

2 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

2.1. Generalidades

No mundo inteiro, os aquíferos - formações geológicas capazes de armazenar as águas - estão sob perigo cada vez maior de contaminação em decorrência da urbanização, do desenvolvimento industrial, das atividades agrícolas e das empresas de mineração.

Uma grande variedade de microrganismos patogênicos pode ser encontrada em excrementos de seres humanos e de outros animais de sangue quente. Por isso, a contaminação de águas por material de origem fecal é uma das formas mais importantes de introdução de microrganismos patogênicos nas águas (Cajazeiras, 2007). A introdução destes microrganismos na água subterrânea pode ser atribuída às seguintes causas: ruptura accidental das redes de esgoto, vazamentos de tanques sépticos residenciais e latrinas, água infiltrada através de aterros sanitários, recarga artificial de aquíferos por água de esgoto tratada, e a aplicação de esgoto no solo (Corapcioglu e Haridas, 1984). Poços mal construídos são particularmente propensos a apresentar esse tipo de contaminação.

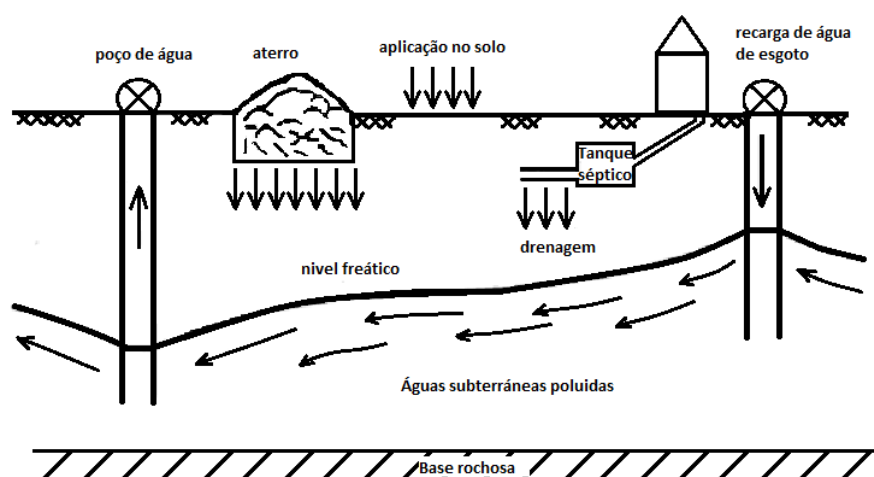


Figura 2.1. Fontes de contaminação biológica das águas subterrâneas (Adaptado de Corapcioglu e Haridas, 1984)

A recarga artificial de fontes de água subterrânea por infiltração de águas residuais e uma proposta amplamente usada para disposição de águas residuais domésticas e municipais, por exemplo, na aplicação do sistema alternativo *on-site* para o tratamento de águas residuais em áreas costeiras denominado *Marshland Upwelling System* (Richardson, 2002).

Outra fonte de bactérias em solos ou em aquíferos de água subterrânea é a aplicação controlada ou injeção de cepas de bactéria para biorremediação *in situ* (bioaumentação) de locais contaminados ou como organismos de biocontrole contra certas doenças das plantas (Kretzschmar *et al.*, 1999).

Conhecimento sobre transporte de bactérias no meio poroso é assim um requerimento chave para a disposição segura de águas residuais e para o desenvolvimento de estratégias de biorremediação efetiva de solos contaminados e aquíferos utilizando cepas de bactéria.

Existem perfis naturais de solo que podem degradar alguns poluentes até atingirem a água subterrânea. Mas também, estudos confirmaram que patogênicos penetram facilmente, rapidamente e profundamente durante eventos de chuvas fortes (Chu *et al.*, 2001; citado por Knappett, 2006). Foppen *et al.* (2008) estudaram os mecanismos de transporte vertical de águas residuais em um aquífero superficial aluvial pobremente consolidado e os resultados indicaram a presença de *E. coli* em uma concentração de 10^6 UFC/100 mL, em profundidades de 50 m abaixo da superfície do solo.

Por tanto, a preocupação com a contaminação da água subterrânea concentra-se principalmente nos aquíferos não confinados, especialmente nas áreas em que a zona vadosa é pouco espessa e o lençol freático é raso. Entretanto, há riscos significativos de poluição em pontos em que o aquífero é semiconfinado, se os aquitardes confinantes forem relativamente pouco espessos e permeáveis (Foster *et al.*, 2006).

De um modo geral os microrganismos patogênicos podem ser agrupados como: Vírus, Bactérias, Protozoários e Ovos de Helminhos. As bactérias e vírus mais relevantes em termos de patogenicidade que poderiam possivelmente ser transportados pelas águas subterrâneas são: *Salmonella* sp., *Shigella* sp., *Yersinia enterocolitica*, *Y. pseudotuberculosis*, *Leptospira* sp., *Francisella tularensis*, *Dyspepsia coli*, *E. coli* enterotóxica, *Pseudomonades*, *Vibrio* sp., *Legionella* sp. E os vírus infecciosos hepatite vírus, pólio vírus, Coxsackie víruses, adenovírus, rotavírus, e Norwalklike vírus (Pekdeger e Matthes, 1983).

Organizações internacionais como a Organização Mundial de Saúde (OMS) e outras, tem repetidamente expressado preocupação sobre a

disponibilidade e qualidade dos recursos de água, e apontado que doenças relacionadas com a água constituem ainda sérios problemas de saúde causados pela poluição microbiológica, saneamento inadequado e falta de água limpa. A Tabela 2.1 mostra as principais doenças de veiculação hídrica, tendo como agente causal a ingestão de água contaminada.

Tabela 2.1. Doenças causadas pelo consumo de água contaminada por excretos humanos ou animais (Bactérias, Protozoários e Vírus) (Cajazeiras, 2007)

	Doença	Agente Causal	Sintomas
Bactéria	Febre tifóide	<i>Salmonella typhi</i>	Febre elevada, diarreia, ulceração do intestino delgado
	Disenteria bacilar	Bacilo disentérico	Forte Diarreia
	Cólera	<i>Vibrio cholerae</i>	Diarreia extremamente forte, desidratação, alta taxa de mortalidade
	Diarreia	<i>Escherichia coli</i>	
Protozoários	Leptospirose	<i>Leptospira interrogans</i>	Icterícia, febre
	Salmonelose	<i>Salmonela</i>	Febre, náusea, diarreia.
	Disenteria amebiana	<i>Entamoeba histolytica</i>	Diarreia prolongada, com sangramento, abscessos no fígado e intestino fino
Vírus	Giardiase	<i>Giardia lamblia</i>	Diarreia leve a forte, náusea, indigestão, flatulência
	Hepatite infecciosa	Vírus da hepatite A	Icterícia, febre
	Gastroenterite	Enterovírus, parvovírus, rotavírus	Diarreia leve a forte
	Paralisia infantil	<i>Poliomielites vírus</i>	Paralisia

É evidente então, a suprema importância de prevenir a ingestão de água subterrânea contaminada. Nesse sentido, para avaliar a proteção das zonas subterrâneas contra microrganismos patogênicos (principalmente bactérias e vírus), os mecanismos de controle que devem ser estudados são principalmente, a persistência das bactérias e de vírus sob condições biológicas e químicas da água subterrânea e os processos físicos, físico-químicos, e microbiológicos que controlam o transporte de microrganismos na água subterrânea (Pekdeger e Matthes, 1983).

O interesse na determinação dos fatores que controlam o transporte através de materiais geológicos e a derivação de uma teoria adequada para descrever o transporte tem sido reforçado nas últimas duas décadas, devido à preocupação referida à poluição dos recursos de água subterrânea. As questões incluem a contaminação das águas subterrâneas por patogênicos, o potencial do transporte bacteriano em conjunção com a biodegradação de contaminantes

orgânicos na subsuperfície, o potencial de descarga de microrganismos gerados geneticamente no meio geológico e a participação dos microrganismos como facilitadores do transporte dos radionuclídeos na água subterrânea (Hornberger *et al.*, 1992).

2.2. Áreas de proteção

Reconhecido o problema da contaminação da água subterrânea, segundo Foster *et al.* (2006) a abordagem mais lógica para este problema é, considerá-lo como a interação entre a vulnerabilidade do aquífero à contaminação e a carga contaminante que é, será ou pode ser aplicada no meio como resultado da atividade humana.

Um fator importante que influencia o perigo representado por uma atividade antrópica é sua proximidade de uma fonte de abastecimento subterrânea (poço ou nascente). Sendo a avaliação dos perigos de contaminação do aquífero dependente em primeiro lugar da definição da zona de captura (perímetros de proteção do manancial) e, em segundo lugar, da mobilidade, persistência e dispersão dos contaminantes dentro do regime de fluxo do aquífero (Foster *et al.*, 2006).

Uma área de proteção interna baseada na distância equivalente a um tempo de trânsito horizontal médio na zona saturada tem sido amplamente adotada para a proteção contra atividades que potencialmente infiltram vírus, bactérias e parasitas patogênicos, como é o caso, por exemplo, das águas residuais e dejetos espalhados nas lavouras. No entanto, o tempo de trânsito real adotado em diferentes países em diferentes épocas apresentou variações significativas (de 10 a 400 dias) (Foster *et al.*, 2006).

