

MODELAGEM DO TRANSPORTE DE TRICLOROETILENO EM SOLO PROVENIENTE DE VAZAMENTO DE COMBUSTÍVEL UTILIZANDO PHYTON

Larisa Janyele Cunha Miranda ¹
Leonete Cristina de Araújo Ferreira Medeiros Silva ²

INTRODUÇÃO

O crescimento das atividades humanas, o contínuo aumento da população e sua concentração espacial nos centros urbanos nas últimas décadas promoveram o desenvolvimento para a sociedade. Por outro lado, essas atividades trouxeram impactos negativos ao meio ambiente, causando processos poluidores do solo. Conforme o Manual de Saneamento da Fundação Nacional de Saúde (FUNASA, 2016), a poluição do solo pode ser definida como sendo a alteração prejudicial de suas características naturais, com eventuais alterações na sua estrutura física, advinda de processos naturais. Já a contaminação do solo pode ser causada por materiais contaminados ou em decomposição existentes nos resíduos sólidos, algumas substâncias químicas perigosas, agrotóxicos, de origem orgânica ou inorgânica.

Os resíduos sólidos têm uma grande parcela de contribuição de contaminantes no solo. No Brasil, até o ano de 2000 cerca de 95% dos municípios declararam realizar sua disposição em locais que não tinham qualquer controle dos contaminantes liberados no solo, água e ar (IBGE, 2002). No ano de 2010 foi criada a Lei nº 12.305/2010 (BRASIL, 1998), também conhecida como Política Nacional de Resíduos Sólidos (PNRS), que trata sobre as diretrizes relativas à gestão integrada e ao gerenciamento de resíduos sólidos, incluindo os perigosos, as responsabilidades dos geradores e do poder público e aos instrumentos econômicos aplicáveis.

Apesar da criação do PNRS, as cidades brasileiras ainda apresentam um quadro que não é considerado de qualidade em relação à coleta e à destinação dos seus resíduos, no qual 90% de cidades que apresentam coleta de lixo, somente cerca de 59% contêm aterro sanitário (APRELPE, 2010), fator esse alarmante, visto que os resíduos quando dispostos de maneira incorreta podem vir a contaminar o solo e a água, seja ela subterrânea ou superficial.

Outra fonte de contaminação do solo é a atividade da indústria petrolífera, devido à possibilidade de vazamentos no subsolo, ocorrendo principalmente no transporte de combustíveis por dutos, vazamentos de tanques de armazenamento subterrâneos e acidentes decorrentes da exploração petrolífera (MARQUES & GUERRA, 2008). Somente no ano de 2007 foram relatados cerca de 7.550 casos de vazamentos em tanques de armazenamento no Brasil (ANP, 2010).

A utilização dos agrotóxicos é mais uma fonte de possível contaminação do solo, pois devido ao crescimento acelerado da população viu-se a necessidade de um aumento na produção de alimentos. Assim, a utilização de agrotóxicos foi adotada como um dos principais agentes para o aumento da produção, e é utilizado de forma que aumente o

¹ Engenheira Civil. Universidade Federal Rural do Semi-árido – UFERSA, larisajcmiranda@hotmail.com;

² Mestre em Engenharia Sanitária e Ambiental, Engenheira Civil. Universidade Federal Rural do Semi-árido – UFERSA, Campus Caraúbas, leonete.cristina@ufersa.edu.br.

suprimento de nutrientes para o solo, realize o controle de pragas e doenças e também para que seja feita a regularização do pH do solo (ARAÚJO & MONTEIRO, 2007).

A contaminação do solo e da água pode causar danos que venham a ser de difícil reversão, sendo necessário, em alguns casos, anos para que determinada área se recupere dos estragos causados pelos diferentes tipos de poluentes que a mesma foi exposta. Esse tempo de recuperação dependerá do tamanho de área atingida e também do tipo de contaminante. Atualmente existem meios de remediação para a recuperação dos solos, alguns dos mais utilizados são: a lavagem do solo, biorremediação e fitorremediação. A escolha do tratamento dependerá do solo a ser tratado e do contaminante a ser retirado do mesmo, podendo ser eliminado até 92% de todo o poluente presente no local, porém a retirada de tal porcentagem pode chegar a 30 anos (AVARES, 2013).

