

ESTUDO COMPARATIVO DA APLICAÇÃO DOS MODELOS
MATEMÁTICOS SCBR E MODFLOW NA SIMULAÇÃO DE
FLUXO SUBTERRÂNEO, TRANSPORTE E REMEDIAÇÃO DE
CONTAMINANTES EM ÁGUA SUBTERRÂNEA

Milena de Brito Espinosa

Milena de Brito Espinosa

**ESTUDO COMPARATIVO DA APLICAÇÃO DOS MODELOS
MATEMÁTICOS SCBR E MODFLOW NA SIMULAÇÃO DE
FLUXO SUBTERRÂNEO, TRANSPORTE E REMEDIAÇÃO DE
CONTAMINANTES EM ÁGUA SUBTERRÂNEA**

Trabalho submetido à Banca Examinadora como parte dos requisitos para a Conclusão do Curso de Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental – TCCII.

Orientador: Prof. Dr. Nilson Guiguer Junior
Coorientadora: Dr^a. Cristina Cardoso Nunes

Florianópolis
2016

Ficha de identificação da obra elaborada pelo autor através do
Programa de Geração Automática da Biblioteca Universitária da UFSC.

Espinosa, Milena de Brito

Estudo comparativo da aplicação dos modelos matemáticos SCBR e MODFLOW na simulação de fluxo subterrâneo, transporte e remediação de contaminantes em água subterrânea / Milena de Brito Espinosa ; orientador, Nilson Guiguer Junior ; coorientadora, Cristina Cardoso Nunes. - Florianópolis, SC, 2016.

134 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade Federal de Santa Catarina, Centro Tecnológico.
Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental.


Inclui referências

1. Engenharia Sanitária e Ambiental. 2. fluxo subterrâneo . 3. transporte e remediação de contaminantes. 4. MODFLOW. 5. SCBR. I. Guiguer Junior, Nilson . II. Cardoso Nunes, Cristina. III. Universidade Federal de Santa Catarina. Graduação em Engenharia Sanitária e Ambiental. IV. Título.

**ESTUDO COMPARATIVO DA APLICAÇÃO DOS MODELOS
MATEMÁTICOS SCBR E MODFLOW NA SIMULAÇÃO DE
FLUXO SUBTERRÂNEO, TRANSPORTE E REMEDIAÇÃO DE
CONTAMINANTES EM ÁGUA SUBTERRÂNEA**

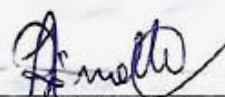
Milena de Brito Espinosa

Trabalho submetido à Banca
Examinadora como parte dos
requisitos para Conclusão do Curso
de Graduação em Engenharia
Sanitária e Ambiental–TCC II.




Prof. Dr. Nilson Guiguer Junior
(orientador)

BANCA EXAMINADORA:



Prof.ª Dr.ª Alexandra Rodrigues
Finotti
(Membro da banca)



Eng.ª M. Karina Lopes Joussef
(Membro da banca)

FLORIANÓPOLIS, (SC)
JULHO 2016

*Dedico este trabalho a minha família
que sempre me apoiou em minhas
decisões.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus pelo dom da vida, por ter me sustentado até aqui, e por todas as oportunidades que Ele me concedeu ao longo destes anos. Seria impossível ser quem eu sou sem o Seu cuidado e amor.

Aos meus pais, Márcio e Tânia, por todo amor e esforço, e por sempre me mostrarem o valor da educação. Em especial à minha mãe, que em todos os momentos me deu força e coragem, incentivando-me a seguir em frente e cumprir meus objetivos apesar de todas as dificuldades. Obrigada por chorar e se alegrar junto comigo. Sem você não teria conseguido, serei grata eternamente.

Ao meu irmão Henrique, pela compreensão e companheirismo, principalmente nos primeiros anos de graduação, quando dividiu o mesmo apartamento que eu. Obrigadas por todas as risadas e implicâncias também, se não fosse assim, não seria você. Ao caçulinha Pedro, que mesmo longe se alegra com minhas conquistas e me incentiva a ser alguém melhor.

Aos meus avós maternos, vó Lourdes e vô “Brito”, por toda ajuda que me dão desde sempre. Vocês são sem dúvida o alicerce da família Brito. Aos meus avós paternos, vó Tereza e vô “Chico”, essenciais em toda minha trajetória, não só de graduação, mas de vida. Por todo amor e cuidado pelo seu “anjinho” Milena.

À minha tia Tatiane e meus primos Mariana e João Victor, pela torcida e por sonharem junto comigo.

À minha amiga-irmã, Bruna, por esses seis anos de convivência com muitas risadas, choros, estresse, companheirismo e cuidado. Obrigada por tornar a minha vida mais leve e divertida.

As minhas amigas Gabriela e Valkíria pela amizade eterna.

À todos os pastores e líderes que passaram pela minha vida. Obrigada pelas orações e compreensão nos momentos de ausência.

Ao professor Nilson, orientador deste trabalho, pela oportunidade de realizar este TCC. Obrigada pela paciência e por estar sempre disponível para tirar minhas dúvidas, mesmo com a agenda cheia de compromissos.

À minha coorientadora, Cristina, pela disponibilidade de tempo e suporte durante a realização deste trabalho.

À professora Alexandra e a Karina, por gentilmente terem aceitado fazer parte da minha banca.

À todos os amigos que fiz durante a graduação, por tornar a caminhada mais suave.

RESUMO

A simulação numérica é uma ferramenta para avaliar as condições de fluxo da água subterrânea, podendo contribuir para a previsão do transporte e transformação de contaminantes, tornando-se uma ferramenta fundamental para o planejamento e tomada de decisão nos processos de gerenciamento ambiental. Este trabalho tem como objetivo comparar a aplicabilidade do modelo matemático SCBR (Solução Coretiva Baseada no Risco) como ferramenta de modelagem matemática de fluxo de água subterrânea, transporte e transformação de contaminantes e tecnologias de remediação, com o modelo tridimensional Visual MODFLOW, uma interface gráfica do MODFLOW. Ambos os modelos foram aplicados para um caso real na região do Terminal de Petróleo de São Sebastião (SP). O modelo conceitual hidrogeológico da área de estudo é composto por duas unidades aquíferas: o aquífero livre e poroso e o aquífero fraturado. A determinação da condição de contorno no SCBR mostrou-se mais simples do que do Visual MODFLOW, entretanto existe o problema de representar o efeito de períodos de taxas de recarga mais ou menos altas pois isto representaria uma variação das cargas hidráulicas que não é considerada no modelo. O Visual MODFLOW tem a vantagem por apresentar cálculo do fluxo subterrâneo mais preciso, enquanto que o SCBR tem uma melhor resolução na fonte, uma vez que controla a dissolução, que é o principal mecanismo responsável pela transferência de massa de contaminantes da fonte para a água subterrânea. Por se tratar de um modelo bidimensional, o SCBR considera a barreira física de baixa permeabilidade para contenção de plumas de contaminação, até a camada impermeável, enquanto que no Visual MODFLOW é possível estabelecer uma altura para a mesma, mais condizente com a realidade. O Visual MODFLOW também realiza a confecção dos poços de bombeamento com maior autonomia, uma vez que pode-se escolher o tamanho da seção filtrante, sendo possível adotar um poço totalmente ou parcialmente penetrante.

Palavras-chave: fluxo subterrâneo; transporte e remediação de contaminantes; MODFLOW; SCBR.

ABSTRACT

The numerical simulation is a tool to evaluate the condition of groundwater flow, it can contribute to the planning and decision-making in environmental process management. This paper has as purpose to compare the application of the mathematical model SCBR (Risk Based Corrective Solution) as a modeling tool of groundwater flow, transportation and transformation of contaminants e remediation technologies, using the visual three-dimensional model MODFLOW, one graphic interface of MODFLOW. Both methods were applied to a real situation around the Terminal de Petróleo de São Sebastião, an oil station in São Paulo, Brazil. The hydrogeological conceptual model of the study area consists of two aquifer units: the free and porous aquifer and the fractured aquifer. Determining the boundary condition in SCBR it was more simple than the visual MODFLOW, however there is a problem to represent the effect of periods of more or less high recharge rates since this would represent the variation of hydraulic heads that is not considered in the model. The visual MODFLOW has an advantage because it has a calculation of groundwater flow more accurate, while the SCBR has a better resolution in the source, since it can control the dissolution, which is the main mechanism responsible to transport the contaminants bulk from the source to the groundwater. As this is a two-dimensional model, SCBR considers the physical barrier of low permeability to contamination plumes contention until the impermeable layer, while in the Visual MODFLOW is possible to establish a height for the same, consistent with the reality. Visual MODFLOW also performs preparation of pumping wells with more autonomy, since one can choose the size of the filter section, it is possible to adapt a fully or partially penetrating well.

Keywords: groundwater flow; transport and remediation of contaminants; MODFLOW; SCBR.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1 - Seção transversal de aquíferos confinados e não confinados.	31
Figura 2 - (a) Fase livre; (b) Fase residual.	36
Figura 3 - Espalhamento da massa de contaminante pela advecção e dispersão.	38
Figura 4 - Processos físicos que causam a dispersão mecânica.	40
Figura 5 - Modelo de transferência de massa da fonte, fase pura, para fase dissolvida.	53
Figura 6 - Etapas da aplicação dos modelos matemáticos SCBR e MODFLOW no gerenciamento de áreas contaminadas.	56
Figura 7 - Localização da cidade de São Sebastião e do Terminal Aquaviário de São Sebastião.	57
Figura 8 - Planta do terminal e a localização dos PM's.	58
Figura 9 - Caracterização hidrogeológica da área do terminal.	59
Figura 10 - Localização do Terminal de Petróleo de São Sebastião (amarelo), bairros da cidade (vermelho), Porto de São Sebastião (verde), Córrego Mãe Isabel (azul claro) e Córrego do Outeiro (azul escuro). ...	65
Figura 11 - Locação dos poços de monitoramento- SCBR.	65
Figura 12 - Locação dos poços de monitoramento - Visual MODFLOW.	67
Figura 13 - Domínio de simulação (1481m x 1733m) – SCBR.	75
Figura 14 - Domínio de simulação ajustado (1280m x 1835m) – SCBR.	76
Figura 15 - Interpolação cargas hidráulicas - Surfer 11.0.	77
Figura 16 - Condições de contorno - Visual MODFLOW (1 camada).	77
Figura 17 - Condições de contorno, 3D - Visual MODFLOW (10 camadas).	78
Figura 18 - Malha estabelecida para as simulações realizadas com o SCBR.	80
Figura 19 - Curva de ajuste de simulação numérica calibrada com o SCBR.	80
Figura 20 - Malha estabelecida para as simulações realizadas com o Visual MODFLOW.	83
Figura 21 - Curva de ajuste da simulação numérica calibrada com o Visual MODFLOW.	83
Figura 22 - Mapa potenciométrico - SCBR.	85

Figura 23 - Campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo – SCBR.	86
Figura 24 - Campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo – SCBR.	88
Figura 25 - Perfil do campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo - Visual MODFLOW (1 camada).	88
Figura 26 - Mapa potenciométrico, campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo - Visual MODFLOW (10 camadas - Layer 4).	89
Figura 27 - Perfil do campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo - Visual MODFLOW (10 camadas).	89
Figura 28 - Localização dos poços de observação.	90
Figura 29 - Pluma de contaminação do benzeno puro após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento – SCBR.	92
Figura 30 - Pluma de contaminação do benzeno na gasolina pura após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento – SCBR.	93
Figura 31 - Pluma de contaminação do benzeno puro após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento - Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2).	95
Figura 32 - Pluma de contaminação do benzeno puro após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento , 3D - Visual MODFLOW (10 camadas).	96
Figura 33 - Pluma de contaminação do benzeno na gasolina pura após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento – Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2).	97
Figura 34 - Pluma de contaminação do benzeno na gasolina pura após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento, 3D – Visual MODFLOW (10 camadas).	98
Figura 35 - Variação do comprimento das plumas de benzeno puro (a) e benzeno na gasolina pura (b) ao longo de 5, 10 e 15 anos.	100
Figura 36 – Concentração x Tempo: benzeno puro-OW_2 (a) e OW_4(b)	101
Figura 37 - Concentração x Tempo: benzeno (gasolina pura) - OW_2 (a) e OW_4 (b).	102
Figura 38 – Concentração x Tempo na fonte: somente benzeno na gasolina pura - SCBR (a); benzeno e outros compostos da gasolina pura - SCBR (b).	105
Figura 39 – Concentração x Tempo na fonte: benzeno na gasolina pura - VMOD (a); benzeno na gasolina pura (concentração constante) - VMOD (b).	106
Figura 40 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) nos tempos 5, 10 e 15 anos após instalação da barreira física – SCBR.	109

Figura 41 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) nos tempos 5, 10 e 15 anos após instalação da barreira física - Visual MODFLOW (1 camada).....	110
Figura 42 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) nos tempos 5, 10 e 15 anos após instalação da barreira física - Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2).....	111
Figura 43 - Perfil da pluma de contaminante antes e depois da instalação da barreira física após 15 anos – Visual MODFLOW: 1 camada – bidimensional (a) e (b); 10 camadas – tridimensional (c) e (d).....	112
Figura 44 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento após 15 anos – SCBR.	113
Figura 45 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento (poço totalmente penetrante) após 15 anos - Visual MODFLOW (1 camada) – (a) planta; (b) perfil.....	113
Figura 46 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento (poço parcialmente penetrante) após 15 anos - Visual MODFLOW (1 camada) – (a) planta; (b) perfil.....	114
Figura 47 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento (poço parcialmente penetrante) após 15 anos - Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2) – (a) planta; (b) perfil – linhas de trajetória de partículas.	115

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Parâmetros hidrogeológicos que foram utilizados na simulação do SCBR.	60
Tabela 2 - Parâmetros hidrogeológicos que foram utilizados na simulação do Visual MODFLOW.	60
Tabela 3 - Dados dos poços de monitoramento.	62
Tabela 4 - Parâmetros de transporte e transformação dos contaminantes - SCBR.	73
Tabela 5 - Parâmetros de transporte e transformação dos contaminantes - Visual MODFLOW.	73
Tabela 6 - Coordenadas da área de simulação e configuração da malha do modelo SCBR.	79
Tabela 7 - Análise residual quantitativa após calibração - SCBR.	81
Tabela 8 - Coordenadas da área de simulação e configuração da malha do modelo Visual MODFLOW- 1 camada.	82
Tabela 9 - Coordenadas da área de simulação e configuração da malha do modelo Visual MODFLOW - 10 camadas.	82
Tabela 10 - Análise residual quantitativa após calibração - Visual MODFLOW.	82
Tabela 11 - Velocidades do fluxo subterrâneo nos poços observados. .	90

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

ABNT – Associação Brasileira de Normas Técnicas
ASTM - American Society for Testing Materials
BTEX - Benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos
CETESB - Companhia Ambiental do Estado de São Paulo
CONAMA – Conselho Nacional do Meio Ambiente
ESSS - Engineering Simulation and Scientific Software
FRTR - Federal Remediation Technologies Roundtable
LNAPL - Light Nonaqueous-Phase Liquid
MDV – Método das Diferenças Finitas
MEF – Método dos Elementos Finitos
MVF – Método dos Volumes Finitos
NBR – Norma Brasileira
REMA – Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente
SCBR - Solução Corretiva Baseada no Risco
UFSC – Universidade Federal de Santa Catarina
USEPA - United States Environmental Protection Agency
VMOD – Visual MODFLOW

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	26
2	OBJETIVOS	28
2.1	OBJETIVO GERAL.....	28
2.2	OBJETIVOS ESPECÍFICOS	28
3	REFERENCIAL TEÓRICO	30
3.1	ESCOAMENTO EM AGUAS SUBTERRÂNEAS	30
3.2	FORMAÇÃO DA FONTE DE CONTAMINAÇÃO.....	35
3.3	TRANSPORTE E TRANSFORMAÇÃO DE CONTAMINANTES	37
3.3.1	Advecção.....	37
3.3.2	Dispersão hidrodinâmica.....	37
3.3.2.1	<i>Difusão molecular</i>	38
3.3.2.2	<i>Dispersão mecânica</i>	39
3.3.3	Biodegradação.....	41
3.3.4	Sorção e Retardo	42
3.4	REMEDIÇÃO DE AREAS CONTAMINADAS.....	44
3.4.1	Projeto de remediação	44
3.4.2	Bombeamento e Tratamento de águas subterrâneas.....	45
3.4.3	Biorremediação	46
3.4.4	Contenção de Barreiras	46
3.5	PRINCÍPIOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA.....	47
3.5.1	Modelo conceitual	48
3.5.2	Condições de contorno	49
3.6	MODELOS MATEMATICOS UTILIZADOS.....	50
3.6.1	SCBR.....	50
3.6.2	MODFLOW	53
4	METODOLOGIA	56
4.1	ÁREA DE ESTUDO	57

4.2	DESENVOLVIMENTO DO MODELO HIDROGEOLOGICO CONCEITUAL.....	58
4.3	OBTENÇÃO DOS DADOS DE CAMPO	59
4.3.1	Caracterização hidrogeológica	60
4.4	GEORREFERENCIAMENTO, BENS A PROTEGER E CONDIÇÕES DE CONTORNO.....	63
4.5	CALIBRAÇÃO DOS PARAMETROS DE FLUXO SUBTERRÂNEO	67
4.6	ELABORAÇÃO DE CENÁRIO DE CONTAMINAÇÃO..	70
4.7	CARACTERIZAÇÃO DA FONTE DE CONTAMINAÇÃO. 70	
4.8	TECNOLOGIAS DE CONTENÇÃO E REMEDIAÇÃO DE PLUMAS.....	74
5	RESULTADOS	75
5.1	CONDIÇÕES DE CONTORNO	75
5.2	CALIBRAÇÃO DO FLUXO SUBTERRÂNEO	79
5.3	SIMULAÇÃO DO FLUXO SUBTERRÂNEO	84
5.4	SIMULAÇÃO DA PLUMA DE CONTAMINAÇÃO.....	91
5.5	TECNOLOGIAS DE CONTENÇÃO E REMEDIAÇÃO DE PLUMAS.....	107
6	CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES.....	117
7	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	121
	APÊNDICE A - Cálculo do coeficiente de retardo do benzeno na área de estudo.....	126
	ANEXO A - Cálculo da fração molar feito pelo SCBR na primeira iteração.	127
	ANEXO B - Dados de saída da fonte do SCBR inseridos no Visual MODFLOW (benzeno como parte da composição da gasolina pura). 129	

1 INTRODUÇÃO

A importância das águas subterrâneas como uma das principais fontes de água potável justifica a preocupação com a preservação de aquíferos e a busca por alternativas que minimizem os impactos causados por atividades potencialmente poluidoras.

A utilização de modelos computacionais como ferramenta de simulação de fluxo, de transporte e transformação de contaminantes na água subterrânea para uma área potencialmente contaminada, antes da ocorrência de eventos de contaminação, tornou-se uma ferramenta fundamental para o planejamento e tomada de decisão nos processos de gerenciamento ambiental.

Existem vários tipos de modelos matemáticos que podem ser aplicados às águas subterrâneas. A maioria dos modelos possui uma estrutura determinística que relacionam a causa e o efeito de maneira exata, sem a inclusão de incertezas estatísticas no processo de simulação. Os modelos ainda podem representar os fenômenos físicos que ocorrem nos aquíferos a partir de soluções analíticas ou numéricas para simulação de problemas com estrutura espacial de uma, duas ou três dimensões (CORSEUIL et al., 2006). Para o desenvolvimento desse trabalho serão utilizados os seguintes *softwares*: o modelo bidimensional SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) e o modelo tridimensional MODFLOW.

Este estudo compara o modelo SCBR – Solução Corretiva Baseada no Risco, utilizado para modelagem matemática de fluxo subterrâneo, transporte de contaminantes e de métodos de contenção para remediação de contaminação em águas subterrâneas com o modelo MODFLOW.

Com estudos de campo e laboratório de mais de vinte anos em tecnologias de remediação para áreas impactadas com hidrocarbonetos de petróleo, foi desenvolvido em 2001 pela Universidade Federal de Santa Catarina em parceria com a PETROBRAS, o modelo computacional SCBR. Este modelo é de propriedade intelectual da PETROBRAS e, até a presente data, não é de domínio público. O SCBR é uma ferramenta de fácil utilização, que emprega o método numérico conhecido como Volumes Finitos e simula o transporte e a transformação de contaminantes em águas subterrâneas, e atende às especificidades de cenários de contaminação, por gasolina com etanol, encontrados no Brasil. O modelo MODFLOW, de domínio público, desenvolvido pela U.S. Geological Survey, utiliza o método de Diferenças Finitas, e é um dos modelos mais utilizados no mundo para simulação de fluxo e transporte de contaminantes em águas subterrâneas. Com o resultado

deste trabalho pretende-se apresentar as vantagens e desvantagens do uso de cada modelo matemático.

2 OBJETIVOS

2.1 OBJETIVO GERAL

Comparar a aplicabilidade do modelo matemático SCBR, a partir de um caso real, como ferramenta para simulação de fluxo subterrâneo, de transporte de contaminantes e de métodos de contenção e remediação de contaminação em águas subterrâneas, com o modelo MODFLOW.

2.2 OBJETIVOS ESPECÍFICOS

- a) Calibrar e comparar os resultados do fluxo subterrâneo de um caso real em uma área de terminal de petróleo, utilizando os modelos matemáticos SCBR e MODFLOW.
- b) Simular e comparar os resultados de um vazamento hipotético de benzeno em estado puro e como parte da composição da gasolina pura para o transporte do contaminante benzeno em ambos os modelos.
- c) Verificar as vantagens e desvantagens da utilização dos dois modelos.
- d) Comparar a aplicabilidade de cada modelo para simulação de contenção e remediação de plumas por meio de barreiras físicas e bombeamento, respectivamente.

3 REFERENCIAL TEÓRICO

3.1 ESCOAMENTO EM AGUAS SUBTERRÂNEAS

Segundo o Art. 1º, item III da Resolução nº15 do Conselho Nacional dos Recursos Hídricos, aquífero é considerado como “o corpo hidrogeológico com capacidade de acumular e transmitir água através dos seus poros, fissuras ou espaços resultantes da dissolução e carreamento de materiais rochosos” (CNRH, 2001).