O conceito de proteção das fontes de abastecimento de água subterrânea foi estabelecido já há muitas décadas, fazendo parte dos códigos jurídicos dos países europeus, no trabalho realizado por Coelho e Duarte, (2003) são apresentados os perímetros de proteção estabelecidos para alguns desses países. No entanto, o dimensionamento de zonas de proteção de águas subterrâneas está baseado em observações empíricas da eliminação de microrganismos na água subterrânea.

Por exemplo, no caso da Nova Zelândia, segundo Pang *et al.* (2003), é estabelecida de forma arbitrária, como proteção, uma distância que varia de 30 a 50 metros para a água subterrânea. Na Áustria, na Alemanha, e na Holanda, as

zonas de proteção de águas subterrâneas são estabelecidas através do cálculo do tempo de fluxo até o poço, de 50 a 60 dias, período considerado que cobre o tempo de sobrevivência de bactérias patogênicas e vírus. Na Suíça, onde os processos físicos e físico-químicos são mais enfatizados, as áreas de proteção são calculadas com base de 10 dias de tempo de fluxo ou pelo menos uma trajetória de fluxo de 100 m de comprimento através do meio poroso (Pekdeger e Matthes, 1983).

Na América Latina e no Caribe, de acordo com a *Pan American Health Organization* (PAHO, 1998) a poluição das águas subterrâneas ameaça diretamente a saúde de grandes segmentos da população. Como uma estimativa, 50% das comunidades depende exclusivamente de águas subterrâneas como fonte de água. E, no entanto, apesar da importância deste recurso como fonte de água potável, a proteção de aquíferos não recebeu a devida atenção na Região.

Conforme Toscano *et al.* 2008, no Brasil, sendo as águas subterrâneas bens dos estados, não são objeto de leis federais que regulamentem seu uso. No entanto, podem ser encontrados alguns dispositivos legais referentes, tais como a Resolução 396 de 03 de abril de 2008 do CONAMA (Conselho Nacional de Meio Ambiente) que prevê a implementação de Áreas de Proteção de Aquíferos e Perímetros de Proteção de Poços de Abastecimento e de Áreas de Restrição e Controle do Uso da Água Subterrânea. Apenas onze estados brasileiros dispõem de legislação que criam áreas de proteção dos aquíferos e áreas de proteção sanitária, não sendo sugeridos, em nenhuma legislação, métodos de delimitação de áreas de proteção.

Finalmente, ao definir o nível de controle necessário para proteger a qualidade da água subterrânea, vale mais a pena em termos de custo e será menos prejudicial ao desenvolvimento econômico, utilizar a capacidade de atenuação natural dos estratos de cobertura do aquífero, em vez de aplicar ao terreno controles universais sobre o uso do solo e sobre a emissão de efluentes (Foster *et al.*, 2006).

2.3. Sobrevivência de bactérias e vírus na água subterrânea

As oportunidades de contaminação da água subterrânea incrementam-se devido à capacidade de sobrevivência dos microrganismos no meio subsuperficial por longos períodos de tempo. Segundo Pekdeger e Matthes

(1983) dois grupos de microrganismos devem ser diferenciados quando é considerada a sobrevivência de bactérias e vírus na água subterrânea; os microrganismos autóctones e os microrganismos alóctones, estes últimos podendo ser patogênicos ou produtores de enterotoxinas.

As bactérias aloctônicas ingressam dentro da água subterrânea devido à contaminação e são eliminadas geralmente nesse ambiente. Durante a fase inicial (fase Lag), sob condições estéreis e oligotróficas, podem sobreviver por vários meses sem um decréscimo substancial ou ainda incrementar o número de células, enquanto que, em águas contendo bactérias predadoras, esta fase pode-se limitar a poucos dias (Matthess *et al.*, 1988)

As enterobactérias, em geral, persistem no solo durante dois ou três meses. Entretanto, já foi detectado tempo de sobrevivência maior que cinco anos (Corapcioglu e Haridas, 1984). Estudos de laboratório reportados por Gerba *et al.* (1975), citado por Abu-Ashour *et al.* (1993), indicam um tempo de sobrevivência para a *E. coli* maior a 4,5 meses em água subterrânea mantida na escuridão.

É assim que a sobrevivência de bactérias no solo, normalmente varia a partir de umas poucas semanas até poucos meses. São muitos os fatores que afetam a sobrevivência dos microrganismos nos ambientes subsuperficiais. A Tabela 2.2 resume os efeitos individuais destes fatores sobre a sobrevivência de bactérias e vírus em um ambiente subsuperficial.

Tabela 2.2. Fatores físico-químicos que afetam a sobrevivência de bactérias entéricas e vírus no solo (Abu-Ashour *et al.*, 1993)

Fator	Impacto na sobrevivência
pH	Menor tempo de sobrevivência em solos ácidos (pH 3-5) do que em solos alcalinos
Conteúdo de água no solo	Maior tempo de sobrevivência em solos úmidos e durante períodos de chuvas fortes
Conteúdo de matéria orgânica	Aumento da sobrevivência e possibilidade de crescimento quando existe quantidade suficiente de matéria orgânica
Textura, tamanho e distribuição das partículas do solo	Principalmente solos finos, minerais de argila e substâncias húmicas incrementam a retenção de água no solo que aumenta o tempo de sobrevivência
Temperatura	Baixas temperaturas incrementam o tempo de sobrevivência
Disponibilidade de nutrientes	Aumento do tempo de sobrevivência
Propriedades de adsorção	Os microrganismos parecem melhorar sua persistência quando se encontram em estado de sorção
Luz solar	Tempos de sobrevivência são curtos na presença de luz solar direta

Informação sobre as características de sobrevivência dos microrganismos é geralmente referida como decaimento, eliminação ou inativação, que é a destruição irreversível do contaminante através de processos físicos, químicos ou biológicos. A eliminação de bactérias e vírus pode ser aproximadamente descrita por uma função exponencial:

$$C_{(t)} = C_0 e^{-\lambda(t-t_0)} \quad (2.1)$$

onde $t \geq t_0$ e $t_0 \leq 7$ dias; C_0 e C é a concentração inicial e a concentração no tempo t , e λ é a constante de eliminação calculada através da equação (2.2).

$$\lambda = \frac{\ln 2}{\tau_{1/2}} \quad (2.2)$$

onde $\tau_{1/2}$ é a vida média do microrganismo, que varia geralmente entre 1 e 20 dias (Pekdeger e Matthes, 1983).

A equação (2.1) expressa que depois de uma eliminação muito rápida no início, bactérias e vírus podem ainda existir em pequenas quantidades na água subterrânea, mesmo depois de longos períodos (*i.e.* 6 meses). A constante de eliminação depende de parâmetros físicos, químicos, e biológicos e é específico para diferentes espécies microbianas, que corresponde a coeficientes de decaimento, variando desde 0,035 até 0,69 d^{-1} , baseado na equação (2.1) (Richardson, 2002). Ainda não é possível prever com precisão necessária as constantes de eliminação com base nos fatores de controle, que devem ser determinadas para cada espécie e ambiente específico.

Normalmente o crescimento está incluído no coeficiente de decaimento, resultando em um valor neto de decaimento (Yates e Yates, 1991). Enquanto ocorre decaimento bacteriano, algum nível de crescimento acontece simultaneamente. Durante condições de baixa disponibilidade de nutrientes, a limitada energia disponível é aplicada à manutenção da célula para o crescimento (Metcalf e Eddy, 1991). Em tal caso, o crescimento pode ser considerado desprezível.

2.4. ***Escherichia coli***

Para prever a presença de patógenos na água, normalmente é usado um grupo específico de microrganismos, geralmente conhecidos como organismos indicadores fecais. Os mais importantes indicadores microbianos de contaminação fecal (poluição) usados são: *Escherichia Coli* e bactérias coliformes termotolerantes. Ambos são amplamente utilizados, porque sua

detecção é simples, rápida, e confiável. A *E. coli* é o indicador preferido de contaminação fecal, pois é o único membro do grupo coliformes termotolerantes que é invariavelmente encontrada em fezes de animais de sangue quente e que ultrapassa outros coliformes termotolerantes em ambos os excrementos humanos e animais (Foppen e Shijven, 2006).

O gênero *Escherichia* é típico da família *Enterobacteriaceae*, que tem como hábitat o intestino de humanos e animais. A *Escherichia coli* é um bacilo Gram-negativo, anaeróbico, reto, com forma de bastão de aproximadamente 2,5 μm de comprimento e 0,8 μm de diâmetro e está presente em pares ou isoladamente. Possui órgãos externos como os chamados pili, filamentos finos e retos, que lhe permitem captar o substrato específico e um filamento mais fino, helicoidal e longo denominado flagelo (um o mais) que lhe permite nadar (Berg, 2004). A Figura 2.2 apresenta a imagem de uma célula de *E. coli*, captada através de microscopia eletrônica.