O estudo dessa contaminação passa pela compreensão dos fenômenos de transporte dos contaminantes ao longo do perfil do solo, abrangendo as áreas de engenharia geotécnica, hidrológica, sanitária e ambiental. Na atualidade existem programas que permitem analisar a distribuição de contaminantes no solo e na água, como o ModFlow que gera projetos tridimensionais de fluxo de água subterrânea e transporte de contaminantes (AQUAVEO, 2019), o FEFLOW que semelhante ao anterior também gera projetos em 3D do fluxo de contaminantes na água e no solo (MIKE, 2019). Outro programa com grande utilização é o ECLIPSE Blackoli que também gera projetos tridimensionais, porém de contaminação referente a derramamentos de óleos negros de uso geral (NEXT.ECLIPSE, 2019). Esses programas têm em comum não somente a sua utilidade, como também o seu elevado custo de utilização, uma vez que a licença para utilizar esses programas gira em torno de 600 US\$ a 13.000 US\$ (AQUAVEO, 2019; MIKE, 2019; NEXT.ECLIPSE, 2019).

Na busca de soluções de engenharia uma das perspectivas configura-se como a utilização de softwares gratuitos ou o desenvolvimento de programas que permitam simulações precisas e de baixo custo. Nesse contexto, o presente trabalho, surgiu com a proposta de desenvolver um código computacional em linguagem livre, a partir de dados geotécnicos e das características de contaminantes, para simular a movimentação dos poluentes no solo. Para tanto, foi escolhida a modelagem do transporte unidimensional de contaminantes de água subterrâneas em uma dimensão (1D), cuja validação foi feita baseando-se na resposta fornecida pela plataforma online “Groundwater contaminant transport. 1-D step injection (GCT-1D)”, desenvolvida pelo LMNO Engineering, Research, and Software, Ltd, de propriedade de Ken Edwards (EDWARDS, 2003).

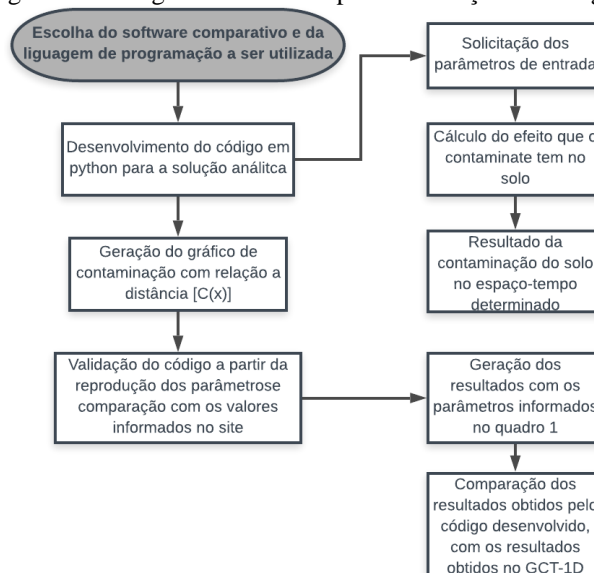
O programa foi elaborado na linguagem de programação Phyton, denominada como linguagem de script orientada a objetos, possuindo uma estrutura de dados de alto nível e uma abordagem eficaz para programação orientada a objetos (LUTZ & ASCHER, 2007). Apresenta atributos de linguagem que o tornam ideais para a utilização em questão, sendo eles a multiplataforma, portabilidade, software livre, extensibilidade, orientação a objetos, código legível, flexibilidade, operação dos arquivos e uso interativo (COELHO, 2007).

Portanto, o objetivo deste trabalho foi desenvolver um código computacional em linguagem Phyton para simular o transporte de contaminantes de injeção 1-D no solo, tendo como objetivo específico a obtenção de um código para a resolução analítica verificado através do modelo GCT-1D. O contaminante estudado foi o tricloroetileno, cujo emprego pode ocorrer como desengraxante de metais, intermediário químico, retardante químico, na indústria têxtil, como solvente ou em misturas (adesivos, lubrificantes, tintas, vernizes, pesticidas e limpeza de metais frios).

METODOLOGIA (OU MATERIAIS E MÉTODOS)

O presente trabalho teve como fase inicial uma pesquisa bibliográfica a fim de escolher o melhor método para a elaboração do trabalho. O esquema da Figura 1 apresenta os passos seguidos para o desenvolvimento do código computacional.

Figura 1: Fluxograma descritivo para elaboração do código.



Os parâmetros utilizados para os cálculos de validação do código foram similares aos apresentados pelo GTC- 1D e que estão expressos na quadro 1.

Quadro 1. Valores utilizados para validação do código.