De acordo com Capucci et. al. (2001), os aquíferos ou reservatórios naturais de água subterrânea são formações rochosas ou camadas geológicas que armazenam e transmitem água em quantidades economicamente passíveis de extração. Os aquíferos fornecem quantidades significativas de águas para os poços e nascentes, servindo como proveitosas fontes de abastecimento (TODD, 1980). Por meio dos aquíferos, os cursos de águas superficiais são mantidos estáveis e o excesso de água (transbordamento) é evitado através da absorção da água da chuva.

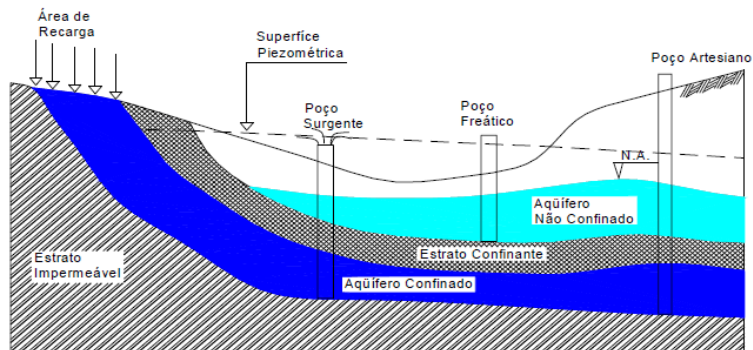
As águas subterrâneas podem ocorrer tanto em rochas duras compactas (rochas ígneas e metamórficas), como em rochas sedimentares não consolidadas (areias e cascalhos) e também de maior consistência (calcários), ou seja, qualquer tipo de rocha pode constituir um aquífero, desde que apresente condições de armazenar e transmitir água.

Apesar do volume das rochas sedimentares corresponder a apenas 5% de todas as rochas da crosta terrestre, elas são responsáveis pelo armazenamento de aproximadamente 95% da água subterrânea existente no planeta, em função, exatamente, de suas características de material mais poroso.

De acordo com a pressão da água armazenada, os aquíferos podem ser de dois tipos: não confinados (freáticos ou livres) ou confinados (artesianos).

Os aquíferos confinados ocorrem quando o nível d'água está confinado sob pressão maior do que a atmosférica por estratos confinantes (Figura 1). Os aquíferos não confinados são aqueles limitados superiormente pelo nível freático e totalmente saturados de água. A base é formada por uma camada impermeável ou semipermeável (TODD, 1980).

Figura 1 - Seção transversal de aquíferos confinados e não confinados.



Fonte: BEDIENT et al.,1997.

- i. Lei de Darcy, Condutividade Hidráulica e Armazenamento Específico.

Ao investigar os fatores que governam o fluxo de água através de meios porosos, Henry Darcy (1856) verificou que a vazão específica (q) através de um meio poroso é proporcional à diferença de carga de água existente entre dois pontos (dh), inversamente proporcional à distância entre estes dois pontos (dl) e proporcional à condutividade hidráulica (k), conforme Equação (1) (FETTER,1994):

$$q = -K \frac{dh}{dl} \quad \text{Equação (1)}$$

Para o fluxo em três dimensões, a definição é semelhante ao fluxo em uma dimensão, conforme equação (2) a seguir:

$$qx = -K_x \frac{\partial h}{\partial x}; \quad qy = -K_y \frac{\partial h}{\partial y}; \quad qz = -K_z \frac{\partial h}{\partial z}.$$

$$\text{Equação (2)}$$

O fluxo de água subterrânea ocorre saindo do local de maior carga hidráulica para o local de menor carga hidráulica, por isso o sinal negativo (SCHNOOR, 1996). A relação entre dh e dl é entendida como a perda de

carga por unidade de comprimento, conhecida como gradiente hidráulico (FETTER, 1994).

A condutividade hidráulica (K) pode ser traduzida como a capacidade do meio poroso em transmitir água, ou seja, traduz a facilidade com que a água se desloca ao longo do perfil do solo, podendo seu valor ser determinado tanto em laboratório como em campo (BEDIENT et al., 1997). De acordo com Fetter (1994), a condutividade hidráulica considera as características do meio, incluindo porosidade, forma, tamanho e arranjo das partículas, bem como as características do fluido que está escoando (viscosidade e massa específica). Nos meios porosos reais, a condutividade hidráulica dos materiais possui uma distribuição complexa e irregular (FITTS, 2002).

A lei de Darcy pode ser aplicada à maioria dos fluxos de água subterrânea. Entretanto, ela também encontra restrições, que são verificadas quando a velocidade de fluxo é muito alta em meios com poros grandes, e quando o meio poroso é muito irregular (FITTS, 2002).

A vazão específica definida por Darcy (ou velocidade de Darcy) também pode ser compreendida como a vazão de água fluindo através de uma seção transversal de uma unidade de área do solo (Equação (3)). Em um meio poroso esta seção transversal inclui a porção do solo ocupada pelo líquido que nele escoar e a parcela ocupada por sólidos e ar.

Entretanto, por admitir que o fluxo da água subterrânea ocorra ao longo de toda seção transversal de uma amostra de solo, considera-se a velocidade de Darcy uma velocidade fictícia (TODD, 1980). Na realidade, verifica-se que o fluxo de água subterrânea escoar somente nos canais interconectados entre os poros (velocidade intersticial). Assim, a velocidade de fluxo real geralmente é muito maior do que a velocidade de Darcy (BEDIENT et al., 1997), conforme mostrada na Equação (4):

$$q = \frac{Q}{A} \quad \text{Equação (3)}$$

$$v_x = \frac{Q}{(A \cdot n_e)} \quad \text{Equação (4)}$$

Onde,

Q : vazão da água subterrânea;

A : área da seção transversal perpendicular à direção do fluxo;

v_x : velocidade intersticial;
 n_e : porosidade efetiva.

De acordo com Fetter (1994), a porosidade efetiva n_e é um parâmetro que pode ser definido como a quantidade de água fornecida por unidade de volume do material, ou seja, a razão entre o volume de água efetivamente liberado de uma amostra de rocha porosa saturada e o volume total. Consoante a Equação (5):

$$n_e = \frac{V_D}{V}$$

Equação (5)

Onde,

V_D : volume de água drenada por gravidade;

V : volume total.

Outro elemento na verificação do fluxo subterrâneo em aquíferos é o do armazenamento específico (S_s), que pode ser definido como a quantidade de água liberada de uma unidade de volume do material saturado (V_w) por unidade de variação da carga hidráulica (dh) e por unidade de volume do meio (V_t), conforme a Equação (6) (FITTS, 2002).

$$S_s = - \frac{dV_w}{V_t} \frac{1}{dh}$$

Equação (6)

Essa equação também pode ser expressa pela Equação (7):

$$S_s = \rho_w \cdot g (\alpha + n \cdot \beta)$$

Equação (7)

Onde,

ρ_w : densidade da água;

g : aceleração da gravidade;

α : compressibilidade do aquífero;

n : porosidade;

β : compressibilidade da água.

ii. Equação geral para o fluxo tridimensional em aquíferos.

O fluxo de água subterrânea através de meios porosos depende de diversas variáveis. Desta maneira, ele pode ser descrito por diferentes equações diferenciais parciais, onde as coordenadas espaciais (x , y , z) e o tempo (t) são variáveis independentes. Empregam-se os princípios de conservação da massa e conservação de energia e a Lei de Darcy, a fim de obter as equações que regem o fluxo de água em aquíferos (FETTER, 1994).

Para desenvolver a equação diferencial parcial tridimensional, que governa o fluxo de água subterrânea em aquíferos, Fitts (2002) considerou o volume de controle, assumindo que o mesmo está localizado na zona saturada do aquífero e que as suas dimensões são fixas no espaço. Fitts também assumiu que o fluxo macroscópico na vizinhança do elemento é unidimensional na direção x ($q_x \neq 0$, $q_y = q_z = 0$). Desta maneira, ele obteve primeiro a equação geral para o caso unidimensional (Equação (8)), estendendo-a em seguida, para o fluxo tridimensional (Equação (9)).

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

Equação (8)

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

Equação (9)

Se no cenário considerado houver uma fonte ou sumidouro (R), representando o volume de água introduzido (ou retirado) por unidade de volume do meio e por unidade de tempo, a Equação (9) transforma-se na Equação (10), representando o escoamento tridimensional da água subterrânea, tanto no aquífero confinado quanto no aquífero não confinado.

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y \frac{\partial h}{\partial y} \right) + \frac{\partial}{\partial z} \left(K_z \frac{\partial h}{\partial z} \right) + R = S_s \frac{\partial h}{\partial t}$$

Equação (10)

Onde:

k_x, k_y, k_z : condutividades hidráulicas ao longo dos eixos coordenados x , y e z ;

h : carga hidráulica;

R : fluxo externo por unidade de volume, representando fonte e/ou sumidouro de água;

S_s : coeficiente de armazenamento específico dos poros do material;

t : tempo;

3.2 FORMAÇÃO DA FONTE DE CONTAMINAÇÃO

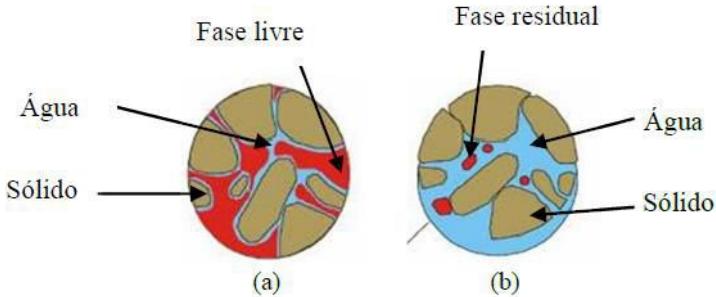
Se houver um vazamento de combustíveis derivados de petróleo, os compostos imiscíveis de densidade relativa menor que a água tenderão a flutuar no topo do lençol freático, e devido à baixa solubilidade, permanecerão como uma fase denominada LNAPL. O LNAPL é classificado como líquido leve de fase não aquosa (light nonaqueous-phase liquid), também chamado de fase livre (BEDIENT et al.,1997).

Quando o volume derramado for grande ou a fonte persiste por muito tempo, suficiente para alcançar as águas subterrâneas, a migração descendente e lateral do produto livre pode ser extensiva (BEDIENT et al.,1997).

A partir do momento que a fonte cessa, a massa contínua de LNAPL tende a encolher e o processo forma a pluma residual por onde o produto livre passou (Figura 2). A natureza imiscível do LNAPL pode causar a presença de glóbulos de produto puro que ficam retidas na zona saturada do solo. O LNAPL residual será uma fonte de liberação de contaminantes para a fase dissolvida por um longo período de tempo nas águas subterrâneas (WIEDEMEIER et al., 1999).

O fluxo de água subterrânea que passa pela região da fonte faz com que exista uma transferência de massa de hidrocarbonetos de maior solubilidade para a água, ocasionando uma pluma de contaminantes, a jusante da área da fonte, denominada fase dissolvida. (BEDIENT et al.,1997).

Figura 2 - (a) Fase livre; (b) Fase residual.



Fonte: Adaptado de BEDIANT et al.,1997.

No processo de contaminação, a fonte é representada pela fase livre e fase residual e a pluma é representada pela fase dissolvida. Essas duas condições representam fases distintas. No entanto, elas estão totalmente ligadas pelo processo de dissolução.

A dissolução dos BTEX da fonte para a água subterrânea é um dos mecanismos mais importantes de contaminação e decaimento destes compostos no LNAPL em fase pura. A dissolução do LNAPL é governada pelas características do aquífero (porosidade efetiva e velocidade da água subterrânea), propriedades físicas do LNAPL (área superficial do LNAPL em contato com a água subterrânea) e características específicas de cada contaminante presente no LNAPL, como a solubilidade efetiva em água (WIEDEMEIER et al., 1999). A Lei de Raoult (Equação (11)) é que determina a solubilidade efetiva dos compostos, em que a concentração aquosa máxima do composto é determinada por sua fração molar presente no LNAPL e pela solubilidade máxima do composto em água. Devido a redução da fração molar dos hidrocarbonetos mais solúveis, a taxa de dissolução diminui ao longo do tempo (BEDIANT et al.,1997).

$$C_{w\ Raoult} = S_w \cdot X_i \quad \text{Equação (11)}$$

Onde,

$C_{w\ Raoult}$: concentração máxima do composto no volume de controle;

S_w : solubilidade do composto químico em água pura;

X_i : fração molar do composto na mistura.

3.3 TRANSPORTE E TRANSFORMAÇÃO DE CONTAMINANTES

Para se estimar a pluma de contaminantes na água subterrânea é importante determinar o comportamento e a interação dos processos físicos, químicos e biológicos. Os principais processos de transporte e transformação do soluto de interesse na água subterrânea incluem advecção, dispersão, sorção e retardo, e biodegradação (CORSEUIL et al., 2006).

3.3.1 Advecção

A advecção é um dos mecanismos de maior influência no transporte de contaminantes. Através da advecção, o soluto (contaminante dissolvido) é transportado com o fluxo da água subterrânea. A direção e a velocidade de transporte do contaminante coincidem com a velocidade intersticial no meio poroso (v_x), (DOMENICO; SHAWARTZ, 1998). Esta velocidade depende de propriedades do aquífero podendo ser determinada através da Lei de Darcy, conforme Equação (12) (FETTER, 1994):

$$v_x = \frac{K}{ne} \cdot \left(\frac{dh}{dl} \right)$$

Equação (12)

Onde :

v_x : velocidade intersticial da água subterrânea no meio poroso

K : condutividade hidráulica;

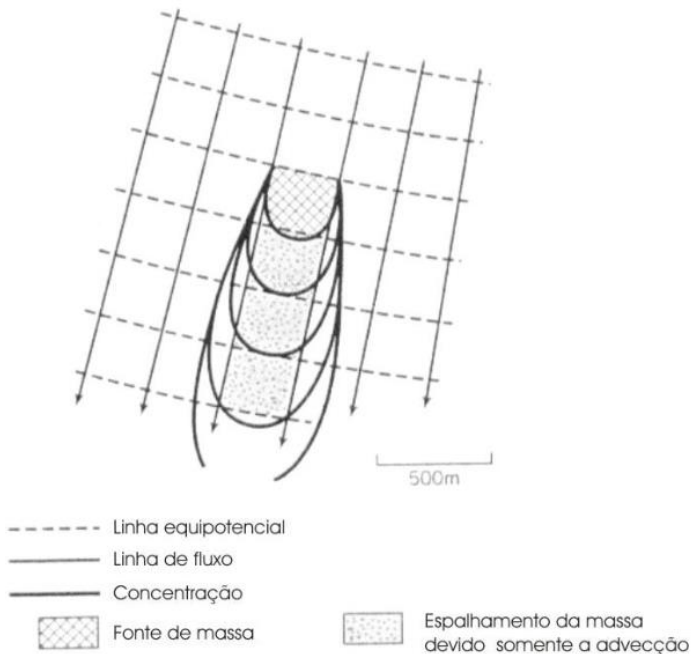
ne : porosidade efetiva do meio poroso;

dh/dl : gradiente hidráulico

3.3.2 Dispersão hidrodinâmica

A dispersão hidrodinâmica é um processo que inclui tanto a difusão molecular como a dispersão mecânica. Representa o espalhamento longitudinal e transversal à direção de migração da pluma de contaminação (FETTER, 1994). A Figura 3 ilustra uma rede de fluxo no processo de advecção e dispersão em uma fonte de contaminação.

Figura 3 - Espalhamento da massa de contaminante pela advecção e dispersão.



Fonte: DOMENICO; SHAWARTZ, 1998.

3.3.2.1 Difusão molecular

A difusão é o processo molecular de transporte de massa em que o soluto move-se de uma área de alta concentração para uma área de baixa concentração (WIEDEMEIER et al., 1999). Este processo resulta do movimento molecular translacional, vibracional e rotacional do contaminante no meio líquido. A difusão molecular de um soluto na água subterrânea é descrita pela Lei de Fick. A 1ª. Lei de Fick é aplicável para o fluxo difusivo de um contaminante em condições de estado estacionário e fluxo unidimensional, representado pela Equação (13), (SCHNOOR, 1996). O sinal negativo indica que a direção do fluxo é da área de maior concentração para a menor.

$$F = -D \frac{dC}{dx}$$

Equação (13)

Onde :

F : fluxo de massa do soluto por unidade de área por unidade de tempo;
 D : coeficiente de difusão molécula;
 dC/dx : gradiente de concentração;

No caso de um regime transiente, a 2ª. Lei de Fick pode ser aplicada conforme Equação (14).

$$\frac{\partial C}{\partial t} = D \frac{\partial^2 C}{\partial x^2}$$

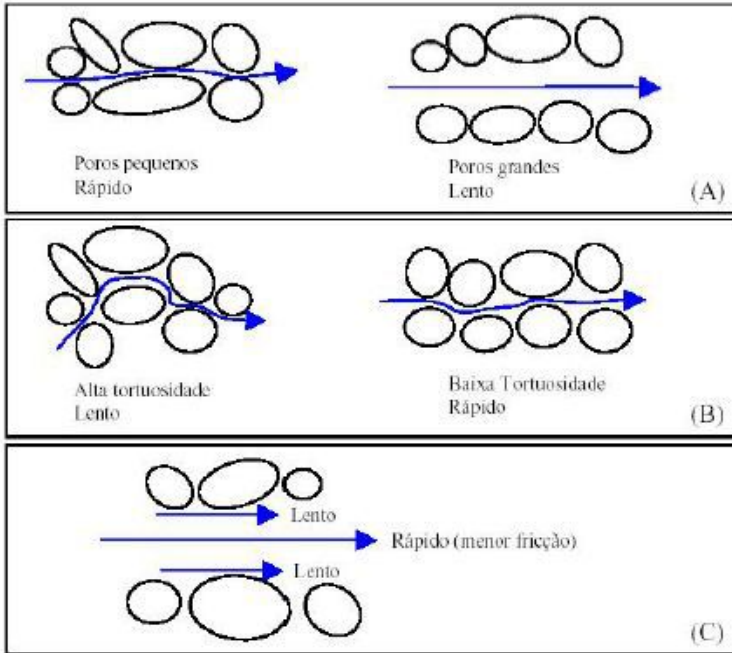
Equação (14)

3.3.2.2 Dispersão mecânica

Quando um fluido contaminado escoar através do meio poroso, mistura-se com a água não contaminada. O resultado será a diluição do contaminante pelo processo de dispersão mecânica (FETTER, 1994). Essa mistura é causada pela heterogeneidade do meio poroso que cria variações na velocidade e trajetória do fluxo (BEDIENT et al.,1997). É um processo advectivo e não químico. A mistura ocorrida na direção do fluxo é chamada de dispersão longitudinal (Dx). A dispersão que ocorre normal à direção do fluxo é a dispersão transversal (Dy).

Este mecanismo é definido como a mistura ocasionada pelas variações locais da velocidade no meio poroso, que é influenciado basicamente por três processos, conforme Figura 4. O primeiro processo é a fricção variável dentro de um poro individual, portanto, à medida que a água subterrânea flui através de um poro, a velocidade será maior no centro do que nas margens do poro devido à fricção (Figura 4a). A segunda causa da dispersão hidrodinâmica é a tortuosidade do caminho do fluxo, fazendo com que parte do fluxo se encaminhe para rotas menos tortuosas (rápido) (Figura 4b), enquanto outra parte passa por rotas mais tortuosas (lento). O terceiro processo é a variação da velocidade do fluxo através dos poros de vários tamanhos, aumentando em poros pequenos e diminuindo em poros grandes (Figura 4c).

Figura 4 - Processos físicos que causam a dispersão mecânica.



Fonte: FETTER, 1994.

Os processos de difusão molecular e dispersão mecânica não podem ser separados no fluxo da água subterrânea. Portanto, para um fluxo unidimensional a dispersão hidrodinâmica (dispersão mecânica + difusão molecular) é representada pela seguinte Equação (15) (FETTER, 1994):

$$Dx = \alpha x \cdot vx + D *$$

Equação (15)

Onde :

Dx : coeficiente de dispersão hidrodinâmica longitudinal;

αx : dispersividade hidrodinâmica;

vx : velocidade linear da água subterrânea;

D^* : difusão molecular efetiva;

Os coeficientes de dispersão hidrodinâmica são de difícil determinação, principalmente devido à heterogeneidade do solo. O método mais preciso para determinação da dispersão, consiste na injeção

e monitoramento de um traçador conservativo como, por exemplo, o brometo de potássio, o cloreto de sódio ou o trítio (SCHNOOR, 1996).

Comumente a dispersividade é determinada através de fórmulas empíricas. Xu e Eckstein (1995) também relaciona a dispersividade longitudinal com o comprimento da pluma (Lp) (em m) na Equação (16):

$$\alpha L = 0,83 [\log (Lp)]^{2,414} \quad \text{Equação (16)}$$

Em modelos matemáticos tridimensionais a dispersividade é avaliada na direção longitudinal, ao longo da direção de fluxo da água subterrânea, transversalmente e verticalmente. A dispersividade transversal (αt) e a vertical (αv) podem ser representadas pelas Equações (17) e (18), respectivamente (GELHAR, 1996).

$$\alpha t = 0,1\alpha L \quad \text{Equação (17)}$$

$$\alpha v = 0,001L \quad \text{Equação (18)}$$

3.3.3 Biodegradação

O termo biodegradação é, frequentemente, utilizado para descrever uma variedade de processos biológicos onde os micro-organismos transformam os contaminantes orgânicos em produtos metabólicos. Durante o processo de biodegradação, os micro-organismos presentes no ambiente subterrâneo (micro-organismos nativos), que podem ser bactérias e fungos, transformam os hidrocarbonetos de petróleo e o etanol em produtos menos tóxicos, reduzindo a massa desses contaminantes no ambiente subterrâneo. Estas transformações dependem das características hidroquímicas, geoquímicas, da população microbiana e das propriedades dos contaminantes (CHAPELLE, 1993).

