

4

Resultados e discussões

O processo de migração de umidade sob influência de gradientes de temperatura em solos não-saturados envolve uma série de parâmetros hidráulicos e térmicos na resolução do problema. A falta de estudos sobre o assunto abordado na dissertação no país, juntamente com o curto tempo para a realização de um estudo experimental no decorrer da dissertação fez com que as simulações realizadas sejam baseadas em estudos realizados com parâmetros hidráulicos e térmicos diferenciados em relação aos parâmetros de solos existentes no país. O objetivo deste capítulo é apresentar a validação do programa e resultados de simulações de modelos hipotéticos com condições iniciais e condições de contorno bem definidas. Na utilização do programa utilizou-se como pré- e pós-processador o aplicativo MTool (Tecgraf/PUC-Rio), onde, como citado no capítulo 3, foram realizadas alterações subseqüentes.

4.1

Verificação do modelo

A falta de soluções analíticas que descrevam com clareza o problema associado ao transporte acoplado de umidade e calor em meios porosos restringiu a validação às soluções experimentais existentes. Por se tratar de um programa original que contém simulações que validam e descrevem fenômenos de fluxo e infiltração, e por ser utilizado com alguma frequência em pesquisas realizadas pela geotecnia da PUC-Rio, julgou-se irrelevante a validação contra soluções analíticas que representam fenômenos isotérmicos, uma vez que as alterações têm por objetivo simular o transporte não-isotérmico. O modelo numérico proposto na

dissertação foi verificado através da comparação com resultados gerados experimentalmente por *Bach* (1989). A comparação foi realizada para condições isotérmicas e não-isotérmicas. Em uma breve descrição do experimento, para ambas as condições citadas acima, colunas de solo arenoso (“Otero sandy loam”) foram colocadas em posição horizontal, com diferentes teores de umidade volumétrica inicial, e com suas respectivas vazões prescritas aplicadas em uma das extremidades da coluna. Para o caso não-isotérmico, foi aplicado um gradiente térmico obtido pelo aquecimento de uma extremidade da coluna e resfriamento na outra extremidade. Na utilização dos parâmetros hidráulicos foi realizada uma interpolação linear entre o modelo da curva característica do solo utilizado pelo programa UNSATCHEM2D e o modelo utilizado na análise experimental. O modelo utilizado na referida dissertação é o modelo de van Genuchten, enquanto que o modelo utilizado por *Bach* (1989) é baseado em uma solução empírica do modelo de Brooks e Corey (1966). Tal interpolação não obteve uma total convergência, devido à alta não-linearidade do modelo do experimento. Porém os valores obtidos foram considerados aceitáveis pelo autor para utilização como validação das implementações numéricas.

Os parâmetros hidráulicos e térmicos necessários para a simulação numérica são os parâmetros de van Genuchten, com as umidades volumétrica saturada e residual (θ_s e θ_r), os parâmetros empíricos n e α , a permeabilidade saturada (K_s) e a porosidade do material (por). Os parâmetros térmicos são definidos a partir das equações de *Philip e de Vries* (1957) e *de Marsily* (1986) para o cálculo da condutividade térmica aparente do solo ($I_{ij}(\mathbf{q})$). Ambos os parâmetros hidráulicos e térmicos podem ser definidos a partir de ensaios de laboratório, ou através do banco de dados de programas comerciais, como o programa HYDRUS2D.

Os parâmetros hidráulicos de van Genuchten e térmicos utilizados na solução numérica estão descritos na Tabela 1 e Tabela 2.

Tabela 1 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (exemplo de validação).

Parâmetros	θ_s	θ_r	n	α	K_s	por ¹
Coluna	0,50	0,05	2,057	0,0166	0,0011	0,47

Tabela 2 - Parâmetros térmicos (exemplo de validação).

Parâmetros	θ_n	θ_o	λ_L	λ_T	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Coluna	0,6	1e-2	0,5	0,1	22,8	-249,6	490,9	19200	25100	41800

A Tabela 3 mostra os diferentes teores de umidade inicial com as respectivas vazões aplicadas e os gradientes de temperatura aplicados para o caso isotérmico e não-isotérmico.

Tabela 3 – Condições experimentais para cada caso (*Bach*, 1989).

Exp #	Caso ²	Teor de Umidade Inicial (cm ³ /cm ³)	Temperatura Inicial Média (°C)	Temperatura Extremidade Aquecida (°C)	Temperatura Extremidade Resfriada (°C)	Fluxo (cm/hr)
5	I	0,151	24,00			0,094
6	NI	0,151	23,88	35,5	24	0,094
7	I	0,049	23,68			0,091
8	NI	0,049	23,55	35,5	18,5	0,091
9	I	0,282	23,55			0,092
10	NI	0,282	23,10	35,5	24	0,092

A malha de elementos finitos utilizada nas simulações é formada por 60 nós com 58 elementos triangulares (Figura 6). As condições iniciais e condições de contorno empregadas nas simulações são semelhantes às condições utilizadas nos experimentos citadas na Tabela 3.

¹ porosidade

² I = Caso Isotérmico NI = Caso Não-Isotérmico

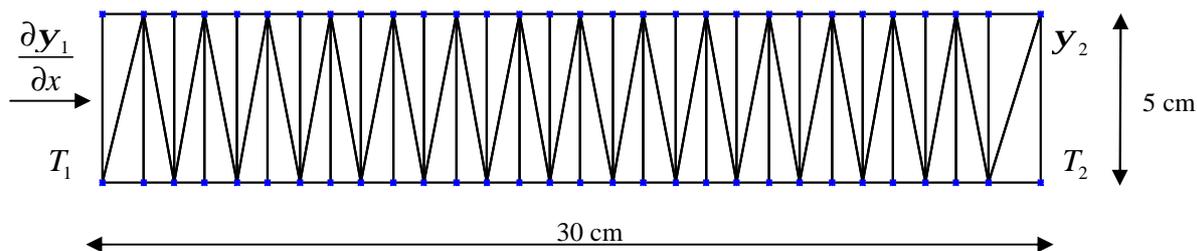


Figura 6 – Malha de elementos finitos utilizada na validação dos resultados, com condições de contorno para o caso não-isotérmico.

Na simulação com umidade inicial igual a 0,151, temos para o caso não-isotérmico as condições iniciais e de contorno iguais a:

$$\left. \begin{array}{l} y = -240 \text{ cm} \\ T = 23,88 \text{ }^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad \text{para } t=0\text{s em } 0 \leq x \leq 30 \text{ cm}$$

$$\left. \begin{array}{l} q_m / r_l = -2,6 \times 10^{-5} \text{ cm/s} \\ T = 33,5 \text{ }^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad \text{para } t>0\text{s em } x = 0 \text{ cm}$$

$$\left. \begin{array}{l} \partial y / \partial x = 0 \\ T = 23,88 \text{ }^\circ\text{C} \end{array} \right\} \quad \text{para } t>0\text{s em } x = 30 \text{ cm}$$

A comparação entre os valores numéricos e experimentais para as simulações isotérmicas é apresentada na Figura 7, Figura 8 e Figura 9 para um tempo de simulação de 6, 12 e 24 horas, com teor de umidade inicial igual a 0,151. Os valores comparados apresentaram uma boa concordância e curvas de variação de umidade semelhantes.

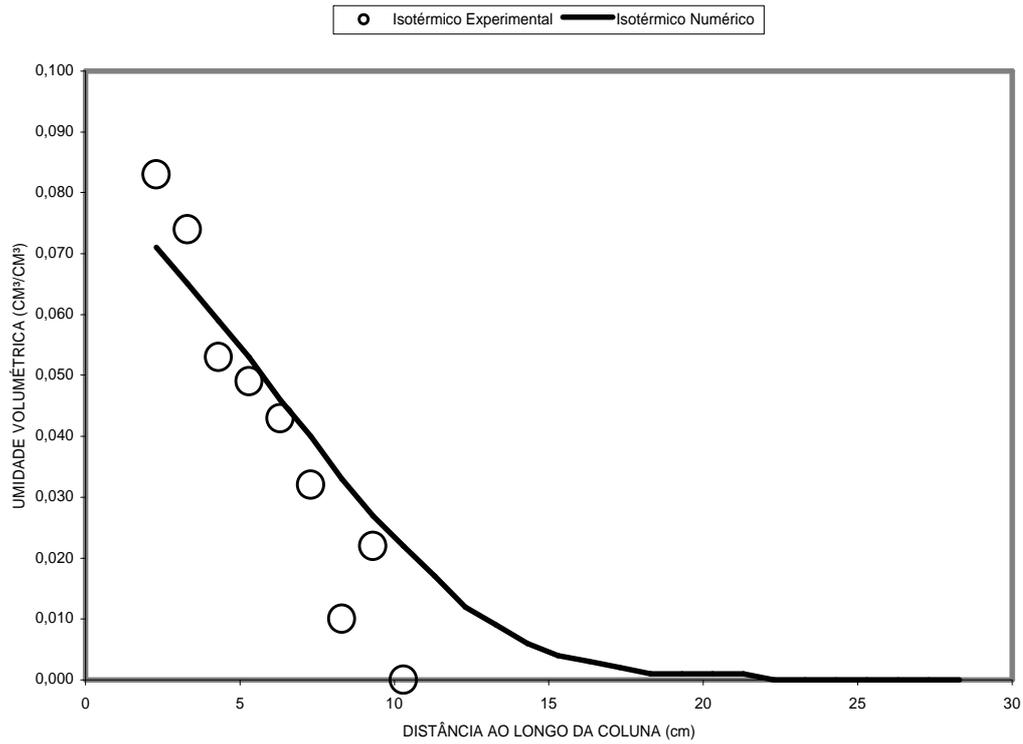


Figura 7 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 6$ hs.

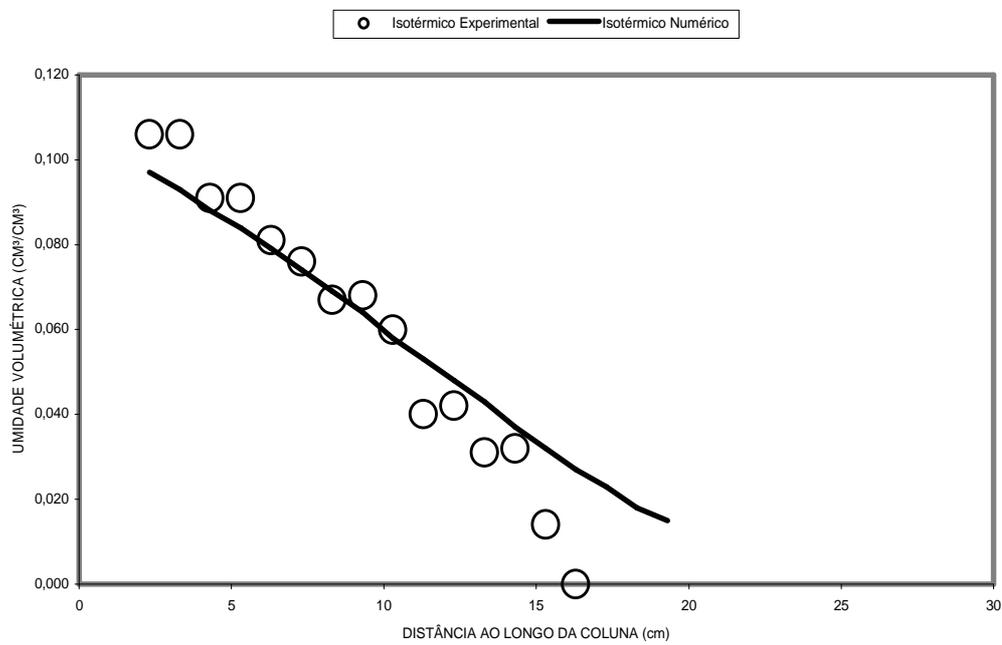


Figura 8 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 12$ h.