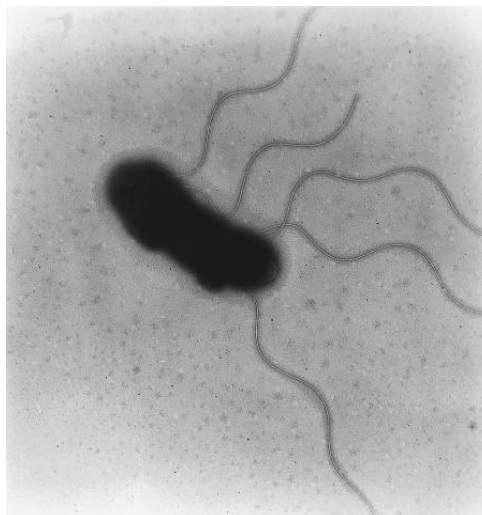


Figura 2.2. Micrografia eletrônica da *E. coli*. Escala: o corpo da célula é de aproximadamente 1 μm de comprimento (Berg, 2004)

A maioria dos membros da espécie *E. coli* são considerados organismos inofensivos, enquanto que algumas estirpes são causadoras de doenças. Três síndromes clínicas gerais podem resultar de infecção com espécies (patótipos): doenças entéricas/ diarréicas, infecções do trato urinário, e sepsis / meningite. Estirpes patogênicas têm sido categorizadas dentro de seis grupos com base em características sorológicas e de virulência (Kaper *et al.*, 2004, citado por Foppen e Schijven, 2006).

Geralmente, quando bactérias *E. coli* são introduzidas dentro de ambientes aquáticos, morrem gradualmente e este processo é acompanhado por mudanças

em suas características. Daubner (1975), citado por Foppen e Schijven (2006), realizou experimentos de sobrevivência utilizando estirpes frescas de *E. coli* em água estéril demineralizada e água altamente mineralizada. Foi observado que cinco a vinte horas depois que a *E. coli* é transferida na água estéril, ocorre encolhimento da célula e redução do conteúdo citoplasmático (na água destilada) ou dano à integridade da célula em meio mineralizado. A questão óbvia é descobrir qual o efeito dessas mudanças morfológicas e fisiológicas na adesão bacteriana.

Vários estudos sobre a influência da hidrofobicidade sobre o processo de adesão, concluíram que *E. coli* é pobremente adesiva e que é mais um organismo hidrofílico do que hidrofóbico, e que a hidrofobicidade não determina a adesão. Em vez disso, o modulador primário de aderência parece ser o potencial zeta (Foppen e Shijven, 2006).

A carga superficial da *E. coli* não é medida diretamente, mas é frequentemente determinada via o que é chamado de mobilidade eletroforética, que é uma medida do potencial zeta (definido como a queda de potencial através da parte móvel da dupla camada responsável pelo fenômeno eletrocinético (Stumm e Morgan, 1996). Foppen e Shijven (2006) determinaram o potencial zeta da *E. coli* ATCC 25922 em várias soluções e os resultados de sua pesquisa indicaram que para soluções com eletrólitos monovalentes (Na^+) e divalentes (Ca^{++}), com valores de força iônica variando desde 10^{-5} até 400 mM, na faixa de pH de 7,19 – 8,81, o potencial zeta variou desde -20 até -170 mV.

No entanto, o potencial zeta é tipicamente aplicado a partículas esféricas duras, e no caso de células biológicas, elas formam uma camada permeável, macia de íons em torno da célula, que controla a distribuição espacial do potencial elétrico da superfície. Além disso, o potencial zeta reflete as propriedades eletrocinéticas resultantes da célula e não é sensível a variações a pequena escala. Portanto, misturar esta distribuição heterogênea de carga em um valor de potencial zeta, pode resultar em previsões erradas das interações da superfície da bactéria e o coletor (Foppen e Shijven, 2006).

Walker *et al.* (2005) demonstrou que valores de potencial zeta para *E. coli* D21g coletadas no meio da fase de crescimento exponencial e na fase estacionária em soluções para várias concentrações de KCl foram similares, enquanto que a taxa de deposição bacteriana em colunas de areia de quartzo limpo (com carga negativa) e força iônica moderada (0,003 – 0,03 M KCl), foi 10 vezes mais alta na fase estacionária do que no meio da fase exponencial. Isto pode ser atribuído à distribuição não uniforme de carga (negativa) nas células da

fase estacionária e conseqüente menor repulsão e maior adesão, do que as células da fase exponencial que estão cobertas por proteínas relativamente simples.

Resumindo, a bactéria *E. coli*, frequentemente encontrada na água subterrânea indicando contaminação fecal, é fácil de quantificar, é hifrofílica e possui forte carga negativa. Estas propriedades fazem que esta bactéria seja amplamente utilizada como indicador de contaminação fecal, especialmente em países em desenvolvimento que não dispõem de recursos suficientes de laboratório. Além do mais, algumas estirpes de *E. coli* são enteropatogênicas (Foppen e Shijven, 2006).

2.5. Transporte de Biocolóides

Colóides são comumente definidos como partículas e outras entidades com dimensões entre aproximadamente 1nm e 1 μ m (Kretzschmar *et al.*, 1999) (até 10 μ m segundo Bradford *et al.*, 2002). Esses limites de moléculas dissolvidas por um lado e partículas maiores suspensas por outro são graduais, e em certa medida arbitrários.

Devido a seu pequeno tamanho, os colóides têm área específica muito grande (>10m²/g) tornando-se eficientes coletores de contaminantes ambientais. Partículas coloidais permanecem estáveis em suspensão por longos períodos de tempo até que formem agregados maiores ou que se depositem sobre superfícies de grãos maiores (Kretzschmar *et al.*, 1999).

Muitos contaminantes ambientais são encontrados como colóides (organismos patogênicos) ou estão associados a colóides (metais pesados, radionuclídeos, pesticidas, hidrocarbonetos aromáticos policíclicos, etc.). Portanto, o transporte de vírus e bactérias, chamados de “biocolóides” (Kretzschmar *et al.*, 1999) é abordado como um problema de transporte de colóides.

Porém, pelo fato de se tratar de organismos vivos, o estudo do transporte de microrganismos é mais complexo do que no caso de colóides abióticos. Não só eles estão sujeitos aos mesmos fenômenos físico-químicos dos colóides, mas há também um número de processos biológicos que afetam seu transporte (Ginn *et al.*, 2002).

O transporte de bactérias através de um meio poroso saturado, foco principal do presente trabalho, é governado através de numerosas relações entre

solo, a bactéria e os mecanismos e as propriedades ambientais. Uma descrição aproximada do transporte bacteriano como um todo, requer a compreensão do impacto de cada fator na progressão da bactéria através do espaço de poro da matriz de solo.

A descrição do transporte biocolóides pode ser formulada como um problema geral de transporte de solutos. Para derivar uma equação que descreva o transporte de microrganismos no meio poroso, um enunciado matemático da conservação da massa deve ser formulado, ou seja, a quantidade do material deixando o sistema deve ser igual à quantidade de material entrando no sistema, mais ou menos (\pm) qualquer mudança no armazenamento.

$$\left[\begin{array}{l} \text{Taxa neta de} \\ \text{variação de massa} \\ \text{bacteriana no VE} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{l} \text{Massa} \\ \text{bacteriana} \\ \text{saindo do VE} \end{array} \right] - \left[\begin{array}{l} \text{Massa} \\ \text{bacteriana} \\ \text{entrando no VE} \end{array} \right] \pm \left[\begin{array}{l} \text{Ganho ou} \\ \text{perda de massa} \\ \text{bacteriana} \end{array} \right] \quad (2.3)$$

A equação (2.3) representa o esquema do movimento do contaminante através de um volume elementar (VE) e mudanças na quantidade do contaminante. Assume-se que o meio poroso é homogêneo, isotrópico, incompressível, e totalmente saturado (Yates e Yates, 1991).

Corapcioglu e Haridas (1984, 1986) foram os primeiros em desenvolver um modelo matemático específico para o transporte de vírus e bactérias através do meio granular poroso. Este modelo inclui os processos de advecção, dispersão hidrodinâmica e um número de mecanismos associados à retenção de células bacterianas no meio poroso, como também os efeitos de crescimento e decaimento tanto dos microrganismos livres como adsorvidos.

A equação de balanço de massa macroscópico da equação (2.3) para solutos adsorvidos (microrganismos) fluindo através de um meio poroso, na forma unidimensional pode ser expressa como:

$$\frac{\partial \rho_{bulk} S}{\partial t} + \frac{\partial \theta C}{\partial t} = D_h \theta \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \theta \frac{\partial C}{\partial x} - R_F \quad (2.4)$$

onde C é a massa (ou número) de microrganismos na fase aquosa para uma distância x e tempo t ; S denota a massa (ou número) de microrganismos adsorvidos por unidade de massa da parte sólida do meio poroso; D_h é o coeficiente de dispersão hidrodinâmica; v é a velocidade intersticial do fluxo; ρ_{bulk} densidade total seca do meio poroso; θ representa o volume ocupado pela suspensão por unidade de volume total e R_F a taxa de consumo (ou decaimento) dos microrganismos.

Neste trabalho, o estudo está focado no transporte da bactéria, eliminando as complexidades derivadas dos processos biológicos, tais como crescimento, morte e predação, restringindo a bactéria a seu estado estacionário (sem crescimento) durante períodos de tempo para os quais o decaimento não é observado e o sistema é desprovido de predadores.

Assim, desprezando os efeitos dos processos biológicos, para um meio poroso homogêneo e saturado ($\theta=n$), a equação (2.4) na forma unidimensional pode ser simplificada como se apresenta a seguir:

$$\frac{\rho_{bulk}}{n} \cdot \frac{\partial S}{\partial t} + \frac{\partial C}{\partial t} = D_h \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.5)$$

Enquanto os microrganismos são transportados através do meio poroso, eles são removidos do fluido dos poros por meio de filtração físico-química (adsorção nas superfícies do grão) representado pelo termo $\rho_{bulk} \partial S / n \partial t$.

