

UTILIZAÇÃO DA TEORIA DE ANÁLISE COMPARTIMENTAL PARA ESTUDAR A CINÉTICA DE INFILTRAÇÃO NA ZONA NÃO SATURADA EM ABADIA DE GOIÁS

Dora de Castro Rubio Poli* e Carlos Henrique de Mesquita**

*Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares - IPEN-CNEN/SP
Travessa "R", 400 - Cidade Universitária
05508-900, São Paulo, Brasil
Email: dcrpoli@net.ipen.br

** INCOR - Instituto do Coração - Fundação Zerbini
Av. Dr. Enéas de Carvalho Aguiar 44, Laboratório de Pesquisas
05403-900, São Paulo, Brasil
Email: chmesqui@usp.br

RESUMO

Utilizou-se a análise compartimental para avaliar os parâmetros cinéticos da infiltração da precipitação e determinação da recarga do aquífero, na região de Abadia de Goiás - Goiânia. Propôs-se um modelo contendo 13 compartimentos para explicar a infiltração e a cinética da água no solo. Para validar o modelo efetuou-se injeção de água tritiada em local representativo da região, a uma profundidade de 50cm, abaixo da zona das raízes. Amostragens de solo foram efetuadas nos tempos de 4, 9 e 12 meses após a injeção. No primeiro compartimento considerou-se um componente de evaporação $k_{4,0}$ e no último compartimento, uma constante de remoção para o lençol freático, $k_{13,0}$. Os compartimentos 1, 2 e 3 foram incluídos ao sistema para considerar o efeito da precipitação. Foi utilizado o programa AnaComp, desenvolvido no IPEN para a determinação das constantes de transferência $k_{i,j}$ (de compartimento de índice i para o compartimento j), onde i e j variam de 0 a 13. No programa AnaComp as constantes $k_{i,j}$ são determinadas pelo método dos mínimos quadrados não linear utilizando rotinas de autovalores - autovetores ou alternativamente a rotina de Runge-Kutta de quarta ordem. No modelo compartimental o traçador radioativo foi introduzido, num único impulso, no compartimento nº 6 (50cm de profundidade). O modelo utilizado permite caracterizar os processos de difusão do traçador no solo estudado. A adequação do modelo adotado mostrou um coeficiente de explicação r^2 igual a 0,78, o que é satisfatório para a metodologia utilizada.

I. INTRODUÇÃO

O estudo do movimento da água na zona não saturada é importante para o conhecimento da infiltração de poluentes e lixiviação de compostos que poderão alcançar o lençol freático.

O movimento da umidade do solo é influenciado pela intensidade, duração e distribuição da precipitação; permeabilidade, densidade e tipo de solo; topografia; vegetação; evaporação, evapotranspiração; velocidade dos ventos; temperatura do ar e deficiência de umidade do solo⁽¹⁾.

A estimativa da recarga tem sido estimada pela técnica de marcação da umidade do solo com água tritiada⁽¹⁾. Baseia-se na suposição de que a umidade do solo

se move para baixo em camadas discretas. Qualquer camada fresca de água adicionada à superfície por causa da precipitação ou irrigação irá percolar, deslocando uma mesma quantidade de água abaixo dela e assim sucessivamente, de tal forma que a última camada da zona não saturada é adicionada à água subterrânea. Esse modelo de movimento de água através do solo é denominado como modelo de fluxo em pistão e foi desenvolvido por Zimmermann e col.⁽¹⁾. Nesta técnica, injeta-se o traçador a uma profundidade desejada. O traçador se move juntamente com a umidade do solo devido a subsequente precipitação ou evaporação. O deslocamento do traçador é indicado pelo pico em sua concentração ou pelo centro de gravidade do perfil de radioatividade.

O pico pode ser alargado por causa de muitos fatores, a saber: difusão molecular, irregularidades e variações microscópicas da velocidade. O centro de gravidade do perfil e o pico do trítio correspondem à posição média da camada marcada.

O conteúdo de umidade da coluna de solo entre a profundidade de injeção e a de deslocamento do traçador é a medida da recarga do aquífero no intervalo de tempo entre a injeção do trítio e a coleta da amostra de solo.