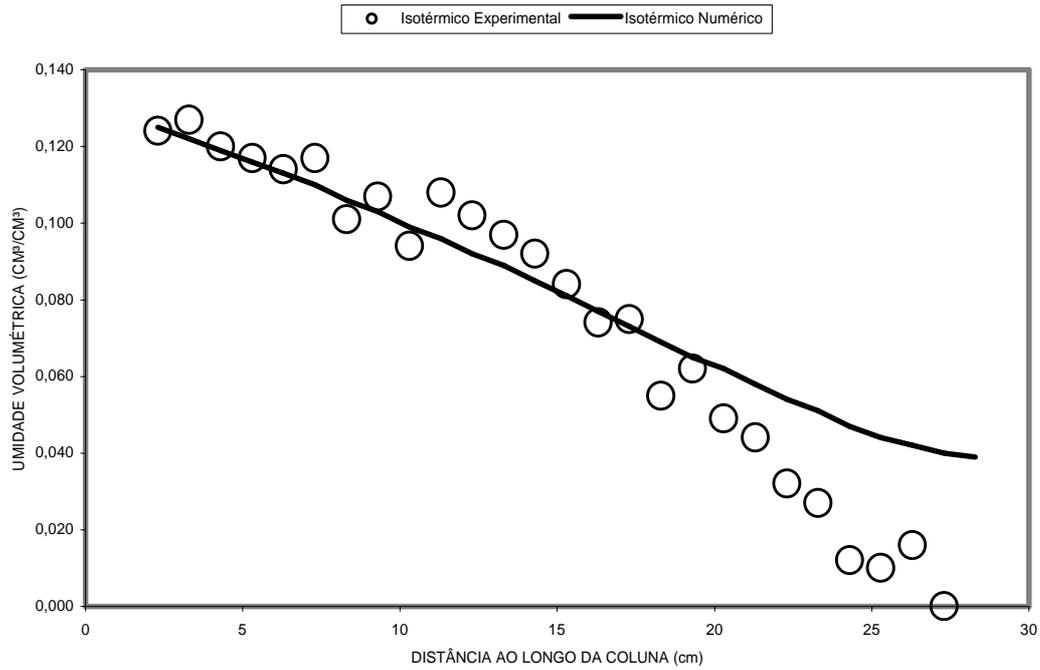


Figura 9 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 24$ h.

Os valores numéricos e experimentais para a condição não-isotérmica são igualmente demonstrados na Figura 10, Figura 11 e Figura 12.

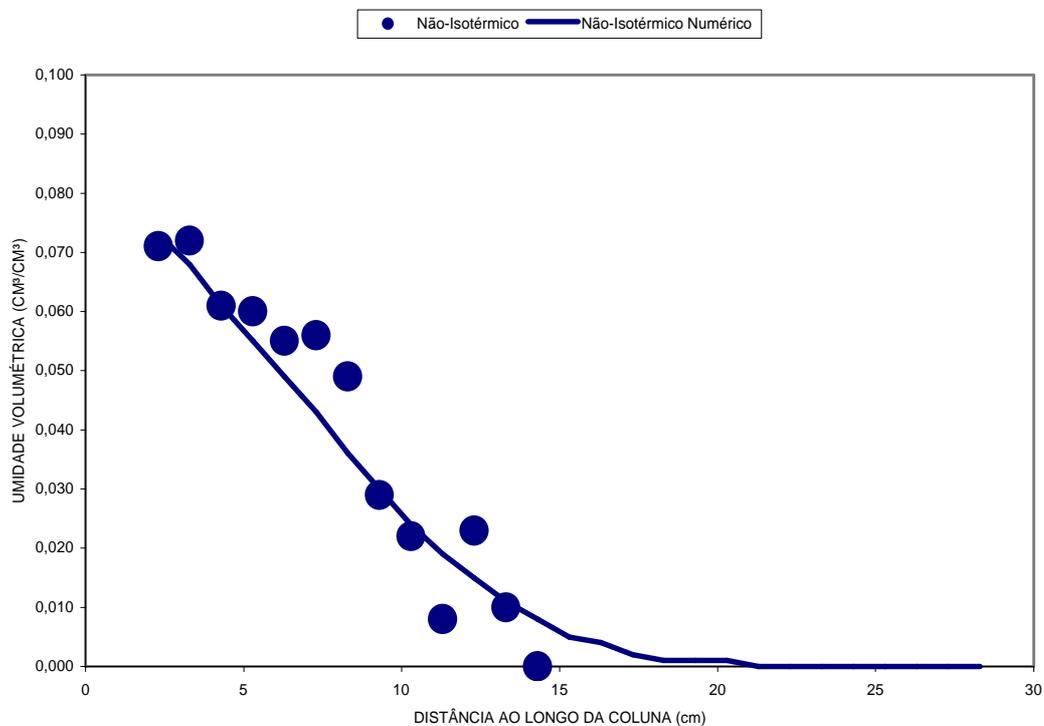


Figura 10 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição não-isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 6$ h.

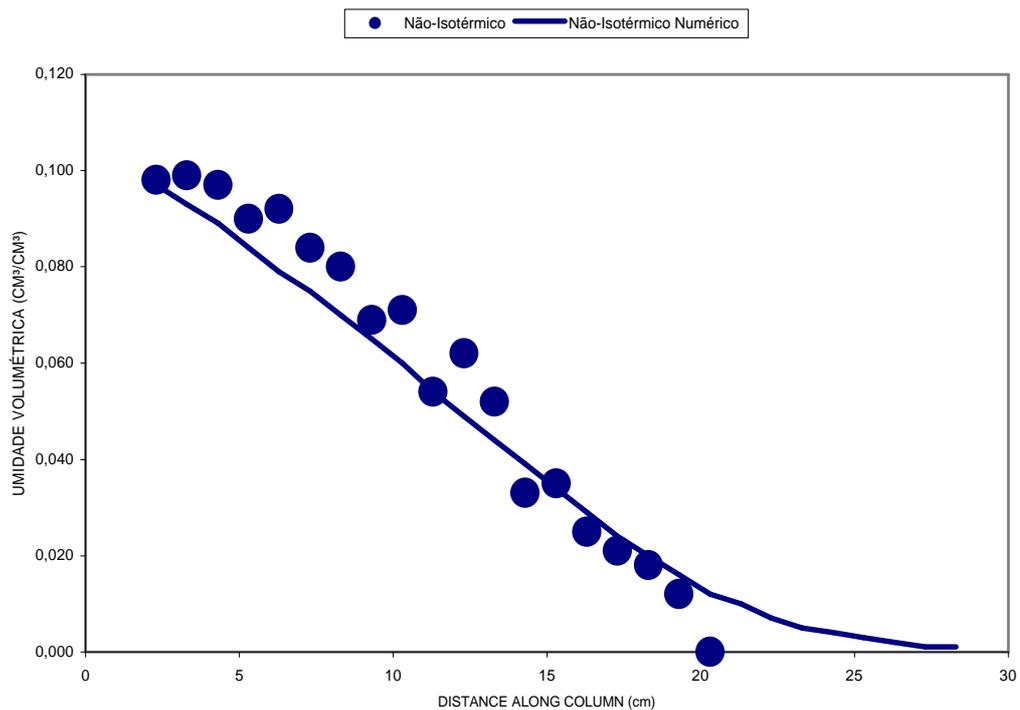


Figura 11 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição não-isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 12$ h.

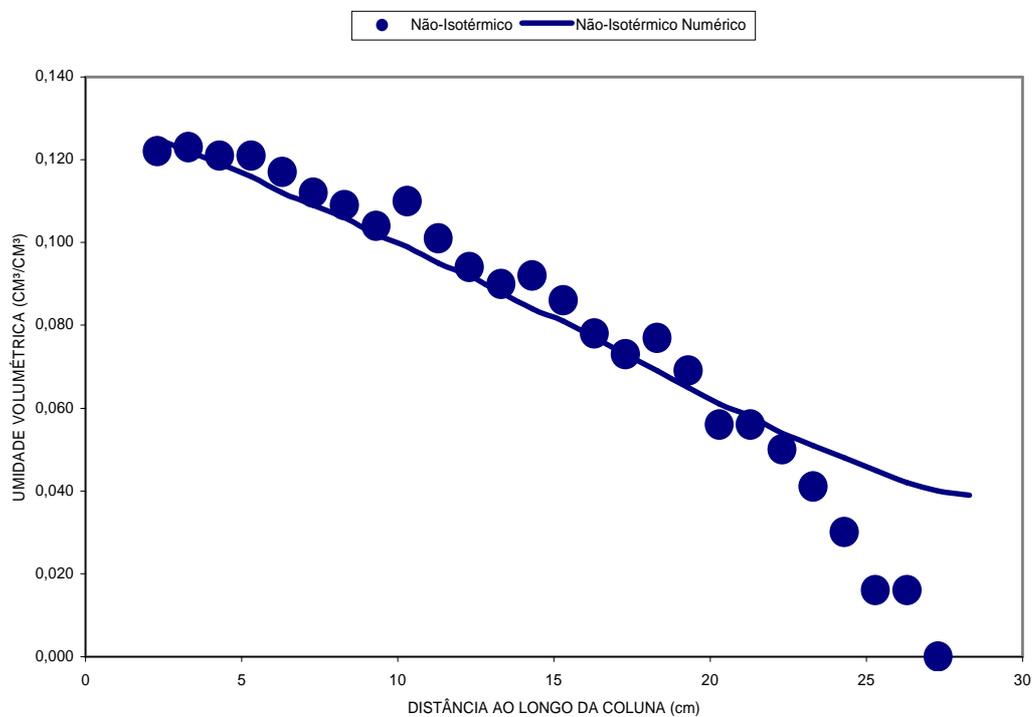


Figura 12 – Variação do teor de umidade volumétrica com condição não-isotérmica para valores de $\theta_i = 0,151$ e $t = 24$ h.

4.2

Simulações de problemas termo-hidráulicos

As simulações realizadas neste capítulo visam demonstrar modelos hipotéticos que podem existir em campo. Foram realizadas simulações de modelos que envolvem a utilização de fontes de calor na zona não-saturada a fim de melhorar o processo de remediação, seja este por injeção de água, ou por extração de vapor do solo ou ainda bioremediação. Também é demonstrada a utilização de uma fonte de calor externa simulando um processo de desorção térmica. Outro ponto abordado nas simulações foi à cobertura de resíduos industriais ou de mineração, onde uma possível infiltração de água no resíduo pode acarretar em sérios danos ao meio ambiente, como a contaminação das águas subterrâneas por metais pesados. Para que haja segurança na deposição destes resíduos é necessário garantir uma situação de fluxo zero na camada de resíduo, simulando condições atmosféricas que levam a cobertura a processos de umidescimento e secagem de acordo com as condições climáticas do ambiente.

4.2.1

Simulação de uma fonte de calor interna

Um dos possíveis métodos para melhorar os processos de remediação em solos contaminados é através da emissão de uma fonte de calor na zona não-saturada. Para estudar quais efeitos esta fonte de calor interna pode ter sobre o transporte acoplado de umidade e calor nos solo, utilizou-se uma malha bidimensional com 1662 nós e 3142 elementos, com dimensões apresentadas na Figura 13. Neste exemplo, simula-se um cabo de potência aterrado no centro da malha, que emite uma temperatura prescrita (condição de contorno de Dirichlet), provocando o fluxo de umidade. O meio poroso na região do fluxo encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -100 cm e uma temperatura de 20 °C, em todos os pontos da malha. O fluxo, portanto, será gerado apenas pelos gradientes de temperatura impostos, a partir de uma temperatura prescrita no cabo de 65 °C.