2.6. Processos de Transporte

Como foi explicado previamente, no item 2.5, os microrganismos como vírus e bactérias são considerados, por suas dimensões e comportamento, como colóides, mais especificamente biocolóides. Devido à complexidade, que implica o estudo do efeito combinado dos fenômenos físico-químicos e biológicos sobre o transporte de organismos vivos nos ambientes subsuperficiais, nesta seção são estudados os processos de transporte, sem considerar os processos biológicos em um meio poroso saturado. Dessa forma os principais processos abordados são; a advecção e a dispersão, processos básicos que controlam o transporte de solutos e de partículas coloidais suspensas; a filtração mecânica (*straining*), que descreve a remoção de colóides baseado no tamanho físico; a adsorção, resultante de várias forças de origem eletrostática entre o colóide e o grão, quando a distância entre eles é pequena (da ordem dos nanômetros) e finalmente, processos como a exclusão, fenômeno observado principalmente no caso de vírus (Knapett *et al.*, 2008) e o bloqueamento e *ripenning*, fenômenos referidos às variações da taxa de deposição com relação ao tempo.

2.6.1. Advecção

Advecção é o processo pelo qual um contaminante é transportado junto com a massa de fluxo da água subterrânea (Freeze e Cherry, 1979), sendo a

taxa média de migração de um soluto igual à velocidade linear média da água (Fitts, 2002). Assim, a massa de fluxo de um soluto devido unicamente a advecção é simplesmente:

$$F_{ax} = q_x C \quad (2.6)$$

onde F_{ax} é o fluxo de massa de soluto por advecção (massa/tempo/área normal à direção x), q_x é a descarga específica (volume/tempo/área) e C a concentração do soluto (massa/volume).

Nesse sentido, para quantificar as forças de advecção presentes em um sistema dado, é preciso determinar a velocidade da água sendo transportada através do meio poroso. As velocidades da água subterrânea em aquíferos porosos são geralmente menor do que um metro/dia e até poucos metros/dia. Velocidades acima 10 m/d são restritas a sedimentos muito grossos e elevados gradientes hidráulicos (Pekdeger e Matthess, 1983).

Em uma configuração a escala de laboratório, a descarga específica q_x é conhecida, e com base na porosidade do sistema n , a velocidade intersticial v pode ser calculada através da seguinte relação:

$$v = \frac{q_x}{n} \quad (2.7)$$

Na maioria dos ambientes subsuperficiais, advecção é considerada como o principal mecanismo de transporte bacteriano (Peterson e Ward, 1987; citado por Richardson, 2002). Corapcioglu e Haridas (1986) no estudo do transporte de microrganismos incluíram dentro do termo de advecção, a velocidade de sedimentação e a velocidade devido à quimiotaxia.

2.6.2. Dispersão Hidrodinâmica

A distribuição real da velocidade das águas subterrâneas varia significativamente tanto no espaço quanto no tempo, em decorrência da não uniformidade da velocidade de fluxo e conseqüentemente a massa de fluido tende a se espalhar ou dispersar. Este processo é conhecido como dispersão mecânica (Fitts, 2002).

Estas variações na velocidade do fluido são causadas pela resistência ao longo das paredes dos canais de poros, mudanças da seção transversal dos canais do poro e da tortuosidade (Frezze e Cherry, 1979).

No transporte real de um soluto na água subterrânea existem dois processos básicos: a dispersão mecânica e a difusão molecular, ambas as quais contribuem para uma dispersão transversal (Bear, 1972; Fitts, 2002).

A difusão molecular é a mistura que ocorre como consequência do movimento aleatório das moléculas dentro do fluido. As moléculas que colidem ou se impulsionam dentro do líquido tendem, ao longo do tempo, a espalhar os solutos de modo que as concentrações de soluto se tornam mais uniformemente distribuídas no espaço. Como outros colóides, bactérias e vírus estão sujeitos ao movimento Browniano, através do qual a trajetória da partícula individual parece bastante errática, enquanto o fluxo médio de partícula é proporcional ao gradiente de concentração (Corapcioglu e Haridas, 1986).

Assim, a difusão move a massa de soluto de regiões com altas concentrações para regiões com baixas concentrações segundo a primeira lei de Fick (Fitts, 2002), que para um meio poroso saturado é governada pela equação seguinte:

$$F_{dx} = -nD_m \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.8)$$

onde F_{dx} é o fluxo de massa de soluto por difusão (massa/tempo/área) e D_m é a constante denominada coeficiente de difusão molecular. O coeficiente de difusão para partículas suspensas (bactérias e vírus) pode ser estimado através da equação de *Stokes-Einstein* (Corapcioglu e Haridas, 1986).

O fluxo de um soluto em uma direção qualquer é proporcional ao gradiente de concentração nessa direção. O sinal negativo na equação (2.8) se deve a que a massa de soluto se movimenta na direção que as concentrações decrescem, na direção oposta ao gradiente de concentração.

Os efeitos da dispersão mecânica adicionada à difusão molecular normalmente são agrupados no que é chamado de dispersão hidrodinâmica. O coeficiente de dispersão hidrodinâmica D_h é definido pela seguinte equação:

$$D_h = \alpha_L v + \tau D_m \quad (2.9)$$

onde α_L é o coeficiente de dispersividade, v a velocidade da água subterrânea, D_m a difusão molecular e τ a tortuosidade.

O coeficiente de dispersividade α_L é uma função da falta de homogeneidade do aquífero, assim este coeficiente cresce com a escala dos

experimentos. O meio poroso usado em experimentos de laboratório tem coeficientes de dispersividade na ordem de 0,1 cm⁻¹ m, em experimentos de campo na ordem de 0,1 a 100 m, e em rocha cárstica e fissurada 10 – 1000 m (Pekdeger e Matthes, 1983).

Tanto o coeficiente de dispersão hidrodinâmica como a dispersividade, não são verdadeiras propriedades físicas do meio poroso, se trata de parâmetros de ajuste que permitem ao modelo matemático, simular a dispersão de solutos de um modo mais ou menos similar ao que ocorre dentro de um sistema real (Fitts, 2002).

A significância relativa da difusão em relação à dispersão mecânica pode ser estimada utilizando um parâmetro adimensional conhecido como número de Peclet (P_e) para a difusão molecular:

$$P_e = \frac{vd}{D_m} \quad (2.10)$$

onde d é o comprimento médio característico neste caso o diâmetro médio do grão do meio poroso. Para valores muito baixos de P_e (<0,4) unicamente a difusão governa o processo de transporte. Para valores entre 0,4 e 5 (aproximadamente) a influência da difusão molecular e a dispersão mecânica são da mesma ordem de grandeza. Para valores superiores a 5 a propagação do soluto é dominada pela dispersão mecânica (Bear, 1972).

Pekdeger e Matthes (1983) consideraram que a mobilidade ativa da bactéria pode ser representada como uma força dispersiva e incluída como uma componente da dispersão hidrodinâmica, que decresce ao diminuir as temperaturas (*i.e.* para *E. coli* 0,1 m/d a 20°C).

2.6.3. Adsorção

A adsorção, também denominada como filtração físico química (McDowell-Boyer *et al.*, 1986), é um processo reversível ou irreversível em que a célula bacteriana é sujeita nas superfícies do solo por várias forças físico-químicas (carga superficial, forças eletrostáticas, e forças de London-vander Waals) (Yates e Yates, 1991).

Consequentemente, a adsorção da bactéria na superfície dos grãos é função das propriedades físicas e químicas do meio e da água dos poros,

características da bactéria, e condições hidráulicas do sistema (Corapcioglu e Haridas, 1984).

Propriedades do meio tal como tamanho do grão, carga superficial, e estrutura dos poros (*i.e.* presença de macroporos) podem ter um efeito significativo no grau de adsorção da bactéria. Em geral, solos de textura fina tais como argilas, são muito efetivos na retenção de bactérias, em decorrência do seu pequeno tamanho, grande área superficial específica e carga superficial (Corapcioglu e Haridas, 1984). Contrariamente, meios com grãos de tamanho maiores tais como areias, têm baixo potencial de adsorção bacteriana (Peterson e Ward, 1989 citado em Richardson, 2002). O meio poroso, opostamente carregado à bactéria que reside, tende a estimular elevados níveis de adsorção de bactérias. Scholl *et al.* (1990) encontraram maior adesão de bactéria indígena (com carga superficial negativa) às superfícies de meio positivamente carregado (*i.e.* calcita, quartzo e moscovita cobertos de hidróxidos de ferro e moscovita) do que no caso de meio negativamente carregado (*i.e.* quartzo limpo e moscovita).

A estrutura do poro da matriz do solo pode também influenciar o grau de adesão bacteriana. Sistemas naturais de solo são raramente, ou nunca, homogêneos em todas as direções, apresentando um grande número de heterogeneidades e macroporos. A recompactação de solos diminui a presença de macroporos dentro da estrutura do solo obrigando à bactéria a se infiltrar nos espaços de poros menores, assim aumentando o potencial de adsorção bacteriana (Richardson, 2002).

Um elevado conteúdo de sal na água subterrânea poderia incrementar a adsorção devido à compressão da dupla camada elétrica, permitindo às células bacterianas se aproximar dos locais carregados no meio. O incremento na disponibilidade de íons na solução promove a formação de pontes entre o meio carregado e as superfícies das células bacterianas (Fontes *et al.*, 1991). Também pode se incrementar a adsorção reduzindo o pH por baixo de 8.0 ou adicionando cátions, especialmente de espécies divalentes (Corapcioglu e Haridas, 1986).

