibilidade da migração de contaminantes através de aquíferos, incluindo os mecanismos de advecção, retardo e reações químicas.

Os estudos realizados demonstram uma redução significativa no espalhamento da pluma de contaminação quando ocorre o aumento dos coeficientes de retardo (R) e de reação química (k) no aquífero, o que ocorre devido ao acúmulo na superfície do meio poroso e à degradação do contaminante respectivamente, influenciando diretamente no nível do impacto causado pela propagação na zona saturada do solo.

As análises citadas anteriormente podem ser agravadas quando a velocidade de fluxo (u) for elevada. Ou seja, quando a advecção for predominante, ocorrerá uma maior propagação do poluente na zona saturada do solo nos casos estudados, ocasionando maiores impactos e consequências deletérias no corpo hídrico subterrâneo.

Os resultados sugerem que o gerenciamento e a mitigação da migração de poluentes em aquíferos podem ser verificados por simulações numéricas, motivando o avanço do método em trabalhos futuros.

Agradecimentos

Ao Instituto Federal de Educação, Ciência e Tecnologia da Paraíba, Campus Santa Rita, pela concessão de afastamento para cursar o doutoramento.

Financiamento

Esta pesquisa não recebeu financiamento externo.

Conflito de interesses

Os autores declaram não haver conflito de interesses.

Contribuições ao artigo

SILVA, A. L.; VIEIRA, F. F.: concepção ou desenho do estudo/pesquisa; análise e/ou interpretação dos dados; revisão final com participação crítica e intelectual no manuscrito. Todos os autores participaram da escrita, discussão, leitura e aprovação da versão final do artigo.

Referências

AHMADI, H.; KILANEHEI, F.; NAZARI-SHARABIAN, M. Impact of pumping rate on contaminant transport in groundwater – A numerical study. **Hydrology**, v. 8, n. 3, 103, 2021. DOI: <https://doi.org/10.3390/hydrology8030103>.

AHUSBORDE, E.; AMAZIANE, B.; EL OSSMANI, M.; MOULAY, M. Numerical modeling and simulation of fully coupled processes of reactive multiphase flow in porous media. **Journal of Mathematical Study**, v. 52, n. 4, p. 359-377, 2019. DOI: <https://doi.org/10.4208/jms.v52n4.19.01>.

ANTENOR, S.; SZIGETHY, L. Resíduos sólidos urbanos no Brasil: desafios tecnológicos, políticos e econômicos. Centro de Pesquisa em Ciência, Tecnologia e Sociedade. **Center for Research in Science, Technology and Society – IPEA**, 7 set. 2020. Disponível em: <https://www.ipea.gov.br/cts/en/topics/217-residuos-solidos-urbanos-no-brasil-desafios-tecnologicos-politicos-e-economicos>. Acesso em: 18 jan. 2022.

BANAEI, S. M. A.; JAVID, A. H.; HASSANI, A. H. Numerical simulation of groundwater contaminant transport in porous media. **International Journal of Environmental Science and Technology**, v. 18, n. 1, p. 151-162, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13762-020-02825-7>.

BEAR, J. **Hydraulics of groundwater**. New York: McGraw-Hill International Book Company, 1979.

BEAR, J.; CHENG, A. **Modeling groundwater flow and contaminant transport**. Berlin: Springer Science & Business, 2010.

CHEN, J.-S.; HO, Y.-C.; LIANG, C.-P.; WANG, S.-W.; LIU, C.-W. Semi-analytical model for coupled multispecies advective-dispersive transport subject to rate-limited sorption. **Journal of Hydrology**, v. 579, 124164, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.jhydrol.2019.124164>.

CHOQUET, C.; DIÉDHIU, M. M.; EL DINE, H. N. Numerical analysis of a finite volume scheme for the optimal control of groundwater pollution. *In*: KLÖFKORN, R.; KEILEGAVLEN, E.; RADU, F. A.; FUHRMANN, J. (ed.). **Finite volumes for complex applications IX - methods, theoretical aspects, examples: FVCA 9**, Bergen, Norway, June 2020. Cham: Springer, 2020. p. 467-475. (Springer Proceedings in Mathematics & Statistics, v. 323). DOI: https://doi.org/10.1007/978-3-030-43651-3_43.

COSTA, C. W.; LORANDI, R.; DI LOLLO, J. A.; SERIKAWA, V. S. Combinação de atributos naturais e antrópicos na definição do potencial de contaminação de

aquíferos, Sudeste do Brasil. **Sociedade & Natureza**, v. 32, p. 603-619, 2020. DOI: <https://doi.org/10.14393/SN-v32-2020-56221>.

