

SIMULAÇÃO DO MOVIMENTO DE CONTAMINANTES ATRAVÉS DE UM MEIO POROSO

SIMULATION OF CONTAMINANT MOVEMENT THROUGH A POROUS MEDIUM

SIMULACIÓN DEL MOVIMIENTO DE CONTAMINANTES A TRAVÉS DE UN MEDIO POROSO



10.56238/revgeov17n3-054

Rogério Martins Saldanha Gama

Professor Doutor

Instituição: Universidade do Estado do Rio de Janeiro (UERJ)

E-mail: rogerio.gama@eng.uerj.br

RESUMO

Este trabalho descreve matematicamente escoamentos de fluidos newtonianos contendo contaminantes não reagentes através de meios porosos rígidos e homogêneos, modelados usando uma abordagem de Teoria de Misturas. O objetivo principal consiste na simulação do escoamento através de um meio poroso, associado ao movimento de contaminantes no interior deste. Para tal simulação será considerado um meio poroso infinito que, inicialmente, contém um fluido com uma dada distribuição de densidades e de velocidades e um elemento contaminante com uma dada concentração. A simulação apresentada mostra como se dá o movimento do fluido e do contaminante no interior do meio poroso, a partir de uma dada condição inicial. O problema matemático a ser resolvido, em geral, não admite solução contínua, impondo a presença de ondas de choque para a representação completa do fenômeno. A partir de uma condição inicial na forma de degrau, a solução exata é apresentada contemplando todas as possibilidades.

Palavras-chave: Meio Poroso. Problema de Riemann. Transporte de Contaminantes. Solução Exata.

ABSTRACT

This work presents a mathematical description of the flow of Newtonian fluids containing non-reactive pollutants through rigid and homogeneous porous media, modeled using a Mixture Theory approach. The main objective is to simulate the flow through a porous medium, associated with the movement of pollutants within it. For this simulation, an infinite porous medium will be considered, initially containing a fluid with a given density and velocity distribution and a pollutant element with a given concentration. The simulation presented illustrates how the fluid and the pollutant move within the porous medium, starting from a given initial data. The mathematical problem to be solved, in general, does not admit a continuous solution, presenting shock waves for the complete representation of the phenomenon. Starting from a step function as the initial condition, the exact solution is presented, encompassing all possibilities.

Keywords: Porous Medium. Riemann Problem. Pollutant Transport. Exact Solution.



RESUMEN

Este trabajo describe matemáticamente el flujo de fluidos newtonianos que contienen contaminantes no reactivos a través de medios porosos rígidos y homogéneos, modelados mediante un enfoque de Teoría de Mezclas. El objetivo principal es simular el flujo a través de un medio poroso, asociado con el movimiento de contaminantes en su interior. Para esta simulación, se considerará un medio poroso infinito, que inicialmente contiene un fluido con una densidad y distribución de velocidad dadas, y un contaminante con una concentración dada. La simulación presentada muestra cómo el fluido y el contaminante se mueven dentro del medio poroso, partiendo de una condición inicial dada. El problema matemático a resolver, en general, no admite una solución continua, requiriendo la presencia de ondas de choque para la representación completa del fenómeno. Partiendo de una condición inicial en forma de escalón, se presenta la solución exacta, abarcando todas las posibilidades.

Palabras clave: Medio Poroso. Problema de Riemann. Transporte de Contaminantes. Solución Exacta.



1 INTRODUÇÃO

Os fenômenos de transporte em meios porosos apresentam diversas aplicações, algumas das quais com relevantes impactos ambientais, como o sequestro de dióxido de carbono, a penetração de produtos químicos que contaminam o solo, ou a eliminação de resíduos radioativos. Entre as aplicações significativas na área de petróleo e gás estão a simulação de escoamento de reservatórios de petróleo, a recuperação avançada de petróleo e a produção de gás natural, por exemplo. Outra aplicação relevante são os escoamentos de águas. Essencialmente, o estudo dos escoamentos de águas subterrâneas é essencial para o desenvolvimento e gestão dos recursos hídricos.

Além disso, os escoamentos através de meios porosos são aplicados a secagem, filtração, gerenciamento de energia geotérmica, drenagem de terras agrícolas, coleta de energia geotérmica, coletores de energia solar e transferência de massa através de membranas, para citar algumas das inúmeras aplicações (Bear, 1972; Scheidegger, 1974; Whitaker, 1969).

A Teoria de Misturas, empregada no presente trabalho, considera sempre uma descrição macroscópica dos constituintes contínuos superpostos da mistura (cada ponto da mistura ocupado, simultaneamente, por todos os constituintes da mistura) com uma aparente independência termomecânica. As leis de conservação são propostas para todos os constituintes com termos de fonte adicionais para levar em conta a interação entre os constituintes (e considerar a aparente independência termomecânica dos constituintes) e para a mistura como um todo (Atkin e Craine, 1976; Bowen, 1982; Bedford e Drumheller, 1983; Rajagopal e Tao, 1995). O modelo mecânico requer equações constitutivas propostas através de um procedimento sistemático, satisfazendo sempre o princípio da objetividade e a segunda lei da termodinâmica (ver: Coleman e Noll, 1963; Costa Mattos et al., 1995).