O estudo da infiltração da precipitação e determinação da recarga do aquífero no sítio de Abadia de Goiás em Goiania-GO (Brasil) apresenta um interesse especial devido a existência do repositório contendo ^{137}Cs no local.

A teoria dos compartimentos é um poderoso instrumento para a interpretação de dados cinéticos, sendo aplicada aos estudos da biologia, fisiologia, farmacologia, física e engenharia. A análise compartimental é uma ferramenta, matemática e iconográfica, útil para explicar os mecanismos envolvidos no sistema em estudo. As equações matemáticas geradas do modelo proposto são utilizadas para elaborar previsões sobre o fenômeno estudado. A validação do modelo é confirmada pela exatidão entre os dados experimentais e aqueles gerados pelas equações do modelo. Se os valores teóricos discordarem dos dados experimentais o modelo deverá ser reavaliado e redesenhado.

A origem da teoria dos compartimentos tem como precursores os estudos cinéticos com traçadores radioativos naturais divulgados desde a década de 20 (Hevesey¹⁹²³). Esses estudos tiveram um reforço na década de 30 com a descoberta do deutério (^2H) o qual é um elemento químico comum nas moléculas da água e relativamente fácil de ser quantificado. Mais recentemente, com o advento das soluções cintiladoras, a quantificação de água tritiada ($^3\text{H}_2\text{O}$) tornou-se relativamente simples e tem tido a preferência dos pesquisadores. A maioria dos trabalhos científicos das décadas de 30 a 50 expressavam seus resultados de modo qualitativo. Se limitavam a quantificar grosseiramente o tempo de meia-vida, embora alguns trabalhos já contivessem tratamento matemático bem elaborados (Artom e col¹⁹⁶⁹; Segre¹⁹³⁸; Burton¹⁹³⁹). O mérito da primeira abordagem com profundidade, incluindo definições e terminologias, foi devido ao clássico trabalho de Zilversmit et al¹⁹⁴³. Em seguida surgiram importantes contribuições que aprimoraram e complementaram a terminologia e o tratamento matemático da teoria compartimental. Destaca-se nessa fase os trabalhos de Sheppard¹⁹⁴⁸, Shepard & Householder¹⁹⁵¹ e Berman & Shoenfeld¹⁹⁵⁶. Os mais recentes avanços da análise compartimental são devidas à utilização dos recursos dos computadores (Berman et al¹⁹⁶²; Garfinkel^{1963,1966}). O advento dessas máquinas junto com a disponibilidade de instrumentação mais sensível tem permitido alcançar um aprofundamento substancial na interpretação dos dados, principalmente naqueles de natureza cinética^[2].

A teoria dos compartimentos, estruturada em equações diferenciais, não é a única opção de análise.

Outras alternativas estão presentes na literatura, como por exemplo: (a) equações integrais (Gillespie¹⁹⁹¹, Murphy¹⁹⁹¹); (b) análise de redes; (c) abordagens probabilísticas ou estocásticas (método de Monte Carlo) e (d) inteligência artificial (rede neural). Entretanto, nenhuma dessas alcançou, até o momento, a popularidade da teoria da análise compartimental (Atkins¹⁹⁶⁹)^[2].

A teoria dos compartimentos é constituída por alguns conceitos básicos como por exemplo: a substância de prova ou teste; as constantes de transferências "k".

A substância de prova ou de teste é aquela de interesse do estudo, no caso do presente trabalho, a água. Na linguagem matemática é a variável de estado. Geralmente nos estudos cinéticos a substância teste é marcada com um traçador apropriado ou utiliza-se uma outra substância que tenha a capacidade de mimetizar o comportamento cinético da substância teste. Os traçadores radioativos e os traçadores isotópicos não radioativos são os principais recursos para acompanhar a cinética das substâncias de prova.