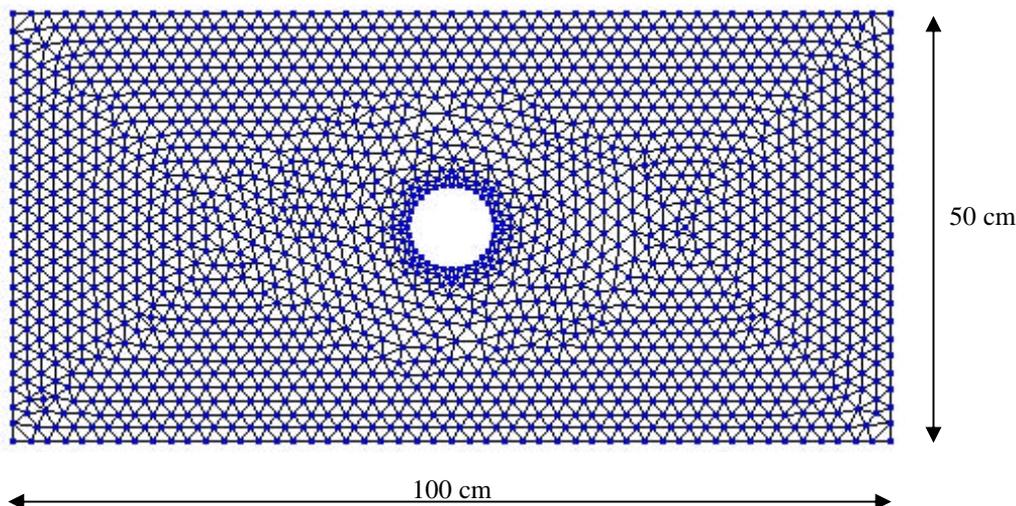


Figura 13 – Malha de elementos finitos representando um cabo de potência aterrado.

Na simulação utilizou-se parâmetros hidráulicos de van Genuchten de um solo argiloso hipotético, a partir do banco de dados do programa HYDRUS2D (*Simunek e van Genuchten, 1999*) descritos na Tabela 4.

Tabela 4 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (fonte de calor interna).

Parâmetros	θ_s	θ_r	n	α	K_s	por ³
Fonte de calor interna	0,38	0,068	1,09	0,008	0,0000556	0,42

Tabela 5 - Parâmetros térmicos (fonte de calor interna).

Parâmetros	θ_n	θ_o	λ_L	λ_T	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Fonte de calor interna	0,6	1e-2	0,5	0,1	-19,7	-96,2	252,1	19200	25100	41800

As condições de contorno de temperatura utilizadas consistem de um contorno impermeável onde não existe troca de calor com o meio externo, com a temperatura após um determinado tempo de simulação equalizando com a temperatura prescrita em todos os pontos da malha.

O processo de migração de umidade no meio poroso não-saturado ocorre exclusivamente por influência de gradientes de temperatura gerados pela fonte. A

³ porosidade

simulação é realizada em fluxo horizontal, onde não existe o efeito de carga de elevação no processo de migração de umidade, com os gradientes de temperatura gerados pela fonte de calor provocando um fluxo de umidade em direção ao centro da malha. As figuras a seguir mostram as variações da temperatura, com as isotermas em cinco diferentes tempos da simulação.

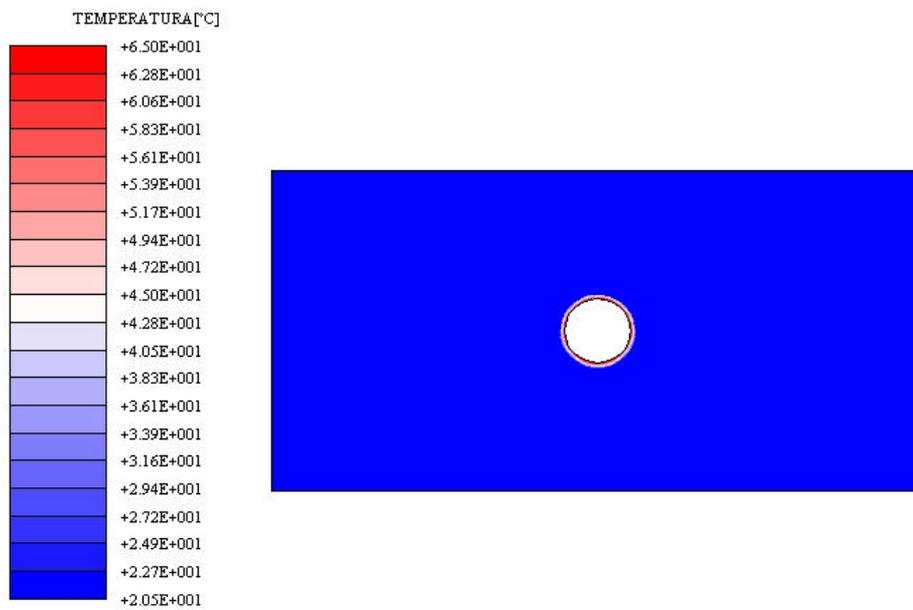


Figura 14 – Isotermas para o instante inicial (fonte de calor interna).

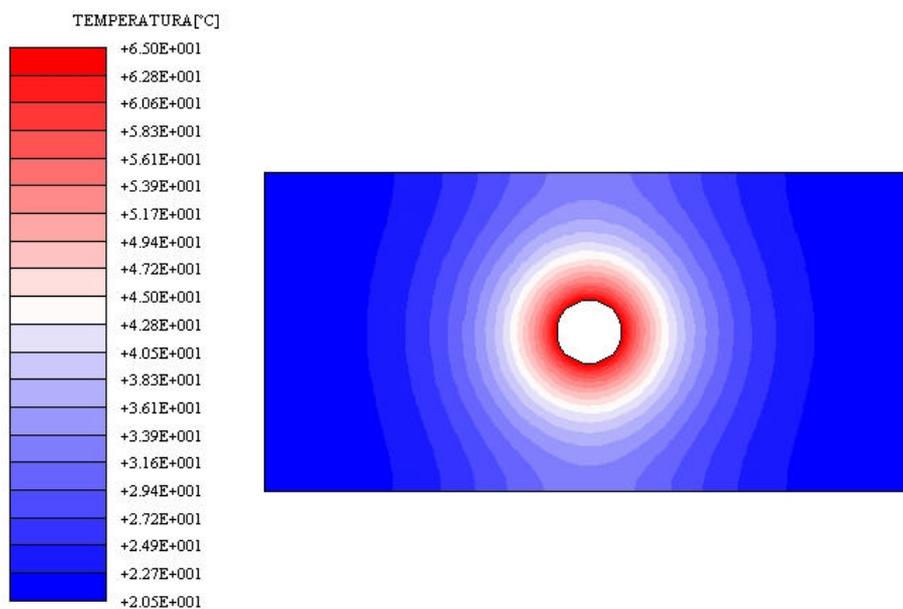


Figura 15 – Isotermas para o tempo de 9600 segundos (fonte de calor interna).

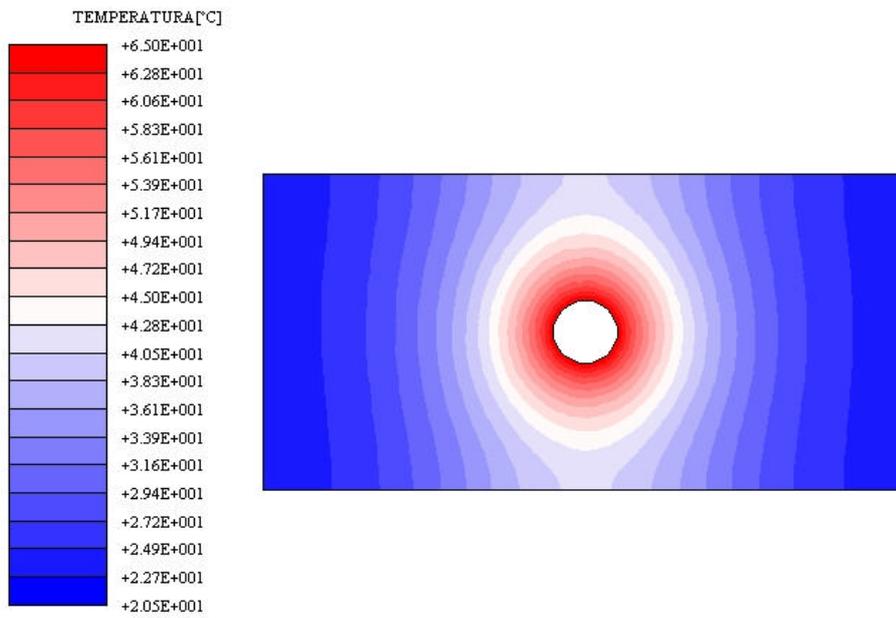


Figura 16 – Isotermas para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor interna).

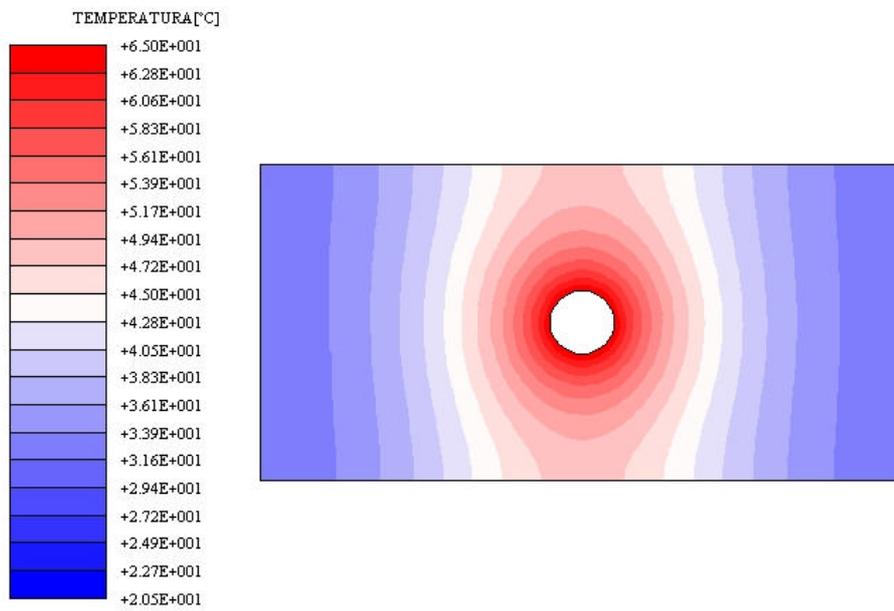


Figura 17 – Isotermas para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor interna).

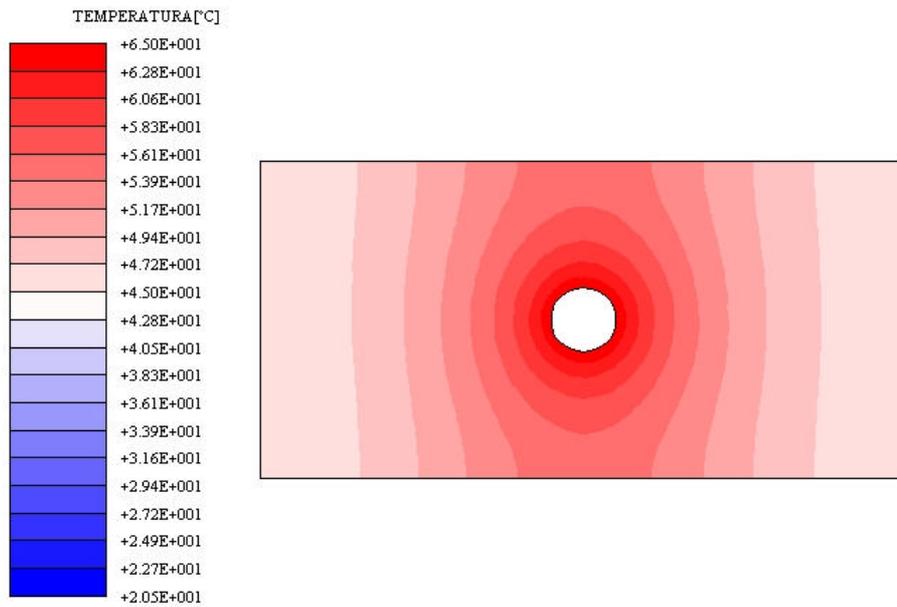


Figura 18 – Isotermas para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor interna).