Este trabalho tem como foco o estudo de um escoamento de um fluido, contendo contaminantes em suspensão, através de uma matriz porosa insaturada, descrito à luz da Teoria Contínua de Misturas. A simulação do sistema hiperbólico não linear que resulta do modelo mecânico é realizada sob a hipótese de meio infinito e sob condições iniciais em forma de degrau, de tal maneira que o problema matemático resultante é um Problema de Riemann (Smoller, 1983), cuja solução é obtida de forma exata. Esta metodologia de simulação não é usual, uma vez que admite ondas de choque (descontinuidades). Este tipo de descrição tem sido empregada em diversos problemas de Engenharia, dentre os quais está o estudo do comportamento da pressão em tubos preenchidos por líquidos (Freitas Rachid et al., 1994).

2 O MODELO MATEMÁTICO

Partindo de uma descrição à luz da Teoria Contínua de Misturas, vamos considerar uma mistura contínua composta por $n_p + 3$ constituintes. O primeiro, representando o meio poroso, não terá suas equações de conservação abordadas, uma vez que o meio poroso é suposto rígido e em repouso. O



segundo representa um gás inerte com baixíssima densidade, considerado apenas para prover a mistura de alguma compressibilidade. Suas equações de conservação também não serão tratadas, como consequência da hipótese de baixíssima densidade. O terceiro constituinte representa um líquido que escoar através do meio poroso. Sob o ponto de vista da Mecânica do Contínuo Clássica, esse líquido será suposto incompressível.

Além dos três constituintes anteriormente citados, vamos admitir a existência de mais n_p constituintes, cada um deles representando algum tipo de elemento em suspensão na mistura (por exemplo, contaminantes), todos eles presentes com pequena concentração, de tal forma que dispensaremos a análise das equações da quantidade de movimento para os contaminantes, nos restringindo apenas à equação de conservação de massa para cada um destes constituintes presentes com pequena concentração.

Quando se consideram constituintes com pequenas concentrações é possível admitir que suas velocidades sejam aproximadamente iguais à velocidade do líquido principal, a qual será aproximadamente igual à velocidade da mistura.

Considerando que a massa do fluido principal (um líquido) se conserva temos que:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_t} \rho_f dV = 0 \quad (1)$$

onde ρ_f é a densidade do constituinte fluido na mistura e Ω_t é a região espacial ocupada no instante de tempo t .

A densidade de um constituinte na mistura é uma razão local entre a massa deste constituinte e o volume da mistura. Assim, ao integrar a densidade de um constituinte na mistura sobre um dado volume de mistura, teremos a massa deste constituinte contida no referido volume.

Voltando à equação (1), podemos usar o Teorema do Transporte de Reynolds para escrever:

$$\int_{\Omega_t} \left\{ \frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \text{div}(\rho_f \mathbf{v}_f) \right\} dV = 0 \quad (2)$$

onde $\mathbf{v}_f$ é a velocidade do constituinte que representa o líquido principal. Levando em conta que Ω_t é uma região arbitrária no espaço, a equação (2) permite concluir que:

$$\frac{\partial \rho_f}{\partial t} + \text{div}(\rho_f \mathbf{v}_f) = 0 \quad (3)$$



Neste ponto são definidos alguns conceitos usuais em escoamentos em meios porosos. A porosidade (ε) de uma matriz porosa, assim como a densidade mássica do fluido (ρ_f) são medidas sob um ponto de vista (clássico) de Mecânica do Contínuo. Como ρ_f é a densidade do constituinte fluido na mistura, a fração de fluido é definida como a razão

$$\varphi = \frac{\rho_f}{\rho_F} \quad (4)$$

A saturação ψ é a razão entre a fração de fluido φ e a porosidade ε do meio poroso (medida sob um ponto de vista de Mecânica do Contínuo):

$$\psi = \frac{\varphi}{\varepsilon} \quad (5)$$

A definição da concentração ω_i de um contaminante na mistura é feita considerando a densidade do fluido principal, visto como um meio contínuo incompressível, denotada por ρ_F . Assim sendo, podemos definir as concentrações ω_i dos constituintes contaminantes como:

$$\omega_i = \frac{\rho_i}{\varepsilon \rho_F} \quad (6)$$

sendo ρ_i a densidade do constituinte i na mistura.

O balanço de massa para os constituintes contaminantes é dado por:

$$\int_{\Omega_i} \left\{ \frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\rho_i \mathbf{v}_i) \right\} dV = 0 \quad i = 1, n_p \quad (7)$$

onde n_p representa o número de constituintes contaminantes considerados. A forma local do balanço de massa é obtida levando em conta que a equação (7) é válida para qualquer volume arbitrário Ω_i , logo o integrando tem que ser nulo:

$$\frac{\partial \rho_i}{\partial t} + \text{div}(\rho_i \mathbf{v}_i) = 0 \quad (8)$$



Suporemos que a quantidade de contaminantes na mistura é tão pequena que suas velocidades podem ser aproximadas por $\mathbf{v}_f$, que é a velocidade do constituinte que representa o líquido principal, ou seja, $\mathbf{v}_i \cong \mathbf{v}_f$.