A taxa de biodegradação pode ser determinada pela aplicação dos dados de análise de campo a um modelo cinético de biodegradação. Os modelos de destino e transporte de contaminantes geralmente empregam o modelo cinético de decaimento de 1ª ordem para descrever a cinética de biodegradação dos contaminantes hidrocarboneto de petróleo em aquífero, representado pela Equação (19):

$$\frac{dC}{dt} = -\lambda \cdot C$$

Equação (19)

Onde:

 dC/dt : velocidade de decaimento o soluto no tempo;

C: concentração do soluto;

 λ : coeficiente de decaimento do soluto devido à biodegradação;

Através do gráfico $\ln(C)$ versus tempo t obtém-se uma reta, cujo coeficiente angular corresponde ao coeficiente de biodegradação de primeira ordem (λ) (CHAPRA, 1997). O parâmetro λ apresentado nos modelos de biodegradação não é uma constante, mas um coeficiente que varia no tempo e no espaço devido à mudança na população microbiana como resultado das variações da química do aquífero.

O coeficiente de biodegradação pode ser obtido integrando a Equação (20), o que resulta em:

$$\frac{C}{C^0} = e^{-\lambda \cdot t}$$

Equação (20)

Onde, C^0 é a concentração inicial.

O modelo cinético de primeira ordem, mostrado na Equação (19) assume que o coeficiente de biodegradação do soluto é proporcional à sua concentração. Um aumento na concentração origina aumento na cinética de degradação (SCHNOOR, 1996).

3.3.4 Sorção e Retardo

Muitos contaminantes orgânicos, incluindo os solventes clorados e BTEX, são removidos da solução por sorção à matriz aquífero (WIEDEMEIER et al., 1999). A sorção é um fenômeno pelo qual os contaminantes dissolvidos particionam-se da água subterrânea e aderem às partículas da matriz do aquífero.

Por causa da sua estrutura molecular menos polar, os hidrocarbonetos geralmente apresentam sorção pelo processo de ligações hidrofóbicas, isto é, quando as superfícies da matriz do aquífero são

menos polares do que a molécula da água, como na maioria dos casos, há uma forte tendência, por parte das moléculas do contaminante menos polar, em particionarem-se da água subterrânea e sorverem-se na matriz do aquífero. Este fenômeno dá-se através de ligações hidrofóbicas e é um fator importante no controle do destino de muitos poluentes orgânicos em sistemas subsuperficiais. A matéria orgânica e os minerais de argila são os componentes que têm maior influência no processo de sorção dentro de um aquífero. Na maioria dos aquíferos, é a fração orgânica que tende a controlar a sorção de hidrocarbonetos dissolvidos. Dessa forma, quanto maior o teor de matéria orgânica no aquífero, maior será o retardo no deslocamento dos contaminantes. Além disso, quanto mais hidrofóbico for o composto, maior será o efeito da sorção (BEDIENT et al., 1997).

O grau de retardo depende principalmente da capacidade de sorção, ou seja, quantidade de massa de contaminantes que é absorvida pela matéria orgânica presente no aquífero. Geralmente, compostos que apresentam menor solubilidade mostram alta capacidade de sorção; entretanto, exibem maior retardo (BEDIENT et al., 1997).

O modelo mais frequentemente utilizado para descrever a sorção de compostos orgânicos voláteis em solos é a isoterma de Freundlich, representada pela equação (21):

$$C_s = Kd \cdot C_w^n \quad \text{Equação (21)}$$

Onde:

C_s : concentração do composto químico sorvido;

C_w : concentração do composto químico que permanece dissolvido em água;

Kd : coeficiente de distribuição;

n : expoente de Freundlich.

O coeficiente de retardo (R) para sorção linear é determinado pela relação:

$$R = 1 + \frac{\rho_b \cdot Kd}{\eta e} \quad \text{Equação (22)}$$

Onde:

ρ_b : densidade do aquífero;

η_e : porosidade efetiva;

K_d : coeficiente de distribuição ($K_d = C_s/C_{wn}$). Também pode ser expresso pelo produto do coeficiente de sorção (K_{oc}) pela fração da matéria orgânica (f_{oc}): $K_d = K_{oc} \cdot f_{oc}$.

A velocidade de transporte do contaminantes (vc) pode ser calculada por (FETTER, 1994):

$$vc = \frac{vx}{R}$$

Equação (23)

No caso do transporte de contaminantes conservativos, em que o efeito da sorção não se verifica, R é igual a 1. Com isso, a velocidade de transporte do contaminante (vc) é igual à velocidade do fluxo da água subterrânea (vx).

3.4 REMEDIAÇÃO DE ÁREAS CONTAMINADAS

A remediação de áreas contaminadas é aplicação de técnica ou conjunto de técnicas em uma área contaminada, visando à remoção ou contenção dos contaminantes presentes, de modo a assegurar uma utilização para a área, com limites aceitáveis de riscos aos bens a proteger (CETESB, 2001).

Um projeto de remediação, pode incluir algumas tecnologias de remoção de fonte, tratamento e/ou contenção, podendo ser selecionadas ou combinadas às técnicas de remediação mais adequadas e legalmente permissíveis, entre várias existentes. Essas tecnologias visam reduzir as concentrações dos contaminantes para níveis abaixo ou iguais ao aceitável. Outras formas de intervenção, visando reduzir ou eliminar a exposição ao contaminante, podem ser adotadas: controles institucionais definidos pela parte responsável ou pelo órgão ambiental, através da restrição do uso e ocupação do solo; e controles de engenharia, como instalação de uma barreira hidráulica (ASTM, 2002).

3.4.1 Projeto de remediação

O projeto de remediação deve ser elaborado a fim de ser aplicado como a base técnica para o órgão gerenciador ou órgão de controle ambiental avaliar a possibilidade de autorizar ou não a implantação e operação dos sistemas de remediação propostos (CETESB, 2001).

É importante que seja dada às pessoas diretamente afetadas a possibilidade de se informar e participar da avaliação das medidas remediadoras e seus efeitos. Estas informações, em tempo hábil, permitirão que as pessoas afetadas façam valer objeções e sugestões perante o responsável pela remediação, ou perante o órgão competente. Este procedimento gerará uma maior aceitação e facilitará a implementação e execução das medidas remediadoras (CETESB, 2001).

Nos itens 3.4.2, 3.4.3 e 3.4.4, são descritas, brevemente, as principais tecnologias de remediação e bastante utilizadas em todo o mundo.

3.4.2 Bombeamento e tratamento de águas subterrâneas

Esse método consiste na captura, por meio de poços de extração, de água subterrânea contaminada, para que ela seja tratada e redisposta (CETESB, 2001). Os objetivos do processo de bombeamento e tratamento de águas subterrâneas são a remoção de contaminantes dissolvidos na subsuperfície e/ou a contenção da água subterrânea contaminada para prevenir a migração dos contaminantes. O uso desta técnica sempre deixa concentrações residuais de contaminantes no aquífero, mas é bastante eficiente para a contenção de plumas (USEPA, 1990).

Um sistema de bombeamento e tratamento é projetado com base: na hidrogeologia local e regional (levando-se em conta a heterogeneidade quanto à permeabilidade, sobretudo na relação entre permeabilidade vertical e horizontal, que influencia a taxa de captura); nas características hidráulicas do aquífero contaminado e nas características dos contaminantes presentes na água subterrânea (CETESB, 2001).

O posicionamento dos poços de extração depende do objetivo proposto. Quando o objetivo é eliminar o máximo possível de contaminantes, os poços são geralmente locados imediatamente a jusante da fonte de contaminação ou no núcleo mais concentrado da pluma. Se o objetivo for conter o avanço da frente da pluma, para evitar impactos a receptores sensíveis, nos casos em que a pluma esteja migrando para fora dos limites da área, ou esteja próxima ou já atingindo um receptor, os poços são locados nos limites da pluma da contaminação (CETESB, 2001).

No que se diz respeito ao comprimento do filtro em relação à espessura saturada do aquífero, quando esses valores são iguais, tem-se a situação de um poço totalmente penetrante, se o comprimento do filtro é

menor em relação à espessura do aquífero, temos um poço parcialmente penetrante.

3.4.3 Biorremediação

A biorremediação consiste na transformação ou destruição de contaminantes orgânicos por decomposição biológica, pela ação de micro-organismos de ocorrência natural no solo (bactérias, fungos e protozoários). Estes micro-organismos são capazes de biodegradar poluentes tóxicos, para obtenção de energia, em substâncias como dióxido de carbono, água, sais minerais e gases (metano e sulfeto). Dentre os compostos biodegradáveis incluem-se os hidrocarbonetos derivados do petróleo, os preservantes de madeira (creosoto e pentaclorofenol), os solventes halogenados e os pesticidas. O contaminante funciona como fonte de carbono para os micro-organismos, sendo necessário o fornecimento de nutrientes como nitrogênio e fósforo, bem como um agente oxidante, que funcione como receptor de elétrons, além de outros nutrientes específicos para cada contaminante (CETESB, 2001).

A biorremediação compreende duas técnicas: bioestimulação e bioaugmentação. A bioestimulação é a técnica de biorremediação em que o crescimento dos micro-organismos endógenos é estimulado por práticas que incluem a introdução de um dos componentes necessários para manter a atividade metabólica destes micro-organismos. Em locais onde foi identificada uma insuficiência de micro-organismos endógenos para a biodegradação do contaminante, mesmo após a tentativa de bioestimulação, a aplicação de micro-organismos não endógenos poderá ser considerada, consistindo na bioaugmentação (USEPA, 2004).

3.4.4 Contenção por Barreiras

A técnica da contenção consiste basicamente em criar barreiras para evitar a liberação de poluentes, do solo para outros meios, como o ar e as águas superficiais e subterrâneas. Estas barreiras podem ser hidráulicas ou físicas. As barreiras físicas são, em geral, constituídas por camadas impermeabilizantes de argila ou outro material, empregadas nos casos em que não existe a possibilidade de contato entre o solo contaminado e o aquífero freático. Se houver a possibilidade de contato do solo contaminado com o aquífero freático, são empregadas as barreiras hidráulicas, a partir do rebaixamento do nível do freático, pelo bombeamento das águas subterrâneas em poços estrategicamente localizados, ou através de trincheiras drenantes (CETESB, 2001).

As barreiras são tipicamente instaladas em profundidades de até 30 metros e com espessura entre 0,60 e 1,20 metro. Dimensões maiores que estas são viáveis, tecnicamente, mas o custo pode ser incrementado em até 3 vezes. Têm sido usadas em larga escala, por décadas, como soluções de longo prazo no controle da velocidade de percolação do contaminante. Deve-se ter atenção a tipos específicos de contaminantes que podem degradar quimicamente a barreira e reduzir a efetividade a longo prazo (FRTR, 2002).

3.5 PRINCÍPIOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA

O uso de modelos matemáticos para águas subterrâneas é bastante difundido no campo da hidrogeologia. Estes modelos tornaram-se uma ferramenta fundamental para o planejamento e a tomada de decisão nos processos de gerenciamento ambiental (ASTM, 2002). Segundo Bonganha et. al. (2007), o modelo matemático representa o comportamento do sistema físico real da água subterrânea pela resolução das equações matemáticas que regem os processos atuantes. Modelos de fluxo da água subterrânea são normalmente utilizados para determinar a velocidade e a direção do movimento da água subterrânea através dos aquíferos e unidades confinadas na subsuperfície. Já os modelos de transporte e transformação são desenvolvidos para estimar a concentração de um produto químico tanto na zona saturada como na zona insaturada so solo.

A solução das equações que descrevem o fluxo e os processos de transporte e transformação pode ser obtida utilizando-se modelos analíticos ou modelos numéricos. Nos modelos analíticos as condições de fluxo ou de transporte são simplificadas e as equações possuem solução exata. Estes modelos são recomendados para avaliações iniciais nas quais não é necessário um alto nível de exatidão e para checar os resultados obtidos com modelos numéricos. Nos modelos numéricos consegue-se resolver as equações que representam as condições de fluxo e de transporte mais complexas. Desta maneira, o método numérico de solução traz ao modelo maior robustez e flexibilidade, permitindo sua aplicação em situações diversas.

Os métodos numéricos mais utilizados são: o método das diferenças finitas (MDV), o método dos elementos finitos (MEF) e o método dos volumes finitos (MVF). Nos dois primeiros casos, o domínio que compreende a área de estudo é interpretado como um sistema tridimensional de grades de nós, com diferença básica quanto à forma da malha estabelecida que, enquanto no primeiro método (MDV) é

retangular, com as linhas de malha sempre ortogonais umas às outras; no segundo método (MEF), pode ser tanto regular como irregular, com elementos quadriláteros ou retangulares (WANG; ANDERSON, 1995). Já o terceiro método (MVF), tem como principal característica o emprego de volumes de controle na discretização do domínio ao invés de pontos de malhas (WENDLANDER, 2003).

A exatidão dos modelos numéricos depende basicamente dos dados de entrada no modelo e do método numérico utilizado para resolver as equações (MANDLE, 2002).

De acordo com Bonganha et. al. (2007), para a construção de um modelo matemático que represente um sistema real, de fluxo de água subterrânea, são adotados os seguintes procedimentos:

- desenvolvimento do modelo conceitual, que envolve todo o levantamento e interpretação de dados e observações do sistema real;
- seleção do programa a ser utilizado segundo as necessidades e os dados existentes (escolha do aplicativo matemático);
- tradução do modelo conceitual para a linguagem matemática, construindo-se os diversos bancos de dados para a entrada das informações no programa selecionado;
- calibração do modelo matemático construído de forma a diminuir as incertezas inerentes a uma representação simplificada (modelo matemático) de um sistema real, em geral, complexo.

3.5.1 Modelo conceitual

O modelo conceitual é uma parte fundamental no processo de construção de um modelo numérico, já que nele são detalhados todos os processos físicos do meio natural e as simplificações adotadas para esse meio. Aqui também, por conseguinte, residem as principais causas de falhas e de imprecisão do modelo. A construção do modelo conceitual é um processo iterativo e ele está sempre em evolução, já que, se uma hipótese adotada para o modelo não for confirmada, ele deve ser revisto.

Este modelo conceitual norteará a definição do domínio do modelo, do tipo de aquífero a ser modelado, das condições iniciais e de contorno, e das fontes e sumidouros de água no sistema.

Portanto, o modelo conceitual constitui-se uma síntese das informações relativas a uma área em estudo, onde se pode visualizar, através de texto explicativo ou ilustração, a localização da contaminação, a sua forma de propagação e a sua relação com os bens a proteger existentes (CETESB, 2001).

3.5.2 Condições de contorno

Como foi visto anteriormente, a equação geral do fluxo em meio poroso é uma equação diferencial parcial. Para resolvê-la, é necessário conhecer as condições de contorno e para o caso de problemas transientes é preciso também conhecer as condições iniciais. O estabelecimento das condições de contorno é um passo fundamental para a modelagem. Se elas forem mal estabelecidas podem acarretar sérios erros na solução do problema (FEITOSA et al, 2008).

De acordo com Carvalho Filho e Cota (2003) as condições iniciais definem a distribuição de carga no início da simulação. As condições de contorno são enunciados matemáticos que especificam a variável dependente (carga) ou a derivada da variável dependente (fluxo) nos limites ou fronteiras do domínio do problema (CARVALHO FILHO; COTA, 2003).

Segundo Wang e Anderson (1995), existem diferentes tipos de condições de contorno:

- Condição de carga hidráulica especificada para as superfícies que estão dentro dos limites da região de fluxo (Condição do Tipo I ou de Dirichlet), expresso por:

$$H(x,y,z,t)=\text{especificado}$$

A carga hidráulica é conhecida em certas regiões do domínio simulado, e servem como referência para a solução do modelo. Franke, Reilly e Bennett (1987) exemplificam tais condições de contorno por rios e lagos, que possuam valores de carga hidráulica conhecida e ligação direta com o aquífero.

- Condição de fluxo especificado para ao longo das superfícies dentro dos limites da região do fluxo (Condição do Tipo II ou de Neumann), expresso matematicamente por:

$$\frac{dh(x,y,z,t)}{dn} = \text{especificado}$$

Onde:

$dh(x,y,z,t)$: variação elementar tridimensional e temporal de carga hidráulica,;

dn : variação elementar de distância perpendicular à direção de fluxo;

Nesse tipo de condição, o fluxo especificado pode ser nulo ou não. É aplicado fluxo nulo quando existe um contorno impermeável, uma linha de simetria, uma linha de fluxo, ou seja, onde inexistir fluxo transversal a este contorno. Franke, Reilly e Bennett (1987), exemplificam essas condições de contorno (não nulo) por lagos e rios, desde que estes tenham sua interação com o aquífero bem conhecida.

- Condição de fluxo dependente da carga (Condição do Tipo III ou Condição de Cauchy), representada matematicamente pela equação:

$$\frac{dh}{dn} + ch = c$$

Um exemplo normalmente utilizado para este tipo de contorno é aquele no qual existe uma camada semipermeável separando dois aquíferos ou um aquífero e um corpo de água superficial

Anderson e Woessner (1992) sugerem que, sempre que possível, sejam adotadas como condições de contorno, fronteiras hidráulicas naturais, representadas por alguma feição física como contatos geológicos, rios e divisores de água.

3.6 MODELOS MATEMATICOS UTILIZADOS

3.6.1 SCBR

O modelo SCBR – Solução Corretiva Baseada no Risco – é resultado da parceria entre a PETROBRAS (Petróleo Brasileiro S.A.) e a Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC) através do Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA), com a colaboração da ESSS (Engineering Simulation and Scientific Software). O modelo SCBR foi desenvolvido em 2001 e é de propriedade da PETROBRAS com solicitação de registro no INPI (nr. 65320), não sendo até a presente data de domínio público.

O SCBR é um modelo matemático bidimensional para o gerenciamento e/ou prevenção de áreas potencialmente impactadas. O modelo permite tanto a determinação do fluxo da água subterrânea e transporte de contaminantes como a avaliação de risco para as rotas solo, água superficial, água subterrânea e ar. O modelo foi desenvolvido para auxiliar a tomada de decisão no gerenciamento ambiental de áreas impactadas ou em áreas onde são desenvolvidas atividades potencialmente poluidoras. Está em conformidade com as diretrizes da

Resolução Conama Nº 420/2009 e Normas ABNT (NBR 15515, NBR 16209 e NBR 16210) para o gerenciamento ambiental de áreas contaminadas (PETROBRAS; UFSC; ESSS, 2015a).

Para a solução das equações de fluxo e transporte o SCBR emprega o método numérico dos volumes finitos (MFV). O MFV tem como principal vantagem a realização de um balanço de conservação da propriedade que está sendo simulada em cada volume elementar da malha, eliminando inconsistências de perda ou ganho de propriedades (massa, quantidade de movimento, etc) no interior do domínio de cálculo, satisfazendo a conservação das propriedades (CORSEUIL et al., 2006).

O modelo permite entre outros, a determinação do fluxo da água subterrânea, a estimativa do alcance e da velocidade de migração de plumas de contaminação, a definição de perímetros de proteção de aquíferos, o cálculo e o mapeamento do risco à saúde humana (2D) considerando diversas rotas de exposição e a geração de relatórios e animações. Destaca-se que o modelo SCBR considera a interferência do etanol nos processos de biodegradação e solubilização dos hidrocarbonetos de petróleo em casos de derramamento de gasolina brasileira, onde se adicionam álcool (CORSEUIL et al., 2006).

A formulação matemática do SCBR foi fundamentada com base no modelo conceitual que representa a contaminação das águas subterrâneas de unidades aquíferas não confinadas. Neste modelo conceitual, os mecanismos primários de contaminação das águas subterrâneas são vazamentos em sistemas de armazenamento e distribuição de produtos químicos, atividades agrícolas, disposição inadequada de resíduos tóxicos, entre outros (CORSEUIL et al., 2006). Ainda em relação à formulação matemática do modelo matemático SCBR, destaca-se que ela envolve a solução das equações de Darcy no meio poroso, acrescidas das equações de transporte de soluto.

O modelo de fluxo bidimensional da água subterrânea para aquíferos não confinados implementado no SCBR é conhecida como equação de Boussinesq (PETROBRAS; UFSC; ESSS, 2015b). Formalmente, a equação de Boussinesq é obtida através da integração da equação tridimensional de fluxo sobre a dimensão vertical do aquífero, como mostrado na Equação (24):

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(K_x h \frac{\partial h}{\partial x} \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(K_y h \frac{\partial h}{\partial y} \right) + (|q_z| + I) + F = S_y \frac{\partial h}{\partial t}$$

Equação (24)

Onde:

K_x e K_y : componentes principais do tensor condutividade hidráulica, ao longo dos eixos de coordenadas x e y , respectivamente;

$|qz|$: velocidade específica da água subterrânea, na direção de z , que atravessa a base do aquífero, representando a drenança (ganho ou perda) de água através da interface com a camada confinante inferior;

I : termo de infiltração de água (recarga) através da superfície superior da zona saturada do meio, representando o volume de água introduzido no aquífero, por unidade de tempo;

S_y : coeficiente de armazenamento do meio não-saturado,

F : representa o termo fonte ou sumidouro de água, ou seja, o volume de água introduzido (ou retirado) por unidade de área do meio e por unidade de tempo – o valor de F é positivo, se for uma fonte, e negativo se for um sumidouro.

As condições de contorno utilizadas na solução da Equação (24) são do 1º Tipo (Dirichlet), onde a carga hidráulica é especificada no contorno, e o caso especial da condição de 2º Tipo (Neumann), especificando no contorno a condição de não fluxo.

