



Pamela Alessandra Rodriguez Yaquetto

**Modelagem numérica da infiltração de
hidrocarbonetos em solos não saturados
utilizando o método de volumes finitos.**

Dissertação de Mestrado

Dissertação apresentada como requisito parcial para
obtenção do título de Mestre pelo Programa de Pós-
Graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio.

Orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Junior

Rio de Janeiro, março de 2009



Pamela Alessandra Rodriguez Yaquette

**Modelagem numérica da infiltração de
hidrocarbonetos em solos não saturados
utilizando o método de volumes finitos.**

Dissertação apresentada como requisito parcial para obtenção do título de Mestre pelo Programa de Pós-Graduação em Engenharia Civil da PUC-Rio. Aprovada pela Comissão Examinadora abaixo assinada.

Eurípedes do Amaral Vargas Junior

Orientador
PUC-Rio

Luiz Fernando Campos Ramos Martha

PUC-Rio

Tacio Mauro Pereira de Campos

PUC-Rio

José Eugenio Leal

Coordenador Setorial do Centro Técnico - Puc-Rio

Rio de Janeiro, 6 de março de 2009

Todos os direitos reservados. É proibida a reprodução total ou parcial do trabalho sem autorização da universidade, da autora e do orientador.

Pamela Alessandra Rodriguez Yaquetto

Graduou-se em Engenharia Civil pela Universidad Nacional San Antonio Abad del Cusco em 2004. As principais áreas de interesse e linhas de pesquisa são:

Geotecnia Ambiental, Mecânica dos Solos e Modelagem Numérica.

Ficha Catalográfica

Rodríguez Yaquetto, Pamela Alessandra

Modelagem numérica da infiltração de hidrocarbonetos em solos não saturados utilizando o método de volumes finitos / Pamela Alessandra Rodríguez Yaquetto ; orientador: Eurípedes do Amaral Vargas Junior. – 2009.
92 f. : il.(color.) ; 30 cm

Dissertação (Mestrado em Engenharia Civil)–Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2009.
Inclui bibliografia

1. Engenharia civil – Teses. 2. Vazamento. 3. Zona vadosa. 4. Modelagem numérica. 5. Volumes finitos. 6. Fluxo multifásico. 7. LNAPL. I.Vargas Junior, Eurípedes do Amaral. II. Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro. Departamento de Engenharia Civil. III. Título.

CDD: 624

Aos meus pais que representam um estímulo na minha vida,
com muito amor e gratidão.

Agradecimentos

Aos meus pais, Edwin e Regia, pelo que sou e onde estou. Por me estimularem a estudar e buscar desafios, pelo incentivo, amor e apoio que sempre me deram e por terem despertado em mim o gosto pela engenharia. O meu profundo agradecimento.

A minha família aqui no Rio, pela ajuda em esta nova experiência de vida, o qual facilitou muito minha estadia em esta cidade maravilhosa.

A minha família no Perú pela preocupação e apoio irrestrito.

Ao meu orientador de Tese de Mestrado, Eurípedes do Amaral Vargas Júnior, pela orientação recibida, pelo conhecimento adquirido e pela confiança depositada em mim ao longo deste último ano.

A Raquel, pela paciência para comigo, pela lucidez de suas sugestões, pelas valiosas contribuições e pela amizade sempre demonstrada.

Aos professores membros da banca, pela disposição para analisar esta dissertação.

A todos os meus professores da PUC-Rio, por compartilharem comigo e com todos os outros alunos seus conhecimentos.

À Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro pela bolsa de isenção total, sem a qual eu não poderia ter realizado os cursos, nem este trabalho.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro que me deu a oportunidade de fazer o mestrado.

A Carolina pela amizade que fez com que as exigências de rigor e seriedade pareçam menos pesadas do que são.

A Enrique pelos diversos apoios e pelo carinho.

A Gabi pela amizade e revisão precisa e interessada.

A Carlos pela amizade incondicional e por sempre estar disposto a ajudar.

Aos amigos com os quais tive o privilégio de conviver neste país ao longo dos últimos anos, pela amizade.