A equação de balanço de massa para os contaminantes pode ser reescrita empregando a definição da concentração ω_i e admitindo que os contaminantes se movem com a velocidade do constituinte fluido, $\mathbf{v}_f$, tem-se:

$$\frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \text{div}(\omega_i \mathbf{v}_f) = 0 \quad i = 1, n_p \quad (9)$$

O balanço de quantidade de movimento linear para o constituinte fluido da mistura que representa o líquido (fluido Newtoniano incompressível) é dado por:

$$\frac{d}{dt} \int_{\Omega_i} \rho_f \mathbf{v}_f dV = \int_{\Omega_i} (\rho_f \mathbf{b}_f + \mathbf{m}_f) dV + \int_{\partial \Omega_i} \mathbf{T}_f \mathbf{n} dA \quad (10)$$

onde $\mathbf{T}_f$ representa o tensor parcial de tensões, $\mathbf{b}_f$ a força de corpo, e $\mathbf{m}_f$ a força difusiva de interação, todos atuando sobre o constituinte fluido.

Aplicando o teorema da divergência e levando em conta que a região de integração é arbitrária, ficamos com

$$\rho_f \left[\frac{\partial \mathbf{v}_f}{\partial t} + (\text{grad } \mathbf{v}_f) \mathbf{v}_f \right] = \text{div } \mathbf{T}_f + \mathbf{m}_f + \rho_f \mathbf{b}_f \quad (11)$$

Williams (1978), fazendo uma analogia com o tensor tensão de Cauchy, supôs que o tensor parcial de tensões fosse proporcional à pressão e ao gradiente de velocidade – na verdade ao tensor de taxa de deformação – atuando sobre o constituinte fluido. Allen (1986) afirmou que as tensões normais eram dominantes em relação ao cisalhamento e às trações interfásicas na mistura. Isto levou a uma hipótese simplificadora para a equação constitutiva do tensor parcial de tensões $\mathbf{T}_f$ do constituinte do fluido, sendo esta dada por:

$$\mathbf{T}_f = -\varepsilon \varphi^2 \bar{p} \mathbf{1} \quad (12)$$

Novos termos de fonte são necessários para levar em conta a interação termomecânica entre os constituintes da mistura. Neste caso, existe uma fonte de momentum atuando sobre o constituinte



fluido representado pelo termo $\mathbf{m}_f$ devido à interação do constituinte fluido com os demais constituintes da mistura, especialmente com o meio poroso. A fonte de momentum é um termo que tenta modelar o efeito das forças capilares sob o ponto de vista da Teoria de Misturas, que considera o fato dos escoamentos através de meios porosos insaturados dependerem fortemente da saturação. Suporemos então que o termo de fonte dependa do gradiente de saturação (Williams, 1978; Saldanha da Gama e Sampaio, 1987). Neste caso a equação constitutiva para o termo $\mathbf{m}_f$ é dada por

$$\mathbf{m}_f = -\frac{\mu_f \varepsilon^2 D}{K} \phi \nabla \phi \quad (13)$$

onde μ_f é a viscosidade do fluido e K é a permeabilidade específica da matriz porosa – todas as variáveis medidas num contexto de Mecânica do Contínuo. A quantidade D é um coeficiente de difusão (Wang, 2000).

Substituindo as hipóteses constitutivas para a fonte de momentum e o tensor parcial de tensões no balanço de momentum linear, supondo que não haja influência das forças de corpo (essencialmente devidas à aceleração da gravidade) neste escoamento, tem-se o balanço de momentum linear para o constituinte fluido dado por:

$$\rho_f \left[\frac{\partial \mathbf{v}_f}{\partial t} + (\nabla \mathbf{v}_f) \mathbf{v}_f \right] = -\varepsilon \nabla (\phi^2 \bar{p}) - \frac{\mu_f \varepsilon^2 D}{K} \phi \nabla \phi \quad (14)$$

onde $\bar{p}$ é uma constante e a pressão pode ser convenientemente redefinida a partir da relação

$$\frac{\partial}{\partial x} (\phi^2 \varepsilon^2 \bar{p}) + \frac{\mu_f \varepsilon^2 D}{K} \phi \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial p}{\partial x} \quad (15)$$

Supondo que todas as variáveis dependam apenas do tempo t e da coordenada espacial x , com u representando a componente x da velocidade, o sistema pode ser escrito, na forma unidimensional, como:

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\phi u) = 0 \\ \frac{\partial}{\partial t} (\phi u) + \frac{\partial}{\partial x} (\phi u^2 + p) = 0, \quad \text{com } p = \hat{p}(\phi) \\ \frac{\partial \omega_i}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x} (\omega_i u) = 0, \quad i = 1, n_p \end{cases} \quad (16)$$



onde $\varphi = \varepsilon\psi$. Essa proporcionalidade permite substituir φ por ψ em (16).