Na equação de transporte e transformação de contaminantes do SCBR, assume-se que a biodegradação ocorre somente na fase dissolvida (ou seja, o coeficiente de degradação ocorrendo a fonte em fase livre λ' é considerada igual a zero). Dessa forma o transporte dos contaminantes dissolvidos na água subterrânea, assumindo uma cinética de biodegradação de primeira ordem, é baseada na seguinte Equação (25):

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \frac{1}{R} \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(\rho C V_i)}{\partial x_i} \right] - \lambda \rho C + \frac{W \rho C}{n \Delta x \Delta y \Delta z}$$

Equação (25)

Onde:

ρ : densidade do aquífero;

C : concentração do contaminante;

t : tempo;

R : coeficiente de retardo;

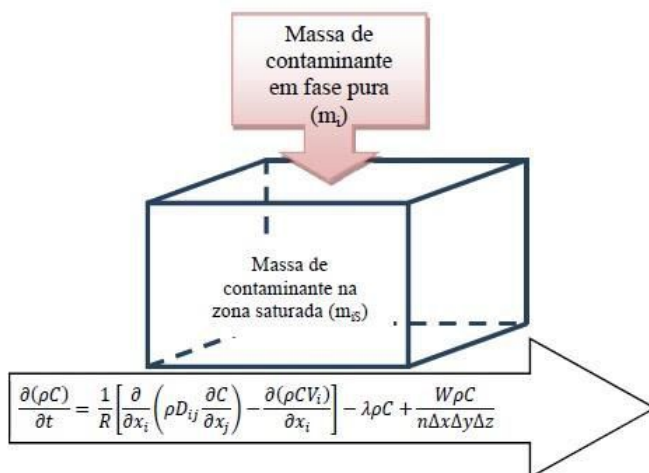
D_{ij} : tensor dispersão hidrodinâmica;

λ : coeficiente de biodegradação;

V_i : velocidade da água subterrânea;
 W: fluxo numérico;
 n: porosidade efetiva;
 x,y e z: eixos coordenados.

Considera-se a região da fonte como sendo de geometria de prisma regular. Os contaminantes deixam o prisma a uma taxa que é calculada em função dos processos de transporte e transformação dos contaminantes (Figura 5); o fluxo de água subterrânea é considerado constante (MULLER; ROSARIO; CORSEUIL, 2013).

Figura 5 - Modelo de transferência de massa da fonte, fase pura, para fase dissolvida.



Fonte: MULLER; ROSARIO; CORSEUIL, 2013.

Caso haja um derramamento de gasolina pura, calcula-se o decaimento da massa de benzeno na fonte através do processo de dissolução, pela Lei de Raoult (Equação (11)).

A versão do modelo matemático utilizada neste trabalho é a 3.1.

3.6.2 MODFLOW

Outro pacote computacional adotado neste trabalho é o MODFLOW, que é um modelo tridimensional que resolve a Equação (9) mostrada anteriormente, em diferenças finitas (aproxima a região por uma

malha uniformemente espaçada de nós, em que cada nó representa uma porção limitada do aquífero) para simulação do escoamento em regimes estacionário e transiente (MC DONALD; HARBAUGH, 1988). Foi originalmente desenvolvido por Mc Donald e Harbaugh em 1984 para a USGS (United States Geological Survey).

Para este trabalho, foi utilizado o Visual MODFLOW, uma interface gráfica do MODFLOW, desenvolvida pela empresa canadense Waterloo Hydrogeologic Inc, que permite a visualização gráfica do modelo, possibilitando a elaboração e simulação de problemas em tempo reduzido (GUIGUER JUNIOR; FRANZ, 1996).

As camadas aquíferas podem ser simuladas como confinadas, semiconfinadas e livres e o regime de bombeamento pode ser escolhido entre estacionário e transiente. O modelo admite as seguintes condições de contorno: Carga hidráulica especificada (condição de Dirichlet), Fluxo especificado (condição de Neumann) e Fluxo dependente da carga hidráulica (condição de Cauchy).

Como o MODFLOW calcula somente a equação de fluxo, o Visual MODFLOW utiliza seus programas associados para o cálculo de velocidades e transporte (GUIGUER JUNIOR; FRANZ, 1996):

- MODFLOW : modelo de fluxo tridimensional.
- MODPATH : modelo de pós-processamento usado no rastreamento de partículas, tendo como base o fluxo tridimensional obtido a partir de simulações de fluxo de águas subterrâneas previamente realizadas no MODFLOW.
- MT3DMS : modelo tridimensional para a simulação da advecção, da dispersão, da sorção e das reações químicas de um determinado poluente dissolvido nas águas subterrâneas. O MT3DMS pode ser acoplado com os modelos de fluxo, e é desenvolvido pelo método de volumes finitos e diferenças finitas. O MT3DMS simula reações químicas como a sorção linear, a sorção não linear e o decaimento de primeira ordem para a biodegradação e para o decaimento de material radiativo

A equação diferencial tridimensional que descreve o destino e transporte de contaminantes no MT3DMS, pode ser escrito como segue na Equação (26):

$$\frac{\partial(\rho C)}{\partial t} = \left[\frac{\partial}{\partial x_i} \left(\rho D_{ij} \frac{\partial C}{\partial x_j} \right) - \frac{\partial(\rho C V_i)}{\partial x_i} \right] \pm q_s \frac{C_s}{\rho} + r$$

Equação (26)

Onde:

C : concentração do soluto dissolvido na água subterrânea;

t : tempo;

D_{ij} : tensor dispersão hidrodinâmica;

V_i : velocidade de transporte na direção i ;

qs : vazão volumétrica por unidade de volume do aquífero;

ρ : porosidade efetiva;

C_s : concentração da fonte;

r : termo de efeitos de adsorção e reação química.

A compilação de todos os dados permitiu a elaboração de um modelo hidrogeológico da área de estudo, possibilitando uma simulação de fluxo em regime estacionário, transporte de contaminantes e simulação de técnica de remediação e contenção de plumas com o *software* Visual MODFLOW v.4.6.0.167, para o sistema aquífero.

4 METODOLOGIA

No presente estudo, a aplicação dos modelos matemáticos foi feita em cinco etapas, com base na metodologia apresentada na Figura 6: área de estudo e desenvolvimento do modelo hidrogeológico conceitual; georreferenciamento, bens a proteger e condições de contorno; calibração do SCBR e Visual MODFLOW; elaboração de cenários de contaminação para um caso real e tecnologias de remediação.

Figura 6 - Etapas da aplicação dos modelos matemáticos SCBR e MODFLOW no gerenciamento de áreas contaminadas.

Área de estudo e desenvolvimento do modelo hidrogeológico conceitual

- Características hidrogeológicas do local
- Corpos de água e feições principais

Georreferenciamento, bens a proteger e condições de contorno para ambos os modelos

- Georreferenciamento
- Ajuste das condições de contorno e parâmetros hidrogeológicos para área de estudo.
- Inserção de dados

Calibração do SCBR e Visual MODFLOW

- Conforme as normas: ASTM 5981 - 2008; ASTM 5490 - 2008.

Elaboração de cenário de contaminação para um caso real

- Identificação de pontos potencialmente contaminadores
- Caracterização da fonte de contaminação
- Simulação da pluma de contaminação

Tecnologias de contenção e remediação

- Simulação das tecnologias de contenção e remediação das plumas.

4.1 ÁREA DE ESTUDO

O cenário utilizado para esse estudo foi o Terminal Aquaviário de São Sebastião. Localizado, portanto no litoral norte do Estado de São Paulo, na microrregião de Caraguatatuba, na margem oeste do canal portuário e praticamente no centro do núcleo urbano da cidade de São Sebastião, distante cerca de 200 km da capital (Figura 7). Seus limites são Caraguatatuba a Norte, o Oceano Atlântico a Leste, Bertioga a Sul e Salesópolis a Noroeste. Abrange uma área de aproximadamente 130 hectares em terra distribuídas em Glebas A, C e D, além da área do porto a qual é denominada Gleba B (BRAIN TECNOLOGIA, 2004)

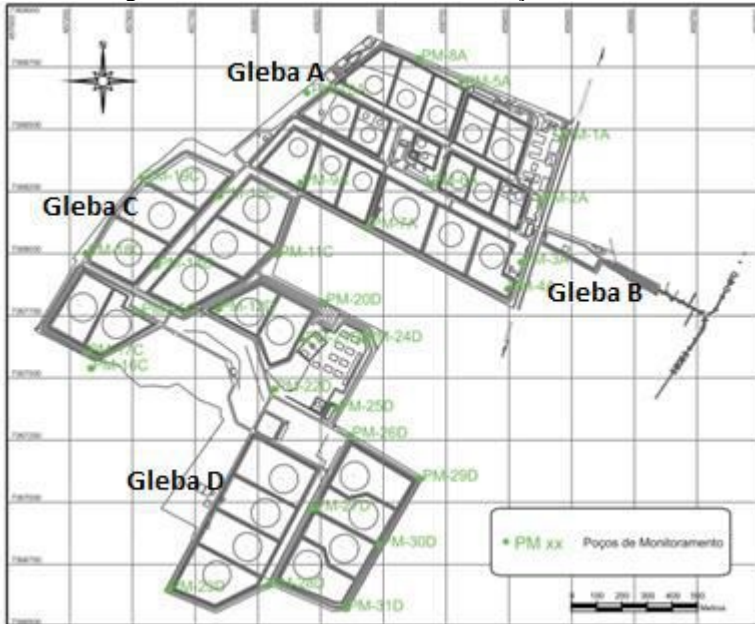
O terminal tem capacidade para armazenar 403.000m³ de derivados em 14 tanques e 1.418.000m³ de petróleo em 21 tanques, além de outros 9 tanques diversos. É o maior terminal da Transpetro, recebe petróleo nacional e importado por navio-petroleiro. Abastece as quatro refinarias do estado de São Paulo: Paulínia, Vale do Paraíba, Capuava e Presidente Bernardes. A planta de localização dos tanques de armazenamento distribuídos nas 4 glebas é mostrada na Figura 8.

Figura 7 - Localização da cidade de São Sebastião e do Terminal Aquaviário de São Sebastião.



Fonte: Adaptado do Google.

Figura 8 - Planta do terminal e a localização dos PM's.

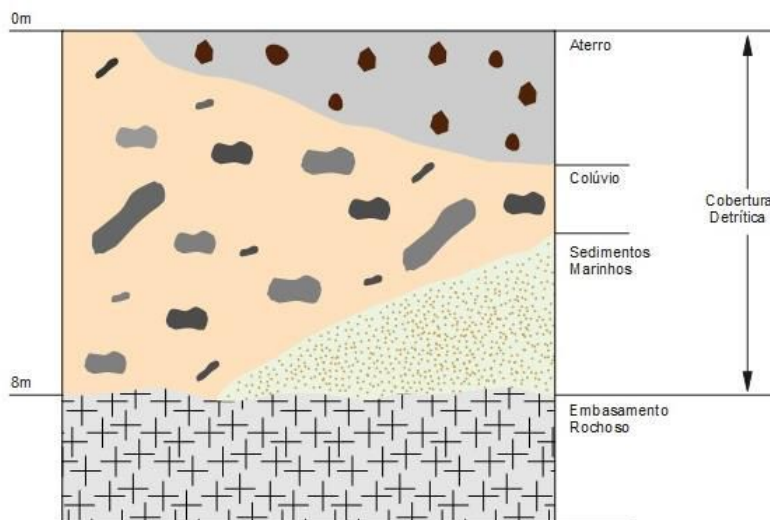


Fonte: BRAIN TECNOLOGIA, 2004.

4.2 DESENVOLVIMENTO DO MODELO HIDROGEOLOGICO CONCEITUAL

Os parâmetros de caracterização hidrogeológica local foram definidos através de uma análise dos estudos feitos por meio do Relatório de Diagnóstico Ambiental do Terminal Aquaviário de São Sebastião (BRAIN TECNOLOGIA, 2004). São assumidas duas unidades geológicas principais: a cobertura detrítica e o embasamento rochoso composto de rochas cristalinas granito-gnáissicas (Figura 9). A cobertura detrítica é constituída principalmente de um colúvio representado por blocos de rocha suportados por matriz areno-argilosa (constituído por areias finas e areias com silte), cuja espessura pode variar de 0 a 8 m, o qual é usualmente sobreposto por uma camada de aterro. Esse aterro pode ter uma variação de 0 a 4 m. Segundo o relatório da Brain Tecnologia Ltda, os sedimentos marinhos representados por areias contendo fragmentos de conchas foram detectados em perfurações realizadas na Gleba A, entretanto eles estão restritos em ocorrência naquela área.

Figura 9 - Caracterização hidrogeológica da área do terminal



Fonte: BRAIN TECNOLOGIA, 2004.

O modelo conceitual hidrogeológico da área de estudo adotado neste trabalho é composto por duas unidades aquíferas: o aquífero poroso e livre desenvolvido sobre a cobertura detritica e o aquífero fraturado desenvolvido no embasamento rochoso (BRAIN TECNOLOGIA, 2004). Por conta da espessura, do posicionamento do nível d'água e pela influência do aquífero poroso e livre desenvolvido sobre a cobertura em relação as atividades desenvolvidas na estação, desprezou-se a influência do aquífero fraturado no embasamento rochoso.

A cidade é limitada pelos seguintes corpos d'água: a oeste pelo rio Guaratuba (fronteira com Bertioga), ao leste pelo rio Juqueriquerê (fronteira com Caraguatatuba) e ao sul pelo Oceano Atlântico.

A recarga deste aquífero ocorre em toda a sua superfície através da precipitação, e a descarga se dá nos corpos d'água da região.

4.3 OBTENÇÃO DOS DADOS DE CAMPO

Os dados de entrada dos modelos e as informações necessárias para elaboração do estudo foram obtidos do Relatório de Diagnóstico Ambiental do Terminal Aquaviário de São Sebastião, elaborado pela empresa Brain Tecnologia Ltda., no ano de 2004 (BRAIN TECNOLOGIA, 2004). Este relatório foi fornecido pela

Transpetro/Petrobras, por meio da parceria existente com a UFSC em pesquisas.

Não houve participação da autora na elaboração desse relatório, nem nas correspondentes coletas de amostras de campo e análises laboratoriais. Para os dados ausentes no relatório, foram feitas estimativas com base na literatura existente.

4.3.1 Caracterização hidrogeológica

Os parâmetros hidrogeológicos obtidos no relatório fornecido pela Brain Tecnologia Ltda foram: condutividade hidráulica e carga hidráulica. No total foram levantados 31 poços de monitoramento.

Os parâmetros hidrogeológicos utilizados para a simulação no SCBR encontram-se na Tabela 1. Enquanto que no Visual MODFLOW, os mesmos estão na Tabela 2 .

Tabela 1 - Parâmetros hidrogeológicos que foram utilizados na simulação do SCBR.

Parâmetro	Valor
condutividade hidráulica (k) ²	2,72x10 ⁻⁵ m/s
porosidade efetiva ¹	21%
densidade do solo ¹	2600kg/m ³
carbono orgânico no solo ¹	0,3%

Fonte: ¹(FETTER, 1994); ²(BRAIN TECNOLOGIA, 2004).

Tabela 2 - Parâmetros hidrogeológicos que foram utilizados na simulação do Visual MODFLOW.

Parâmetro	Valor
porosidade efetiva ¹	21%
porosidade total ¹	21%
Kx=Ky=Kz ² (condutividade hidráulica, em x,y e z)	2,72x10 ⁻⁵ m/s
densidade do solo ¹	2600kg/m ³

Fonte: ¹(FETTER, 1994); ²(BRAIN TECNOLOGIA, 2004).

Para as simulações desse trabalho, não foi considerada a influência da recarga (recarga= 0,0 mm/ano), pois este parâmetro não contribuiu na calibração do fluxo subterrâneo no SCBR. Embora o MODFLOW leve

em conta este parâmetro o mesmo não foi utilizado para possibilitar comparações. Pelo mesmo motivo considerou-se no Visual MODFLOW a isotropia das camadas ($K_x=K_y=K_z$), mesmo que o modelo permita simulações anisotrópicas verticalmente (por camadas). Pelo fato da inserção de recarga no SCBR ter apresentado problemas como a mudança significativa do mapa potenciométrico e do campo de velocidade, julgou-se necessário manter o valor da recarga nulo. Com isso, não foi estabelecida uma comparação do SCBR com o MODFLOW em relação à anisotropia das camadas.

Através do Relatório de Diagnóstico Ambiental do Terminal Aquaviário de São Sebastião de 2004, determinou-se que a condutividade hidráulica média para o terminal é de $2,72 \times 10^{-5}$ m/s, com mínima de $3,52 \times 10^{-7}$ m/s no PM-18C e máxima de $1,02 \times 10^{-4}$ m/s no PM-05A. A avaliação da condutividade hidráulica foi realizada através do Método Hvorslev (BRAIN TECNOLOGIA, 2004). Esses dados, inseridos para cada poço, apresentavam taxa de variação consideravelmente grande (Tabela 3). Deve-se, contudo, destacar que os valores em sua grande maioria estão dentro de uma faixa de grandeza de 10^{-5} a 10^{-3} m/s (FETTER, 1994), características de terrenos constituídos por areias finas e areias com silte. A porosidade efetiva não foi levantada para cada poço, por esse motivo, foi adotado o valor de 21% conforme literatura.

Na Tabela 3 são apresentadas as coordenadas UTM, cotas, profundidade do nível d'água, carga hidráulica e levantados em cada poço e os valores de condutividade hidráulica que foram utilizados no procedimento de calibração dos modelos SCBR e Visual MODFLOW. Os dados ausentes da Tabela 3, significam que o parâmetro não foi levantado para o respectivo poço.

Tabela 3 - Dados dos poços de monitoramento.

Poço	Coordenadas UTM		Cota (m)	Prof. NA (m)	Carga hid. (m)	Cond. hidráulica K (m/s)
	E	N				
PM-01 A	459197.23	7368393.70	2.87	2.15	0.72	4,06 x 10 ⁻⁵
PM-02 A	459130.69	7368200.57	3.40	2.59	0.81	3,04 x 10 ⁻⁵
PM-03 A	459072.91	7368012.39	3.60	2.7	0.90	3,49 x 10 ⁻⁵
PM-04 A	459031.62	7367930.03	3.48	2.48	1.00	4,43 x 10 ⁻⁶
PM-05 A	458895.50	7368556.21	4.04	1.85	2.19	1,02 x 10 ⁻⁴
PM-06 A	458794.27	7368254.16	4.66	2.41	2.25	3,82 x 10 ⁻⁵
PM-07 A	458608.12	7368121.75	4.08	1.65	2.43	6,71 x 10 ⁻⁵
PM-08 A	458760.98	7368635.75	5.37	2.85	2.52	7,02 x 10 ⁻⁵
PM-09 A	458397.97	7368255.12	4.83	1.02	3.81	4,08 x 10 ⁻⁶
PM-10 A	458425.73	7368530.81	8.24	1.37	6.87	1,76 x 10 ⁻⁵
PM-11 C	458326.90	7368034.88	6.26	1.45	4.81	5,83 x 10 ⁻⁶
PM-12 D	458145.76	7367868.22	7.67	0.52	7.15	4,55 x 10 ⁻⁵
PM-13 C	458147.56	7368214.35	10.34	3.85	6.49	1,77 x 10 ⁻⁶
PM-14 C	457956.17	7368000.86	11.46	3.2	8.26	1,29 x 10 ⁻⁵
PM-15 C	457906.51	7367860.04	11.46	2.44	9.02	9,60 x 10 ⁻⁷
PM-16 C	457757.01	7367687.89	22.51	-	-	-
PM-17 C	457743.16	7367734.21	16.81	2.05	14.76	3,49 x 10 ⁻⁶
PM-18 C	457741.19	7368040.03	15.33	3.22	12.11	3,52 x 10 ⁻⁷
PM-19 C	457915.24	7368267.75	16.03	-	-	-
PM-20 D	458470.16	7367889.85	5.54	2.45	3.09	2,00 x 10 ⁻⁵
PM-21 D	458407.33	7367773.45	8.15	-	-	-
PM-22 D	458317.78	7367623.65	8.51	-	-	-
PM-23 D	457993.06	7367010.59	7.19	-	-	-
PM-24 D	458594.92	7367775.76	4.86	2.35	2.51	2,89 x 10 ⁻⁵

Poço	Coordenadas UTM		Cota (m)	Prof. NA (m)	Carga hid. (m)	Cond. hidráulica K (m/s)
	E	N				
PM-25 D	458508.31	7367562.89	5.37	3.31	2.06	$3,57 \times 10^{-5}$
PM-26 D	458549.86	7367481.77	5.36	3.3	2.06	$2,63 \times 10^{-5}$
PM-27 D	458436.06	7367258.76	5.90	-	-	-
PM-28 D	458297.32	7367021.79	6.11	-	-	-
PM-29 D	458765.69	7367350.01	4.77	-	-	-
PM-30 D	458639.30	7367147.66	4.23	-	-	-
PM-31 D	458537.82	7366951.76	3.30	2.48	0.82	$8,27 \times 10^{-6}$

Fonte: BRAIN TECNOLOGIA, 2004.

4.4 GEORREFERENCIAMENTO, BENS A PROTEGER E CONDIÇÕES DE CONTORNO

- **SCBR**

Antes de efetuar a calibração do modelo foram consideradas as seguintes etapas:

- O georreferenciamento da área, o modelo hidrogeológico conceitual e os elementos do ambiente (rios, lagos e obstáculos).
- Com o georreferenciamento da área foram identificados os bens a proteger, que são: bairros residenciais no entorno no terminal, bem como córrego Mãe Isabel e córrego do Outeiro (Figura 10).
- Posteriormente foi realizada a locação dos poços de monitoramento de águas subterrâneas na região de interesse (Figura 11). Os dados de condutividade hidráulica, carga hidráulica e porosidade efetiva foram inseridos no modelo.
- Por fim, ajustou-se o domínio de simulação de forma que as condições de contorno do modelo fossem as mais adequadas possíveis para o SCBR, ou seja, utilizar os poços de monitoramento como condições de contorno posicionando-os nos limites do domínio (condição do tipo 1 ou Dirichlet). O ajuste dos domínios de simulação tem a finalidade de avaliar a calibração mais precisa para o fluxo subterrâneo.

Para a condição de tipo 1 (ou Dirichlet), o SCBR atribui valores iniciais de carga hidráulica em cada volume de controle, na borda do

domínio de simulação e no volume de controle externo à borda. Para situações com mais de 4 pontos de análise com carga hidráulica, que é o caso desse trabalho, o SCBR determina esses valores de carga hidráulica em cada volume através do método de interpolação “krigagem”.

Para o caso dos valores de condutividade hidráulica, o SCBR utiliza os valores medidos e que são interpolados pelo método do “vizinho mais próximo” às regiões onde não se tem valor medido.

Figura 10 - Localização do Terminal de Petróleo de São Sebastião (amarelo), bairros da cidade (vermelho), Porto de São Sebastião (verde), Córrego Mãe Isabel (azul claro) e Córrego do Outeiro (azul escuro).



