

Resumo

Em Portugal é ainda frequente encontrar águas subterrâneas contaminadas por compostos orgânicos voláteis (COVs), sobretudo em zonas de intensiva actividade industrial. Legislação comunitária recentemente publicada exige que se cumpra a médio prazo padrões mínimos de qualidade. O processo de arrastamento por ar em colunas com enchimento desordenado é uma das técnicas de tratamento disponíveis, embora ainda pouco implementada no nosso país.

A descrição do regime hidrodinâmico e da transferência de massa deste processo encontra-se relativamente bem documentada. Com base nos modelos anteriormente testados por Castro [Castro, 1997] e nos mais recentes publicados por Billet [Billet, 1995] e Djebbar [Djebbar, 1998], foram efectuadas simulações numéricas que, para além de possibilitarem o seu estudo comparativo e a verificação das respectivas fiabilidades, permitiram fundamentar a selecção dos mais adequados para implementação numa aplicação informática. Este "software", concebido para MatLab, é composto por dois programas de simulação numérica, sendo o primeiro dedicado à simulação do comportamento de uma coluna em estado estacionário e o segundo destinado a executar o dimensionamento para uma determinada taxa de remoção pretendida. A validação dos resultados do programa foi efectuada recorrendo simultaneamente a dados resultantes de operações às escalas piloto e industrial, que foram publicados por Hand [Hand, 1986] e a dados provenientes de uma instalação laboratorial especialmente construída para este efeito.

Com base neste estudo, os modelos mais apropriados de perda de carga e de transferência de massa foram combinados, para incorporação no modelo fenomenológico de descrição deste processo de transferência, em regime estacionário e em regime transiente. Este modelo corporiza-se num sistema de equações às derivadas parciais (EDPs) de 1º ordem, na sua versão menos restritiva não linear, do tipo hiperbólico, com uma variável espacial axial (é admitido que a dispersão radial pode ser desprezada) e uma variável temporal, sendo o estado estacionário traduzido por um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDOs) lineares. A obtenção de uma solução única está sempre dependente da fixação do valor de alguns parâmetros, da caracterização do estado de referência, através das condições iniciais (CI), e da definição das condições de fronteira (CF). Este conjunto de condições origina diferentes sistemas, com diferentes graus de complexidade, e desempenhos distintos.

O sistema de PDEs que constitui o modelo matemático apresentado não pode ser resolvido pelos programas mais utilizados para integrar numericamente este tipo de equações (como, por exemplo, o módulo PDE do MatLab e os módulos PDECOL para utilização em programação Fortran). Assim, desenvolveram-se algoritmos e estratégias específicas em ambiente MatLab. As CI, ou seja o estado estacionário primitivo, foram determinadas pela resolução de um sistema de EDOs, e foi implementado numericamente pelo método explícito de Euler, apesar de a solução analítica poder ser determinada facilmente. Já a implementação numérica de um algoritmo para resolução do sistema de EDPs por diferenças finitas colocava novos problemas. As CF impõem, na discretização espacial, a

utilização de diferenças ascendentes para as concentrações da fase líquida e de concentrações descendentes para as concentrações da fase gasosa. Esta localização das CF impossibilita a utilização de métodos explícitos, pelo que se teve de recorrer aos métodos implícitos. Estes possuem aliás a vantagem de apresentarem erros inferiores aos obtidos nos métodos explícitos. Possuem no entanto a desvantagem de obrigarem a um recurso intensivo da memória. Neste caso, perante n intervalos temporais e m intervalos espaciais, ter-se-á $n.m$ células espaço-temporais e, para cada uma, ter-se-á de resolver um sistema de 2 equações às diferenças. No total ter-se-á de resolver um sistema de $2.n.m$ equações a $2.n.m$ incógnitas. Este facto implica, por sua vez, a criação de uma matriz do sistema com $(2.n.m)^2$ elementos e $2.n.m$ termos independentes. A estratégia considerada para obtenção da solução foi a utilização de matrizes esparsas.

A validação do modelo global foi executada em duas vertentes: a validação da modelação teórica (física e matemática) centrada numa análise crítica dos resultados obtidos em laboratório sobre um sistema seleccionado formado por água, tolueno e ar, e uma validação numérica centrada em estudos de convergência, estabilidade e consistência assim como da análise dos erros introduzidos pela discretização do modelo e na resposta do modelo a perturbações padrão. Os resultados obtidos mostraram-se coerentes.