É importante notar que neste trabalho as forças externas serão apenas aquelas devidas à pressão e à interação entre o fluido principal e o meio poroso. Nesse caso, a equação diferencial que representa a quantidade de movimento linear é a segunda equação do sistema (16) acima.

3 METODOLOGIA

O problema (16) será escrito em termos da saturação ψ ao invés da fração de fluido φ . O problema resultante é um problema hiperbólico não linear (Smoler, 1983; Lax, 1971) o qual será resolvido admitindo soluções contínuas e soluções descontínuas.

Será admitido que o domínio espacial seja infinito e, portanto, não há condições de contorno. Uma condição inicial, com descontinuidade na origem, garante que a solução dependa apenas da razão x/t .

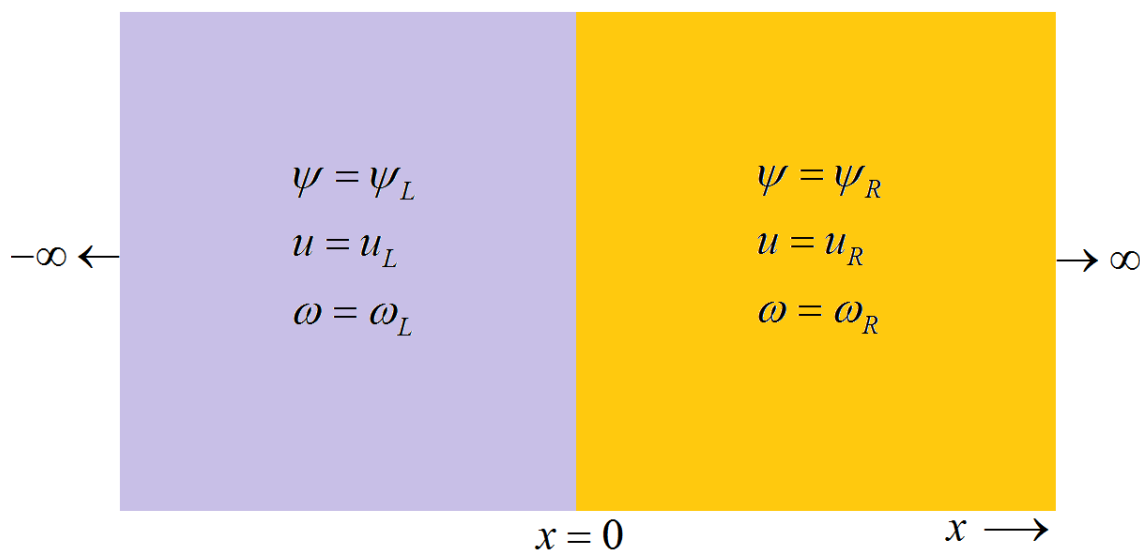
A solução será construída a partir da conexão dos estados à esquerda e à direita a um estado intermediário.

4 RESULTADOS E DISCUSSÕES

Vamos considerar agora uma situação particular para a qual se consegue uma solução exata em forma fechada para o problema.

O problema em foco consiste num meio poroso infinito inicialmente com as quantidades ψ , u e ω (aqui teremos apenas 1 contaminante) assumindo um valor constante para $-\infty < x < 0$ e um outro valor constante para $0 < x < \infty$.

Figura 1. Meio poroso infinito com condição inicial descontínua para ψ , u e ω . Para o instante inicial temos $\psi = \psi_L, u = u_L$ e $\omega = \omega_L$ para $-\infty < x < 0$. Para $0 < x < \infty$ temos $\psi = \psi_R, u = u_R$ e $\omega = \omega_R$.



Fonte: O próprio autor



Considerando que a pressão p e a saturação ψ sejam tais que (Williams, 1978) em algum sistema de unidades:

$$p = \hat{p}(\psi) = \psi^2 \quad (17)$$

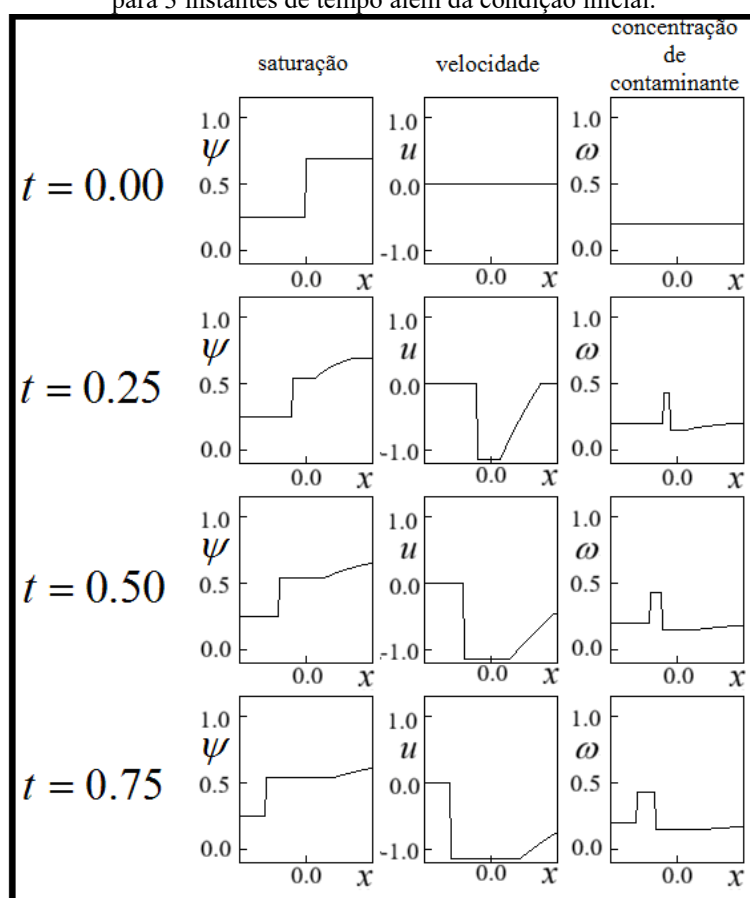
podemos reescrever o sistema de equações como:

$$\frac{\partial}{\partial t} \begin{bmatrix} \psi \\ \psi u \\ \omega \end{bmatrix} + \mathbf{A} \frac{\partial}{\partial x} \begin{bmatrix} \psi \\ \psi u \\ \omega \end{bmatrix} = 0, \quad \mathbf{A} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 2\psi - u^2 & 2u & 0 \\ -\omega u / \psi & \omega_i / \psi & u \end{bmatrix} \quad (18)$$

A solução deste problema, considerando as condições iniciais ilustradas na figura 1, dependerá apenas da variável $\eta = x/t$. As figuras 2, 3, 4 e 5 ilustram alguns resultados.

A figura 2 apresenta resultados obtidos para a condição inicial $\psi_L = 0.25$, $\psi_R = 0.7$, $u_L = 0.0$, $u_R = 0.0$, $\omega_L = 0.2$, $\omega_R = 0.2$.

Figura 2 – A solução do problema (18) considerando $\psi_L = 0.25$, $\psi_R = 0.7$, $u_L = 0.0$, $u_R = 0.0$, $\omega_L = 0.2$, $\omega_R = 0.2$, para 3 instantes de tempo além da condição inicial.