As figuras a seguir mostram as variações da umidade, com as isoumidades em quatro diferentes tempos da simulação.

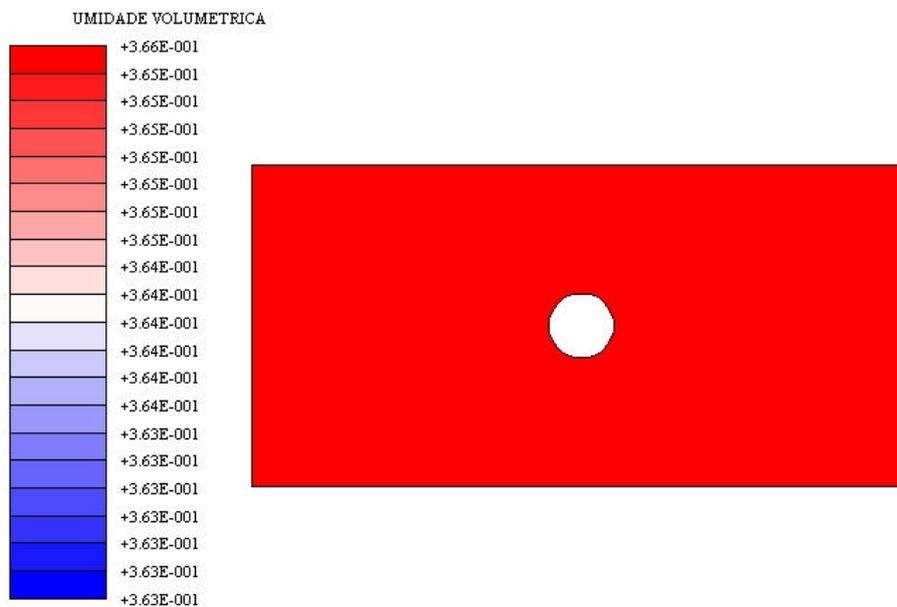


Figura 19 – Isoumidades para o instante inicial (fonte de calor interna).

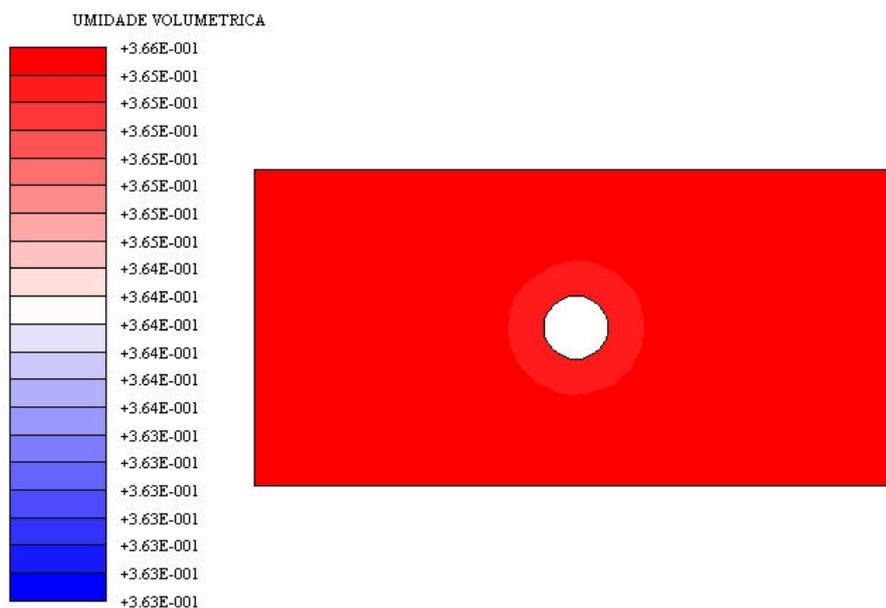


Figura 20 – Isomidades para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor interna).

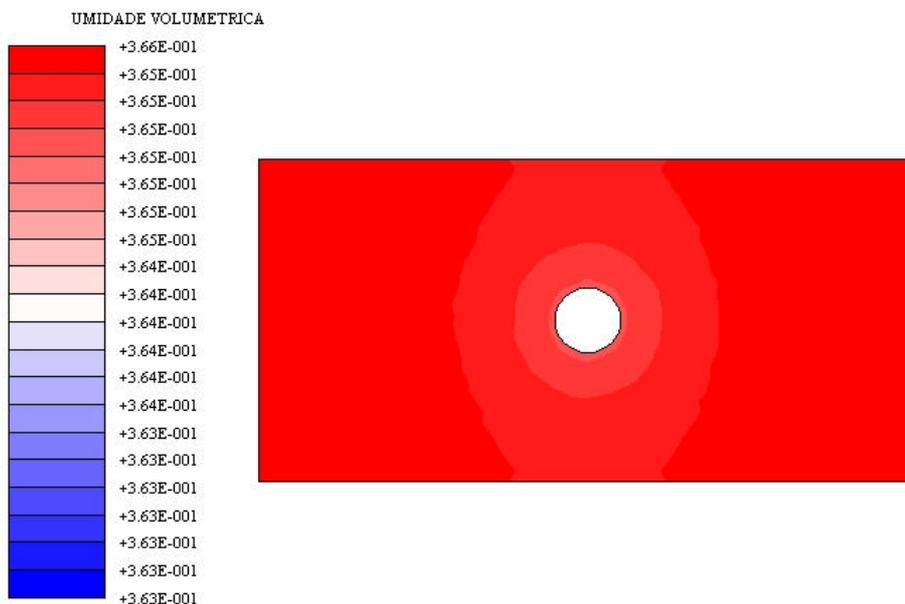


Figura 21 – Isomidades para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor interna).

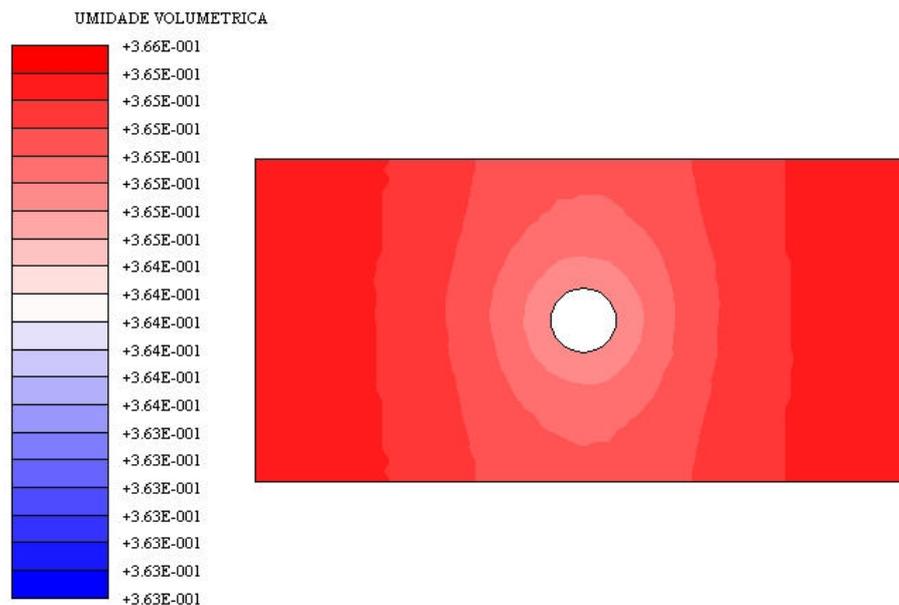


Figura 22 – Isoumidades para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor interna).

4.2.2

Malha bidimensional com fonte de calor externa

O processo de desorção térmica pode ser exemplificado ao simular uma fonte de calor externa que impõe uma temperatura a um recipiente com contornos impermeáveis onde se pode perceber o fluxo em direção a fonte de calor simulando um processo de volatilização dos gases presentes no solo confinado. Nesta simulação utilizou-se uma malha bidimensional com 1659 nós e 3166 elementos, com dimensões apresentadas na Figura 23, com uma fonte de calor prescrita (condição de contorno de Dirichlet) de 20 cm de comprimento situada na extremidade superior e central da malha. O meio poroso na região do fluxo encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -150 cm e uma temperatura de 25 °C, em todos os pontos da malha. O fluxo, portanto, será gerado apenas pelos gradientes de temperatura impostos, a partir de uma temperatura prescrita no cabo de 50 °C.

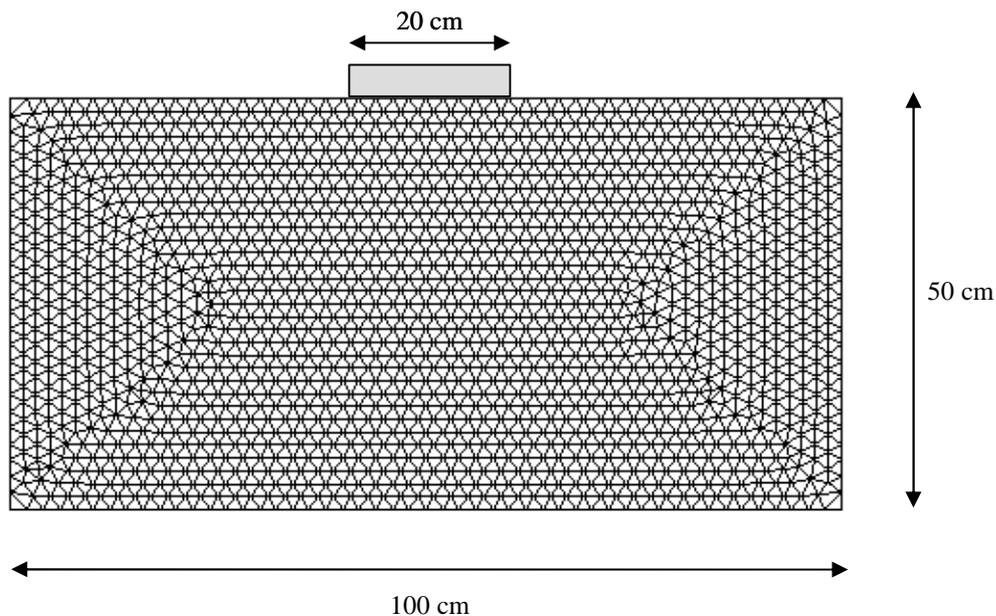


Figura 23 – Malha de elementos finitos representando o recipiente confinante.

Na simulação os parâmetros hidráulicos de van Genuchten são iguais aos parâmetros da simulação com fonte de calor interna, estipulados a partir do banco de dados do programa HYDRUS2D (*Simunek e van Genuchten, 1999*) descritos na Tabela 6.

Tabela 6 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (fonte de calor externa).

Parâmetros	θ_s	θ_r	n	α	K_s	por ⁴
Fonte de calor externa	0,38	0,068	1,09	0,008	0,0000556	0,42

Tabela 7 - Parâmetros térmicos (fonte de calor externa).