FETTER, C. W.; BOVING, T.; KREAMER, D. **Contaminant Hydrogeology**. 3rd. ed. Long Grove, Illinois: Waveland Press, 2017.

FORTUNA, A. O. **Técnicas computacionais para dinâmica dos fluidos**. 2. ed. São Paulo: EdUSP, 2000. (Coleção Acadêmica, v. 30).

HOLZBECHER, E. **Environmental modeling: using MATLAB**. Berlin: Springer, 2012. DOI: <https://doi.org/10.1007/978-3-642-22042-5>.

LIU, M.; MOSTAGHIMI, P. Numerical simulation of fluid-fluid-solid reactions in porous media. **International Journal of Heat and Mass Transfer**, v. 120, p. 194-201, 2018. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.ijheatmasstransfer.2017.11.141>.

LIU, Y. Y.; YANG, L. M.; SHU, C.; ZHANG, H. W. Three-dimensional high-order least square-based finite difference-finite volume method on unstructured grids. **Physics of Fluids**, v. 32, n. 12, 123604, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1063/5.0032089>.

MALISKA, C. R. **Transferência de calor e mecânica dos fluidos computacional**. 2. ed. Rio de Janeiro: Livros Técnicos e Científicos, 2014.

MOUTEA, O. E.; AMRI, H. E. Combined mixed finite element and nonconforming finite volume methods for flow and transport in porous media. **Analysis**, v. 41, n. 3, p. 123-144, 2021. DOI: <https://doi.org/10.1515/anly-2018-0019>.

NAVEEN, J.; JAWAID, M.; VASANTHANATHAN, A.; CHANDRASEKAR, M. Finite element analysis of natural fiber-reinforced polymer composites. In: JAWAID, M.; THARIQ, M.; SABA, N. (ed.). **Modelling of damage processes in biocomposites, fibre-reinforced composites and hybrid composites**. Sawston: Woodhead Publishing, 2019. p. 1-18. DOI: <https://doi.org/10.1016/B978-0-08-102289-4.00009-6>.

PERINA, T. Semi-analytical three-dimensional solute transport of sequentially decaying species with mobile-immobile regions, sorption, decay, and arbitrary transient source. **Mathematical Geosciences**, v. 54, p. 745-762, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1007/s11004-021-09975-5>.

PRADITIA, T.; KARLBAUER, M.; OTTE, S.; OLADYSHKIN, S.; BUTZ, M. V.; NOWAK, W. Finite volume neural network: modeling subsurface contaminant transport. In: ICLR SIMDL WORKSHOP, 2021, On-line. **Proceedings** [...]. [S.l.]: arXiv, 2021. p. 1-11. DOI: <https://doi.org/10.48550/arXiv.2104.06010>.

RAO, X.; ZHAO, H.; LIU, Y. A meshless numerical modeling method for fractured reservoirs based on extended finite volume method. **SPE Journal**, v. 27, n. 6, p. 3525-3564, 2022. <https://doi.org/10.2118/210581-PA>.

SARRAUTE, S.; HUSSON, P.; GOMES, M. C. Effect of the diffusivity on the transport and fate of pesticides in water. **International Journal of Environmental Science and Technology**, v. 16, p. 1857-1872, 2019. DOI: <https://doi.org/10.1007/s13762-018-1815-7>.

SHARMA, P. K.; MAYANK, M.; OJHA, C. S. P.; SHUKLA, S. K. A review on groundwater contaminant transport and remediation. **ISH Journal of Hydraulic Engineering**, v. 26, n. 1, p. 112-121, 2020. DOI: <https://doi.org/10.1080/09715010.2018.1438213>.

TANG, C.; ZHOU, W.; DU, Z.; CHEN, Z.; WEI, J. Numerical simulation of different-scale fracture effects on saturation distributions in waterflooding via the finite volume method. **Energy**, v. 244, Part A, 122573, 2022. DOI: <https://doi.org/10.1016/j.energy.2021.122573>.

VASCONCELOS, A. **Transporte de contaminantes em meios porosos saturados e não saturados**. Estudo de caso: vazamento de gasolina. 2008. 189 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Geotécnica) – Universidade Federal de Ouro Preto, Ouro Preto, 2008. Disponível em: <https://www.repositorio.ufop.br/handle/123456789/2310>. Acesso em: 18 jan. 2022.

VERSTEEG, H. K.; MALALASEKERA, W. **An introduction to computational fluid dynamics: The finite volume method**. Harlow: Longman Scientific and Technical, 1995.