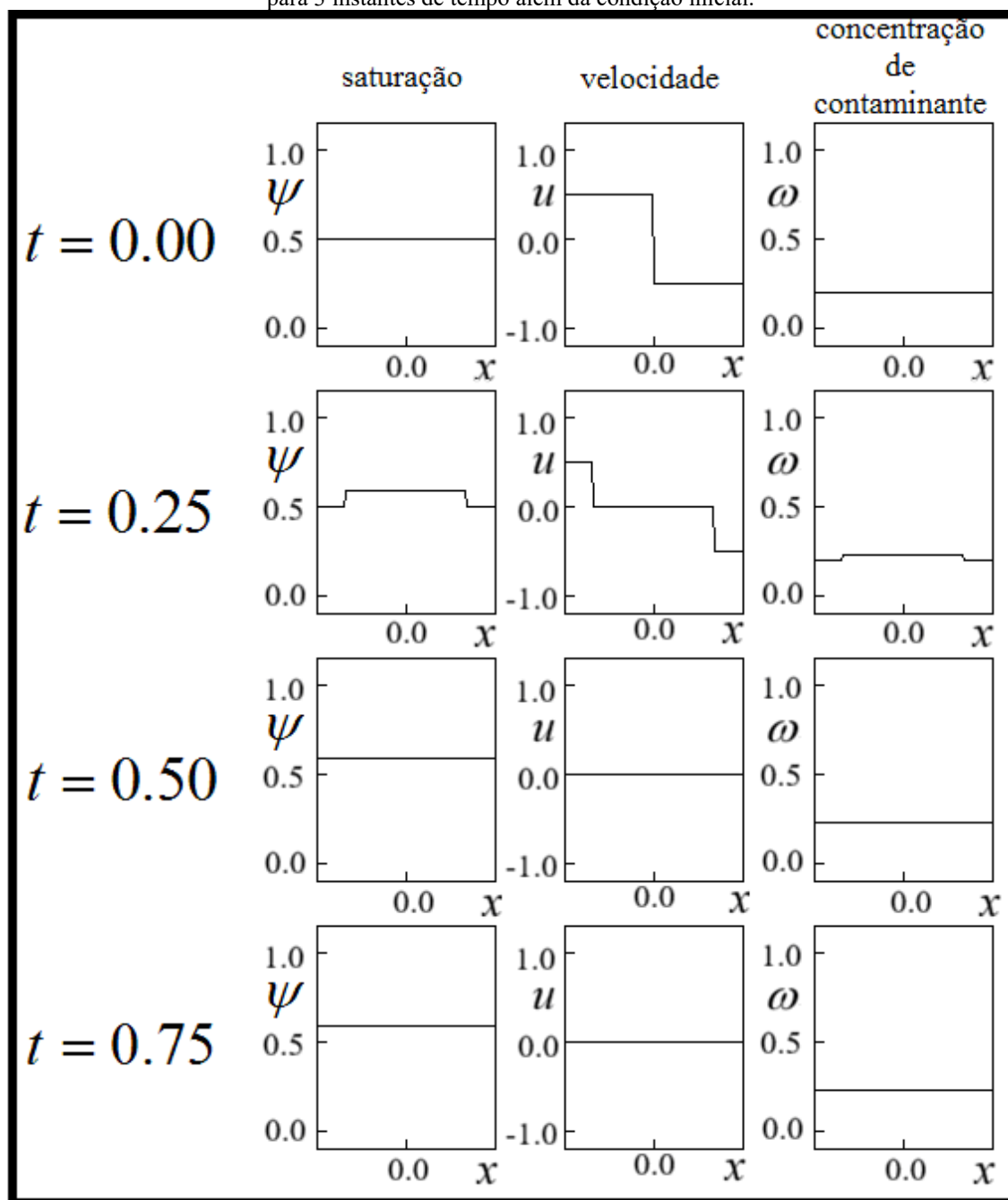


Fonte: O próprio autor



Interessante notar nesta figura 2 que, inicialmente, temos velocidade nula em toda parte e concentração de contaminante constante. A alteração nos perfis de velocidades e de concentrações ocorre única e exclusivamente devido à diferença de saturação no instante inicial.

Figura 3 – A solução do problema (18) considerando $\psi_L = 0.5$, $\psi_R = 0.5$, $u_L = 0.5$, $u_R = -0.5$, $\omega_L = 0.2$, $\omega_R = 0.2$, para 3 instantes de tempo além da condição inicial.