Componente	Valores
Tempo, t (dia)	1000
Distância, x (m)	30
Concentração injetada, C_0 (mg/l)	10000
Duração da injeção, T (dia)	100
Dispersividade, a (m)	10
Coefficiente de difusão molecular, D^* (m ² /s)	1.0×10^{-9}
Condutividade hidráulico, K (cm/s)	0.001
Gradiente hidráulico, dh/dh (m/m)	0.007
Porosidade total, n (%)	35
Porosidade eficaz, n_e (%)	25
Densidade do solo, d (g/cm ³)	1.6
Carbono orgânico do solo, f_{oc} (%)	0.1
Coefficiente de participação de carbono, K_{oc} (cm ³ /g)	100

Tais valores foram utilizados para certificar-se que todos os resultados obtidos estivessem de acordo com os gerados pelo software original. Foi possível então realizar a validação do código desenvolvido em Python e desta forma realizar a elaboração do gráfico da distribuição do contaminante em relação à distância x (m).

DESENVOLVIMENTO

Todo solo tem em sua composição a presença de metais pesados, esses traços dependerão em sua maioria da herança geológica dos solos, pois quando excedidas as taxas limites dos elementos o solo passa a ser impróprio para diversas utilizações (SPARK, 2003). Os solos contaminados apresentam alterações químicas, físicas e biológicas na estrutura do solo, podendo alterar desta forma a densidade, saturação, tipologia e outros fatores ligados a eles (LIMA, 2004). A alteração desses fatores, além de causar um enorme prejuízo ambiental, acaba por dificultar ou até mesmo impossibilitar a utilização do solo para fins construtivos, acarretando erosões, que possam vim a atingir edificações já erguidas ou elevar o custo das que ainda possam vir a ser construídas (OLIVEIRA, 1999).

O movimento dos contaminantes no subsolo não depende exclusivamente do fluxo da água, mas dependem também de fatores físicos, químicos e biológicos, todavia na maioria dos casos são considerados apenas os processos físicos (LANGE et al., 2002). Os fatores físicos de advecção, dispersão e difusão molecular são os principais que controlam a migração de compostos no solo (FANTINATTI NETO, 2007).

A dispersão trata-se de um mecanismo que realiza o espalhamento dos contaminantes, ocorrendo durante o transporte em meio poroso, sendo função da variação da velocidade de percolação. Dessa forma, o poluente acaba por ocupar um volume maior, comparado caso ocorresse apenas a advecção, tendo dessa forma um pico de concentração decrescente, ao mesmo tempo que a frente de contaminante se move mais rapidamente (DEMUELENAERE, 2004).

A dispersão mecânica trata-se de um mecanismo que ocasiona o espalhamento do contaminante, por consequência da variação de velocidade do fluido no meio poroso, podendo ocorrer em canais individuais, por consequência de uma superfície dos poros rugosa, pode ocorrer também dependendo do tamanho dos poros no trajeto e por último devido a tortuosidade.

A determinação da área e da intensidade da contaminação é de grande complexidade, visto que a utilização de simuladores computacionais apresenta grande importância para uma análise de confiança e muitas vezes mais rápida, da quantidade de contaminantes e da gravidade desses poluentes quando dispostos no solo e na água. Tais modelagens apresentam em sua maioria resultados numéricos estáveis, apresentando, o mais fielmente possível, o comportamento correspondente ao sistema real (VALADDÃO et al., 2016).

RESULTADOS E DISCUSSÃO

Para que fosse possível a execução do código foi utilizado o interpretador de comando PyCharm, fazendo-se uso também de bibliotecas disponíveis no Python, foi possível então montar o código da resolução analítica e testá-lo posteriormente. Ao se executar o código é solicitado os dados de entrada para que seja possível realizar os cálculos da distribuição do contaminante no solo.

A validação como já previamente explicada ocorreu com os valores apresentados na literatura (EDWARDS, 2003). Foi possível observar que os resultados obtidos no código desenvolvido foram semelhantes aos obtidos no GTC- 1D, apresentando diferenças em relação apenas a casas decimais, visto que o Python acaba por utilizar uma quantidade maior de números após a virgula, como também pode ser observado na Tabela 1 a diferença em porcentagem não se aproxima nem de 1 %, podendo desta forma comprovar o resultado positivo do código desenvolvido.

O gráfico $C(x)$ gerado pelo código desenvolvido, assim como o gerado pelo GTC-1D, apresentam picos de concentração de contaminante um pouco antes da distância $x = 30$ m, é valido observar que a concentração neste caso, que refere-se a situações onde $t > T$, começa no ponto zero, como é previamente definido nas condições de contorno e é comprovado na

aplicação do método analítico em questão, após a concentração alcançar seu pico a mesma tende a zero de modo que x tende ao infinito, podemos então desta forma validar também o gráfico desenvolvido.