Parâmetros	θ_n	θ_o	λ_L	λ_T	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Fonte de calor externa	0,6	1e-2	0,5	0,1	-19,7	-96,2	252,1	19200	25100	41800

As condições de contorno de temperatura utilizadas são semelhantes as da simulação anterior, com um contorno impermeável onde não existe troca de calor com o meio externo, onde a temperatura após um determinado tempo de

⁴ porosidade

simulação equaliza com a temperatura na extremidade superior prescrita em todos os pontos da malha. As figuras abaixo mostram as variações da temperatura, com as isotermas em cinco diferentes tempos da simulação.

A simulação foi realizada tanto para fluxo horizontal quanto para fluxo vertical, com os resultados apresentados para o fluxo horizontal, destacando efeitos dos gradientes de temperatura. Os gradientes de temperatura gerados pela fonte de calor provocam um fluxo de umidade em direção ao contorno superior da malha, e no caso de um processo de desorção térmica, os gradientes de temperatura provocam a volatilização de contaminantes existentes no solo com fluxo em direção a superfície. As figuras a seguir mostram as variações da temperatura, com as isotermas em cinco diferentes tempos da simulação.

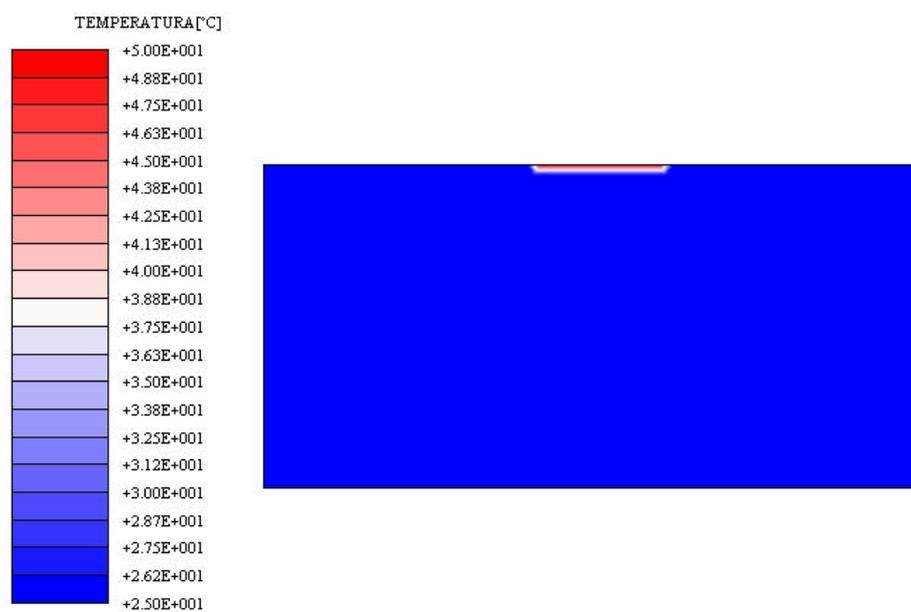


Figura 24 – Isotermas para o instante inicial (fonte de calor externa).

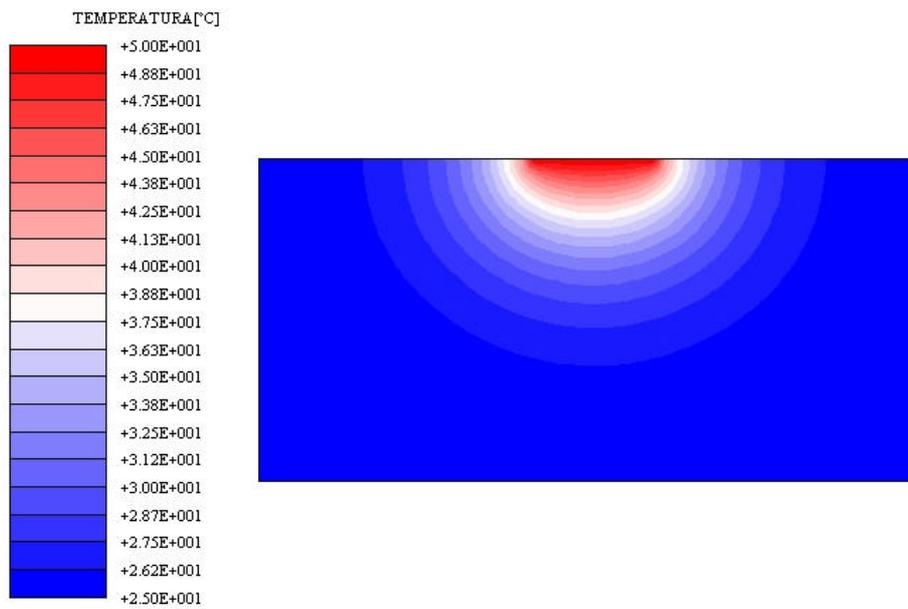


Figura 25 – Isothermas para o tempo de 9600 segundos (fonte de calor externa).

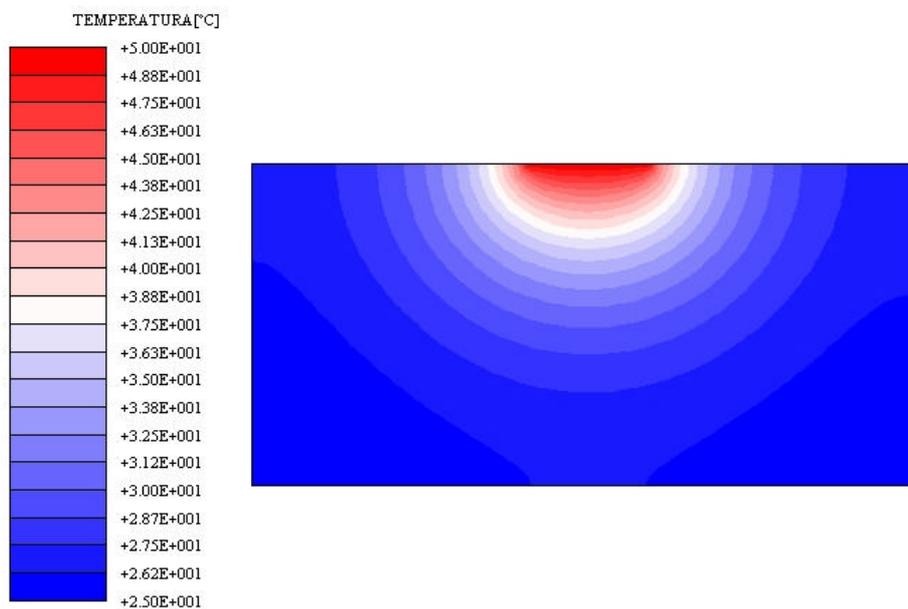


Figura 26 – Isothermas para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor externa).

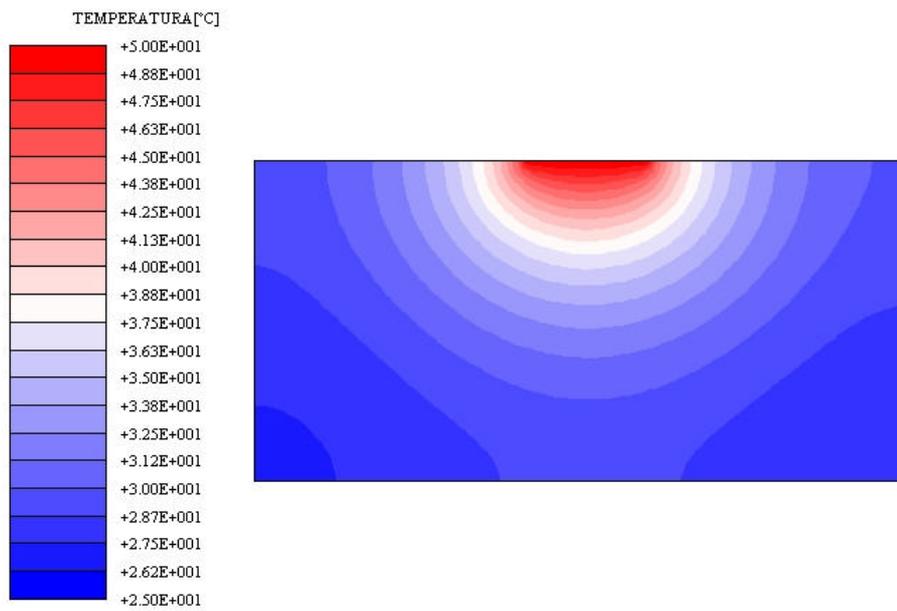


Figura 27 – Isotermas para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor externa).

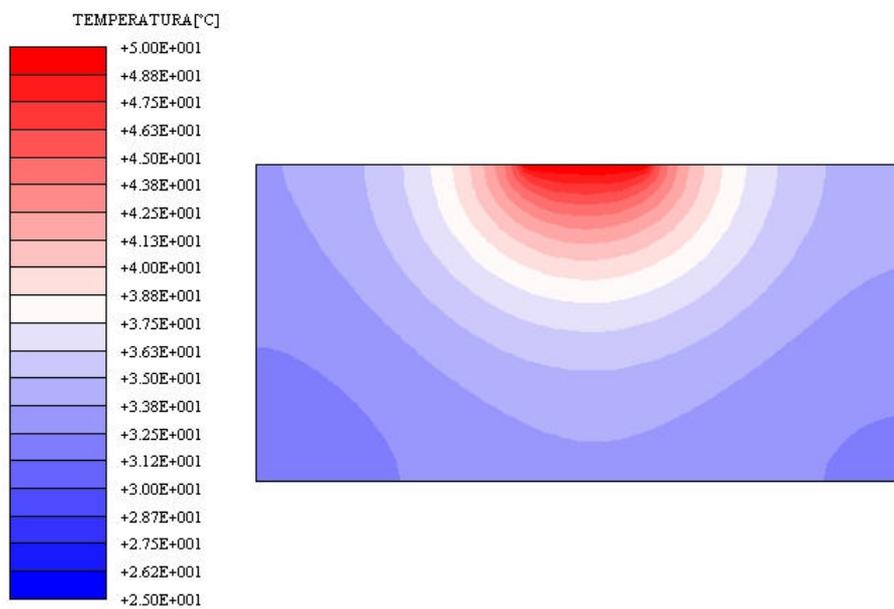


Figura 28 – Isotermas para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor externa).

As figuras a seguir mostram as variações da umidade, com as isoumidades em quatro diferentes tempos da simulação.

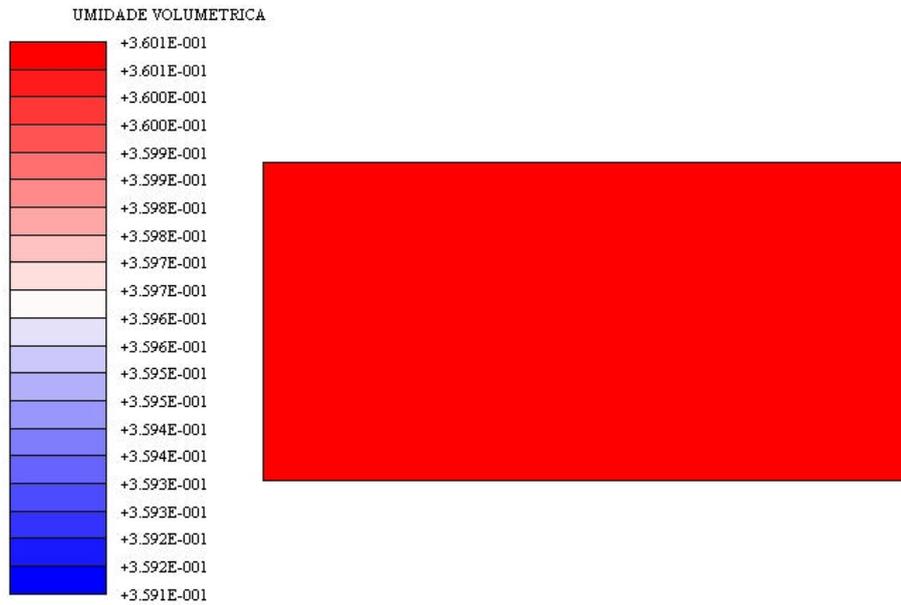


Figura 29 – Isoumidades para o instante inicial (fonte de calor externa).