Aos meus amigos no Perú por manter os laços de amizade e carinho a pesar da distância.

A todas as pessoas vinculadas ao Departamento de Engenharia Civil, pelo trato afetuoso e respeitoso.

A todos que, de uma forma ou de outra, contribuíram para a realização deste estudo.

Resumo

Yaquetto, Pamela Alessandra Rodriguez; Vargas, Eurípedes do Amaral. **Modelagem numérica da infiltração de hidrocarbonetos em solos não saturados utilizando o método de volumes finitos.** Rio de Janeiro, 2009. 92p. Dissertação de Mestrado - Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

Uma grande parcela da população depende de águas subterrâneas para o consumo. Assim, vazamentos dos tanques de gasolina representam um risco significativo de saúde pública, além dos riscos de incêndio e explosão que o vazamento de vapores destes tanques pode causar nas linhas de esgotos dos edifícios. Estes tanques estão em geral localizados na zona não saturada dos solos, acima do nível freático. Torna-se assim, importante avaliar a mobilidade destes compostos nestas condições e em particular de prever a sua chegada no lençol freático. Esta avaliação pode ser feita através de procedimentos numéricos de análise. O principal objetivo deste trabalho é a implementação numérica de um programa que simule o fluxo transiente de NAPLs (non aqueous phase liquids) em meios porosos não saturados. A solução numérica é obtida pela utilização do método dos volumes finitos. Para representar as características hidráulicas dos solos, a função Brooks e Corey e os modelos de Brooks e Corey-Burdine são utilizados. O trabalho apresenta detalhes do programa desenvolvido e o seu uso para simular ensaios de fluxo de gasolina e gasolina misturada com etanol realizados na PUC em estudos anteriores.

Palavras-chave

Vazamento, zona vadosa, modelagem numérica, volumes finitos, fluxo multifásico, LNAPL.

Abstract

Yaquetto, Pamela Alessandra Rodriguez; Vargas, Eurípedes do Amaral (Advisor). **Numerical modelling of infiltration of hydrocarbons in unsaturated soils using the finite volumes method.** Rio de Janeiro, 2009. 92p. Msc. Dissertation – Departamento de Engenharia Civil, Pontifícia Universidade Católica do Rio de Janeiro.

A large proportion of the population depends on groundwater for consumption. Thus, leakage of gasoline tanks represents a significant risk to public health besides the risk of fire and explosion in the sewer lines, due to the flammable gases. These tanks are generally located in the unsaturated soil above the groundwater level. It is therefore important to evaluate the mobility of these compounds under these conditions and in particular to predict its arrival in the water table. This assessment can be done by numerical procedures for analysis. The main objective of this work is the numerical implementation of a program that simulates the transient flow of NAPLs (non aqueous phase liquids) in unsaturated porous media. The numerical solution is obtained by using the method of finite volumes. To represent the hydraulic characteristics of soils, the function of Brooks and Corey, as well as the Brooks and Corey-Burdine's model are used. The essay presents details of the program developed and its use to simulate the flow testing of gasoline and gasoline blended with ethanol made in the PUC in previous studies.

Keywords

Leaking, vadose zone, numerical modelling, finite volume, multiphase flow, LNAPL.

Sumário

1 Introdução	17
2 Fundamentos de fluxo multifásico em meios porosos.	19
2.1. Fases	21
2.2. Meio poroso e porosidade	21
2.3. Tensões superficiais e interfaciais	24
2.4. Molhabilidade	26
2.5. Fluxo e Distribuição de NAPL no Solo	26
2.5.1. Fluxo de LNAPL	28
2.6. Concentração	29
2.6.1. Partição de Solutos	31
3 Solução numérica para problemas de fluxo multifásico	32
3.1. Classes de métodos numéricos disponíveis	32
3.2. Equações de conservação	33
3.2.1. Equação de fluxo - conservação do volume (continuidade)	33
3.2.2. Equação de transporte - conservação da massa (continuidade)	36
3.3. Solução numérica	39
3.3.1. Solução numérica da equação de fluxo	39
3.3.2. Solução numérica da equação de transporte	44
4 Implementação e validação numérica	45
4.1. Etapa 1	47
4.2. Etapa 2	47
4.3. Etapa 3	56
4.4. Etapa 4	56
4.5. Etapa 5	59
5 Apresentação e discussão dos resultados	60
5.1. Introdução	60
5.2. Parâmetros	60
5.3. Resultados do ensaio de coluna.	63