Cada compartimento, também denominado de função compartimental representa teoricamente um local de distribuição (volume) da substância de interesse ou um dos seus estados químicos. Cada compartimento pode ser entendido como uma célula ou um determinado volume delimitado por uma membrana no qual a substância de interesse se dispersa. Um compartimento descreve o comportamento teórico da variável de interesse em termos de um modelo matemático o qual é representado por um conjunto de equações diferenciais definidas a partir das premissas teóricas do modelo. Deve ser capaz de descrever as concentrações em cada um dos compartimentos de distribuição da substância teste em função do tempo (Atkins¹⁹⁶⁹). A substância teste também pode ser definida como a quantidade de uma substância que tem cinética distinta e uniforme na sua distribuição ou transporte. O termo compartimento foi primeiramente utilizado por Sheppard em 1948. Os sistemas compartimentais podem ser classificados em sistemas catenários (ou catenulados), mamilares e mistos. O sistema catenário é aquele em que os compartimentos formam uma cadeia na forma de uma corrente. A sua característica principal é que cada compartimento somente se comunica com o anterior e o posterior. São sub-classificados em sistemas fechados e abertos^[2]. A Fig. 1 representa um sistema compartimental catenário aberto.

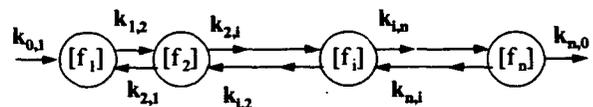


Figura 1. Representação de um Sistema Multicompartmental Tipo Catenário Aberto.

Os parâmetros "k" na Fig. 1 representam as constantes de difusão, transferência ou transporte. $k_{i,j}$ representa a fração do compartimento "i" que é

transportado para o compartimento “j” na unidade do tempo. As constantes “k” estão associadas ao fluxo de transporte pela Eq. (1).

$$\text{Fluxo(Volume}\cdot\text{tempo}^{-1}) = k_{i,j}\cdot[f_i(t)] \quad (1)$$

onde $[f_i(t)]$ é a concentração da substância de prova no compartimento “i” no instante “t”.

O objetivo deste trabalho foi estudar a cinética de transporte da água, durante um ciclo de chuva (1 ano), em um local próximo do repositório de rejeitos radioativos de ^{137}Cs em Abadia de Goiás-GO (Brasil). Utilizou-se medidas da umidade do solo em diferentes profundidade aplicando-se um modelo catenário aberto para representar o fluxo de água nas diferentes profundidades. A validade do modelo foi verificada com o uso de água tritiada como traçador.

II. MATERIAIS E MÉTODOS

Água Tritiada. Utilizou-se o trítio artificial sob a forma de água tritiada ($^3\text{H}_2\text{O}$) com concentração de $5,55\cdot 10^4\text{Bq/mL}$. A concentração foi escolhida com base na concentração máxima permissível, no limite de detecção do aparelho utilizado e nas características do local em estudo.

Injeção. As injeções foram feitas em cinco pontos distintos a uma distância de dez centímetros em forma de cruz. Foram feitos quatro conjuntos de injeções, cada um contendo esses cinco pontos. Esse procedimento garantiu a possibilidade de se efetuar quatro amostragens de solo para diferentes intervalos de tempo, 4, 9 (2 amostragens) e 12 meses após a injeção, sem afetar o solo natural e as condições ao redor do conjunto ainda não amostrado.

Amostragem. As amostras de solo foram tomadas com um trado manual de 15 cm (6”) de diâmetro em intervalos 20 cm de profundidade de solo, até atingir a profundidade de 200 cm. Quantidades adequadas do solo amostrado foram armazenados em frascos bem vedados e levados ao laboratório para a estimativa do conteúdo da umidade e do trítio.

Medida da umidade do Solo. A umidade do solo foi determinada por meio da pesagem das amostras antes e depois da secagem em estufa a $110 \pm 5^\circ\text{C}$ segundo a norma ASTM, designação D-2216-71.

Destilação das Amostras de Solo. Para a extração da umidade, as amostras foram destiladas a vácuo mecânico. As amostras foram aquecidas com mantas aquecedoras de temperatura reguláveis. A umidade destilada foi coletada nos condensadores os quais foram resfriados com mistura de gelo seco-acetona.

Deteção de Trítio. A deteção do trítio foi realizada pela técnica dos detectores líquidos de cintilação (Espectrômetro modelo Tri-Carb 1600TR da Packard

Canberra). As amostras foram preparadas com 5 mL de solução cintiladora (Aquaso-2, New England Nuclear) e 2 mL de água destilada contendo $^3\text{H}_2\text{O}$.