Figura 11 - Locação dos poços de monitoramento- SCBR.



- **Visual MODFLOW**

Procurou-se fornecer como dados de entrada para os dois modelos os mesmos valores das propriedades do aquífero, assim como condições de contorno semelhantes. Do mesmo modo que o SCBR, antes da calibração do modelo são considerados:

- a) Primeiramente o georreferenciamento da área e a caracterização hidrogeológica e de elementos do ambiente (rios, lagos e obstáculos). Considerou-se células inativas toda a região do Oceano Atlântico (parte verde da Figura 12).
- b) Os bens a proteger são os mesmos que mencionados no SCBR.
- c) O próximo passo foi inserir no Visual MODFLOW os valores dos parâmetros de entrada de condutividade hidráulica, assim como os valores dos parâmetros de porosidade efetiva e porosidade total.
- d) Posteriormente foi feita a locação dos poços de monitoramento de águas subterrâneas na região de interesse (Figura 12).
- e) A partir da definição do modelo hidrogeológico conceitual, foram determinadas as condições de contorno do modelo, não se restringindo à área do terminal, sendo estendido até feições como corpos d'água. Para este modelo, é preciso informar o valor da carga hidráulica ao efetuar a composição das condições de contorno. Para a configuração geral do modelo, escolheu-se a representação de 1 camada numérica, ou seja, o Visual MODFLOW operando como modelo bidimensional, para comparar com os resultados do SCBR e a representação de 10 camadas numéricas, operando de maneira tridimensional.

Ao introduzir os parâmetros de condutividade hidráulica, foi possível criar uma interpolação contínua de condutividade, onde utilizou-se o método de interpolação “Inverso da distância”.

Respeitando o modelo conceitual e especificidade de cada modelo matemático, foi feito o máximo esforço para que as condições de contorno do Visual MODFLOW fossem as mais parecidas possíveis às especificadas no SCBR. Ainda assim, não alcançou-se o ajuste de maneira idêntica, porém semelhante.

Figura 12 - Localização dos poços de monitoramento - Visual MODFLOW.



4.5 CALIBRAÇÃO DOS PARÂMETROS DE FLUXO SUBTERRÂNEO

- **SCBR**

O procedimento de calibração adotado está inserido dentro das metodologias apresentadas pela normas ASTM D5981 – 2008 (Calibrating a groundwater flow model application) e ASTM D5490 – 2008 (Comparing groundwater flow model simulations to site-specific information), através de uma análise gráfica e uma análise residual dos valores simulados e medidos.

A análise gráfica qualitativa realiza um gráfico comparativo entre valores simulados (eixo y) e valores medidos (eixo x), com uma reta comparativa de 45° (que representa os valores simulados iguais aos valores medidos, ou seja, o valor do resíduo é zero). Quanto mais próximos os pontos estiverem da reta, menor será o resíduo entre valores simulados e medidos.

Na análise residual quantitativa, o resíduo (r_i) é calculado a partir da diferença entre valores simulados e medidos (Equação (27)):

$$r_i = h_i^{\text{simulada}} - h_i^{\text{medida}}$$

Equação (27)

Para análise dos valores, o SCBR também calcula a média residual (R) e seu desvio padrão (s), em que seu cálculo pode ser observado na Equação (28) e Equação (29), em que n é o número total de pontos utilizados:

$$R = \frac{\sum r_i}{n}$$

Equação (28)

$$s = \left[\frac{\sum (r_i - R)^2}{(n - 1)} \right]^{1/2}$$

Equação (29)

Considera-se ainda o valor da amplitude, que é a diferença entre o valor máximo e mínimo da carga hidráulica medida dentro do domínio de simulação, conforme Equação (30):

$$\text{Amplitude} = h_{\text{máxima}}^{\text{medida}} - h_{\text{mínima}}^{\text{medida}}$$

Equação (30)

O modelo está calibrado quando o quociente entre o desvio padrão residual e a amplitude não ultrapassar 15% (ANDERSON; WOESSNER, 1992).

O procedimento utilizado na calibração do SCBR dos parâmetros de fluxo subterrâneo para a área de interesse foi feita através do processo de “tentativa e erro”, que é comumente utilizado e pode ser realizado não só pelo ajuste dos parâmetros, mas também das condições de contorno e suas eventuais alterações ao longo do tempo, de forma a obter o melhor ajuste da resposta do modelo ao fenômeno observado (ANDERSON; WOESSNER, 1992). No caso desse trabalho, a calibração foi feita através de alterações nas condições de contorno e ajustes das condutividades hidráulicas. Os valores simulados de carga hidráulica foram comparados com os valores medidos em campo.

- **Visual MODFLOW**

Os critérios utilizados na definição do grau de precisão dos resultados simulados foram: a média residual (Equação (31)), a média residual absoluta (Equação (32)) e o desvio padrão, denominado pela sigla RMS (“root mean squared”) (Equação (33)), conforme descrito por Anderson e Woessner (1992), em que n é número total de pontos utilizados:

$$\text{Média residual: } \frac{\sum_{i=1}^n h_i^{\text{calculada}} - h_i^{\text{observada}}}{n}$$

Equação (31)

$$\text{Média residual absoluta: } \frac{\sum_{i=1}^n |h_i^{\text{calculada}} - h_i^{\text{observada}}|}{n}$$

Equação (32)

$$\text{RMS: } \frac{\sqrt{(\sum_{i=1}^n h_i^{\text{calculada}} - h_i^{\text{observada}})^2}}{n}$$

Equação (33)

Além dos critérios definidos acima, existe outro critério relativo à diferença de carga hidráulica, ou de concentração, no domínio do modelo, denominado neste trabalho de RMS normalizado (Equação (34)). Valores de erro RMS normalizado até 10% são considerados aceitáveis (BONGANHA et al. 2007).

$$\text{RMS normalizado: } \frac{\text{Erro RMS}}{h_{\text{máxima}}^{\text{observada}} - h_{\text{mínima}}^{\text{observada}}} \times 100$$

Equação (34)

O procedimento utilizado na calibração do Visual MODFLOW para a área de interesse foi realizado através de alterações nas condições

de contorno, pelo método de “tentativa e erro”. Como foi preciso a utilização do software *Surfer 11.0* para a interpolação das cargas hidráulicas e assim inseri-las no modelo, utilizou-se algumas tentativas para que a houvesse um acuramento entre a carga hidráulica calculada pelo software e àquela que foi inserida como condição de contorno no Visual MODFLOW.

Além disto foram realizadas ajustes nas condutividades hidráulicas e alterações nos métodos de interpolação dos valores das mesmas. Verificou-se que ao se escolher o método “Inverso da distância”, obteve-se uma melhor calibração do que os outros métodos.

4.6 ELABORAÇÃO DE CENÁRIO DE CONTAMINAÇÃO

Após os modelos serem considerados calibrados para a área de estudo, foi escolhido o cenário de contaminação. Esse cenário foi objeto de estudo para a dissertação de mestrado do Bruno Leonardo Colonese (COLONESE, 2010) e que será também utilizado para a elaboração do cenário de contaminação do presente estudo.

Como essa contaminação pode ser originada por algum vazamento nos tanques de armazenamento ou de algum duto do terminal, levou-se em consideração uma análise da planta dos tanques e dutos no terminal. O cenário crítico hipotético escolhido para exemplificar esse estudo foi definido como sendo um rompimento de duto transportando gasolina pura na Gleba D (Figura 8). A escolha se deve ao fato do ponto potencialmente contaminador estar localizado em uma área central do terminal e próximo à área residencial que faz divisa com o terminal.

Simulou-se então a pluma de contaminação do benzeno, que dentre os BTEX é o hidrocarboneto mais prejudicial à saúde humana.

4.7 CARACTERIZAÇÃO DA FONTE DE CONTAMINAÇÃO.

Para a caracterização da fonte de contaminação, foi considerado o produto benzeno transportado no duto, tanto em sua forma pura como em mistura com os BTEXs na gasolina pura. O benzeno é um composto monoaromático, que pode atacar o sistema nervoso central e é cancerígeno à saúde humana, além de apresentar alta mobilidade. Segundo critérios estabelecidos pela Portaria Nº 2.914/11 do Ministério da Saúde, a concentração máxima de benzeno na água é de $5\mu\text{g/L}$ (BRASIL, 2011).

Mesmo que nenhum tanque do terminal opere com benzeno puro armazenado (somente com gasolina e outros), essa escolha foi feita a fim de se fazer comparação com a gasolina pura, pois a simulação (fase

dissolvida) da mesma no SCBR leva em fundamento, além da solubilidade, a fração molar do benzeno na mistura (Lei de Raoult). Entretanto, ao se escolher somente o benzeno puro, sua simulação (fase dissolvida) ocorre levando em consideração a solubilidade do mesmo.

No SCBR, é possível simular um vazamento a partir de um volume estimado de um produto (gasolina pura, gasolina comercial brasileira, diesel, etc.). Como trata-se de um vazamento hipotético de benzeno, ou seja, não há a concentração de contaminante medida na região da fonte, o modelo de dissolução inserido no SCBR estima o valor da concentração do composto químico derramado em função da massa derramada e da geometria da fonte a partir da Lei de Raoult ($C_{w\ Raoult} = S_w \cdot X_i$). Neste modelo, o volume derramado passa para a zona de mistura e conforme se dissolve, há contribuição da fonte para a zona de mistura, através do processo de dissolução. Já no Visual MODFLOW a solubilidade é uma condição de contorno e o esgotamento da fonte não é calculado.

Portanto, foi simulado primeiramente no SCBR, o vazamento hipotético de 50 m³ de benzeno puro na zona saturada do solo. No benzeno puro, considera-se que a fração molar (X_i) é igual 1, uma vez que ele encontra-se na sua forma pura (não há outros componentes). Por este motivo, a concentração na fonte é constante no tempo e igual a sua solubilidade (1790 mg/L).

Tendo em vista que o Visual MODFLOW não controla a solubilidade da fonte, que é uma função da fração molar remanescente da fonte, como no SCBR, a simulação do benzeno puro no modelo ocorreu inserindo uma concentração na fonte igual a solubilidade do benzeno, 1790 mg/L, sabendo-se que, na fase dissolvida, a concentração de benzeno puro em cada volume de controle não pode ser maior que a solubilidade.

Posterior, foi simulado no SCBR o vazamento de 50 m³ de gasolina pura na zona saturada do solo. Neste caso, vale a lei de Raoult, onde a máxima concentração aquosa é igual ao produto da solubilidade ($S_w = 1790$ mg/L) pela fração molar de benzeno na mistura ($X_i = 0,007989$ mol/mol). Ou seja, a concentração na fonte varia ao longo do tempo e não pode ser maior que 14,30 mg/l ($C_{w\ Raoult} =$ solubilidade efetiva). Vale lembrar que os valores de solubilidade e fração molar usados na simulação constam no banco de dados do SCBR. No modelo SCBR a fração molar do composto químico no produto na zona de mistura é variável e é calculada para cada iteração conforme o composto se solubiliza e é transportado pelo fluxo. O Anexo A apresenta o cálculo da fração molar feito pelo SCBR na primeira iteração.

Logo, para fazer esta simulação no Visual MODFLOW, a concentração de benzeno na fonte foi estimada utilizando como dados de entrada os valores de saída do SCBR (Anexo B), já que o modelo não calcula a Lei de Raoult. Esta simulação compreende a concentração decaindo no tempo. Entretanto, para uma melhor descrição sobre o cálculo que o SCBR faz na fonte, simulou-se no mesmo gráfico o comportamento dinâmico de dissolução na fonte dos outros compostos presentes na gasolina pura (Tolueno, Etilbeneno e Xilenos).

E por fim, além desta concentração com os valores decaindo com o tempo, simulou-se no Visual MODFLOW a concentração constante no tempo e igual a solubilidade máxima do benzeno na gasolina pura ($C_{w Raoult} = 14,30 \text{ mg/L}$).

Os parâmetros de transporte e transformação dos contaminantes para simulação do cenário escolhido estão na Tabela 4 (SCBR) e Tabela 5 (Visual MODFLOW). Por causa da inexistência de dados de campo para a biodegradação do benzeno, adotou-se um valor mais conservador, conforme literatura. Ainda que o modelo matemático SCBR calcule o retardo, os valores dos coeficientes de partição (K_{oc}) existente no banco de dados do SCBR (versão 3.1), referente à última atualização (Fonte – EPA/Integrated Risk Information System), tanto para o benzeno (145 L/Kg), como para o etanol (1,0), geraram valores muito elevados de retardo não condizentes com os processos observados em campo. Desta forma, optou-se por utilizar os valores disponíveis na literatura para o cálculo do retardo (Apêndice A), de forma que o resultado da simulação se aproxime dos valores observados em campo.

Como o SCBR acomoda a Equação (16) no cálculo da dispersividade longitudinal, escolheu-se um valor até que fizesse coerência entre a dispersividade longitudinal e o comprimento da pluma. Em relação as dispersividades transversal e vertical, utilizou-se as Equações (17) e (18) para seu cálculo.

Tabela 4 - Parâmetros de transporte e transformação dos contaminantes - SCBR.

Parâmetro	Valor
dispersividade longitudinal da pluma (αL) ¹	8
dispersividade transversal da pluma (αt) ¹	0,8
volume derramado ¹	50 m ³
zona de mistura ²	2 m
modelo de fonte (benzeno) ³	Lei de Raoult
coef. de decaimento do benzeno ⁵	0,4ano ⁻¹
coef. de retardo do benzeno ⁴	2

Fonte: ¹(Hipóteses assumidas); ²(SCHNOOR, 1996); ³(PETROBRAS, UFSC e ESSS, 2015a); ⁴(Apêndice A); ⁵(WIEDEMEIER et al., 1999).

Tabela 5 - Parâmetros de transporte e transformação dos contaminantes – Visual MODFLOW.

Parâmetro	Valor
dispersividade longitudinal da pluma (αL) ¹	8
dispersividade transversal do pluma (αt) ¹	0,8
dispersividade vertical da pluma (αv) ¹	0,08
concentração de benzeno na fonte (benzeno puro)	1790 mg/L
concentração de benzeno na fonte (gasolina pura)	Anexo B
coef. de decaimento do benzeno (fase dissolvida) ⁴	0,0011 dia ⁻¹
coef. de decaimento do benzeno (fase livre)*	0
coeficiente de distribuição (Kd) ³	8,1E-08 L/mg

Fonte: ¹(Hipóteses assumidas); ²(SCHNOOR, 1996); ³(Apêndice A); ⁴(WIEDEMEIER et al., 1999). *Como a formulação do SCBR assume que a biodegradação ocorre somente na dissolvida, o coef. de decaimento ocorrendo na fase livre no Visual MODFLOW é igual a zero.

4.8 TECNOLOGIAS DE CONTENÇÃO E REMEDIAÇÃO DE PLUMAS

Finalmente, simulou-se tecnologias de contenção e remediação de plumas para ambos os modelos. A tecnologia simulada tem objetivo de não permitir a migração da pluma em direção a residências vizinhas e é apresentada nos itens 3.4.2 e 3.4.4., trata-se de uma barreira física (contenção) de baixa permeabilidade e de bombeamento (remediação) com poço totalmente e parcialmente penetrante.

Dois cenários foram estabelecidos:

- Somente com a barreira física de baixa permeabilidade.
- Com barreira física de baixa permeabilidade mais bombeamento. O SCBR considera que o poço é totalmente penetrante, ou seja, os valores do comprimento do filtro em relação à espessura saturada do aquífero são iguais. Entretanto, o Visual MODFLOW reconhece que o poço pode ser tanto totalmente como parcialmente penetrante (valor do comprimento do filtro é menor que à espessura saturada do aquífero). Dessa maneira, serão simulados no Visual MODFLOW um cenário ‘barreira mais poço totalmente penetrante’, e outro cenário ‘barreira mais poço parcialmente penetrante’.

Em ambos os modelos, a barreira foi colocada nas seguintes coordenadas UTM (458337,68; 7367588,15); (458435,48; 7367588,15); (458435,48; 7367468); (458337,68; 7367468). Considerou-se com 8 m de altura, compreendendo as camadas 2 a 6, no Visual MODFLOW. Além disso, o modelo tridimensional permite atribuir valores de condutividade hidráulica e espessura para a barreira. Foram inseridos os valores de 10^{-8} m/s e 0,2 m respectivamente.

A posição do poço foi através das coordenadas (458385,03; 7367530,98) e a taxa de bombeamento 50 m³/dia, nos dois modelos, sendo que o comprimento do filtro possui valor de 9 m quando ele é parcialmente penetrante e 16 m em totalmente penetrante. Este último é exatamente a espessura saturada do aquífero no ponto de instalação.

5 RESULTADOS

5.1 CONDIÇÕES DE CONTORNO

- **SCBR**

Para o ajuste do domínio de simulação no SCBR, observou-se, através da Figura 11 que existem algumas áreas sem a presença de poços de monitoramento para exercer a função de condição de contorno. Por esse motivo, foi preciso um esquema de posicionamento do domínio de simulação, onde os poços estivessem de acordo com o modelo numérico do SCBR para definição do domínio de simulação, fazendo-se necessário um domínio com rotação de 334° . Caso o modelo fosse ajustado para um domínio com rotação 0° (Figura 13), quase não haveria poços de monitoramento nos limites do domínio, fazendo com que o modelo não convergisse. As instalações de poços nessas áreas também evita essas extrapolações. O domínio de simulação ajustado tem dimensões de 1280m x 1835m (Figura 14).

Figura 13 - Domínio de simulação (1481m x 1733m) – SCBR.



Figura 14 - Domínio de simulação ajustado (1280m x 1835m) – SCBR.



- **Visual MODFLOW**

Considerou-se que existem feições naturais que possam ser empregadas como condições de contorno na porção leste do modelo. Para isso, foi necessário entrar célula por célula, de carga fixa igual a zero, por todo seu perímetro, uma vez que considerou-se o mar (Oceano Atlântico) como uma condição de carga hidráulica especificada constante (condição do tipo 1 ou Dirichlet). Para representar a carga hidráulica ao longo das porções oeste, norte e sul do modelo, utilizou-se o software *Surfer 11.0* para criação de mapas, onde fez-se interpolação das mesmas através do método krigagem (Figura 15). Os valores destas interpolações foram inseridas, célula a célula, em todo contorno do modelo, como condições de carga especificada variada (condição do tipo 1 ou Dirichlet) (Figura 16). A Figura 17 representa o mapa 3D das condições de contorno.

Figura 15 – Interpolação de cargas hidráulicas - Surfer 11.0.

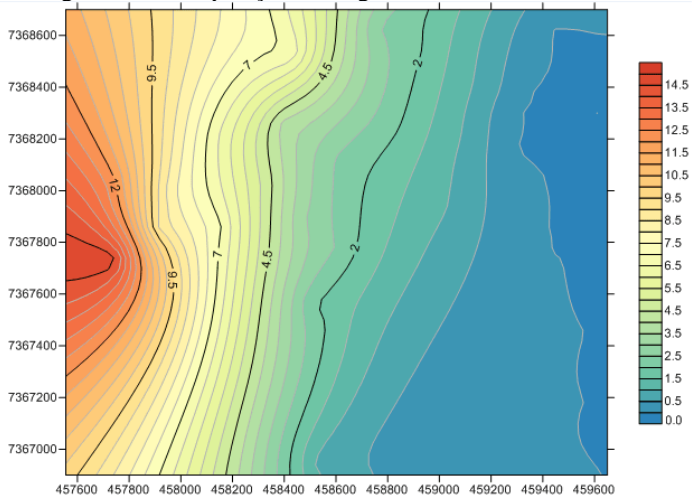


Figura 16 - Condições de contorno - Visual MODFLOW (1 camada).

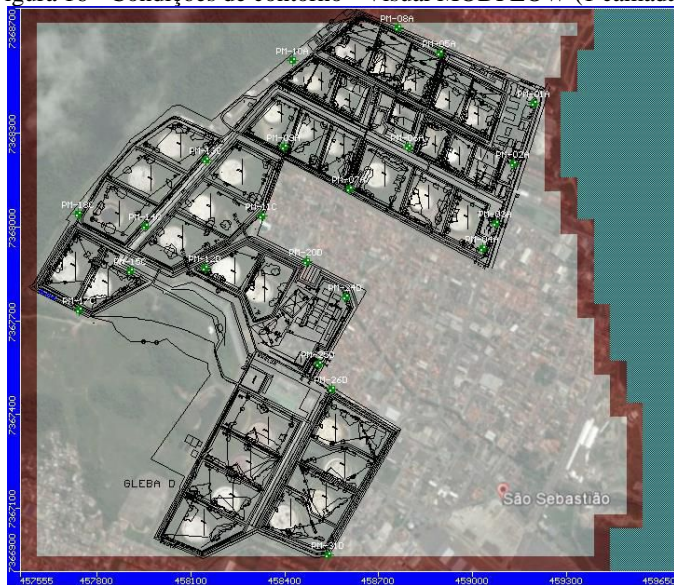
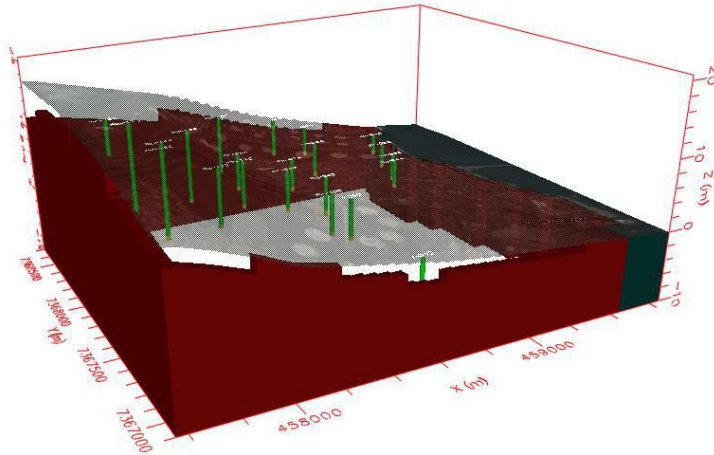


Figura 17 - Condições de contorno, 3D - Visual MODFLOW (10 camadas).