O movimento do gráfico para este caso pode ser explicado pelo fato de que a concentração é diretamente proporcional aos valores de $A(x,t)$ e $A(x, t-T)$. A medida que a distância aumenta a função do erro complementar (erfc) tende a diminuir e o exponencial tende a aumentar, entretanto a função exponencial tende a torna-se constante, no eixo x , quando atinge determinado ponto e a erfc tende a zero no infinito no eixo x , este é um dos fatores que explica o decaimento da concentração após determinado ponto.

Os fatores físicos de advecção, dispersão e difusão molecular, como já discutido anteriormente, são fatores que apresentam fundamental importância para o controle da migração dos contaminantes no solo. A advecção quando combinada com a dispersão proporciona uma maior distância x , em metros, de contaminação. Um dos principais fatores para o aumento ou diminuição desta distância é o coeficiente de dispersividade (α), coeficiente como pode ser analisado realizando o comparativo dos gráficos.

O coeficiente de dispersão (α) é um fator de grande importância para se obter a distância a qual o contaminante irá percorrer até que sua concentração seja reduzida a zero. É possível analisar por fim que o fator de dispersão proporciona um pico de concentração decrescente, ao instante que a frente de contaminante se move mais rapidamente, sendo então o coeficiente de dispersão (α), para este método, o principal fator para se explicar o decaimento da concentração após determinado ponto.

É importante ressaltar que fatores relacionado ao tipo de solo e de contaminante também são importantes para se definir o quanto o contaminante irá percorrer, sendo então de essencial importância a correta análise do solo a ser estudado e do poluente que está disposto no local de contaminação.

CONSIDERAÇÕES FINAIS

Utilizando a linguagem de programação orientada a objetos, Python, foi possível construir um código com o modelo de transporte unidimensional para distribuição de contaminantes, utilizando a injeção como condição de contorno comum para transporte químico. Foram empregados métodos analíticos também utilizados no GTC- 1D, software o qual foi usado para a validação do programa desenvolvido.

Foi possível realizar a validação do software desenvolvido, visto que os valores encontrados foram similares aos também encontrados no GTC-1D, os gráficos desenvolvidos também foram semelhantes ao disponibilizados no programa base. Conseguindo-se alcançar de maneira satisfatória a realização do software proposto, como também sua perfeita execução, podendo então ser validado para a sua utilização.

A análise dos parâmetros de contaminação do solo e da água é de suma importância para que seja possível o estudo do real dano que o contaminante pode causar no meio, danos estes que irão variar de acordo com o tipo de solo apresentado no local, as características que o contaminante o qual solo está exposto, como também o tempo de exposição, englobando então fatores de porosidade do solo, condutividade hidráulica, composição química do poluente, dentre outros.

Palavras-chave: Contaminação do solo; Modelo computacional; Transporte de poluentes.