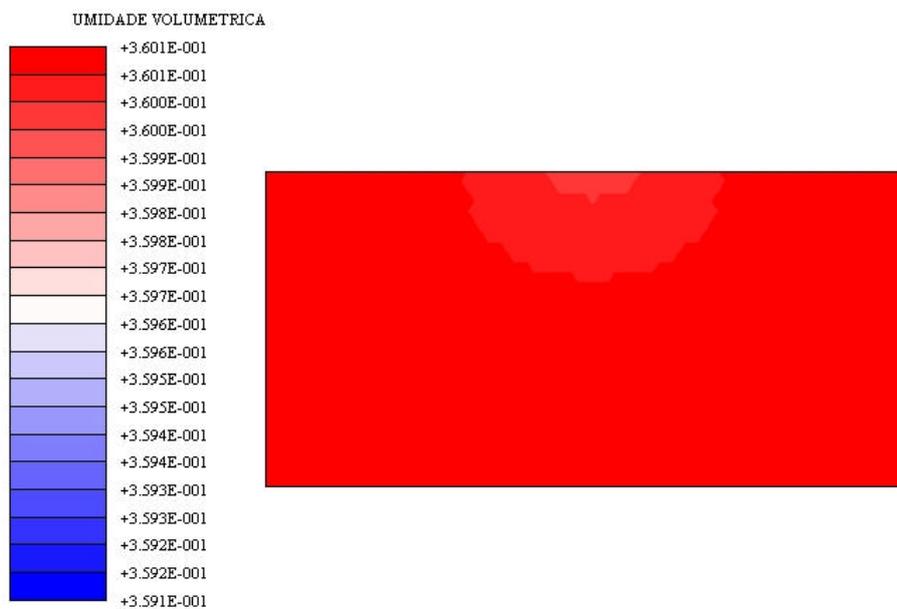


Figura 30 – Isoumidades para o tempo de 19200 segundos (fonte de calor externa).

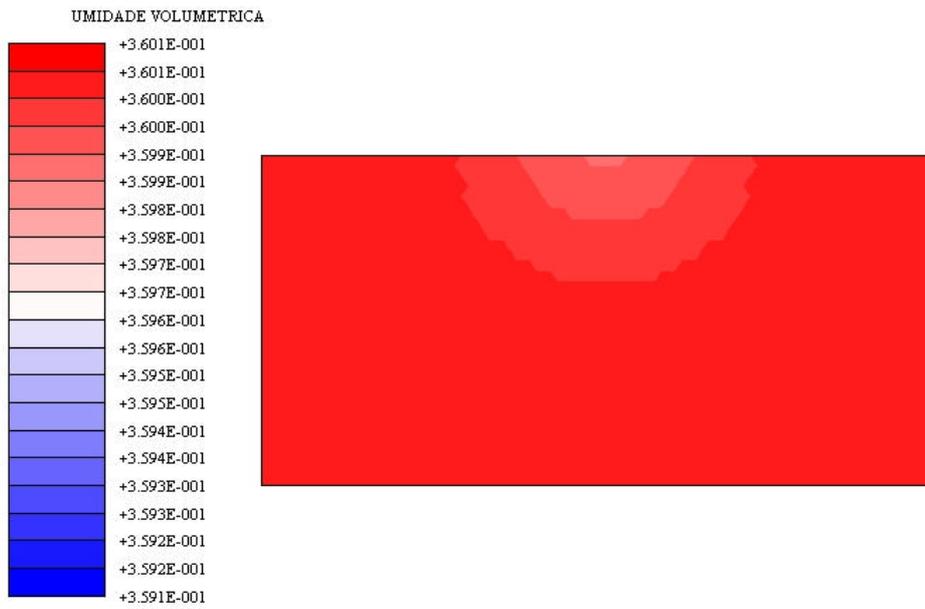


Figura 31 – Isoumidades para o tempo de 38400 segundos (fonte de calor externa).

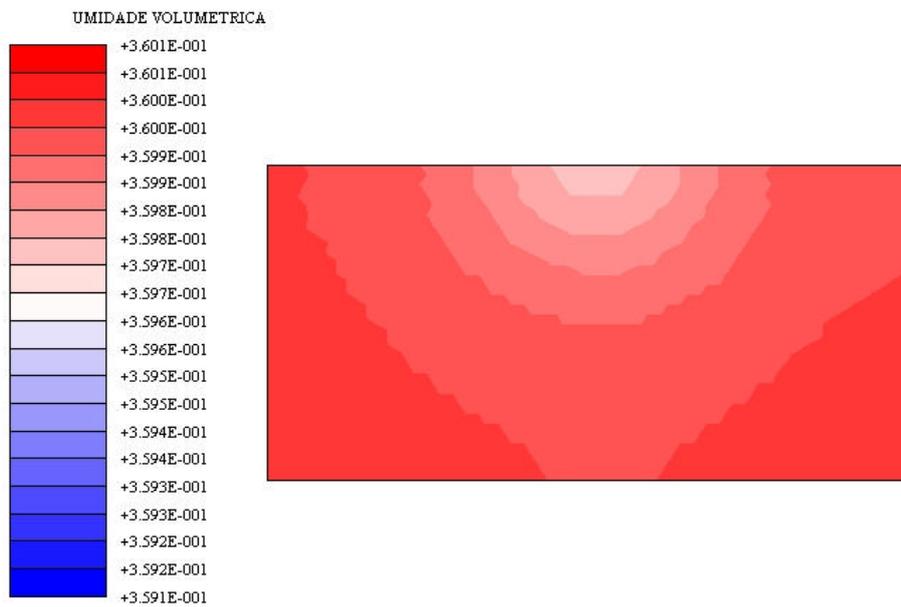


Figura 32 – Isoumidades para o tempo de 76800 segundos (fonte de calor externa).

4.2.3

Simulação de uma cobertura de resíduos sólidos

A simulação de coberturas de resíduos sólidos constitui outra aplicação importante do programa UNSATCHEM-2D (*Simunek e Suarez, 1993*) modificado. Como citado acima, infiltrações de água no resíduo podem acarretar sérios danos ao meio ambiente, como a contaminação das águas subterrâneas por metais pesados. O objetivo desta simulação é garantir um fluxo zero na camada de resíduo, simulando condições atmosféricas que levam a cobertura a processos de umedecimento e secagem de acordo com as condições climáticas do ambiente.

Para isso, são propostas duas configurações de cobertura. A primeira utiliza uma camada de argila entre a cobertura de solo orgânico e o material ou resíduo a ser protegido, simulado pela areia. A segunda configuração não utiliza a camada de argila na sua configuração. Ambas são apenas ilustrativas, e utilizam dados climáticos de precipitação verificando diferenças entre as duas configurações de cobertura.

Na primeira simulação, com a presença da camada de argila, denominada “cobertura A”, utilizou-se uma malha bidimensional com 3194 nós e 6116 elementos triangulares, com dimensões apresentadas na Figura 33. Na mesma figura pode-se verificar a inserção da argila entre a cobertura e o resíduo pelo material de cor vermelha. O meio poroso na região do fluxo encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -250 cm e uma temperatura de 25 °C, em todos os pontos da malha.

A “cobertura B”, que não tem a camada de argila, é formada por uma malha bidimensional com 2912 nós e 5557 elementos triangulares, com dimensões apresentadas na Figura 34. O meio poroso na região do fluxo, idêntico ao da “cobertura A”, encontra-se não-saturado com carga de pressão inicial igual a -250 cm e uma temperatura de 25 °C, em todos os pontos da malha.

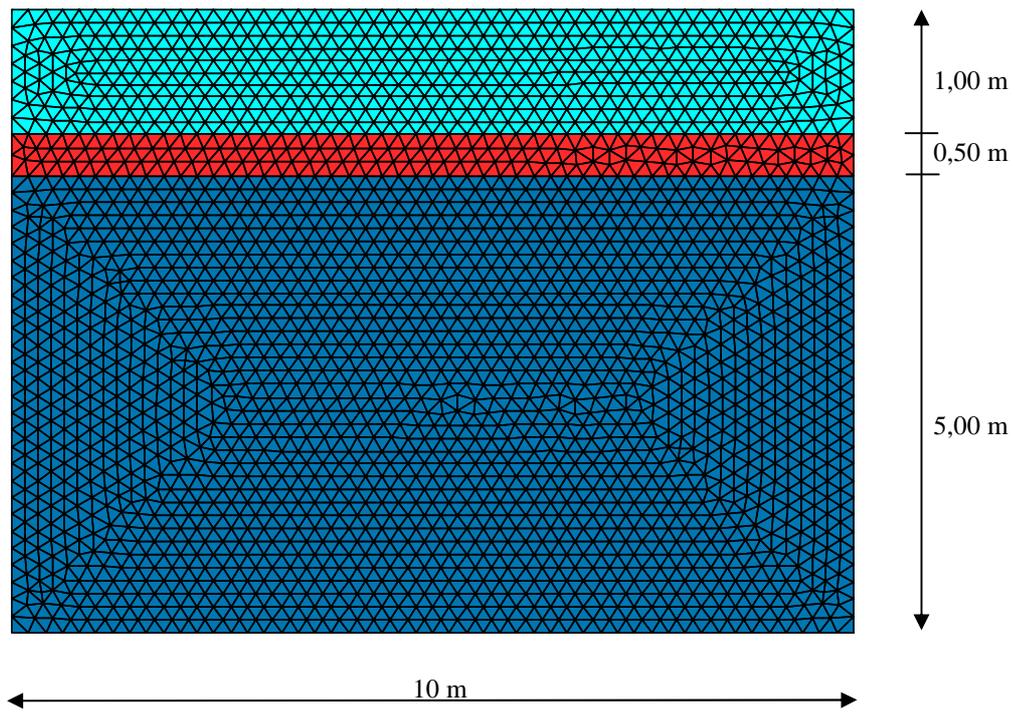


Figura 33 – Malha de elementos finitos representando a “cobertura A”.

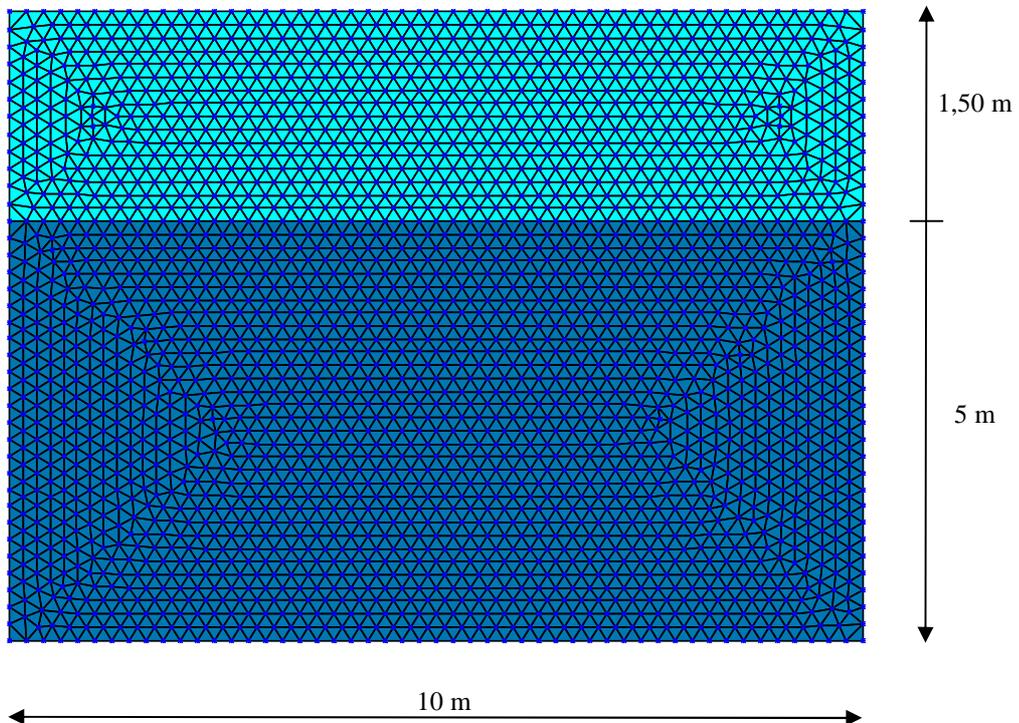


Figura 34 – Malha de elementos finitos representando a “cobertura B”.