Devido à singularidade de cada modelo (SCBR e Visual MODFLOW), o estabelecimento de condições de contorno idênticas não foi possível, mas ficaram bastante próximas. O domínio de simulação do modelo SCBR é configurado em função da localização de poços de monitoramento com cargas hidráulicas conhecidas, o que representa um problema se o domínio de interesse for maior e não houver medições de carga hidráulica. Internamente o SCBR interpola os valores das cargas hidráulicas e aloca automaticamente os valores de condição de contorno tipo 1 ao longo de todas as fronteiras baseada nesta interpolação. Isto traz um problema para representar o efeito de períodos de taxas de recarga mais ou menos altas, pois isto representaria uma variação das cargas hidráulicas que não é considerada no modelo. Já no Visual MODFLOW é possível realizar o mesmo procedimento, ou seja, interpolar as cargas através de um programa externo, como *Surfer*, e alocar condições de contorno tipo 1 ao longo de todas as bordas. Porém este não é um procedimento recomendado e o Visual MODFLOW permite a utilização de condições de contorno tipo fluxo pré-determinado, gradiente pré-determinado ou cargas, permitindo assim representar melhor as feições hidrogeológicas.

Por outro lado, o SCBR atribui valores para o contorno a partir dos dados fornecidos de carga hidráulica dos pontos de análise, áreas de análise, rios e lagos (com carga hidráulica e vazão conhecida). Se a geometria do domínio de simulação não coincidir com estas cargas, pode haver extrapolações numéricas excessivas na hora de calcular o mapa de

fluxo subterrâneo. Além do mais, o modelo apresenta dificuldades quando se quer utilizar como contorno, o mar por exemplo. Neste sentido, o Visual MODFLOW apresenta maior autonomia para definição dos contornos.

5.2 CALIBRAÇÃO DO FLUXO SUBTERRÂNEO

• SCBR

A calibração no SCBR foi feita através de ajustes nas condições de contorno (domínio de simulação), conforme item 5.1 e em ajustes nas condutividades hidráulicas dos poços, onde determinou-se os parâmetros de fluxo da água subterrânea na área de interesse. Foram comparados os valores de carga hidráulica simulado e medidos, em função dos parâmetros de porosidade efetiva e condutividade hidráulica. Como não foi levantado a porosidade efetiva para cada poço, adotou-se um valor de 21% da literatura (FETTER, 1994).

Para ajudar no processo de calibração, foi feito um refinamento de malha. Inicialmente utilizou-se um refinamento menor (90 linhas e 50 colunas). O segundo refinamento foi feito com uma malha de 200 linhas e 240 colunas (Figura 18), onde observou-se uma melhor calibração. A Tabela 6 apresenta as coordenadas da área de simulação e a configuração da malha de cálculo. Com o modelo calibrado, pode-se definir o modelo de fluxo subterrâneo.

A Figura 19 representa a curva de calibração ajustada com os dados fornecidos, enquanto que os dados da análise residual quantitativa encontram-se na Tabela 7.

Tabela 6 - Coordenadas da área de simulação e configuração da malha do modelo SCBR.

Origem da área de simulação		Largura	Altura	Rotação	Malha de cálculo	
X(m)	Y(m)	(m)	(m)	(°)	i	j
457346.211	7367301.1	1280	1835	334	200	240

Figura 18 - Malha estabelecida para as simulações realizadas com o SCBR.

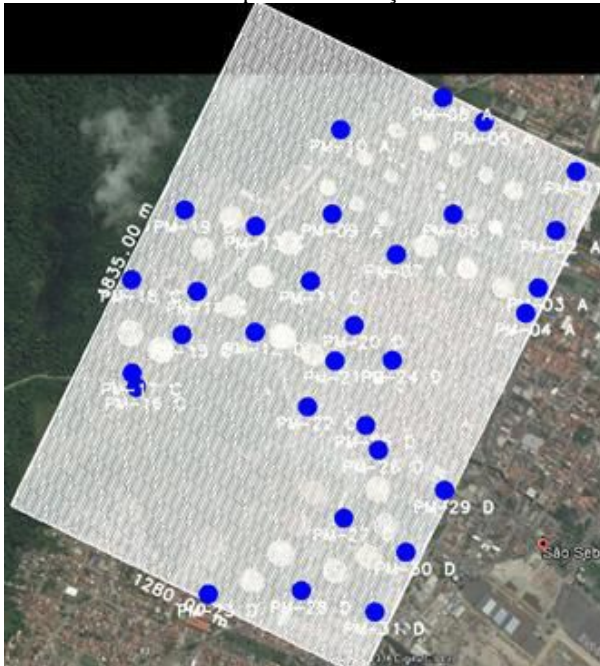


Figura 19 - Curva de ajuste de simulação numérica calibrada com o SCBR.

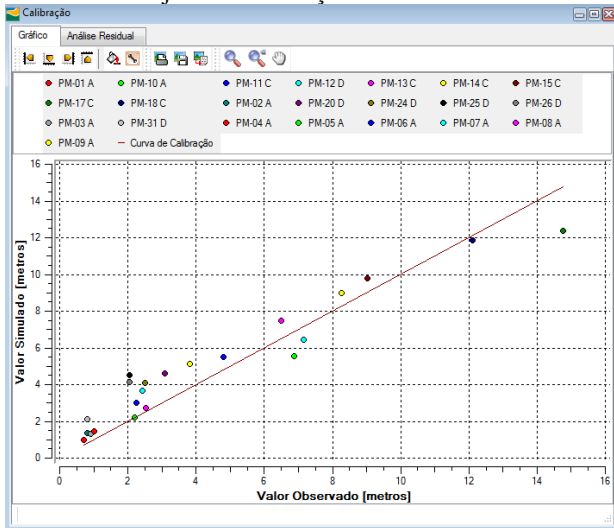


Tabela 7 - Análise residual quantitativa após calibração – SCBR.

	Domínio de Simulação (1481 x 1733)	Domínio de simulação ajustado (1280 x 1835)
Resíduo mínimo		0.0440761
Resíduo máximo		2.4769357
Amplitude		14
Média Residual	Não convergiu	0,582
Desvio Padrão		1.0822
Quociente (desvio padrão/amplitude)		7.73%

Nesse estudo, o modelo foi considerado calibrado com 7,73%, pois o quociente (desvio padrão/amplitude) é inferior a 15%.

- **Visual MODFLOW**

A calibração do modelo foi realizada por meio de ajustes nas condições de contorno e nas condutividades hidráulicas até a existência de uma relação satisfatória entre os valores de carga hidráulica observadas e aquelas calculadas pela simulação. O método “Inverso da distância” de interpolação dos valores de condutividade hidráulica foi aquele que apresentou a calibração mais precisa.

O modelo foi discretizado com o mesmo número de malhas que o SCBR, 200 linhas e 240 colunas (Figura 20), em 1 e 10 camadas. Como o domínio das condições de contorno abrange uma área distante da região de interesse, realizou-se o refinamento da malha apenas no entorno da fonte de contaminação (círculo vermelho na Figura 20). As Tabelas 8 e 9 apresentam as coordenadas da área de simulação e a configuração da malha de cálculo. Através destes passos, o modelo foi considerado calibrado.

A Figura 21 representa as curvas de calibração com os valores de carga hidráulica reais e as calculadas para o modelo com o Visual MODFLOW. Os dados da análise residual quantitativa encontram-se na Tabela 10.

Tabela 8 - Coordenadas da área de simulação e configuração da malha do modelo Visual MODFLOW- 1 camada.

Origem da área de simulação		Nº de camadas	Prof. máxima do modelo (m)	Malha de cálculo	
X(m)	Y(m)			i	j
457555	7366900	1	20	200	240

Tabela 9 - Coordenadas da área de simulação e configuração da malha do modelo Visual MODFLOW - 10 camadas.

Origem da área de simulação		Nº de camadas	Prof. máxima do modelo (m)	Malha de cálculo	
X(m)	Y(m)			i	j
457555	7366900	10	20	200	240

Tabela 10 - Análise residual quantitativa após calibração - Visual MODFLOW.

	Método "Krigagem"	Método "Inverso da distância"
Resíduo mínimo	3,413	0,127
Resíduo máximo	0,099	3,283
Amplitude	14.04	14,042
Média Residual	1,461	0,214
Desvio Padrão (RMS)	2,022	1,179
RMS normalizado (desvio padrão/amplitude)	14,402%	8,396%

Figura 20 - Malha estabelecida para as simulações realizadas com o Visual MODFLOW.

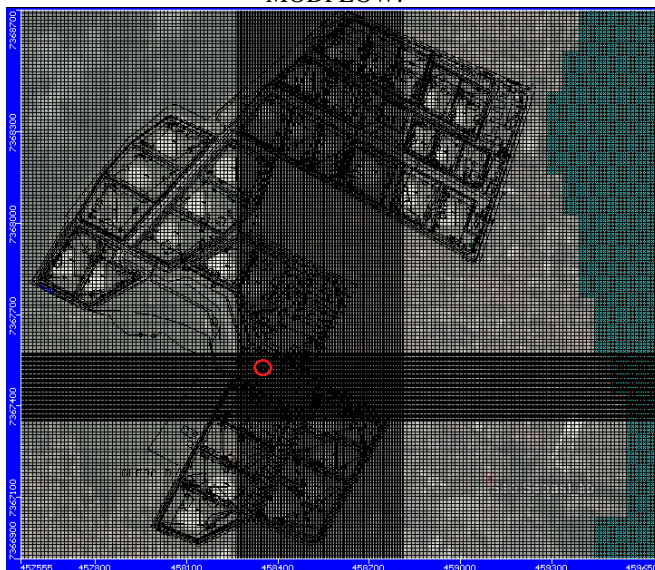
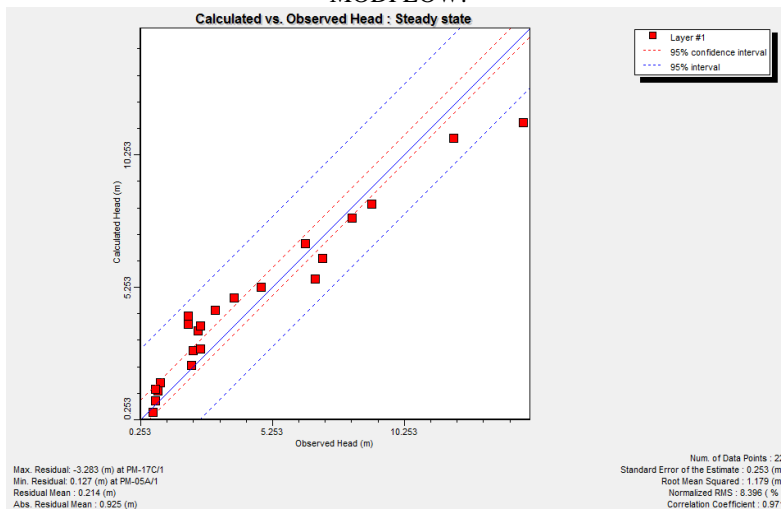


Figura 21 - Curva de ajuste da simulação numérica calibrada com o Visual MODFLOW.



Ao se utilizar o método de “Krigagem” verificou-se um RMS normalizado acima do aceitável. Portanto, o modelo foi considerado calibrado com RMS normalizado de 8,396% (inferior a 10%) a partir do método de interpolação “Inverso da distância”.

Como observado nas Figuras 19 e 21, os gráficos de calibração gerados pelo Visual MODFLOW e SCBR são semelhantes.

A área com maior divergência entre os valores, tanto no gráfico do SCBR quanto do Visual MODFLOW engloba os poços de monitoramento 17C, 26D, 10A, 24D, 25D e 20D. As peculiaridades hidrogeológicas e litológicas da Gleba D, onde encontra-se a maioria dos poços com valores divergentes, como a influência de maiores profundidades da cobertura detrítica pelas atividades de corte para o nivelamento da área, como sugerido por BRAIN Tecnologia Ltda, pode ser um dos motivos dessa discordância.

5.3 SIMULAÇÃO DO FLUXO SUBTERRÂNEO

- **SCBR**

Com o modelo calibrado, podê-se apresentar o mapa potenciométrico no SCBR, conforme Figura 22. Os valores calculados de carga hidráulica variaram dentro de uma faixa de 0,54 a 14,62 m. Nota-se que a direção vai de oeste para leste, ou seja, dos maiores valores para os menores.

O mapa da direção de fluxo subterrâneo e campo de velocidade é mostrado na Figura 23. As velocidades de fluxo subterrâneo calculadas variaram dentro de uma faixa de 1,40 m/ano a 133,25 m/ano. Sendo que os menores valores são encontrados na porção nordeste e os maiores valores na porção leste do local de estudo.

Figura 22 - Mapa potenciométrico - SCBR.

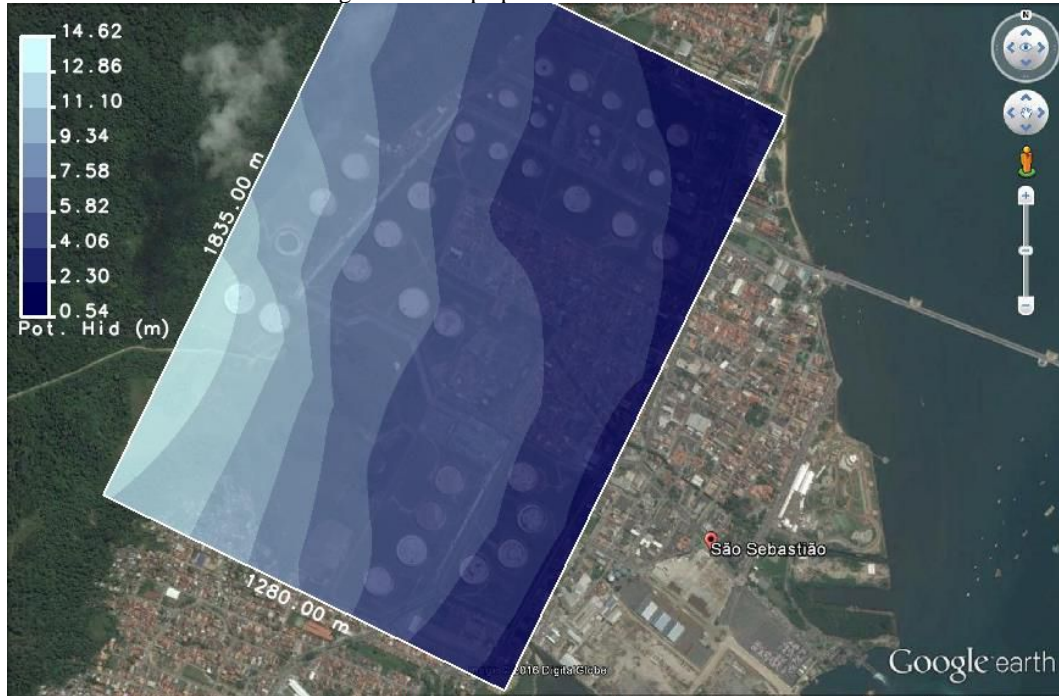
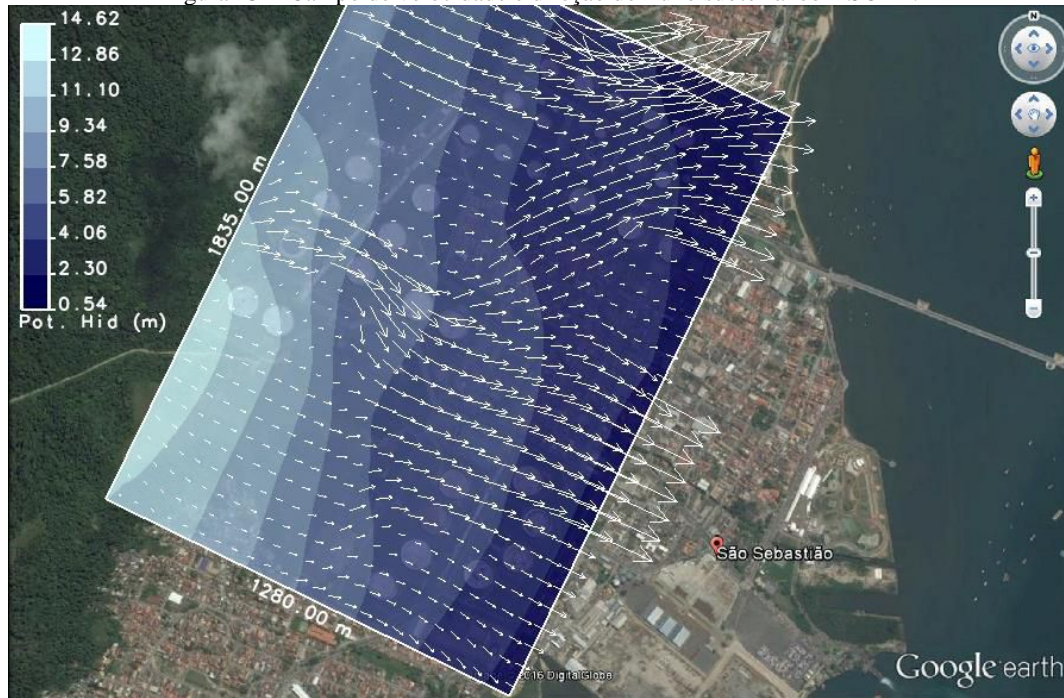


Figura 23 - Campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo – SCBR.



- **Visual MODFLOW**

A Figura 24 apresenta o resultado da distribuição de carga hidráulica de 1 em 1 metro no modelo. Os valores calculados de carga hidráulica variaram dentro de uma faixa de 0 a 14,90 m. Estes valores foram obtidos do Visual MODFLOW operando como modelo bidimensional, pois neste caso foi representado somente 1 camada numérica. Isto para comparar com os resultados do SCBR. A Figura 25 mostra a visualização da simulação do campo de velocidade e direção do fluxo em perfil para 1 camada.

A mesma simulação foi feita de maneira tridimensional, utilizando-se 10 camadas numéricas. Em planta, o mapa potenciométrico e os vetores de direção de fluxo são mostrados na Figura 26. Nota-se que os equipotenciais em planta são bem similares ou iguais ao caso de 1 camada numérica. Porém, quando visualizado em perfil, nota-se fluxos ascendentes (vermelho) nas áreas de recarga e descendentes (azul) nas áreas de descarga perto do mar (Figura 27)

As velocidades de fluxo subterrâneo calculadas variaram dentro de uma faixa de 2,22 m/ano a 123,1 m/ano. Sendo que os menores valores são encontrados na porção sul e os maiores valores na porção nordeste do local de estudo. Observa-se ainda que as águas subterrâneas têm como zonas de descarga principalmente o Oceano Atlântico e a região do sul da área.

Figura 24 - Campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo – SCBR.

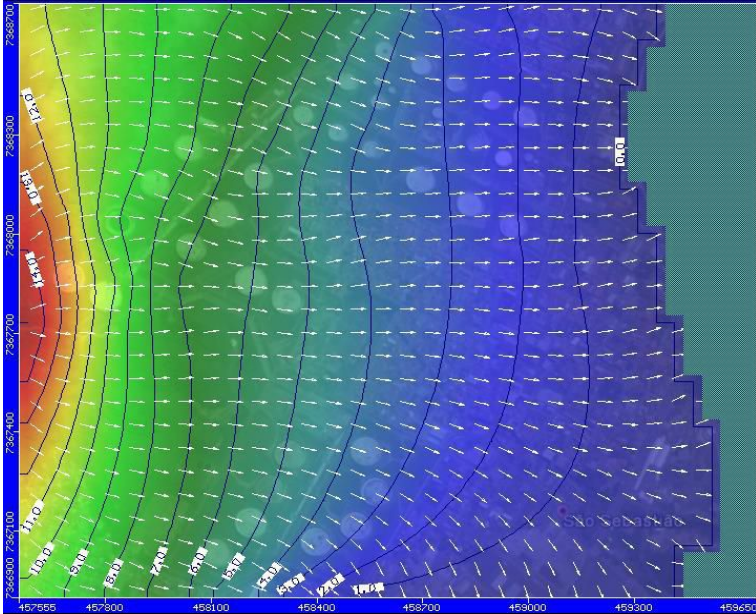


Figura 25 - Perfil do campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo - Visual MODFLOW (1 camada).

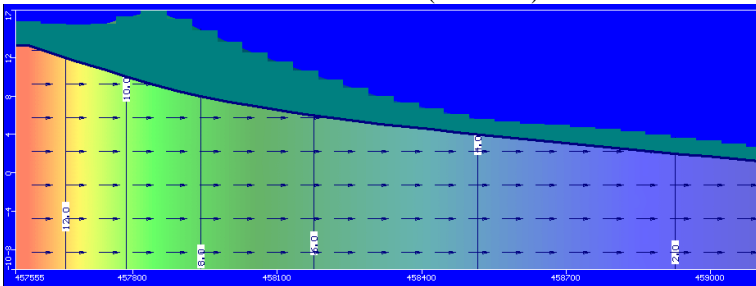


Figura 26 - Mapa potenciométrico, campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo - Visual MODFLOW (10 camadas - Layer 4).

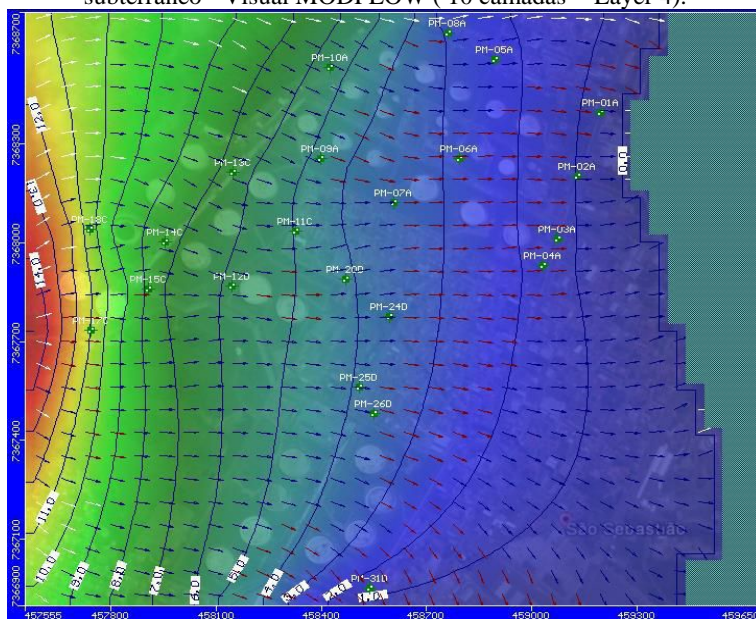
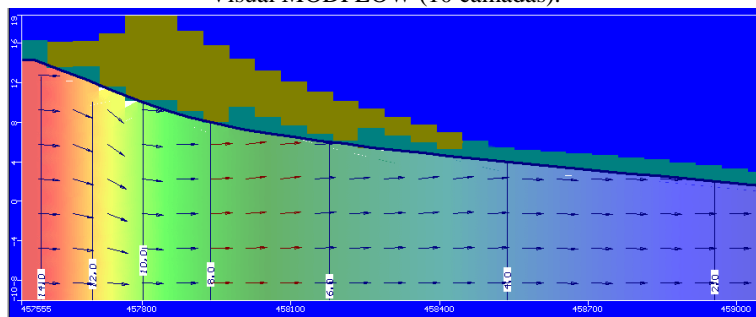


Figura 27 - Perfil do campo de velocidade e direção do fluxo subterrâneo - Visual MODFLOW (10 camadas).