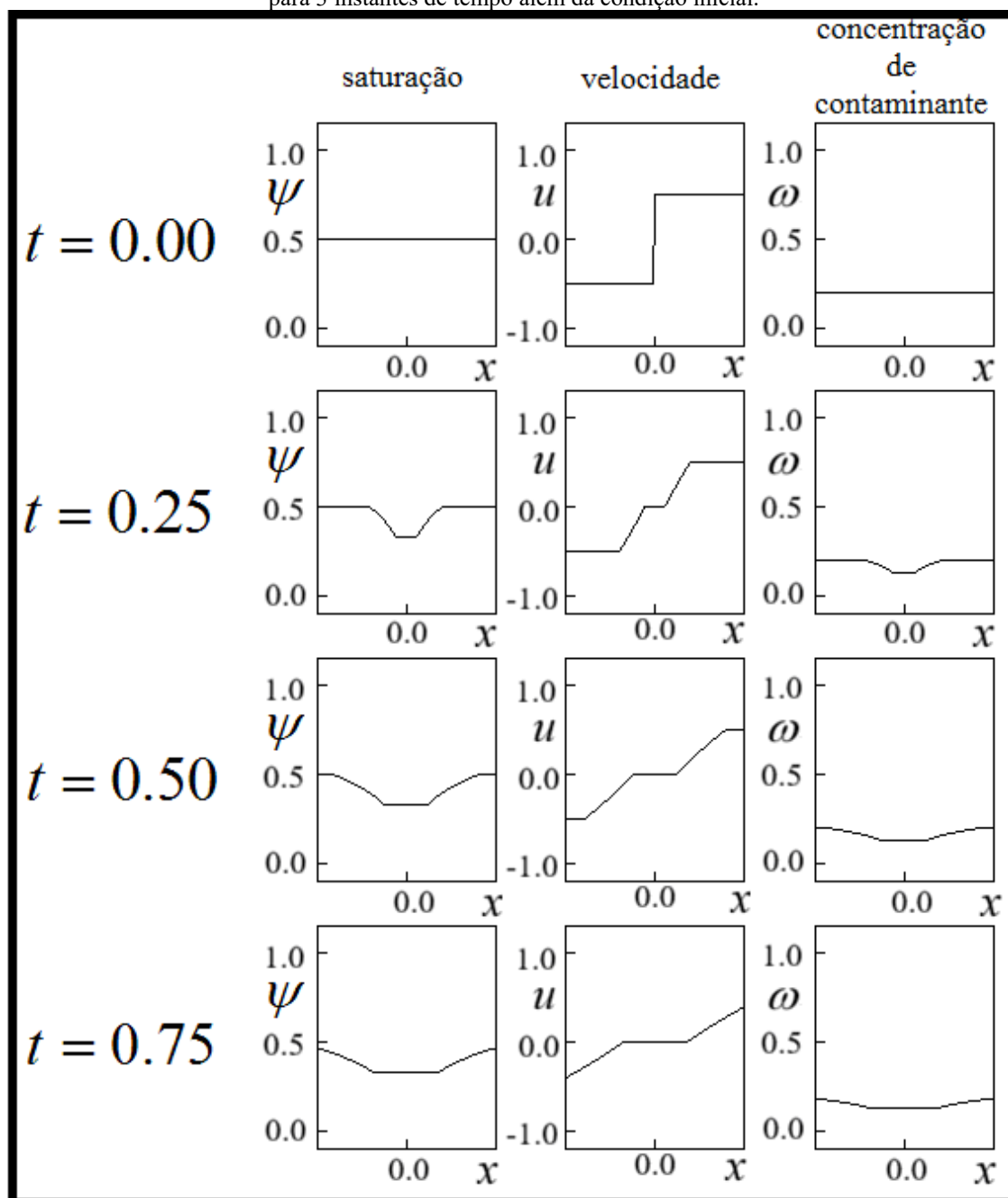


Fonte: O próprio autor

Interessante notar nesta figura 3 que, inicialmente, temos saturação constante e concentração de contaminante constante. A velocidade é negativa no lado direito e positiva no lado esquerdo, no instante inicial. A alteração nos perfis de saturações e de concentrações ocorre única e exclusivamente devido à diferença de velocidades no instante inicial.



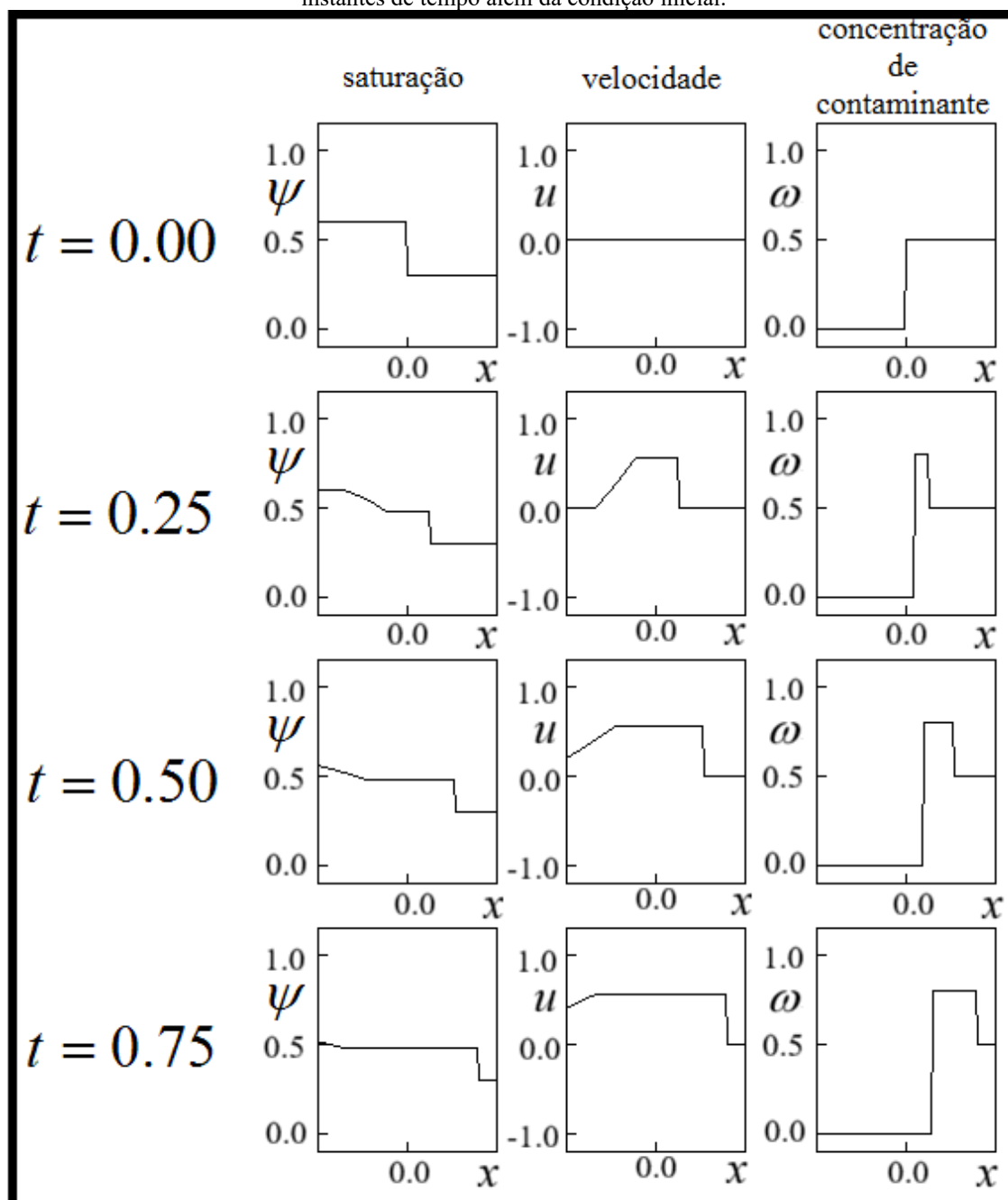
Figura 4 – A solução do problema (18) considerando $\psi_L = 0.5$, $\psi_R = 0.5$, $u_L = -0.5$, $u_R = 0.5$, $\omega_L = 0.2$, $\omega_R = 0.2$, para 3 instantes de tempo além da condição inicial.