Na simulação utilizou-se parâmetros hidráulicos (van Genuchten) e térmicos dos solos a partir do banco de dados do programa HYDRUS2D (*Simunek e van Genuchten, 1999*) descritos na Tabela 8, Tabela 9, Tabela 10 e Tabela 11.

Tabela 8 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (cobertura A).

Cobertura A	θ_s	θ_r	n	α	K_s	Por ⁵
Solo orgânico	0,43	0,078	1,56	0,036	0,000288	0,41
Argila	0,38	0,068	1,09	0,008	0,000055	0,42
Areia	0,43	0,045	2,68	0,145	0,008250	0,39

Tabela 9 - Parâmetros térmicos (cobertura A).

Parâmetros	θ_n	θ_o	λ_L	λ_T	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Solo orgânico	0,6	1e-2	0,5	0,1	24,3	39,3	153,4	19200	25100	41800
Argila	0,6	1e-2	0,5	0,1	-19,7	-96,2	252,1	19200	25100	41800
Areia	0,6	1e-2	0,5	0,1	22,8	-240,6	490,9	19200	25100	41800

Tabela 10 – Parâmetros hidráulicos de van Genuchten (cobertura B).

Cobertura B	θ_s	θ_r	n	α	K_s	Por ⁵
Solo orgânico	0,43	0,078	1,56	0,036	0,000288	0,41
Areia	0,43	0,045	2,68	0,145	0,008250	0,39

Tabela 11 - Parâmetros térmicos (cobertura B).

Parâmetros	θ_n	θ_o	λ_L	λ_T	b1	b2	b3	Cn	Co	Cw
Solo orgânico	0,6	1e-2	0,5	0,1	24,3	39,3	153,4	19200	25100	41800
Areia	0,6	1e-2	0,5	0,1	22,8	-240,6	490,9	19200	25100	41800

Os dados de precipitação e evaporação são colocados de acordo com o período de simulação estabelecido, não existindo um período mínimo ou máximo para a entrada dos dados climáticos. O programa possibilita também a utilização de dados que simulem a absorção de água pela cobertura vegetal na superfície. Em ambas simulações foram utilizados tempos de 180 dias, com a inserção de dados aleatórios, meramente ilustrativos, a cada 30 dias, conforme Tabela 12.

⁵ porosidade

As condições de contorno utilizadas em ambos os casos foram apenas condições de contorno atmosféricas na superfície com contorno impermeável nas outras extremidades. A utilização de condições de contorno atmosféricas não elimina o uso de quaisquer outras condições de contorno existente no programa.

Tabela 12 – Dados de precipitação utilizados nas simulações de cobertura de resíduos.

Tempos (dias)	Precipitação (cm/dia)
30	0,1
60	0,1

A condição de contorno de evaporação imposta é de acordo com a eq.3.32, onde o ciclo de temperatura é descrito por uma onda senoidal (Figura 35). Pode-se verificar no gráfico da Figura 35, que mostra a variação da temperatura ao longo de dois dias completando dois ciclos, a incidência da maior temperatura por volta do meio-dia.

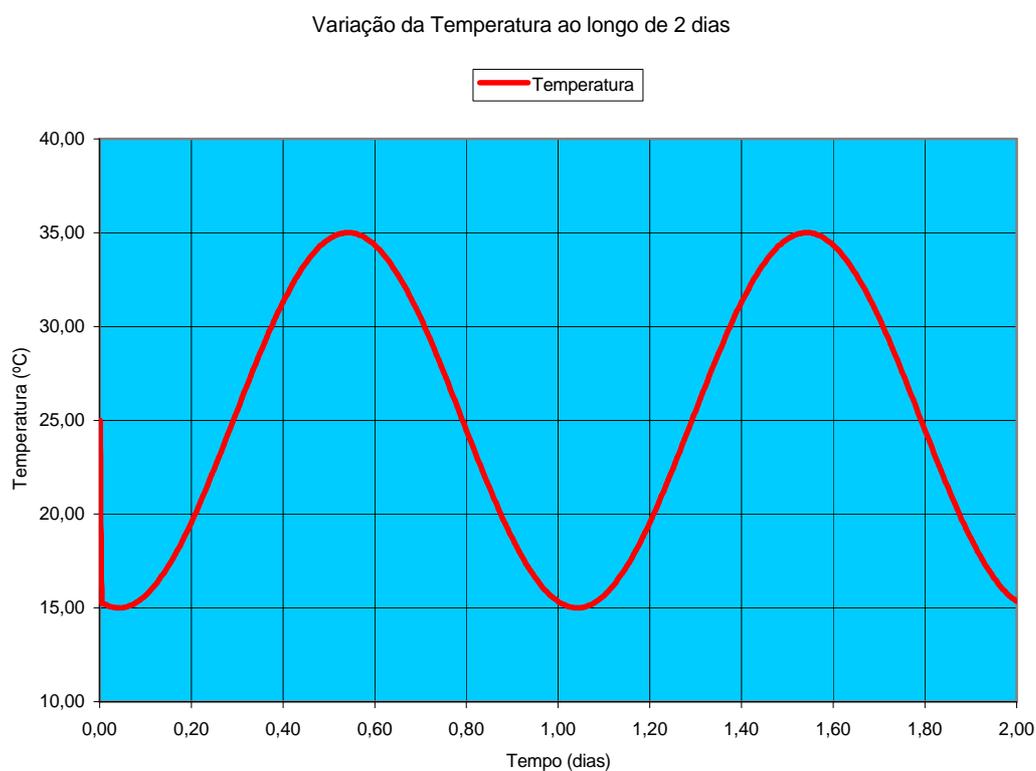


Figura 35 – Variação da temperatura ao longo de dois dias.

As Figuras 36, 37 e 38 demonstram a variação da carga de pressão, umidade volumétrica e temperatura respectivamente, em um ponto localizado 50 cm abaixo da superfície da cobertura. Ao final da simulação pode-se verificar que a cobertura A permitiu um maior avanço da frente de saturação, apesar da existência da camada de argila, porém para verificar qual cobertura vai garantir fluxo zero à camada de areia é necessário um tempo de simulação maior. Nota-se ainda que as condições de contorno atmosféricas impostas causam um fluxo evaporativo a partir de 60 dias, onde não existem condições de precipitação impostas. Na Figura 38, o ciclo da temperatura atmosférica é comparado ao ciclo da temperatura no interior do meio poroso, verificando a diferença entre os ciclos devido a condutividade térmica dos materiais constitutivos das camadas.

O exemplo desta simulação é meramente ilustrativo, sendo necessária a simulação de casos reais com seus respectivos parâmetros hidráulicos e térmicos para a verificação das condições de contorno atmosféricas. Uma alternativa é a utilização de diversos tipos de solos com diferentes coeficientes de permeabilidade na camada intermediária.

A Figura 39 apresenta as isoumidades para três diferentes tempos de simulação da cobertura A. No instante inicial, onde os materiais apresentam suas umidades iniciais calculadas a partir da carga de pressão inicial. Após 90 dias de simulação, onde já houve um avanço da frente de saturação (precipitação) e está ocorrendo um fluxo evaporativo e após 180 dias de simulação, onde o fluxo evaporativo equalizou a umidade na camada de solo orgânico e em um tempo de simulação maior continua a evaporação.

Na Figura 40 estão demonstradas as isoumidades da cobertura B em três diferentes tempos igualmente à cobertura A. No primeiro instante os materiais estão com suas umidades iniciais. Após 90 dias à frente de saturação percorreu a camada de solo orgânico conforme condições de contorno atmosféricas com valores de precipitação (Tabela 12) e em seguida inicia o fluxo evaporativo. Em 180 dias de simulação, o fluxo evaporativo continua ocorrendo conforme as isoumidades correspondentes.

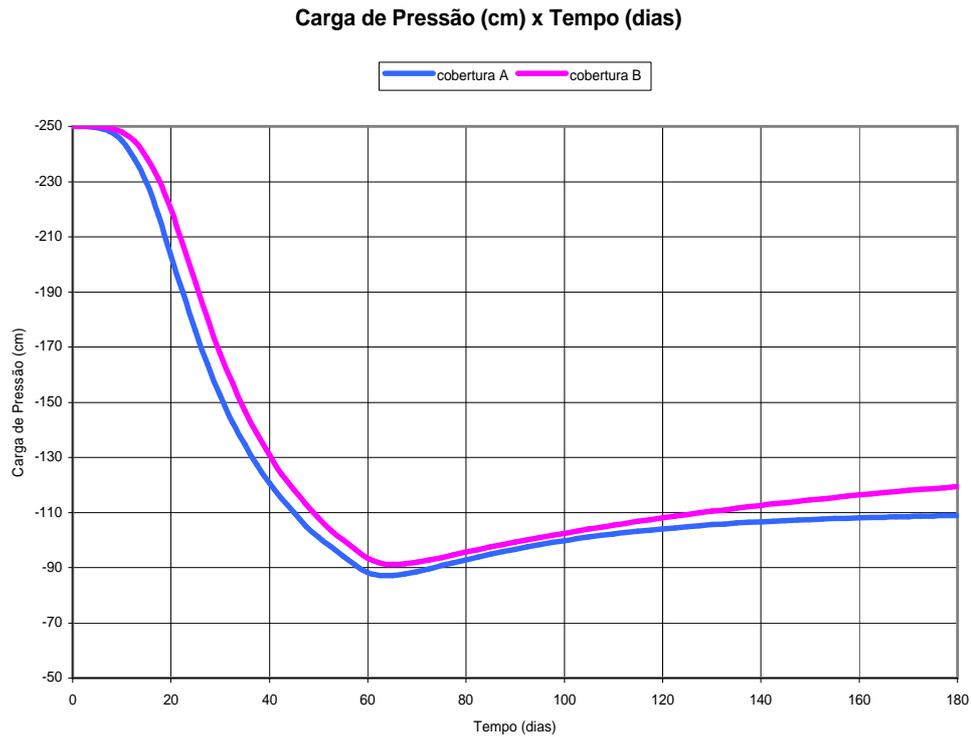


Figura 36 – Variação da carga de pressão ao longo do tempo para as duas coberturas.