REFERÊNCIAS

- AGÊNCIA NACIONAL DO PETRÓLEO (ANP). Anuário Estatístico Brasileiro do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis, 2010. Disponível em: <www.anp.gov.br>. Acesso em 07 de jul. 2019.
- APRELPE-Associação Brasileira de Empresas de Limpeza Pública e Resíduos especiais. Panorama dos resíduos sólidos no Brasil, 2010. Disponível em:
<http://www.abrelpe.org.br/downloads/Panorama2010.pdf> Acesso em: 19/03/2011
- AQUAVEO. GMS 10.4 Edições e preços. Disponível em: <<https://www.aquaveo.com/software/gms-pricing>>. Acesso em: 09 jul. 2019.
- ARAÚJO, A. S. F.; MONTEIRO, R. T. R. Indicadores biológicos de qualidade do solo. Bioscience Journal, v. 23, n. 3, p. 66-75, 2007. Disponível em: <<http://www.seer.ufu.br/index.php/%20biosciencejournal/article/%20viewFile/%206684/4403>>.
- AVARES, Sílvio Roberto de Lucena. REMEDIAÇÃO DE SOLOS E ÁGUAS CONTAMINADAS POR METAIS PESADOS: Conceitos Básicos & Fundamentos. Rio de Janeiro: Cdd, 2013. Disponível em: <<chrome-extension://oemmnecbldboiebfnladdacbdmfmadadm/https://ainfo.cnptia.embrapa.br/digital/bitstream/item/100358/1/Cap-1Livro-CA-Silvio-Tavares.pdf>>. Acesso em: 12 jul. 2019.
- BRASIL. Lei nº 12.305 de 2 de agosto de 2010 que Institui a Política Nacional de Resíduos Sólidos; altera a Lei nº 9.605, de 12 de fevereiro de 1998; e dá outras providências. Disponível em:
<<http://www2.mma.gov.br/port/conama/legiabre.cfm?codlegi=636>>.
- COELHO, F. C. (2007). Computação Científica com Python - Uma introdução à programação para cientistas. (1ª ed.). Petrópolis, Rio de Janeiro: Edição do Autor.
- DEMUELENAERE, Rafael Gerard de Almeida. Caracterização de Propriedades de Transporte de Metais Pesados em Solos Residuais do Rio de Janeiro. 2004. 120 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2004. Disponível em: <chrome-extension://oemmnecbldboiebfnladdacbdmfmadadm/file:///C:/Users/Larisa/Downloads/_pdf_200.pdf>. Acesso em: 10 jun. 2019.
- EDWARDS, Ken. Groundwater Contaminant Transport. 1-D Step Injection. 2003-2017. Disponível em: <<https://www.lmnoeng.com/Groundwater/transportStep.php>>. Acesso em: 01 jun. 2019.
- FANTINATTI NETO, F.P. Estudo do Transporte de Contaminantes na Área de Disposição de Resíduos Sólidos da Cidade de Campos dos Goytacazes –RJ. Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil) – Universidade Estadual do Norte Fluminense Darcy Ribeiro, Campos dos Goytacazes, 2007.
- FUNDAÇÃO NACIONAL DA SAÚDE - FUNASA. Manual de Saneamento. 3. Ed. rev. – Brasília: Ministério da Saúde, 2006.
- IBGE -Instituto Brasileiro de Geografia e Estatística. Pesquisa Nacional de Saneamento Básico 2000. Rio de Janeiro: IBGE, 2002.
- LANGE, Liséte Celina et al. ESTUDO DO TRANSPORTE DE CONTAMINANTES EM MEIOS POROSOS APLICADO A ATERROS DE DISPOSIÇÃO DE RESÍDUOS SÓLIDOS URBANOS. In: CASTILHOS JUNIOR, Armando Borges de et al. Lternativas de Disposição de Resíduos Sólidos Urbanos para Pequenas Comunidades. Florianópolis: Prosab, 2002. p. 85-92.
- LIMA, L. M. Q. Lixo, tratamento e biorremediação. 3 ed. São Paulo: Hemus, 2004. 265p.
- LUTZ, M.; ASCHER, D. Aprendendo python. Tradução de João Tortello. Porto Alegre, Bookman, 2007.
- MARQUES, Emily de Mendonça; GUERRA, Antônio José Teixeira. Solos Contaminados por Hidrocarbonetos de Petróleo. 2008. Disponível em: <<chrome-extension://oemmnecbldboiebfnladdacbdmfmadadm/http://lsie.unb.br/ugb/sinageo/7/0109.pdf>>. Acesso em: 16 jun. 2019.
- MIKE. FEFLOW. Disponível em: <<https://www.mikepoweredbydhi.com/products/feflow>>. Acesso em: 09 jul. 2019.
- NEXT. ECLIPSE Blackoil Reservoir Simulation. Disponível em: <<http://www.nexttraining.net/Courses/Details/OG-SW1-SIS10920/ECLIPSE-Blackoil-Reservoir-Simulation.aspx?trainingplan=True>>. Acesso em: 09 jul. 2019.
- OLIVEIRA, M. A. T. Processos erosivos e preservação de áreas de risco de erosão por voçorocas. In: GUERRA, A. G. T.; BOTELHO, R. G. M. (Org.). Erosão e conservação dos solos: conceitos, temas e aplicações. Rio de Janeiro: Bertrand Brasil, 1999. p. 58-101.
- SPARKS, D. L. Environmental soil chemistry. San Diego: Elsevier Science 2003. 352 p.
- VALADDÃO, Izabella Christynne Ribeiro Pinto et al. Simulação computacional da difusão molecular de poluentes líquidos de aterros em solos organo argilos: Aterro Metropolitano de Gramacho, RJ. Estudos Tecnológicos, Rio de Janeiro, v. 2, n. 1, p.55-64, Não é um mês valido! 2016. Disponível em: <<chrome-extension://oemmnecbldboiebfnladdacbdmfmadadm/file:///C:/Users/Larisa/Downloads/6075-18615-1-SM.pdf>>. Acesso em: 15 jun. 2019.