A concordância entre os resultados obtidos na teoria e na prática, pese embora as dificuldades encontradas no controlo analítico das amostras, permite concluir que o modelo proposto possui um rigor fenomenológico suficiente e que o modelo numérico associado possibilita um elevado grau de exactidão e de fiabilidade. A aplicação desenvolvida pode constituir uma importante ferramenta de apoio à análise dinâmica desta operação unitária à escala industrial, reduzindo o esforço experimental e os respectivos custos associados. Constitui igualmente a base para uma implementação de um potencial sistema de controlo por actuação antecipada com base num modelo que reveste a forma de um sistema de parâmetros distribuídos.

Abstract

In Portugal is still common to find groundwater contaminated by VOC, specially in areas with intensive industrial activity. The actual European Community legislation on groundwater imposes in medium term the accomplishment of quality patterns concerning these contaminants. Air stripping using columns with random packing is one of the most used technologies.

The description of the main hydraulic features and the mass transfer in this process is relatively well documented. Based on the models previously tested by Castro [Castro, 1997] and on the most recent works published by Billet [Billet, 1995] and Djebbar [Djebbar, 1998], several numerical simulations were made allowing its comparability and the appraisal of the reliability, thus allowing the election of the most adequate for implementation in a computer application. This software was conceived in a Matlab environment and consists in two digital simulation programmes. The first concerns the simulation of the behaviour of a column in steady-state and the second refers to the design of a

column achieving a pre-defined rate of removal. The validation of the results was done using either data published by Hand [Hand, 1986], collected in pilot and industrial operations, or data produced in a small pilot installation that was specially built for this research.

The most appropriate pressure drop and mass transfer models were combined for incorporation in a phenomenological model describing this transfer process, both in steady and transient state. This model consists in a system of 1st order partial differential equations of the hyperbolic type, which are non-linear in its less restrictive form, with two independent variables: a longitudinal space variable (the radial dispersion was neglected) and the time. The steady state assumes the form of a system of two ordinary differential equations. The determination of a unique solution depends on fixing the values for some parameters, on the characterization of a reference state (initial conditions) and on the definition of the boundary conditions.

The system of PDE can not be solved by any of the most vulgar programmes used to numerically integrate this type of equations (AS, for instance, the PDE Toolbox in Matlab and the set of routines designated by PDECOL for usage in Fortran programming). Thus, specific Algorithms and strategies were developed in Matlab environment. The initial conditions or the primitive steady-state was calculated solving a system of ODE by the Explicit Euler method, although the Analytical solution is easily obtained. However, the numerical implementation of an algorithm for solving the PDE system by finite differences caused new problems. The boundary conditions are located in opposite extremities of the space, compelling the usage of ascending differences for the concentrations in the liquid phase and descending differences for the concentrations in the gaseous phase. This location of the boundary conditions does not allow the usage of explicit methods and for this reason the implicit method was used. Nevertheless, they have the advantage of generating errors smaller than those arising from the explicit methods. But they also present the notorious disadvantage of an intensive usage of the memory. In this case if we have n intervals in time and m intervals in space, $n.m$ space-time cells are generated, and for each it is necessary to solve a system of two difference equations. As total, we have to solve a system with $2.m.n$ equations in relation to $2.m.n$ unknowns. This implies the creation of a matrix with $(2mn)^2$ elements and $2mn$ independent terms. The adopted solution was the usage of sparse matrixes.

The validation of the global model was done both in relation to the conceptual translation of the process phenomenology and to its numerical reliability. The first, focused in a critical analysis of the results produced at the experimental station using water contaminated with toluene. The second was based in studies of convergence, stability and consistency of the numerical solutions and also on the analysis of the errors produced by the discretization of the theoretical model when submitted to specific perturbations. The results were coherent.

The fitness between theoretical and experimental results, in spite of the difficulties found in the chemical analysis, allows the conclusion that the models developed have an adequate intrinsic phenomenological rigour and that the associated numerical methods allow a high degree of exactness and reliability. The models created may constitute an important tool of support to the dynamic analysis of this operation at an industrial scale. They can also be converted into the fundamental basis for the

implementation of a potential automatic feedforward control system based on a model represented by a distributed parameter system.