Modelo Cinético. A média do índice pluviométrico ao longo de cada um dos trimestres foi calculado a partir de dados publicados pelo Departamento Nacional de Meteorologia, Agência de Meteorologia de Goiânia-GO⁽³⁾. Ajustou-se essas estimativas ao modelo descrito na Fig. 2.

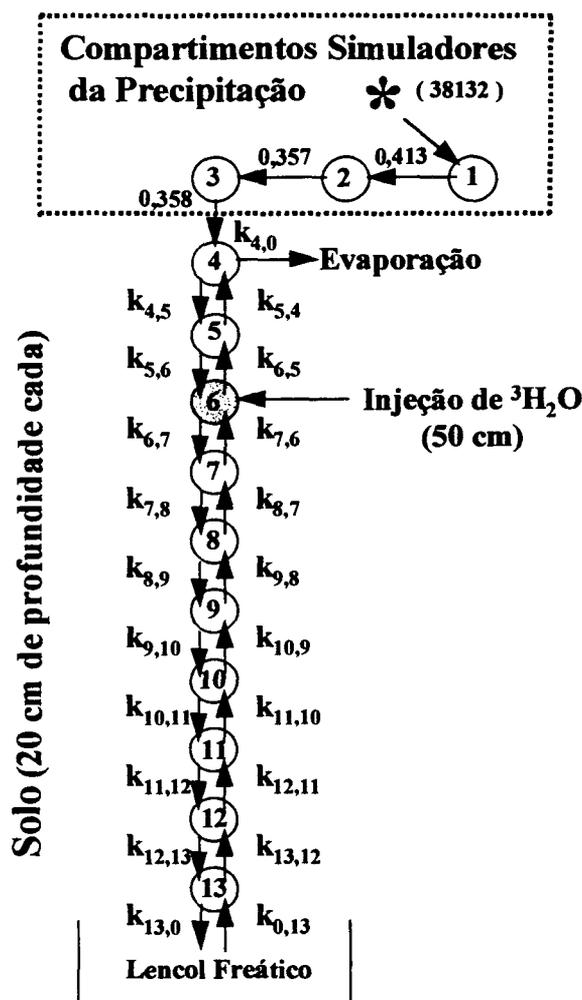


Figura 2. Modelo Simulador do Índice Pluviométrico (compartimentos 1 a 3) e Diagrama dos Fluxos de Água no Solo.

Equações Diferenciais do Modelo. O modelo da Fig. 1 é descrito matematicamente pelo sistema de equações diferenciais, onde $d1$ a $d13$ representam as equações diferenciais (df_i/dt) de cada função compartimental $f_i(t)$, sendo i o i -ésimo compartimento:

$$\begin{aligned} d1 &= -k_{1,2}\cdot f1 \\ d2 &= k_{1,2}\cdot f1 - k_{2,1}\cdot f2 \\ d3 &= k_{2,3}\cdot f2 - k_{3,4}\cdot f3 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
d4 &= 0,358*f3 + k5,4*f5 - (k4,0 + k4,5)*f4 \\
d5 &= k4,5*f4 + k6,5*f6 - (k5,4 + k5,6)*f5 \\
d6 &= k5,6*f5 + k7,6*f7 - (k6,5 + k6,7)*f6 \\
d7 &= k6,7*f6 + k8,7*f8 - (k7,6 + k7,8)*f7 \\
d8 &= k7,8*f7 + k9,8*f9 - (k8,7 + k8,9)*f8 \\
d9 &= k8,9*f8 + k10,9*f10 - (k9,8 + k9,10)*f9 \\
d10 &= k9,10*f9 + k11,10*f11 - (k10,9 + k10,11)*f10 \\
d11 &= k10,11*f10 + k12,11*f12 - (k11,10 + k11,12)*f11 \\
d12 &= k11,12*f11 + k13,12*f13 - (k12,11 + k12,13)*f12 \\
d13 &= k12,13*f12 - (k13,12 + k13,0)*f13 + k0,13
\end{aligned}$$