5.4. Resultados da Simulação do ensaio de coluna	64
5.5. Resultados da simulação do ensaio de aquário.	75
5.6. Resultados da simulação do transporte unidimensional de benzeno	80
5.7. Discussão dos resultados	84
6 Conclusões e sugestões para trabalhos futuros	86
Referências Bibliográficas	88

Lista de figuras

Figura 1 - Empacotamento cúbico de esferas.	23
Figura 2 - Empacotamento rombóide de esferas.	23
Figura 3 - Pequenos grãos tendem a ocupar espaços deixados entre os maiores gerando menores porosidades.	24
Figura 4 - Forças de atração entre moléculas no interior e na superfície de um líquido (Shaw, 1998 <i>apud</i> Borges, 2002).	25
Figura 5 - Modelo conceitual do comportamento do LNAPL no meio poroso.	28
Figura 6 – Volume elementar para os balanços de conservação de volume.	33
Figura 7 - Formulação em volume de controle para duas dimensões.	34
Figura 8 - Volume elementar para os balanços de conservação de massa.	36
Figura 9 - Formulação em volume de controle para duas dimensões.	37
Figura 10 - Fluxograma.	46
Figura 11 - Resultados da variação da carga de pressão ao longo do tempo usando o programa HYDRUS 1D.	48
Figura 12 - Resultados da variação da carga de pressão ao longo do tempo usando o programa implementado no MATLAB	49
Figura 13 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=5000s$	50
Figura 14 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=10000s$	50
Figura 15 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=15000s$	51
Figura 16 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=20000s$	51
Figura 17 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=25000s$	52
Figura 18 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=30000s$	52
Figura 19 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=35000s$	53
Figura 20 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=40000s$	53

Figura 21 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=45000s$	54
Figura 22 - Comparação dos resultados o Hydrus com os do programa implementado no MatLab no tempo $t=50000s$	54
Figura 23 - Saturação do NAPL na camada do solo após um tempo de cinquenta segundos de iniciado o vazamento modelado no MatLab	57
Figura 24- Saturação do NAPL na camada do solo após um tempo de cem segundos de iniciado o vazamento modelado no MatLab.	58
Figura 25 – Ensaio de aquário.	58
Figura 26 - Saturação do NAPL na camada do solo (esferas de vidro).	59
Figura 27 - Seqüência típica (1-9) do avanço da frente de saturação de gasolina nos ensaios de coluna ao longo do tempo.	63
Figura 28 – Simulação do ensaio de coluna para as condições iniciais ($t=0s$)	64
Figura 30 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=10s$)	65
Figura 31 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=15s$)	65
Figura 32 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=20s$)	66
Figura 33 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=25s$)	66
Figura 34 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=30s$)	67
Figura 35 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=35s$)	67
Figura 36 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=40s$)	68
Figura 37 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=45s$)	68
Figura 38 – Simulação do ensaio de coluna com gasolina para ($t=50s$)	69
Figura 39 – Simulação do ensaio de coluna usando gasolina misturada com etanol para ($t=0s$) Condições Iniciais.	69
Figura 40 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol ($t=5s$)	70
Figura 41 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol ($t=10s$)	70
Figura 42 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol ($t=15s$)	71
Figura 43 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol ($t=20s$)	71
Figura 44 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol ($t=25s$)	72
Figura 45 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol ($t=30s$)	72