A forma e tamanho de uma dada célula bacteriana podem influenciar a adsorção nas proximidades dos grãos do meio. Em geral, diâmetros maiores experimentam maiores interações (colisões) com o meio, aumentando assim a possibilidade de adesão e elevadas velocidades de poros tendem a reduzir as potenciais oportunidades de contato das bactérias suspensas nas superfícies dos grãos (Richardson, 2002).

A filtração físico-química tem sido modelada tanto como um processo irreversível quanto reversível em função da análise do termo $\rho_{bulk} \partial S / n \partial t$ da equação (2.5). No caso do processo reversível, podem ser aplicados tanto mecanismos de equilíbrio quanto mecanismos cinéticos, descritos a seguir.

2.6.3.1. Sorção de equilíbrio

A adsorção de células bacterianas na superfície dos grãos pode ser representada através de isotermas de equilíbrio (isoterma de Freundlich ou de Langmuir), que descrevem a relação entre a concentração de bactérias adsorvidas S e a concentração de bactérias suspensas C (Domenico e Schwartz, 1990). Assumindo que a adsorção de partículas é um processo que atinge o equilíbrio rapidamente, pode ser descrito através da forma linear da isoterma de Freundlich $S = K_D C$, expressão que derivada com relação ao tempo, pode ser facilmente incorporada na equação de transporte equação (2.5) através da seguinte expressão:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = K_D \frac{\partial C}{\partial t} \quad (2.11)$$

onde K_D é o coeficiente de distribuição ou partição (L^3/M) e pode ser obtido empiricamente em ensaios em batelada no laboratório. Uma vez substituída a equação (2.11) na equação (2.5), pode-se expressar o fator de retardamento R como segue:

$$R = 1 + K_D \frac{\rho_{bulk}}{n} \quad (2.12)$$

Desta forma a equação de transporte é simplificada na forma seguinte:

$$R \frac{\partial C}{\partial t} = D_h \frac{\partial^2 C}{\partial x^2} - v \frac{\partial C}{\partial x} \quad (2.13)$$

A representação linear da adsorção bacteriana implica que está presente uma única capa de adsorção, onde só as células bacterianas podem ocupar um local de adsorção dado, a tempo determinado.

A adsorção à superfície do grão impede a migração da bactéria, forçando assim que ela seja transportada mais lentamente do que a água em torno dos poros. O termo “retardamento” é geralmente usado para descrever o impacto da

adsorção sobre o transporte global (Yates e Yates, 1991). Ainda fatores adicionais (*i.e.* filtração mecânica e sedimentação) podem também ser incluídos.

Experimentos de campo têm registrado fatores de retardamento entre 1 e 2 para bactérias (*E. coli* e *Serratia marcescens*) (Pekdeger e Matthes, 1983). Muitos outros estudos revelaram fatores de retardamento menores que 1 (Fontes *et al.*, 1991), sugerindo velocidades bacterianas mais elevadas que a dos traçadores introduzidos simultaneamente. Este fenômeno pode ser explicado através da teoria de exclusão, que será visto no item 2.6.5.

Os vírus em geral, especialmente os poliovírus, têm valores elevados de K_D (até 500), dependendo das propriedades da água e as propriedades dos vírus respectivos. Assim, a passagem subterrânea pode proporcionar uma proteção muito efetiva contra a contaminação de vírus. Porém os vírus podem ser novamente desorvidos, quando as concentrações dos cátions decrescem (*i.e.*, devido a uma chuva intensa) sendo assim ativados para maior deslocamento (Pekdeger e Matthes, 1983).

2.6.3.2. Sorção Dinâmica

Em um sistema composto de microrganismos em suspensão e grãos de solo, um estado de sorção de equilíbrio não é atingido instantaneamente. Inicialmente, um mecanismo de sorção cinética em duas etapas controla a remoção de microrganismos da fase aquosa. No primeiro passo, descrito como transporte da massa, os microrganismos são transferidos a partir da massa de fluido para a superfície dos grãos de solo. Em um segundo passo, os microrganismos são aderidos sobre a superfície como resultado de interações físico-químicas (Tufenkji, 2004; Kretzschmar *et al.*, 1999). O subsequente desprendimento pode ser também controlado por processos cinéticos. Sob estas condições, a taxa de modificação da concentração dos microrganismos retidos pode ser descrita do seguinte modo:

$$\frac{\rho_{bulk}}{n} \frac{\partial S}{\partial t} = k_{att} C - \frac{\rho_{bulk}}{n} k_{det} S \quad (2.14)$$

onde k_{att} e k_{det} representam as taxas constante de adsorção e desorção respectivamente, (T^{-1}). A equação anterior representa um modelo cinético de *no*-equilíbrio (Jiang *et al.*, 2007).

A aproximação mais frequentemente utilizada em estudos de laboratório e campo para avaliar o transporte de microrganismos, é a teoria clássica de

filtração CFT (*Colloid Filtration Theory*). Na realidade, este modelo de filtração denominado “*clean-bed*” ou leito limpo, trata-se de um caso especial do processo cinético de adsorção anteriormente explicado, mediante o qual a adesão dos microrganismos sobre as superfícies dos grãos é considerada irreversível, desprezando o processo de desprendimento (Tufenkji, 2007). Desta forma a equação (2.14) se reduz como segue:

$$\frac{\rho_{bulk}}{n} \frac{\partial S}{\partial t} = k_{att} C \quad (2.15)$$

De acordo com este modelo de transporte, assume-se que a cinética de deposição de colóides (bactérias), acontece de forma irreversível em duas etapas:

- Primeira etapa; as partículas coloidais são transportadas na direção das superfícies dos grãos mediante difusão Browniana, intercepção, e sedimentação resultando em colisões do colóide contra o coletor.
- Segunda etapa; se produz a adesão de partículas coloidais nas superfícies dos grãos em decorrência da ação de forças inter-partículas que incluem, forças de atração de vander Waals e forças repulsivas da dupla camada elétrica, esta última fortemente afetada pela composição química da solução e a carga das superfícies (Kretzschmar *et al.*, 1999).

A cinética da etapa de transporte, que depende primariamente de fatores físicos foi inicialmente descrita por Yao *et al.* (1971). Considerando inicialmente uma única partícula do meio filtrante, esférica, chamada de “coletor”, fixada na suspensão sem ser afetada pelas partículas vizinhas como é mostrado na Figura 2.3, onde também se mostra a trajetória de uma partícula suspensa (biocolóide), que pode ser retida sobre o coletor (grãos de areia) devido a fenômenos físicos de difusão, sedimentação e intercepção.

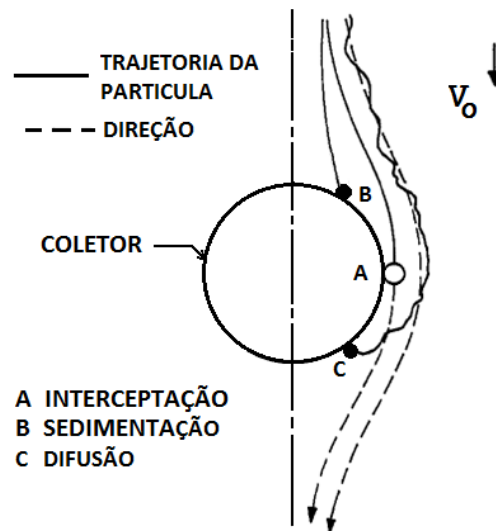


Figura 2.3. Mecanismos básicos de transporte em filtração de água (Adaptado de Yao *et al.*, 1971)

Para a obtenção da taxa de adesão k_{att} , inicialmente deverá ser determinada a eficiência do coletor η , definida como a relação entre a taxa na qual as partículas colidem com o coletor, e a taxa na qual as partículas fluem na direção da área projetada do coletor como mostra a equação (2.16), onde d_g é o diâmetro médio do grão (coletor), v a velocidade intersticial e C_o a concentração das partículas na suspensão (Yao *et al.*, 1971).

$$\eta = \frac{\text{taxa na qual as partículas colidem}}{vC_o \left(\frac{\pi \cdot d_g^2}{4} \right)} \quad (2.16)$$

De acordo com Yao *et al.* (1971), a eficiência global do meio filtrante para um filtro granular composto por esferas uniformes, obtida a partir de um balanço de massa, é relacionada com a eficiência do coletor η , e através da seguinte relação:

$$\ln\left(\frac{C}{C_o}\right) = -\frac{3(1-n)}{2d_g} \eta L \quad (2.17)$$

onde L é a profundidade do meio granular filtrante, n é a porosidade, d_g o diâmetro médio do grão (coletor), C e C_o as concentrações do influente e do efluente da coluna respectivamente. A equação (2.17) pode ser usada para estimar a distância da viagem de colóides em um meio poroso saturado tal como os aquíferos de água subterrânea.