Fluxo de água do lençol para o compartimento nº 13 foi assumido como $k_{0,13}$ (mL/mês). Adotou-se que as constantes fracionais de transferências $k_{i,j}$ (mes⁻¹) entre os compartimentos 4 a 13 sejam iguais, isto é, $k_{4,5} = k_{5,6} = k_{6,7} = k_{7,8} = k_{8,9} = k_{9,10} = k_{10,11} = k_{11,12} = k_{12,13} = k_{13,0}$ e analogamente, $k_{5,4} = k_{6,5} = k_{7,6} = k_{8,7} = k_{9,8} = k_{10,9} = k_{11,10} = k_{12,11} = k_{13,12}$. Com essas hipóteses os valores desconhecidos no sistemas são as constantes fracionais de transferências $k_{4,5}$; $k_{5,4}$; $k_{4,0}$ e $k_{0,13}$. As constantes de transferências pertinentes aos compartimentos 1 a 3 do bloco de simulação da precipitação foram determinados separadamente com os dados do índice pluviométrico da região estudada fornecidos pelo Departamento Nacional de Meteorologia (DNM), Agência de Goiânia-GO. Ao todo o sistema possui 16 (= 3+13) valores desconhecidos. Os valores experimentais das primeiras medidas do volume de água em cada bloco serviram como estimativas para os valores das condições iniciais do sistema. Após os processos de cálculos obteve-se os valores aprimorados dessa estimativa. As constantes fracionais de transferências dos compartimentos 1, 2 e 3 foram previamente estimadas fazendo-se uso do índice pluviométrico publicados pelo Departamento Nacional de Meteorologia - Agência de Meteorologia de Goiânia-GO.

Cálculos dos Parâmetros: Os parâmetros do modelo foram determinados pelo método dos mínimos quadrados não linear utilizando-se o método de Runge-Kutta de quarta ordem. Fez-se uso do programa computacional AnaComp versão 4.0 para a realização dos cálculos pertinentes.

Parâmetros Cinéticos. As constantes $k_{i,j}$ e as condições iniciais dos compartimentos foram determinadas pelo programa AnaComp versão 4.0

III. RESULTADOS

A TABELA 1 apresenta os dados de volume de água de precipitação, ao longo dos meses, no compartimento nº 4 do modelo adotado (Figura 2). Esse representa o primeiro compartimento localizado na superfície do solo. A TABELA 2 mostra os valores experimentais e calculados pelo modelo (compartimentos 4 a 13) da umidade da água do solo amostrado em Abadia de Goiás durante o período de julho/91 ($t=0$) a junho/92

($t=11$). O modelo da Figura 2 foi capaz de explicar 77,5% das variações das medidas experimentais, de acordo com coeficiente de explicação r^2 .

TABELA 1- Precipitação Acumulada. Dados Inferidos do Índice Pluviométrico Fornecido pelo DNM-Goiânia e Calculados pelo Programa AnaComp a partir do Modelo de três Compartimentos (1 a 3 da Figura 2)

Mês	EXPERIMENTAL	CALCULADO
	Compartimento nº 4 (mL)	Compartimento 4 (mL)
0 - jul	0	0
1 - ago	0	249
2 - set	1396	1523
3 - out	3786	3957
4 - nov	5387	7266
5 - dez	9974	11061
6 - jan	15670	14997
7 - fev	19838	18812
8 - mar	23642	22336
9 - abr	26718	25478
10- mai	27009	28201
11- jun	27009	30509

A Figura 3 mostra a variação no tempo do conteúdo de umidade em um compartimento de 3648 cm³ do solo de Abadia de Goiás-GO.

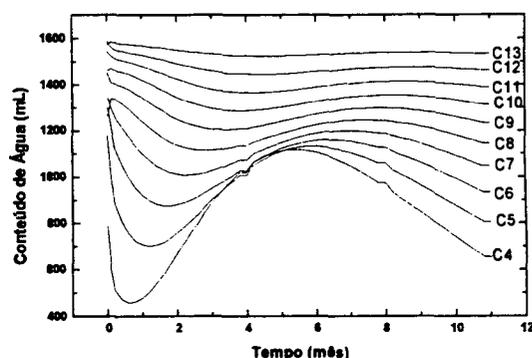


Figura 3. Variação do Conteúdo de Água (em 3648 cm³ de solo) em um Ciclo de Chuva (julho/91 a junho/92) Calculado a partir do Modelo da Figura 2, utilizando o Programa AnaComp.