Figura 46 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol (t=35s)	73
Figura 47 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol (t=40s)	73
Figura 48 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol (t=45s)	74
Figura 49 – Simulação do ensaio de coluna para gasolina misturada com etanol (t=50s)	74
Figura 50 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=10s).	75
Figura 51 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=20s).	75
Figura 52 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=30s).	76
Figura 53 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=40s).	76
Figura 54 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=50s).	77
Figura 55 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=60s).	77
Figura 56 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=70s).	78
Figura 57 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=80s).	78
Figura 58 - Frente de saturação de BETEX no ensaio de aquário simulado (t=90s).	79
Figura 59 - Transporte de benzeno unidimensional (t=10s).	80
Figura 60 - Transporte de benzeno unidimensional (t=20s).	80
Figura 61 - Transporte de benzeno unidimensional (t=30s).	81
Figura 62 - Transporte de benzeno unidimensional (t=40s).	81
Figura 63 - Transporte de benzeno unidimensional (t=50s).	82
Figura 64 - Transporte de benzeno unidimensional (t=60s).	82
Figura 65 - Transporte de benzeno unidimensional (t=70s).	83
Figura 66 - Transporte de benzeno unidimensional (t=80s).	83
Figura 67 - Transporte de benzeno unidimensional (t=90s).	84

Lista de tabelas

Tabela 1 Comparação dos resultados das pressões finais usando os dois programas. 55

Tabela 2 – Parâmetros utilizados no modelo de simulação de infiltração de gasolina pura. 61

Tabela 3 - Parâmetros utilizados no modelo de simulação de infiltração de gasolina com etanol. 62

Lista de Símbolos

A	área [L^2]
C	concentração volumétrica do contaminante na fase aquosa [ML^{-3}]
g	aceleração da gravidade [LT^{-2}]
h_n	carga de pressão do NAPL [L]
H_n	carga de energia total (pressão + elevação) do NAPL [L]
h_{an}	pressão capilar ar-NAPL [L]
h_{nw}	pressão capilar NAPL-água [L]
i	gradiente hidráulico [-]
J	coeficiente de partição de NAPL-água [-]
k	permeabilidade intrínseca do meio [L^2]
K_d	coeficiente de partição entre a concentração na fase sólida e a concentração na fase aquosa [-]
K_n	permeabilidade do solo ao NAPL [-]
K_{nr}	condutividade hidráulica relativa do meio para o NAPL [LT^{-1}]
K_{ns}	condutividade hidráulica saturada do meio para o NAPL [LT^{-1}]
M	massa [M]
M_e	massa do contaminante na entrada do elemento [M]
M_i	massa do contaminante dentro do elemento [M]
M_s	massa do contaminante na saída do elemento [M]
n	porosidade [-]
q	vazão [L^3]
S_m	saturação irreduzível [-]
S_n	saturação do NAPL [-]
S_{nr}	saturação residual do NAPL [-]
S_n	saturação atual do NAPL [-]
S_{nr}	saturação relativa do NAPL [-]
\bar{S}_n	saturação efetiva de NAPL [-]
S_t	saturação líquida total [-]
\bar{S}_t	saturação efetiva total líquida [-]
S_w	saturação d'água [-]

S_{wr}	saturação residual d'água [-]
\overline{S}_w	saturação efetiva de água [-]
v	velocidade [LT^{-2}]
V_e	volume do fluido (NAPL) na entrada do elemento [L^3]
V_i	volume do fluido (NAPL) dentro do elemento [L^3]
V_s	volume do fluido (NAPL) na saída do elemento [L^3]
x	eixo das ordenadas
y	eixo das abscissas
β_{an}	fator escala de pressão capilar ar-NAPL [-]
β_{nw}	fator escala de pressão capilar NAPL-água [-]
ε	constante dependente da distribuição do tamanho de poros [-]
λ	índice de distribuição do tamanho de poros [-]
μ_n	viscosidade dinâmica do NAPL [$ML^{-1}T^{-1}$]
ρ_d	densidade seca [ML^{-3}]
ρ_n	densidade do NAPL [ML^{-3}]
θ_n	conteúdo volumétrico do NAPL [L^3L^{-3}].
σ_{an}	tensão interfase ar-NAPL [MT^{-2}]
σ_{aw}	tensão interfase ar-água [MT^{-2}]
ψ	pressão de entrada do fluido não molhante função de Brooks e Corey [-]