Observa-se que as regiões onde encontram-se as maiores e menores velocidades do fluxo subterrâneo para ambos os modelos são diferentes, conforme mencionado acima. Essa diferença pode ser causada pelo tamanho do domínio de simulação, menor no SCBR do que no Visual MODFLOW. Ou seja, o modelo tridimensional abrange uma área maior para calcular suas velocidades

Em razão disso, para comparar as velocidades entre os dois modelos, foram escolhidos 4 pontos como poços de observação. Estes poços estão localizados próximo a fonte de contaminação (item 5.3), na região onde haverá a simulação da pluma (Figura 28). A escolha se deve para a verificação de diferenças significativas de velocidades nesse local, que pode alterar também a velocidade da pluma. Através da Tabela 11, verifica-se que velocidades do fluxo subterrâneo nos poços observados são parecidas.

Figura 28 - Localização dos poços de observação.

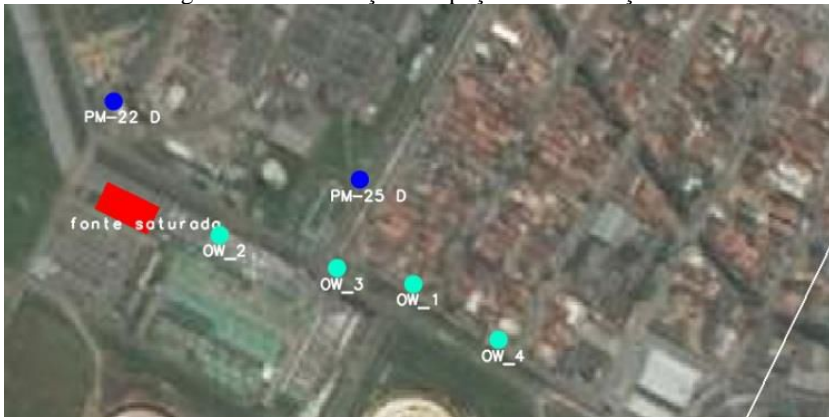


Tabela 11 - Velocidades do fluxo subterrâneo nos poços observados.

Pontos	SCBR (m/ano)	V. MODFLOW (m/ano)	Diferença (SCBR/MODFLOW%)
OW_1	25,50	21,92	16,33
OW_2	23,62	24,15	2,19
OW_3	21,67	22,68	4,45
OW_4	29,32	22,58	29,85

Do mesmo modo, os mapas potenciométricos para ambos os modelos são semelhantes, entretanto suas diferenças podem ser causadas pelas diferenças metodológicas para a determinação das condições de contorno do domínio de simulação. No modelo SCBR, os valores das cargas hidráulicas das condições de contorno são dados pelas cargas dos poços de monitoramento que estão posicionados sobre o domínio de simulação e/ou pela extrapolação (Krigagem) das cargas hidráulicas que estão no interior do domínio e são utilizadas para se obter valores de carga hidráulica para locais onde não foi possível se obter um valor medido e caracterizar a região. Já no Visual MODFLOW, as cargas hidráulicas que foram fornecidas nas condições de contorno foram obtidas pela interpolação (*Surfer 11.0*) com o método de interpolação inverso da distância.

Todavia, o Visual MODFLOW possui uma melhor resolução para o cálculo do fluxo subterrâneo pelo fato do modelo ser tridimensional. Por este motivo, é possível visualizar os fluxos ascendentes e descendentes na simulação.

5.4 SIMULAÇÃO DA PLUMA DE CONTAMINAÇÃO

- **SCBR**

Conforme descrito no item 4.6, foi simulada a pluma de contaminação do benzeno originada a partir de um rompimento de duto na Gleba D.

A Figura 29 ilustra o comprimento da pluma simulada com benzeno puro em 5, 10 e 15 anos. Sendo que aos 5 anos a pluma já estaria migrando em direção às residências e fora dos limites do terminal, com concentração máxima acima do valor permitido de 5 $\mu\text{g/L}$ e comprimento de 258 m. Em um tempo igual a 10 e 15 anos, a pluma continua migrando em direção as residências com comprimento de aproximadamente 346 e 430 m, respectivamente.

Do mesmo modo, a Figura 30 ilustra o comprimento da pluma de benzeno presente na gasolina pura em 5, 10 e 15 anos. Sendo que aos 5 anos a pluma já estaria migrando em direção às residências e fora dos limites do terminal com concentração máxima acima do valor permitido de 5 $\mu\text{g/L}$ e comprimento de 250 m. Em 10 anos a pluma atinge 335 m e em 15 anos aproximadamente 412 m.

Figura 29 - Pluma de contaminação do benzeno puro após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento – SCBR.

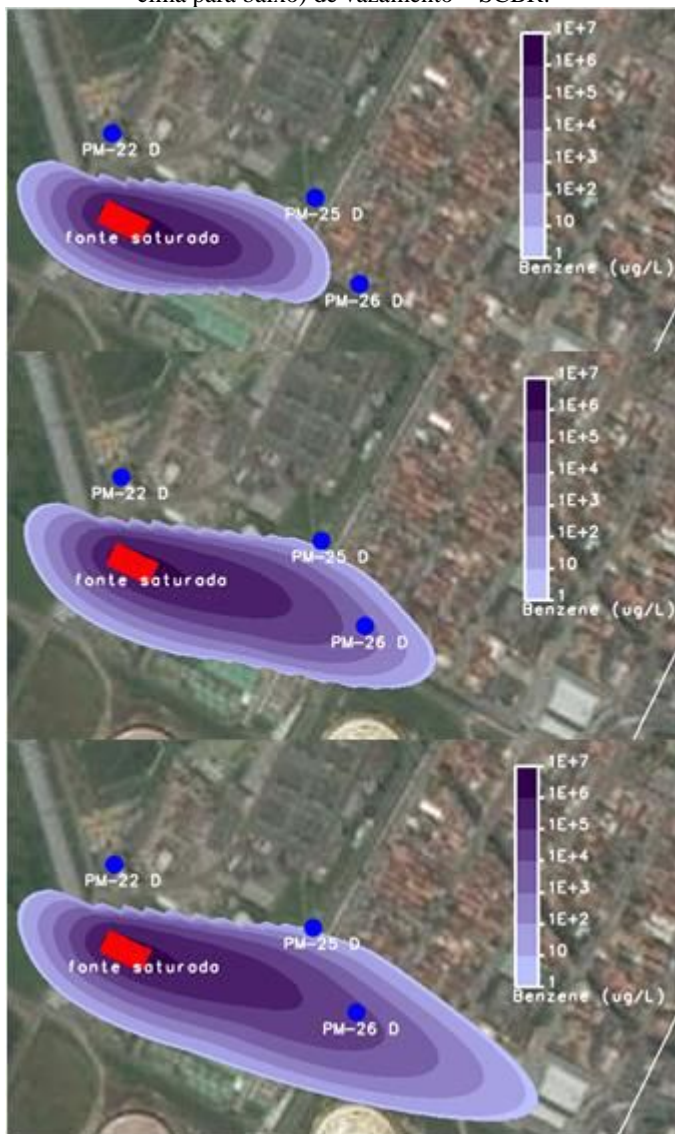
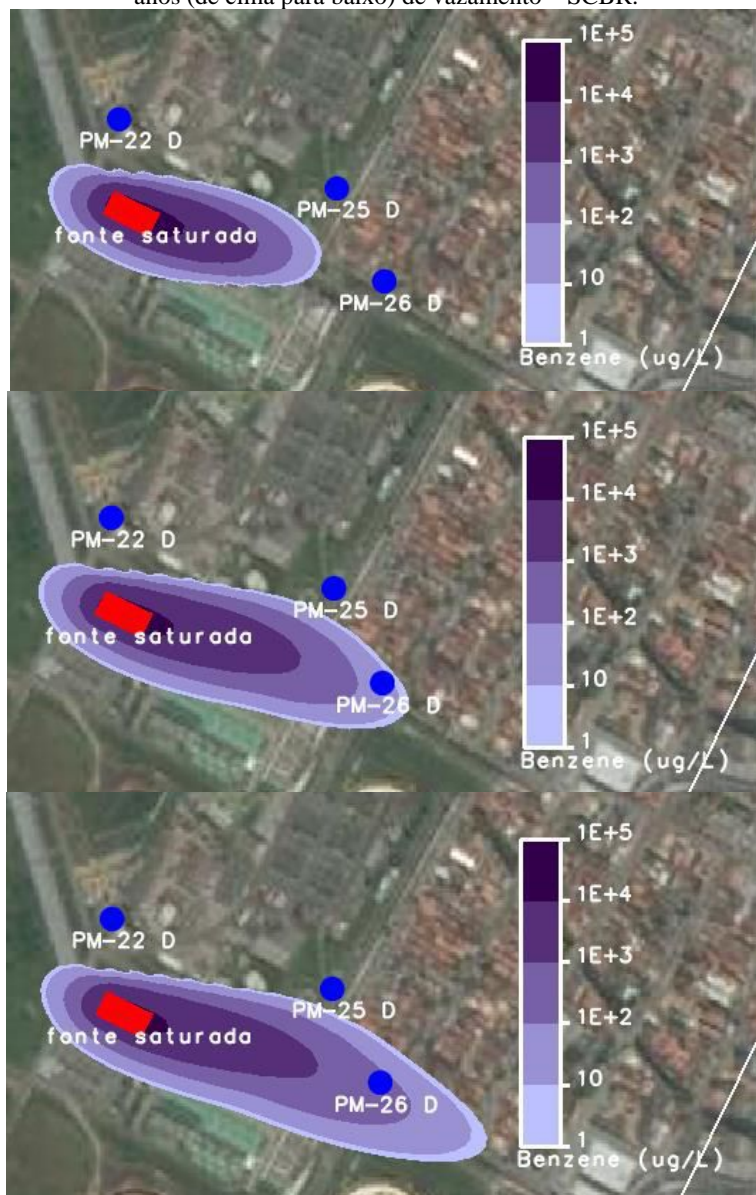


Figura 30 - Pluma de contaminação do benzeno na gasolina pura após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento – SCBR.



- **Visual MODFLOW**

As saídas das simulações de transporte no Visual MODFLOW para benzeno puro está representada na Figura 31. Aos 5 anos a pluma estaria com comprimento por volta de 315 m e já estaria migrando em direção às residências; Aos 10 e 15 anos seu comprimento é de 422 e 500 m respectivamente.

Do mesmo modo, a Figura 33 ilustra o comprimento da pluma de benzeno presente na gasolina pura em 5, 10 e 15 anos. Em 5 anos seu comprimento seria aproximadamente 246 m, enquanto que em 10 e 15 anos a pluma atingiria 337 m e 380 m de comprimento, respectivamente.

Para a visualização das simulações de transporte em perspectiva, foi gerado o mapa tridimensional nos planos X,Y e Z do modelo (Figuras 32 e 34).

Em relação à extensão das plumas de benzeno puro e benzeno na gasolina pura, o limite adotado para o delineamento das plumas foi baseado nos limites de potabilidade estabelecidos pela Portaria N° 2.914/11 do Ministério da Saúde, ou seja, 5 μ g/L (BRASIL, 2011).

Figura 31 - Pluma de contaminação do benzeno puro após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento - Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2).

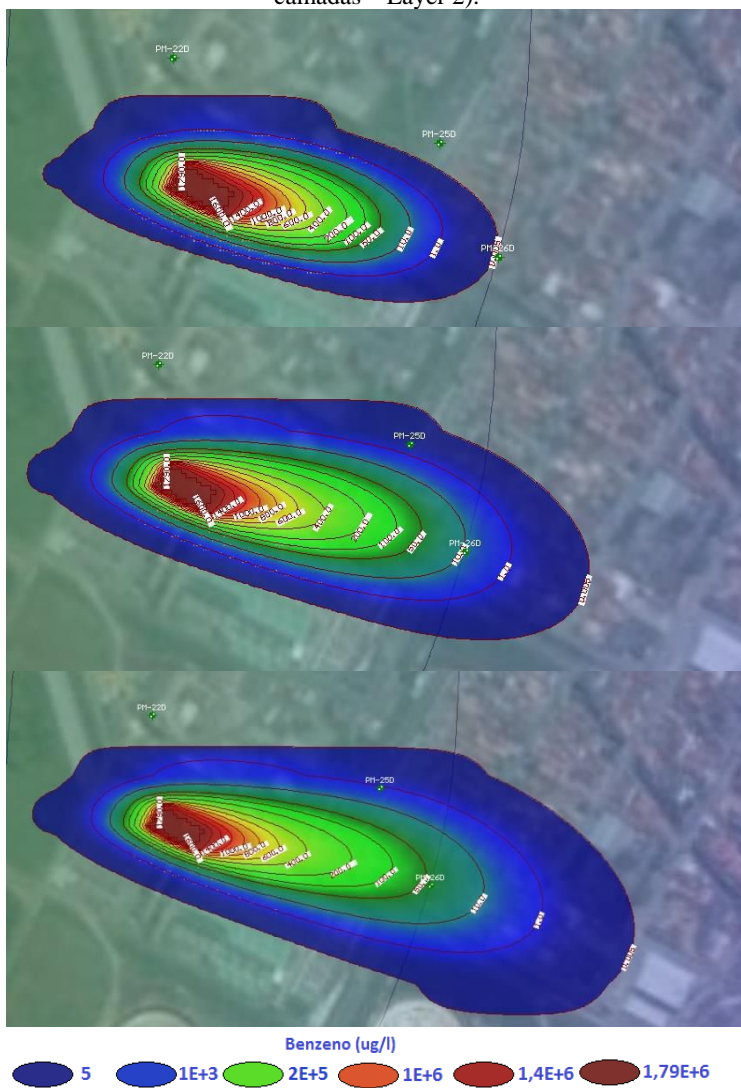


Figura 32 - Pluma de contaminação do benzeno puro após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento , 3D - Visual MODFLOW (10 camadas).

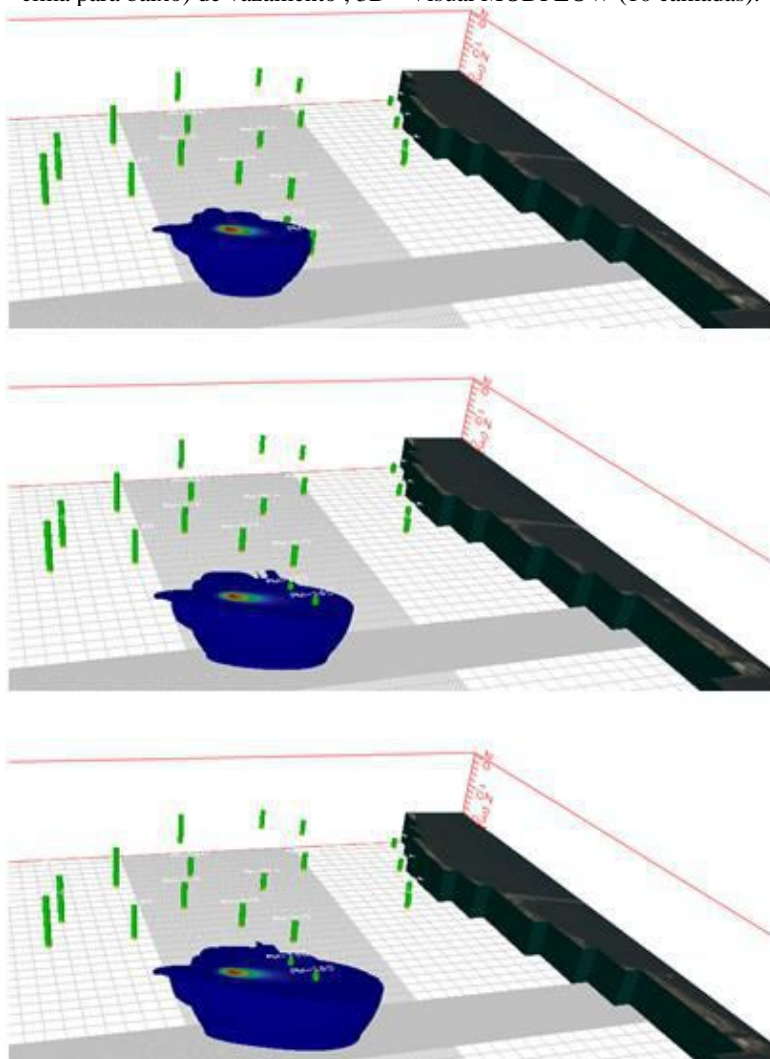


Figura 33 - Pluma de contaminação do benzeno na gasolina pura após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento – Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2).

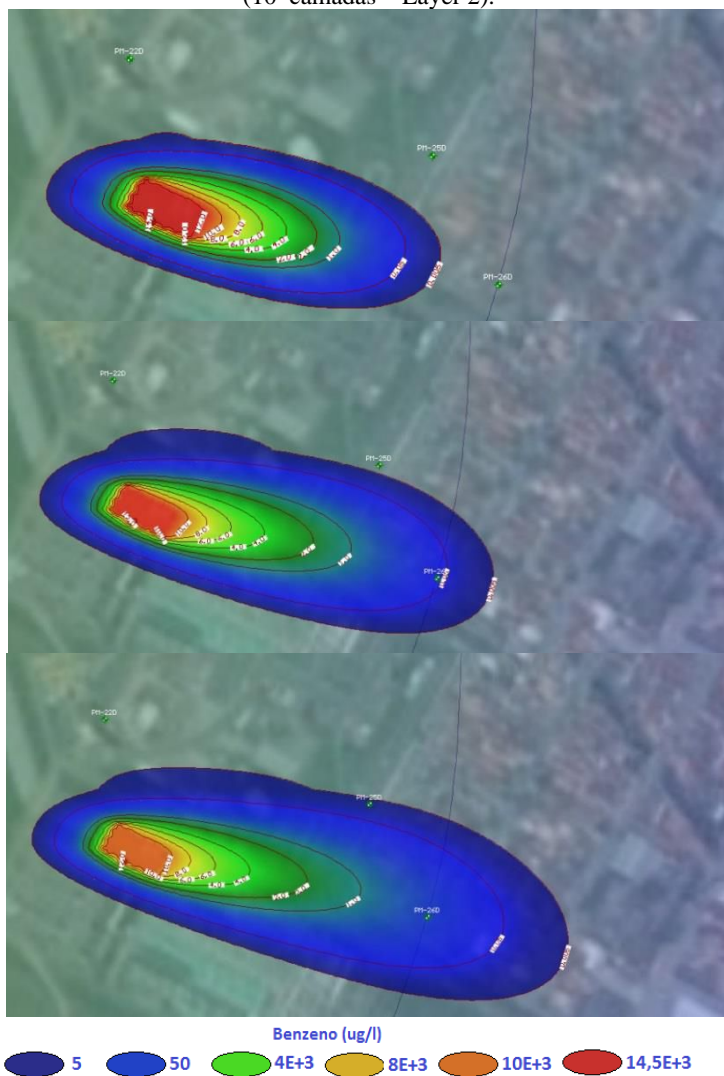
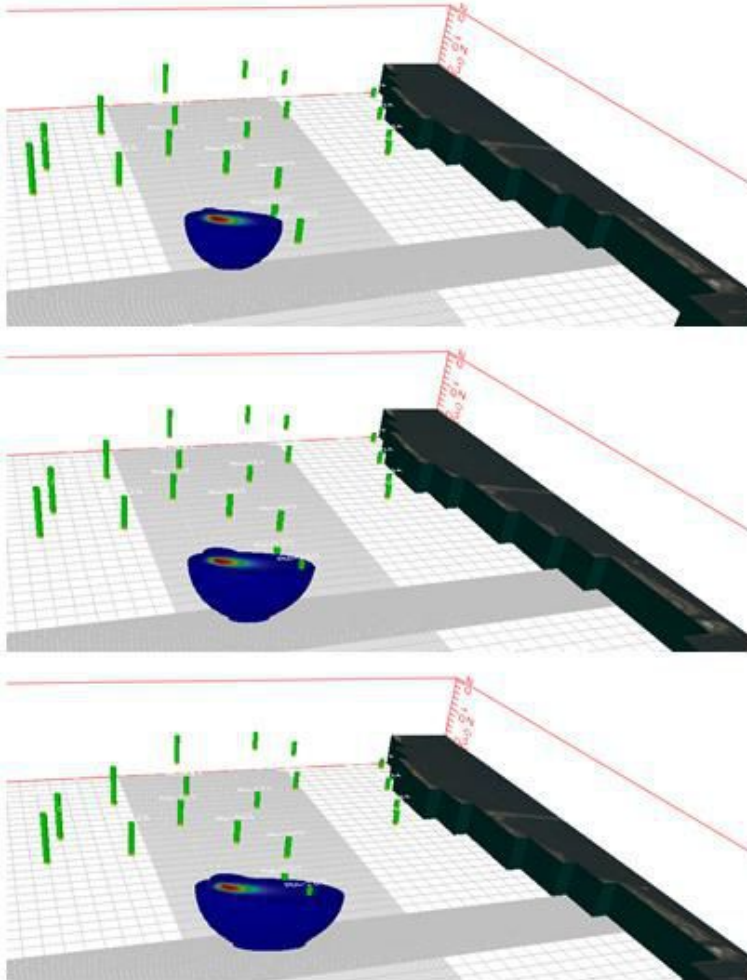


Figura 34 - Pluma de contaminação do benzeno na gasolina pura após 5, 10 e 15 anos (de cima para baixo) de vazamento, 3D – Visual MODFLOW (10 camadas).