O objetivo da teoria de filtração (CFT) é determinar η sob condições físicas e químicas conhecidas. Porém, devido à presença de forças repulsivas decorrentes da dupla camada elétrica, nem todas as colisões resultam em adesão de partículas sobre o coletor e, conseqüentemente se faz necessário combinar um fator empírico na predição de η . Neste sentido, a eficiência do coletor teórica denominada como η_o , determinada com base a fatores físicos como será indicado mais adiante, é multiplicada pelo fator de eficiência de colisão α , como indica a equação seguinte:

$$\eta = \alpha \cdot \eta_o \quad (2.18)$$

A eficiência de colisão α para uma dada suspensão coloidal e meio filtrante pode ser determinado através de ensaios de coluna e varia entre 10^{-3} e 1 (Ryan e Elimelech, 1996).

Yao *et al.* (1971) descreveram quantitativamente os processos incluídos na teoria da filtração (CFT), considerando que estes atuam na direção principal de fluxo (a direção da força gravitacional), sendo os colóides transportados a partir da massa de água para a superfície externa dos grãos. Estes processos são descritos a seguir:

- Difusão: torna-se mais importante como um mecanismo de transporte para organismos patogênicos pequenos tais como vírus comparados com outros maiores, como se pode observar na equação (2.19), que descreve o movimento Browniano. Esta equação é conhecida como a equação de Einstein (Yao *et al.*, 1971).

$$D_g = \frac{kT}{3\pi\mu d} \quad (2.19)$$

onde D_g é a difusividade do grão (coletor) na água, k é a constante de Boltzman ($1,38048 \times 10^{-23}$ J/K), T é a temperatura absoluta (K), μ é a viscosidade dinâmica da água ($1,002 \times 10^{-3}$ N·s/m²), e d é o diâmetro do biocolóide. A efetividade da difusão se incrementa ao decrescer o tamanho da partícula.

- Intercepção: inversamente à difusão que tem um grande efeito sobre organismos patogênicos menores, a intercepção baseia-se na tendência de objetos a permanecerem em movimento, uma propriedade pertencente a colóides maiores (Richardson, 2002). A probabilidade de colisões que ocorrem devido à intercepção pode ser descrita pela relação abaixo:

$$\eta_o \propto \frac{d}{d_g} \quad (2.20)$$

A equação (2.20) mostra que quanto maior a relação entre o diâmetro da partícula ou biocolóide d com relação ao diâmetro do coletor d_g tem-se maior probabilidade de colisão (Ryan e Elimelech, 1996). Assume-se que tanto a partícula quanto o coletor são perfeitamente esféricos. Também é assumida que para uma distância infinita entre o coletor e a partícula, a concentração C é igual à C_o , e C igual a zero para uma distância $(d+d_g)/2$ medida desde o centro do coletor esférico (Yao *et al.*, 1971).

- Sedimentação: como o processo de interceptação, a sedimentação também é proporcional ao tamanho de patogênico enquanto a difusão é inversamente proporcional. Isso significa que a difusão tenderá a ser o processo de transporte dominante para patogênicos de menor porte e a sedimentação e a interceptação dominará o transporte dos maiores. A sedimentação é o processo de movimento descendente devido à diferença de densidade e é descrito através da Lei de Stoke's:

$$v_s = \frac{(\rho - \rho_f)gd^2}{18\mu} \quad (2.21)$$

onde v_s é a velocidade de sedimentação, ρ e ρ_f as densidades da partícula e do fluido respectivamente, d o diâmetro médio do biocolóide e μ a viscosidade dinâmica do fluido.

A Lei de Stoke's assume que a partícula é esférica, macia e rígida, sendo essas presunções não inteiramente válidas para microrganismos.

Este mecanismo é muito importante na acumulação de uma suspensão de mineral inorgânico (densidade aproximadamente de $2,5 \text{ g/cm}^3$), mas não para microrganismos, que apresentam tamanho de partícula menor do que $5 \text{ }\mu\text{m}$ e densidade aproximadamente de 1 g/cm^3 (Pekdeger e Matthes, 1983).

Os três processos citados acima (difusão, interceptação e sedimentação), que contribuem à eficiência de colisão têm sido integradas dentro de uma equação por Yao *et al.* (1971) e pode ser aplicada para a filtração inicial "clean bed" ou leito limpo, onde a deposição no interior dos poros não altera significativamente o padrão de fluxo e as características do meio (Yao *et al.*, 1971). Esta equação incluindo a correção de Happel pode ser escrita como segue (Hornberger *et al.*, 1992):

$$\eta_o = \eta_D + \eta_I + \eta_G = 0,9 A_s^{1/3} \left(\frac{kT}{\mu d_g dv} \right)^{2/3} + \frac{3}{2} A_s \left(\frac{d}{d_g} \right)^2 + \frac{(\rho - \rho_f) g d^2}{18 \mu v} \quad (2.22)$$

Na equação acima, η_D , η_I , η_G corresponde aos processos de difusão, interceptação e sedimentação respectivamente e A_s é o fator de correção de Happel que depende da porosidade de acordo com as equações seguintes:

$$A_s = \frac{2(1 - p^5)}{2 - 3p + 3p^5 - 2p^6} \quad (2.23)$$

$$p = (1 - n)^{1/3} \quad (2.24)$$

É também importante salientar que a equação (2.22) foi deduzida para um coletor único e perfeitamente esférico. Além disso, assume-se que o diâmetro do coletor não muda o que sim, de fato, ocorre devido ao acúmulo de colóides na superfície dos grãos e a formação de biofilme (ou *bio-fouling*) (Knappett, 2006).

Para a determinação da taxa de adesão irreversível k_{att} baseada na CFT, considerada como um caso especial do processo geral de adsorção cinética, o sistema é assumido como estacionário, inicialmente livre de microrganismos e a influência da dispersão hidrodinâmica desprezível (*i.e.* o termo de dispersão e pequeno comparado com o termo de advecção, que pode ser estimado através do valor do número de Peclet (P_e) como foi explicado no item 2.6.2. A solução para a equação (2.5) sob estas condições, para uma injeção contínua do biocolóide com uma concentração C_o ($x=0$) em um período de tempo t , e considerando a relação dada na equação (2.15), está dada pela equação seguinte:

$$C = C_o \exp \left[-\frac{k_{att}}{v} x \right] \quad (2.25)$$

onde a taxa de adesão k_{att} dos microrganismos está relacionada com η e α , através da equação (2.17) como segue:

$$k_{att} = \frac{3(1 - n)v\eta}{2d_g} \quad (2.26)$$

É importante apontar que tanto η quanto a taxa de adesão k_{att} podem ser determinadas diretamente a partir da curva de chegada, seja com o experimento de fonte contínua ou fonte pulso, considerando o valor de C/C_o para o qual a curva de chegada torne-se estável, através das seguintes equações:

$$n = -\frac{2}{3} \frac{d_g}{(1-n)L} \ln\left(\frac{C}{C_o}\right) \quad (2.27)$$

$$k_{att} = -\frac{v}{L} \ln\left(\frac{C}{C_o}\right) \quad (2.28)$$

Como foi exposto anteriormente o valor da eficiência de colisão α depende principalmente das condições químicas do sistema. Uma vez que a colisão acontece, à adesão dependerá do efeito da força resultante da interação entre partículas (força de atração ou repulsão).

Esta força ou potencial de energia total depende da distância entre partículas e pode ser calculada como a soma das forças interpartículas tais como, forças de atração de van der Waals e forças de repulsão eletrostática (Verwey e Overbeek, 1948; citado por Kretzschmar *et al.*, 1999).

A teoria de energia DLVO (*Derjaguin and Landau, and Verwey and Overbeek*) estuda, de forma quantitativa, a estabilidade coloidal e foi desenvolvida para explicar a coagulação rápida de colóides, observada em presença de uma concentração eletrolítica alta e mais lenta, no caso de uma baixa concentração, com uma transição de uma para a outra, conhecida como a concentração crítica de coagulação (Gwyn, 2003). Desta forma a teoria DLVO explica as alterações de energia que acontecem entre microrganismos e superfícies sólidas e envolve uma estimativa da energia potencial de atração e de repulsão, versus a distância entre partículas. Essas quantidades são mostradas na Figura 2.4 e descritas embaixo. Porém, a teoria DLVO assume a superfície do colóide como lisa a nível molecular, sólida e inerte. Assim, as inadequações desta teoria são sustentadas através de medições diretas das forças de interações entre a bactéria e as superfícies sólidas através de microscopia atômica (Ginn *et al.*, 2002).

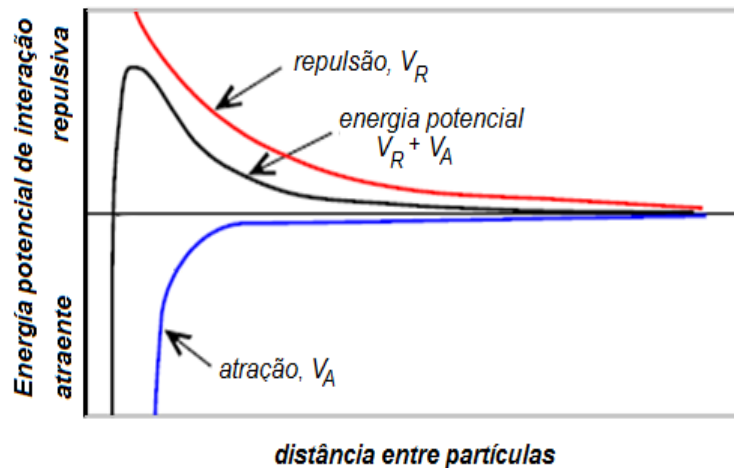


Figura 2.4. Teoria de energia DVLO. As forças combinadas de atração e repulsão governam a agregação de partículas com relação à distância entre elas (Gwyn, 2003)

As partículas sólidas de um aquífero estão quase sempre carregadas negativamente. Uma exceção são os hidróxidos de ferro e de manganês e substâncias orgânicas com baixos valores de pH. Bactérias e vírus, geralmente carregados negativamente, são fortemente adsorvidos por adsorventes aniônicos e fracamente por adsorventes catiônicos. Partículas carregadas negativamente permanecem estáveis em suspensão em filtros de areia, conforme as forças eletrostáticas de repulsão sejam mais fortes que as forças de van Der Waals. Os cátions dissolvidos na água reduzem as forças repulsivas das superfícies dos grãos. Cátions monovalentes são adsorvidos pela substância sólida diminuindo sua carga negativa. Sob essas condições, as forças da massa são mais efetivas e a acumulação de partículas acontece. Cátions bivalentes podem também causar deficiência de carga positiva de modo que as forças eletrostáticas podem ser mais eficientes para adsorção de bactérias e vírus (Pekdeger e Matthes, 1983).