A Figura 4 representa as curvas dos compartimentos C4 (superfície do solo), C6 localizado à 50 cm de profundidade e onde foi injetado o traçador ³H₂O e a curva do compartimento C13, localizado à 200 cm de profundidade.

A Figura 5 ilustra os resultados comparativos entre dados estimados a partir do modelo da Figura 2 e os

resultados provenientes da medida da radioatividade da água tritiada.

TABELA 2- Valores Experimentais versus Calculados pelo Modelo da Figura 2. Umidade do Solo em julho/91(t=0) a junho/92 (t=11). Coluna 1: n° do Compartimento; Coluna 2: Tempo de Amostragem; Coluna 3: Medida Experimental e Coluna 4: Valor Calculado pelo Modelo. O Volume Indicado é Relativo a 3650 cm³ de Solo.

COLUNAS			
1	2	3	4
	(mês)	(mL)	(mL)
C4	0	773.	778
	4	933.	830
	8	870.	908
	11	866.	798
C5	0	1435	1571
	4	1768	1559
	8	1485	1540
	11	1554	1576
C6	0	1114	1181
	4	1286	1232
	8	1381	1282
	11	1052	1003
C7	0	1299	1300
	4	1387	1306
	8	1211	1294
	11	1220	1151
C8	0	1134	1347
	4	1547	1381
	8	1375	1443
	11	1372	1262
C9	0	1485	1261
	4	920.	1192
	8	1100	1083
	11	1311	1347
C10	0	1515	1454
	4	1649	1500
	8	1408	1581
	11	1351	1415
C11	0	1445	1461
	4	1252	1439
	8	1502	1396
	11	1260	1468
C12	0	1507	1543
	4	1611	1551
	8	1564	1562
	11	1617	1512
C13	0	1450	1589
	4	1718	1621
	8	1666	1547
	11	1485	1547

Coefficiente de Explicação $r^2 = 0,775$

compartimentos e o fluxo $k_{0,13}$ (mL•mês⁻¹) determinadas pelo programa AnaComp.

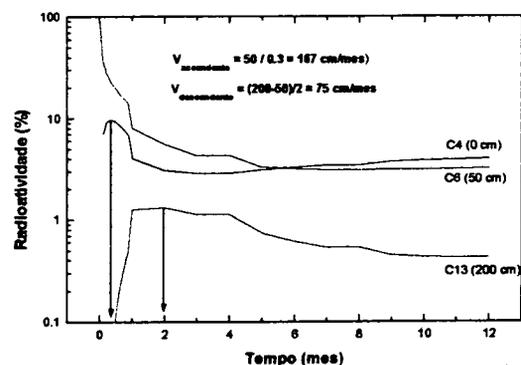


Figura 4. Estimativas Teóricas da Atividade (%) da ³H₂O nos Compartimentos Localizados na Superfície (C4), à 50 cm do Solo (C6) e a 200 cm (C13).

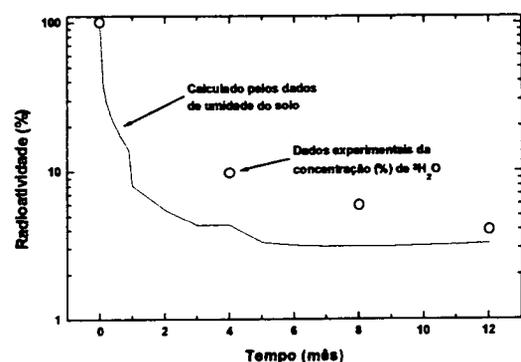


Figura 5. Comparação entre os Valores Calculados com os Valores de Umidade do Solo (—) e com o Traçador ³H₂O (o).

TABELA 3. Valores das Constantes Fracionais de Transferências k_{ij} e fluxo $k_{0,j}$.