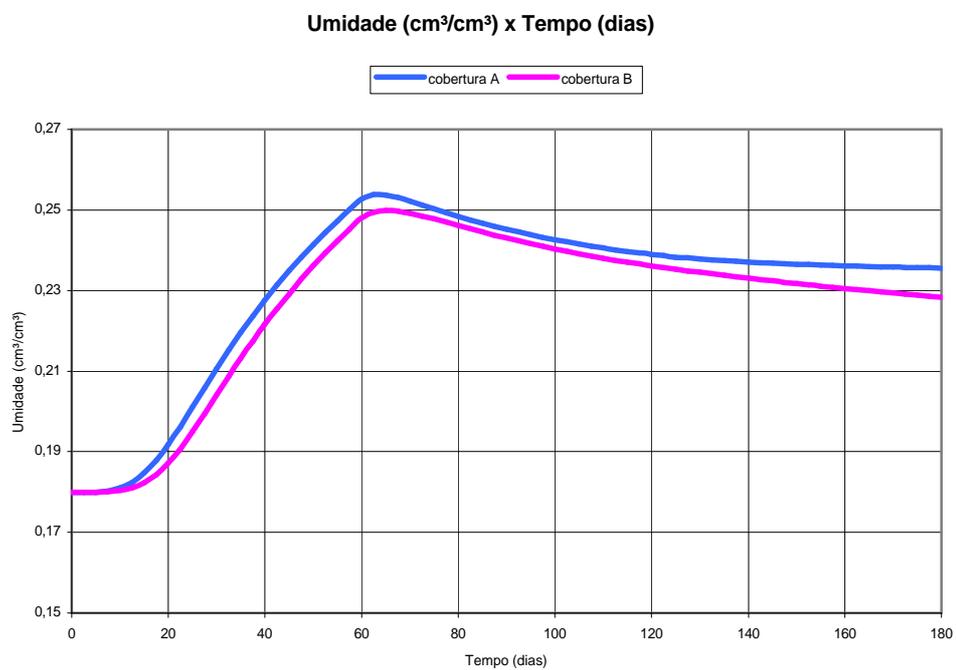


Figura 37 – Variação da umidade ao longo do tempo para as duas coberturas.

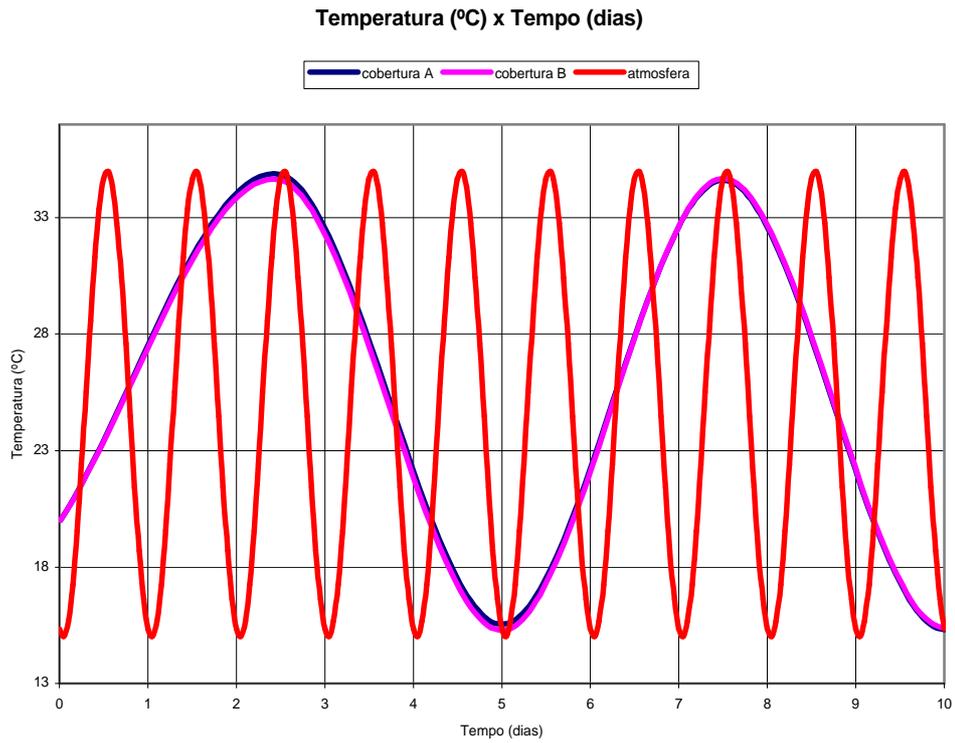


Figura 38 – Variação da temperatura ao longo do tempo para as duas coberturas.

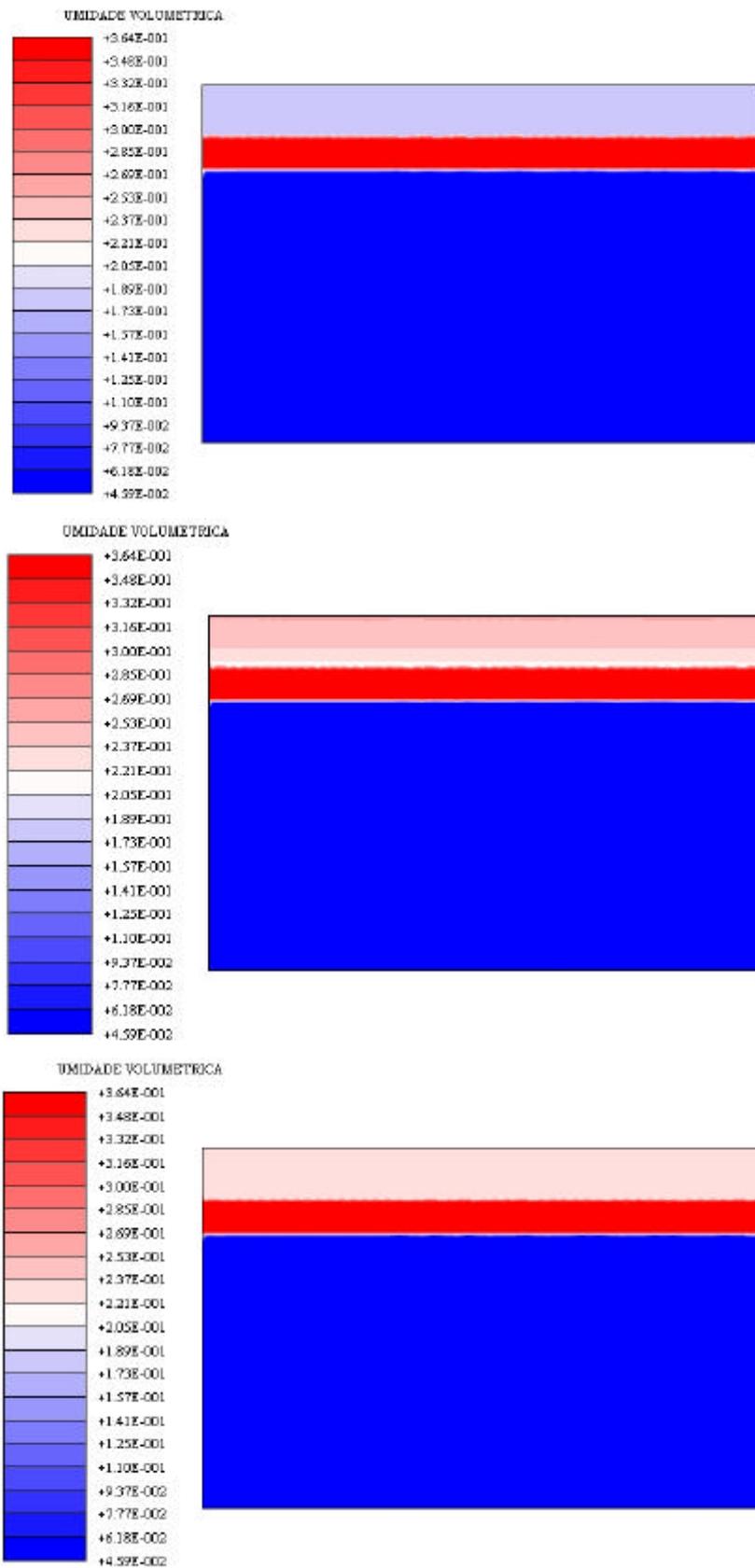


Figura 39 – Isohumidades da simulação da cobertura A nos tempos de 0, 90 e 180 dias.

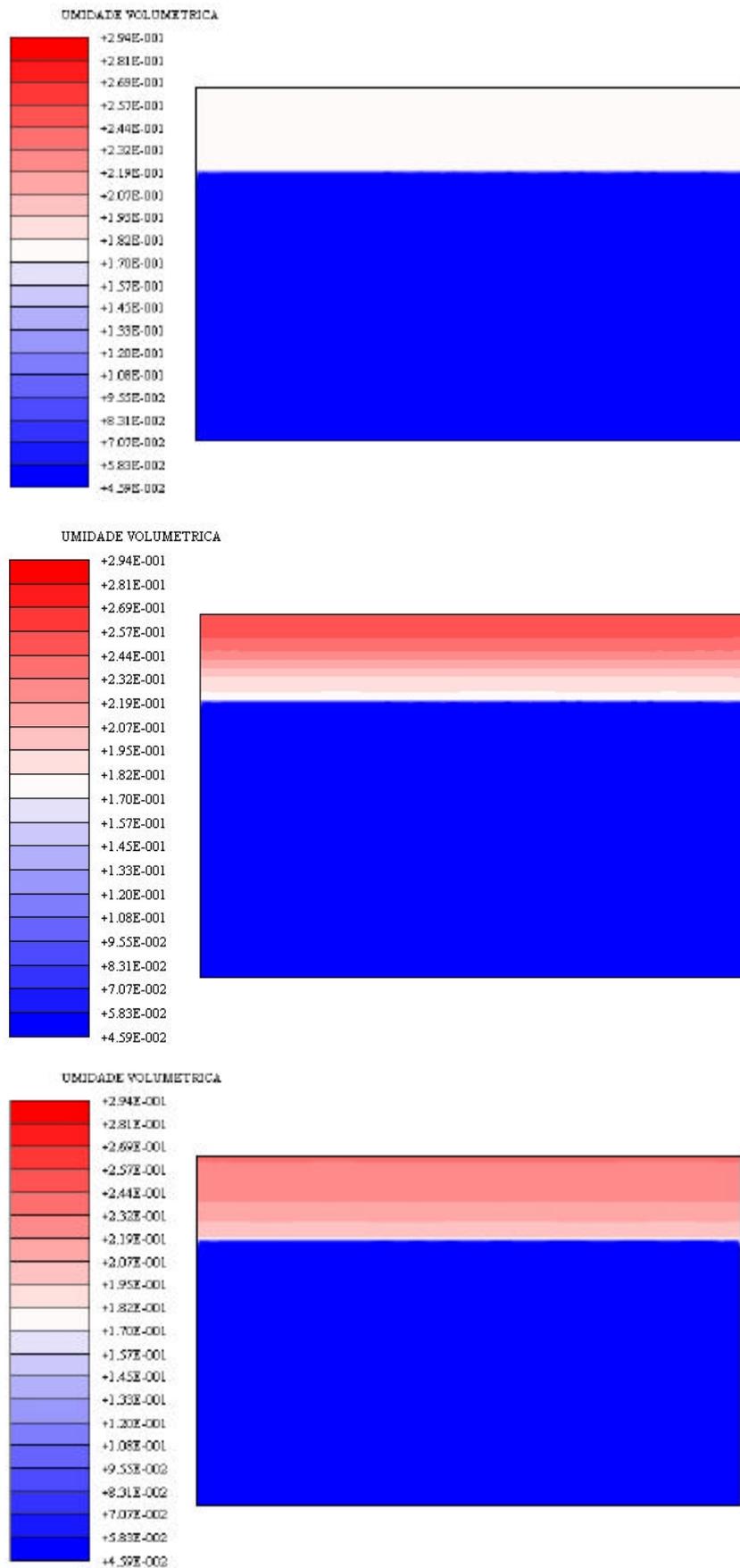


Figura 40 – Isohumidades da simulação da cobertura B nos tempos de 0, 90 e 180 dias.