As bactérias podem se aderir ativamente e irreversivelmente sobre as superfícies dos materiais sólidos dos aquíferos. As bactérias aderidas ficam protegidas contra outras influências e encontram altas concentrações de nutrientes, decrescendo a taxa de eliminação. A adesão é mais intensiva na fase de crescimento exponencial e pode ser de importância imediatamente depois da intrusão da água poluída (Pekdeger e Matthes, 1983).

2.6.4. Filtração mecânica (*straining*)

A filtração é um mecanismo que pode limitar a migração de partículas. McDowell-Boyer *et al.* (1986) consideram três formas de filtração, em função da relação entre o tamanho da partícula e o tamanho do grão do meio poroso:

1. No caso de partículas ou agregados de partículas de tamanho comparável ou maior do que o diâmetro médio do grão, a penetração dentro do meio não acontecerá, mas sim a formação de uma membrana superficial sobre o meio, conduzindo a uma diminuição na condutividade hidráulica, como ilustra a Figura 2.5 (a). Esta forma de filtração é denominada em Bradford *et al.* (2002) como “*complete straining*”.
2. O mecanismo de retenção de partículas dentro do meio poroso denominado como “*incomplete straining*” (Bradford *et al.*, 2002) ou simplesmente “*straining*” (Corapcioglu e Haridas, 1986), acontece quando as partículas são pequenas o suficiente para entrar no meio poroso sendo capturadas em espaços de poros menores, como mostrado na Figura 2.5 (b). A retenção ocorrerá em canais de poro e/ou uniões entre grãos que sejam menores que uma dimensão crítica (Bradford e Bettahar, 2006).
3. Finalmente, a filtração físico química ou adsorção, processo que foi já descrito no parágrafo 2.6.3 se refere à colisão e posterior retenção de colóides em decorrência de forças físico químicas. Este mecanismo tem maior importância quando o tamanho do colóide é pequeno em relação ao tamanho de poro do solo (Bradford *et al.*, 2002).

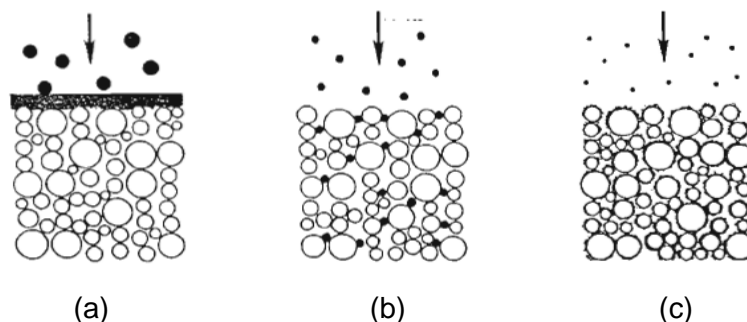


Figura 2.5. Formas em que a filtração limita a migração das partículas, a) Filtração completa, b) Filtração incompleta ou *straining*, e c) Filtração físico química (McDowell-Boyer *et al.*, 1986)

Esta seção está focada no estudo do mecanismo de filtração incompleta ou *straining* que, daqui por diante, será referido como filtração mecânica (termo utilizado em Matthes *et al.*, 1988 e Corapcioglu e Haridas, 1984).

Herzig *et al.* (1970) citado em Foppen *et al.* (2005) estimaram o potencial de filtração mecânica utilizando relações geométricas entre o diâmetro do colóide e o tamanho médio do grão (d/d_g) assumindo os colóides e os grãos esféricos, a través da equação seguinte:

$$\sigma = \frac{1}{2}(1-n)\pi Z \left(\frac{d}{d_g}\right)^2 \sqrt{\left(1 + \frac{d}{d_g}\right)^2 - 1} \quad (2.29)$$

onde $\sigma(-)$ representa o volume de partículas que poderiam ser retidas, por unidade de volume do total do meio poroso, n a porosidade inicial, Z é o número de coordenação ou número de contatos entre os grãos do meio poroso. Em função aos valores de $n=0,4$ e $Z=7$ (considerando um arranjo ortorrômico de esferas) foi determinado que quando a relação d/d_g supera o valor de 0,05 a filtração mecânica tem uma grande influência no processo de retenção de partículas (citado por Corapcioglu e Haridas, 1984; Foppen *et al.*, 2005; Bradford *et al.*, 2006). No entanto, observações experimentais recentes indicaram que a filtração mecânica se dá para relações muito mais baixas, *i.e.* 0,002, valor citado por Tukenkji *et al.* (2004) e Tufenkji (2007).

Considerando a passagem contínua de uma suspensão de bactérias através de uma coluna de meio poroso, Foppen *et al.* (2005) estabeleceram que o tempo t necessário para preencher a porção de volume de poros destinado à deposição de bactérias σ , depende da concentração inicial C_o a través da seguinte relação:

$$\frac{t}{t_o} = \frac{\sigma \cdot \rho_{bact}}{n \cdot C_o} \quad (2.30)$$

onde t_o é o tempo requerido para a passagem de um volume de poro (PV), (t/t_o) o número de volume de poros que permitirá o preenchimento dos espaços destinados à filtração mecânica e ρ_{bact} a densidade bacteriana (g/mL).

No entanto, em geral o solo não é composto de grãos esféricos e a distribuição de tamanho não é uniforme. Nesse sentido Foppen *et al.* (2005) propõem a utilização da função de densidade de poro $f(r)$ dada na equação (2.32), sendo r o radio do poro (m) e d o diâmetro do biocolóide. Esta função permite uma estimativa mais aproximada de σ na equação (2.31). Como resultado deste estudo Foppen *et al.* (2005) concluíram que a equação (2.29)

ainda parece proporcionar uma base valiosa para avaliar a importância da filtração mecânica e para calcular o volume disponível para este processo.

$$\sigma = \int_0^{2d} f(r) \cdot dr \quad (2.31)$$

A distribuição de tamanho de poro pode ser determinada no laboratório através da curva de retenção. Contudo, foi proposta uma solução baseada na função de retenção solo-água de Van Genuchten (1980) (citado em Foppen *et al.*, 2005) para a determinação da função de densidade de poro através da expressão seguinte:

$$f(r) = m_v n_v A r^{-(n_v+1)} \left[1 + A r^{-n_v} \right]^{-(m_v+1)} \quad (2.32)$$

e

$$A = \left(\frac{\alpha_v 2\delta \cos \beta}{\rho_w g} \right)^{n_v} \quad (2.33)$$

onde m_v , n_v e α_v são chamados parâmetros de van Genuchten e dependem das propriedades do solo, δ é a tensão superficial da água 0,0728 N/m a 20°C (valor extraído de Myers, 1999), β o ângulo de contato na interface que para o caso de areia saturada é zero, ρ_w densidade da água (1,0 g/cm³) e g a aceleração da gravidade (9,81 m/s²).

Foppen *et al.* (2005) e Foppen *et al.* (2007) incluem a filtração mecânica na equação geral de transporte ADS, assumindo que as bactérias são retidas na parte sólida do meio poroso em duas frações, uma delas está disponível para a deposição devido à filtração mecânica (S_2) e outra fração para a retenção reversível (S_1). Desta forma, a equação para a retenção de bactérias pode ser expressa como:

$$\frac{\partial S}{\partial t} = \frac{\partial S_1}{\partial t} + \frac{\partial S_2}{\partial t} \quad (2.34)$$

$$\frac{\partial S_1}{\partial t} = \frac{n}{\rho_{bulk}} k_{att} C - k_{det} S_1 \quad (2.35)$$

$$\frac{\partial S_2}{\partial t} = k_{str} \frac{n}{\rho_{bulk}} C \quad (2.36)$$

Foppen *et al.* (2005) observaram experimentalmente que o coeficiente de filtração mecânica K_{str} é função da velocidade de fluxo v , além da relação d/dg

antes indicada por Bradford *et al.* (2003), através da seguinte equação de ajuste onde a e b são parâmetros de ajuste:

$$k_{str} = a \left(\frac{d}{d_g} \right)^b v \quad (2.37)$$

Considerando o processo de filtração mecânica irreversível, sob condições do meio poroso livre de microrganismos (*clean bed*), o valor da dispersão hidrodinâmica desprezível a taxa de deposição devido à filtração mecânica denominada como k_{str} , pode ser considerada igual a k_{att} estimada através da teoria clássica de filtração CFT do colóide (citado por Tufenkji, 2007). Porém, estudos experimentais indicam que esta aproximação resulta inválida no caso que o sistema apresenta condições desfavoráveis à adesão (Martin *et al.*, 1996; Kretschmar *et al.*, 1999; Tufenkji e Elimelech, 2004; Tufenkji, 2007).