Fonte: O próprio autor

A diferença básica entre esta figura 4 e a figura 3 é a inversão de sinal das velocidades. Aqui a velocidade é positiva do lado direito e negativa do lado esquerdo. A alteração nos perfis de saturações e de concentrações ocorre única e exclusivamente devido à diferença de velocidades no instante inicial.

Figura 5 – A solução do problema (18) considerando $\varphi_L = 0.6$, $\varphi_R = 0.3$, $u_L = 0.0$, $u_R = 0.0$, $\omega_L = 0.0$, $\omega_R = 0.5$ para 3 instantes de tempo além da condição inicial.



Fonte: O próprio autor

Nesta figura 5 temos, inicialmente, saturação com descontinuidade e velocidade nula. O contaminante tem concentração nula à esquerda. Nota-se um pico de concentração logo após o instante inicial. A concentração, que inicialmente não passava de 0.5, chega até 0.8.

5 CONCLUSÃO

Este trabalho ilustra o movimento advectivo de um contaminante através de um meio poroso insaturado. Fica bastante clara a influência da saturação e da velocidade iniciais sobre o comportamento da concentração do contaminante.



Esses resultados significam um passo importante para a previsão de desastres ambientais associados à contaminação de solos. Alguns acidentes envolvendo o derramamento de substâncias tóxicas junto a lavouras podem ser simulados a partir dos modelos empregados aqui.

Ferramentas análogas, com algumas alterações funcionais, podem ser empregadas para estudar a propagação de elementos contaminantes no ar, particularmente quando oriundos de eventos muito rápidos como, por exemplo, aqueles oriundos de grandes explosões.

O tema está longe de ser encerrado ou concluído aqui. Problemas com condições de contorno (tanto na saturação quanto na velocidade e na concentração) não foram tratados. Problemas com vários contaminantes e com reações químicas também.



REFERÊNCIAS

- ALLEN, M.B. Mechanics of multiphase fluid flows in variably saturated porous media. *Int. J. Eng. Sci.*, v. 24, 339–351, 1986.
- ATKIN, R.J.; CRAINE, R.E. Continuum Theories of Mixtures. Basic Theory and Historical Development. *Q. J. Mech. Appl. Math.* v. 29, 209–244, 1976.
- BEAR, J. Dynamics of fluids in porous media. New York: Dover, 1972.
- BEDFORD, A.; DRUMHELLER, D.S. Theories of immiscible and structured mixtures. *Int. J. Multiph. Flow*, 21, 863–960, 1983.
- BOWEN, R.M. Compressible porous media models by the use of the theory of mixtures. *Int. J. Eng. Sci.*, 20, 697–735, 1982.
- COLEMAN, B.D.; NOLL, W. The thermodynamics of elastic materials with heat conduction and viscosity. *Arch. Ration. Mech. Anal.*, 13, 168–178, 1963
- COSTA MATTOS, H.S.; MARTINS-COSTA, M.L.; SALDANHA DA GAMA, R.M. On the modeling of momentum and energy transfer in incompressible mixtures. *Int. J. Non-Linear Mech.*, 30, 419–431, 1995.
- FREITAS RACHID, F.B.; SALDANHA DA GAMA, R.M.; COSTA MATTOS, H. Modelling the hydraulic transients in damageable elasto- viscoplastic piping systems. *Appl. Math. Model.*, 18, 207–215, 1994.
- LAX, P. Waves and Entropy. In *Contributions to Nonlinear Functional Analysis*. New York, Academic Press, 1971.
- RAJAGOPAL, K.R.; TAO, L. Mechanics of mixtures. v. 35 of *Advances in Mathematics for Applied Sciences*. Singapura: World Scientific, 1995.
- SALDANHA DA GAMA, R.M.; SAMPAIO, R. A model for the flow of an incompressible newtonian fluid through a nonsaturated infinite rigid porous medium. *Comput. Appl. Math.*, 6, 195–205, 1987
- SCHEIDEGGER, A. E. *The Physics of Flow through Porous Media*, 3o ed. Toronto: University of Toronto Press, 1974.
- SMOLLER, J. *Shock-waves and reaction-diffusion equations*; New York: Cambridge University Press, 1983.
- WANG, L. Flows through porous media: A Theoretical Development at Macroscale. *Transp. Porous Med.*, 39, 1–24, 2000.
- WHITAKER, S. Advances in theory of fluid motion in porous media. *Ind. Eng. Chem.*, 61, 14–28, 1969.
- WILLIAMS, W.O. Constitutive equations for a flow of an incompressible viscous fluid through a porous medium. *Q. J. Appl. Math.*, 36, 255–267, 1978.