CONSTANTE	VALOR
$k_{1,2}$ (mês ⁻¹)	0,413
$k_{2,3}$ (mês ⁻¹)	0,357
$k_{3,4}$ (mês ⁻¹)	0,358
$k_{4,0}$ (mês ⁻¹)	$3,631 \times 10^{-3}$
$k_{4,5}$ (mês ⁻¹)	4,549
$k_{5,4}$ (mês ⁻¹)	2,380
$k_{0,13}$ (mL•mês ⁻¹)	1540
$k_{i > j}$ (mês ⁻¹)	= $k_{5,4}$
$k_{i < j}$ (mês ⁻¹)	= $k_{4,5}$

A TABELA 3 apresenta os valores das constantes fracionais k_{ij} (mês⁻¹) de transferências entre

IV. DISCUSSÃO

A avaliação da cinética do transporte da água no solo quando avaliada por traçadores radioativos pode apresentar algumas dificuldades metodológicas tendo em vista que o mesmo é submetido a uma dispersão isotrópica e a sua recuperação total é impraticável. A remoção do traçador, além da dispersão lateral no solo estudado possui também duas rotas de desaparecimento, a saber: a evaporação -representada por $k_{4,0}$ no modelo - e o deslocamento para o lençol de água. A dificuldade em conhecer nesses casos a quantidade relativa esperada em cada amostra mostra-se evidente. Resultados desses experimentos costumam superestimar o conteúdo amostral (Figura 5). Uma alternativa para avaliar o transporte de água pelo solo pode ser alcançada por medidas diretas da umidade (quantidade de água) do solo associando a um modelo hidrodinâmico compartimental (Figura 2). Essa abordagem exige a ação hidrodinâmica da precipitação. O efeito dessa pressão nos compartimentos é mais intenso quanto maior for a variação do nível de precipitação ao longo dos meses. O solo de superfície é mais sensível a essas variações observando-se menores variações de umidade com o aumento da profundidade (Figura 3). A abordagem da teoria dos compartimentos permite elaborar inúmeras simulações como por exemplo no estabelecimento das velocidades de deslocamentos dos traçadores. Nesse estudo pôde-se prever que a partir da injeção de água tritiada à 50 cm do solo irá ter uma repercussão à 200 cm aproximadamente 2 meses após a injeção. O pico de concentração na superfície do solo (compartimento 4) será prevista para ocorrer em aproximadamente 9 dias (0,3 do mês), conforme se infere dos resultados da Figura 4.

REFERÊNCIAS

- [1] POLI, D. C. R., **Aplicação de avaliação da técnica da umidade do solo com trítio artificial em pesquisas hidrogeológicas no Brasil**. São Paulo, 1989. Tese de doutorado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
- [2] MESQUITA, C. H., **Modelo para determinação da absorção de substâncias radioativas e aplicação em radiodosimetria e dosimetria**, São Paulo, 1991. Tese de doutorado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares.
- [3] POLI, D. C. R. **Estudo da infiltração da precipitação e determinação da recarga do aquífero em abadia de Goiás - Goiânia, pelo método de marcação da umidade do solo com trítio artificial**. Relatório Interno - IPEN-CNEN/SP, São Paulo, fev. 1993.

ABSTRACT

It was used the compartmental analysis theory to evaluate the kinetic parameters of the rainfall infiltration and determination of ground water recharge in Abadia de Goiás - Goiânia. It was proposed a model which contains 13 compartments to explain the infiltration and the kinetics of the unsaturated zone. To validate the model, the tracer injections were carried out in representative site of the region, at a depth of 50cm, below the roots zone. Soil sampling was taken 4, 9 and 12 months after the injection. In the first compartment one component of evaporation $k_{4,0}$ was considered and, for the last compartment, one constant of removal for the water table $k_{13,0}$. The compartments 1, 2 and 3 were added to the system to consider the precipitation effect. The AnaComp program, developed at IPEN, was used to determine the transfer constants $k_{i,j}$ (from compartment index i to compartment j) where i and j range from 0 to 13. In this program the constants $k_{i,j}$ are determined by the non-linear minimum squares, using eigenvalues - eigenvectors routines or alternatively, the fourth order Runge-Kutta routine. In this compartment model the radioactive tracer was introduced, in a single impulse, in the 6th compartment (50cm deep). It permits to characterize the tracer diffusion processes in the soil studied. The adequation of the adopted model showed an explanation coefficient r^2 equal to 0.78, which is satisfactory for the methodology used.