É importante salientar que as equações apresentadas não consideram o potencial de crescimento de um biofilme ou a formação de aglutinações de bactérias. Em geral, as bactérias não estão presentes na solução como partículas individuais, mas podem ser aderidas aos sólidos suspensos. (Mc Dowell–Boyer *et al.*, 1986). A formação de flocos de bactérias aumenta o impacto da filtração mecânica reduzindo a relação do diâmetro do meio poroso e o diâmetro da bactéria (Richardson, 2002).

2.6.5. Exclusão

Denomina-se exclusão ao processo físico que se refere ao incremento da velocidade de transporte de um colóide ou biocolóide em relação à velocidade média da água, envolvendo um incremento da taxa de transporte devido ao tamanho ou carga eletrostática do material transportado (Ginn *et al.*, 2002).

Com relação aos processos que originam a exclusão em Ginn *et al.* (2002) são identificados o efeito aniônico e o efeito do tamanho. A exclusão aniônica acontece em escala molecular, devido a cargas eletrostáticas repulsivas entre o meio poroso e o soluto, sendo direcionado a se afastar das paredes de poro. Este efeito pode se ampliar como exclusão de tamanho (*size exclusion*) no caso dos microrganismos considerando a distribuição parabólica das velocidades nos poros. Os microrganismos e colóides maiores, em virtude ao seu tamanho, experimentam, preferencialmente, as maiores velocidades na proximidade da linha de fluxo central (Murphy, 2000), atingindo uma velocidade média muito

mais elevada que um traçador dissolvido. E pode ser drasticamente mais pronunciado na observação de uma escala maior em meio natural (Murphy, 2000).

O efeito do tamanho se produz quando a partícula coloidal tem a mesma escala de uma fração significativa de poros, sendo as partículas redirecionadas para outros canais de poro maiores, onde os colóides experimentaram velocidades maiores. Este processo é denominado exclusão de poro (*poro exclusion*) ou mais especificamente exclusão de tamanho de poro (*poro size exclusion*).

O processo de exclusão no caso de microrganismos é frequentemente observado em estudos de campo (Hornberger *et al.*, 1992; Pang *et al.*, 2003) e principalmente no caso de transporte de vírus (Woessner *et al.*, 2001). De acordo com Sirivithyakornanand e Keller (2003) os colóides parecem ter uma maior probabilidade de viajar nas proximidades da linha de corrente central no espaço de poro, mas os colóides maiores (1-3 μ m) se espalham em um número maior de linhas de corrente, desta forma não sendo transportados com a velocidade máxima.

2.6.6. Bloqueamento e Ripening

A dependência dos coeficientes de adesão com relação ao tempo é resultado de diferenças no comportamento de adesão de colóides sobre o meio poroso “limpo” e sobre o meio que já contém colóides aderidos (Bradford *et Bettahar*, 2006). Uma diminuição da adesão ocorre quando os locais favoráveis à adesão são completamente ocupados (bloqueio ou *blocking*). Por outro lado, um aumento ou melhoria da adesão pode acontecer quando as partículas aderidas servem como lugares favoráveis para uma adesão subsequente (*Ripening*).

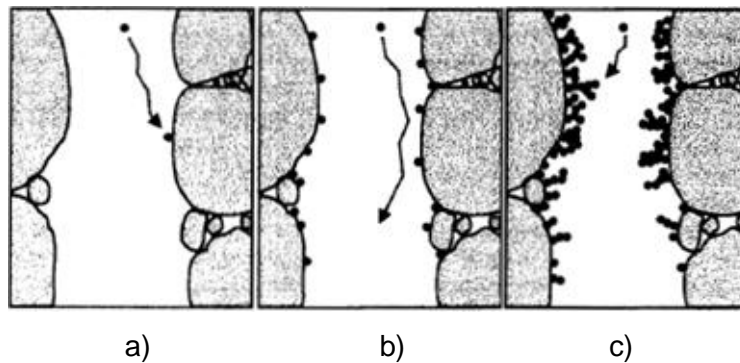


Figura 2.6. a) Cinética inicial de deposição, b) Efeito do bloqueamento e c) Efeito do *ripening* (Kretzschmar *et al.*, 1999)

Estes dois processos foram estudados por Camesano *et al.* (1999) incluindo um coeficiente na equação (2.35) como segue:

$$\frac{\partial S_I}{\partial t} = \frac{n}{\rho_{bulk}} k_{att} \psi_{att} C - k_{det} S_I \quad (2.38)$$

onde (ψ_{att}) é a função de adesão adimensional que considera o processo de bloqueamento (*blocking*). Quando (ψ_{att}) é igual a 1, é assumida a adesão em leito limpo "*clean bed*" e a concentração dos colóides retidos no meio poroso decresce exponencialmente com a profundidade. O valor de (ψ_{att}) torna-se função de S_I para levar em conta o processo de bloqueamento com (ψ_{att}) diminuindo enquanto S_I aumenta.

2.7. Ensaios experimentais

Experimentalmente, o transporte de microrganismos em meios porosos saturados tem sido tradicionalmente investigado através da aplicação do método de colunas empacotadas (*packed column*), termo utilizado em cromatografia, onde a concentração dos microrganismos suspensos no efluente é monitorada em função do tempo. Com o objetivo de entender os mecanismos de transporte e retenção de organismos patogênicos, a literatura mostra que foram realizados vários estudos em laboratório e campo indicados na Tabela 2.3.

O ensaio Advecção-Dispersão-Sorção (ADS) ou também denominado ensaio de coluna, utilizado no campo da geotecnia para o estudo de transporte de contaminantes, é aplicado no presente estudo ao estudo do transporte de microrganismos como se verá em detalhe nos capítulos seguintes.

Tabela 2.3. Componentes utilizados em experimentos realizados para o estudo do transporte de microrganismos

Autor	Ano	Coloide	Meio poroso	Solução
HUYSMAN F. e VERSTRAETE W.	1992	Escherichia Coli Strain Ec1 e Streptococcus faecalis SF3	Solo arenoso e solo argiloso	Água desmineralizada
MCCAULOU D. R., <i>et al.</i>	1994	Cepas de bactérias isoladas a partir de um lençol freático S5 e S139	Quartzo, quartzo revestido com hematita, quartzo revestido com polímero	Água Artificial
BARTON J. W.	1995	Pseudomonas putida PRS2000		Água Artificial
RYAN Joseph N. <i>et al.</i>	1996	partículas de látex (i.e., bactéria e vírus)	Leito de esferas de vidro	
MARTIN M.J. , <i>et al.</i>	1996	Pseudomonas Fluorescens Strain P17	Quartzo medio	Água deionizada
HENDRY L. <i>et al.</i>	1999	<i>Klebsiella oxytoca Burkholdeira cepacia</i>	Areia de Sílica	Água Artificial
CAMESANO T.A., <i>et al.</i>	1999	<i>Pseudomonas putida e</i> carboxylated latex	Solo do sul de Arizona	Água Artificial
LI Q. e LOGAN B.E.	1999	Alcaligenes paradoxus bactéria	Solo Ringold	Água Artificial
BRADFORD S.A., <i>et al.</i>	2002	Partículas de látex	Leito de vidro, varias areias de Ottawa	Água deionizada
LIPING Pang	2003	Escherichia coli e F-RNA phages	Areia de Pedra Pomes	Água nativa
TUFENKJI N. e ELIMELECH M.	2004	Partículas de látex (e.g., bactéria e vírus)	Leitos de vidro	Água deionizada
TUFENKJI <i>et al.</i>	2004	Cryptosporidium parvum oocysts	Areia de Quartzo	Água deionizada
REDMAN J.A.	2004	E. coli K12 strain, D21	Areia de quartzo ultrapura	Água deionizada
FOPPEN J.W.A. <i>et al.</i>	2005	E. coli	Areia de Quartzo	Água de torneira estéril
FOPPEN <i>et al.</i>	2005	E. coli strain ATCC25922	Areia de Quartzo	Água estéril
JIANG G. <i>et al.</i>	2005	Bacillus Subtilis	Areia de Sílica	Água estéril
BRADFORD S.A. <i>et al.</i>	2006	carboxyl latex	Areia de Quartzo	Água deionizada
LEVY J.	2007	E. coli	Sedimentos glaciais	Água de aquífero
KUZNAR Z.A. e ELIMELECH M.	2007	partículas de látex e Cryptosporidium parvum	Leitos de vidro	Água deionizada
FOPPEN <i>et al.</i>	2007	E. coli ATCC25922	Areia de Quartzo ultra pura	Água desmineralizada
JIANG G. <i>et al.</i>	2007	Escherichia coli strain D	Areia de Sílica	Água deionizada
KIM H.N. <i>et al.</i>	2009	Escherichia coli strains (D21g e XL1-Blue)	Areia de Quartzo ultra pura	Água artificial
LUTTERODT <i>et al.</i>	2009	E. coli strains (UCFL-71, UCFL-94, UCFL-131, UCFL- 167, UCFL-263 e UCFL-348)	Areia de Quartzo ultra de 99.1% de pureza	Água desmineralizada e Água artificial