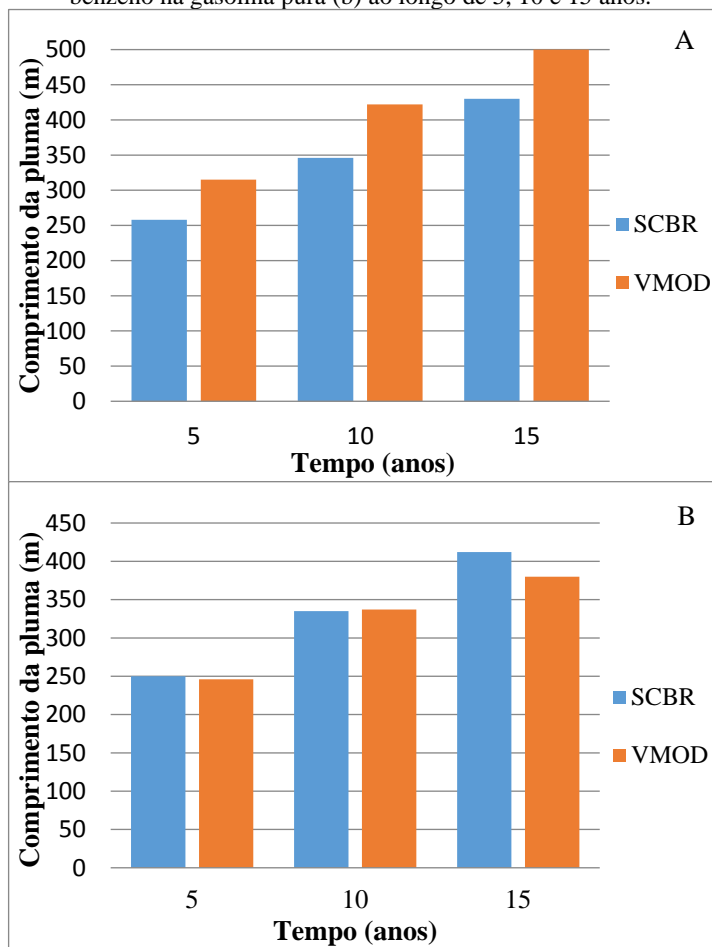
Ao observar as plumas no Visual MODFLOW, nota-se que as mesmas apresentam maior dispersão lateral do que no SCBR, tanto para benzeno puro como para o benzeno na gasolina pura. Essa dispersão também é notada no comprimento das plumas, principalmente nas simulações com benzeno puro. Foram testados diferentes métodos e

esquemas numéricos: diferenças finitas (DF), método híbrido e método das características (MOC) e diminuição da variação total (TVD), para simular o transporte e atenuação de hidrocarbonetos sob condições de fluxo estacionário, utilizando o MT3DMS para simulação. Observou-se menor dispersão numérica dos resultados quando aplicado o método diminuição da variação total (TVD), porém não o suficiente para que não houvesse uma dispersão considerável.

A Figura 35 apresenta o gráfico com as variações dos comprimentos das mesmas nos dois modelos, no tempo adotado.

De acordo com as variações apresentadas na Figura 35, os dois modelos comportaram-se de forma semelhante, obtendo maiores diferenças nas simulações com benzeno puro, onde o Visual MODFLOW apresentou maiores extensões de pluma.

Figura 35 - Variação do comprimento das plumas de benzeno puro (a) e benzeno na gasolina pura (b) ao longo de 5, 10 e 15 anos.



As Figuras 36 e 37 apresentam a variação da concentração no tempo, do benzeno puro e do benzeno na gasolina pura, respectivamente, em 2 poços de observação (OW_2 e OW_4), o primeiro localizado mais próxima à fonte e o segundo ao final da pluma (Figura 28). Vale lembrar que a unidade usada para a confecção dos gráficos de concentração foi o mg/L (e não µg/L como nas legendas das imagens), pela facilidade de sua leitura.

Figura 36 – Concentração x Tempo: benzeno puro - OW_2 (a) e OW_4(b)

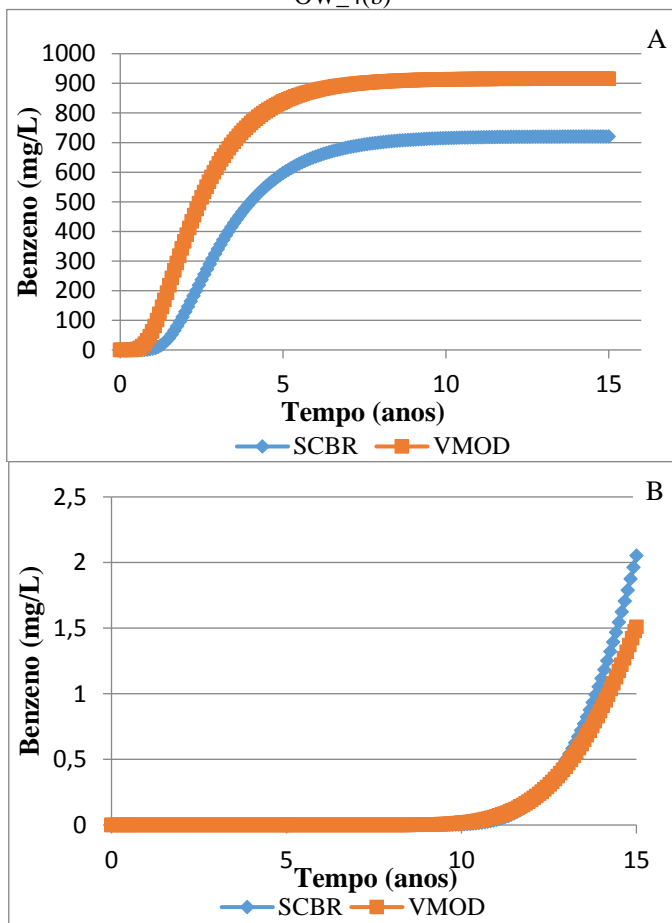
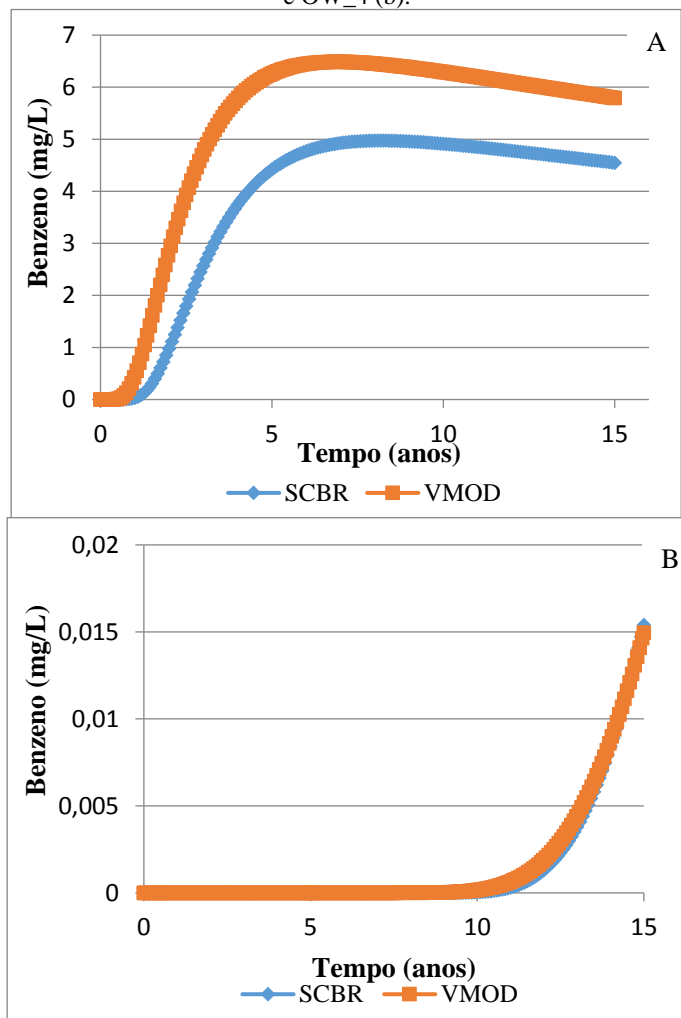


Figura 37 - Concentração x Tempo: benzeno (gasolina pura) - OW_2 (a) e OW_4 (b).



Conforme discutido anteriormente, o principal mecanismo responsável pela transferência de massa de contaminantes da fonte para a água subterrânea é o processo de dissolução. Em áreas impactadas por derramamentos de gasolina a dissolução dos BTEX é descrita pela Lei de Raoult, em que a concentração na fase aquosa é igual à fração molar deste

composto na gasolina, multiplicado pela solubilidade deste composto em água. No caso do SCBR, se o usuário não tiver medidas de concentração na fonte, o próprio modelo calcula a concentração na fonte em função da massa derramada e da geometria da mesma, utilizando a Lei de Raoult. Porém, o Visual MODFLOW não controla a dissolução, e como entrada de dados no modelo é preciso um valor de concentração na fonte. Nesse aspecto, o SCBR apresenta boa resolução em termos de fonte de contaminação, tornando-se mais eficiente que o Visual MODFLOW.

Através do procedimento descrito na metodologia deste trabalho (item 4.7), como o Visual MODFLOW utiliza como concentração na fonte para o benzeno, na forma de gasolina pura, os dados de saída do gráfico de concentração *versus* tempo do SCBR, os gráficos em relação ao SCBR mostraram-se satisfatórios em termos de concentração ao longo do tempo nos pontos observados. A concentração observada no poço OW_4 (Figura 37b) obteve uma semelhança maior em comparação aos dois modelos do que no OW_2 (Figura 37a). Mesmo assim, essas diferenças tornam-se irrisórias em uma escala de mg/L. Deve-se contudo notar, que essas diferenças podem ter acontecido devido as particularidades em termos resolução de fonte para cada modelo, conforme descrito acima.

Entretanto, para a simulação do benzeno em sua forma pura a concentração do volume de controle não pode ser maior que a sua solubilidade (1790 mg/L), já que considera-se que a fração molar (X_i) do composto na mistura é igual a 1, uma vez que o composto encontra-se em sua forma pura (não há outros componentes). Da mesma forma, os gráficos de concentração em relação ao tempo mostraram-se aceitáveis ao se comparar ambos os modelos. Para o benzeno puro, as maiores diferenças de concentrações encontradas estão no poço OW_2 (Figura 36a).

Quando trata-se do benzeno como parte da composição da gasolina pura, o gráfico da concentração ao longo do tempo na fonte no SCBR pode ser observada na Figura 38a. Da mesma forma, simulou-se o comportamento dinâmico de dissolução na fonte dos outros compostos presentes na gasolina pura (Tolueno, Etilbeneno e Xilenos) (Figura 38b). Pelo fato do SCBR considerar a Lei de Raoult, a concentração varia ao longo do tempo, já que a quantidade de componente diminui na fonte (e consequentemente a fração molar).

Do mesmo modo, para confecção do gráfico concentração *versus* tempo na fonte no Visual MODFLOW (Figura 39a), foi necessário obter os dados de saída do SCBR, conforme discutido anteriormente. Caso fosse utilizado na fonte do Visual MODFLOW somente a solubilidade

máxima constante do benzeno na gasolina pura ($C_{w\ Raoult} = 14,30$ mg/L), a Figura 39b apresenta o gráfico da concentração constante com o tempo.

Estes gráficos reforçam a confirmação de que o Visual MODFLOW necessita de cálculo externo para calcular a fonte, mostrando uma vantagem do SCBR neste sentido. A Figura 39b caracteriza como ficaria a concentração do benzeno na fonte caso não houvesse este cálculo, somente considerando o 14,30 mg/L, sem o estabelecimento da Lei de Raoult. Portanto o SCBR foi utilizado para o cálculo das concentrações na fonte (Figura 39a).

Figura 38 – Concentração x Tempo na fonte: somente benzeno na gasolina pura - SCBR (a); benzeno e outros compostos da gasolina pura - SCBR (b).

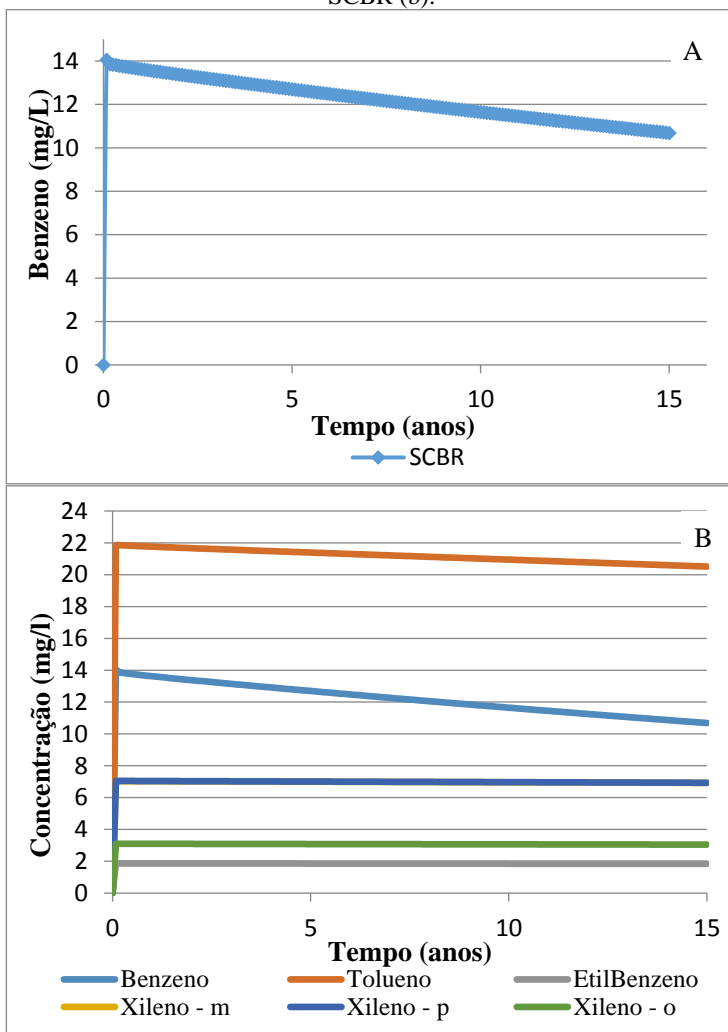
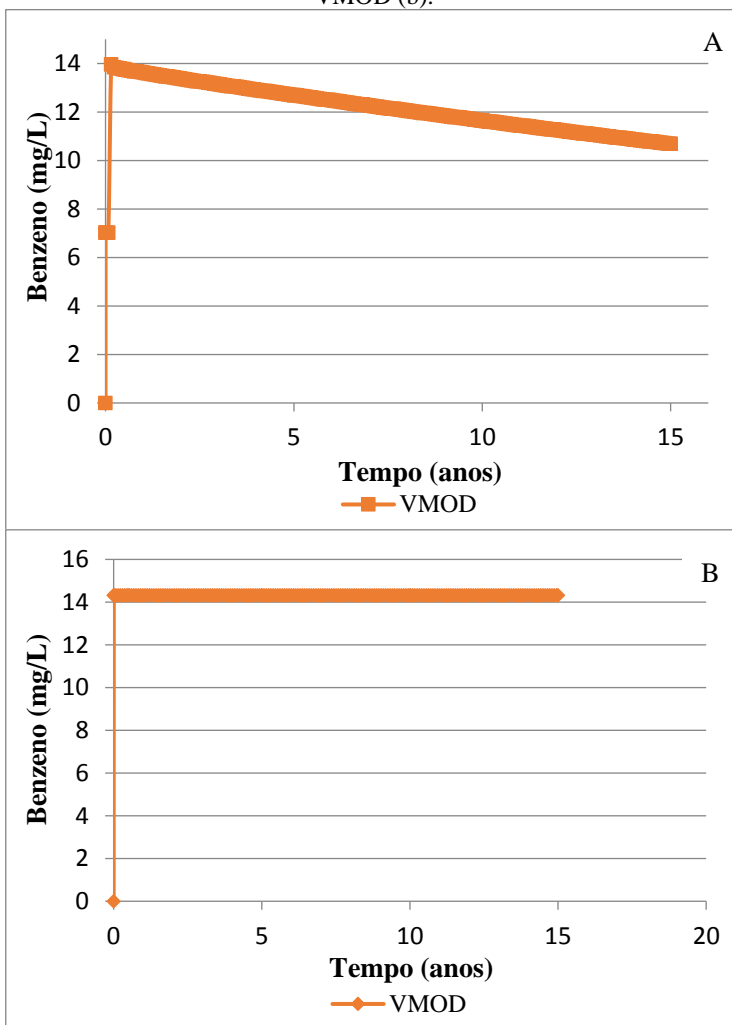


Figura 39 – Concentração x Tempo na fonte: benzeno na gasolina pura - VMOD (a); benzeno na gasolina pura (concentração constante) - VMOD (b).



5.5 TECNOLOGIAS DE CONTENÇÃO E REMEDIAÇÃO DE PLUMAS.

A fim de concluir os objetivos deste trabalho, simulou-se intervenções para que a pluma não atingisse as residências vizinhas. Para facilidade, optou-se pela simulação de contenção e remediação somente da pluma de benzeno na gasolina pura.

O primeiro cenário, foi estabelecido como sendo a instalação de uma barreira física de baixa permeabilidade. Sua configuração em planta no SCBR pode ser vista na Figura 40, e no Visual MODFLOW, na Figura 41 (1 camada) e Figura 42 (10 camadas – Layer 2). Nota-se que, tanto para o SCBR (Figura 40), quanto para o MODFLOW 1 camada (Figura 41), a pluma é desviada para fora da barreira pois à montante da barreira forma-se uma zona de velocidades quase zero e não há circulação. Já num modelo de fluxo totalmente tridimensional (Figura 42) nota-se um comportamento bem mais realista pois, salvo nos raros casos onde pode-se chegar com uma barreira física até a base do aquífero, há uma continuidade do fluxo por debaixo da barreira. Inclusive, em muitos casos há o risco da pluma de contaminante ser forçada a ir para baixo contaminando partes inferiores do aquífero que antes da barreira estavam limpas. Só um modelo tridimensional pode avaliar tais efeitos.

A Figura 43 mostra a migração vertical da pluma antes e depois da instalação da barreira, após 15 anos, em 1(uma) e 10 (dez) camadas numéricas. Observa-se que a barreira para a simulação de 1 camada numérica (operando de maneira bidimensional), é considerada até a camada impermeável. Este é o mesmo princípio do SCBR já que o mesmo é bidimensional, embora não seja possível a sua visualização em perfil. Enquanto que para a simulação de 10 camadas numéricas (operando de maneira tridimensional), é possível estabelecer uma altura para a barreira. Portanto, a simulação apresentada na Figura 43b não condiz com a realidade, pois as barreiras de contenção não são viáveis economicamente com alturas maiores do 10 metros.

Conforme observado pela visualização em planta (Figuras 40, 41 e 42), somente a instalação da barreira, não seria suficiente para conter a pluma de benzeno, onde a mesma encontra-se em direção a vizinhança. Observa-se ainda, através da Figura 43d, que além da barreira não ter surtido efeito nos planos x e y, a mesma não foi o bastante para a contenção da pluma analisada no eixo z. Ou seja, mesmo que no modelo bidimensional a barreira contivesse a pluma de contaminação, não seria possível analisar seu efeito na vertical. Essa análise é totalmente

exequível para o modelo Visual MODFLOW, tornando-se uma incapacidade para o SCBR, já que o mesmo é um modelo bidimensional.

Por esse motivo, optou-se pela instalação de um poço de bombeamento com uma taxa de 50 m³/dia. Como o SCBR é um modelo bidimensional, não existe a opção de escolher se o poço de bombeamento será parcialmente ou totalmente penetrante, como no Visual MODFLOW. O modelo assume que ele seja totalmente penetrante, ou seja, sua seção filtrante é igual à espessura saturada do aquífero. Então, primeiramente, realizou-se a simulação com o poço totalmente penetrante e depois, parcialmente penetrante no Visual MODFLOW para comparações. A Figura 44 mostra a pluma de benzeno (gasolina pura) com a intervenção da barreira + poço de bombeamento no SCBR e as Figuras 45 e 46 exibem a pluma de benzeno (gasolina pura) com a intervenção da barrera + poço de bombeamento totalmente penetrante e barreira + poço de bombeamento parcialmente penetrante no Visual MODFLOW (1 camada), respectivamente, tanto em planta quanto em perfil.

Após a colocação do poço de bombeamento totalmente penetrante (Figuras 44 e 45), observou-se que aparentemente a pluma é capturada, indicando que a vazão de extração é suficiente. Porém, ao analisar essa mesma vazão no Visual MODFLOW, mas agora com um poço parcialmente penetrante (Figura 46), obteve-se resultado análogo, apontando que somente a realização de bombeamento com o poço parcialmente penetrante deverá ser suficiente para a captura completa do contaminante.

As Figuras 47a e 47b mostram esta simulação, de um poço parcialmente penetrante, mas agora em 10 (dez) camadas numéricas. A Figura 47a permite sua visualização em planta, enquanto que a Figura 47b confirma por meio da visualização no eixo z (em perfil), através da trajetória de partículas, que o uso do poço parcialmente penetrante foi bem sucedido na captura da pluma.

A opção de uso de poços parcialmente penetrantes é importante para a redução dos custos no processo de remediação, uma vez que no caso de poços totalmente penetrantes, a seção filtrante está muito abaixo do nível d'água.

Em virtude disso, o modelo tridimensional Visual MODFLOW torna-se vantajoso frente ao bidimensional SCBR, podendo ser feita a escolha de se usar um tipo de poço ou outro, já que permite atribuir valores para a espessura da seção filtrante.

Figura 40 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) nos tempos 5, 10 e 15 anos após instalação da barreira física – SCBR.

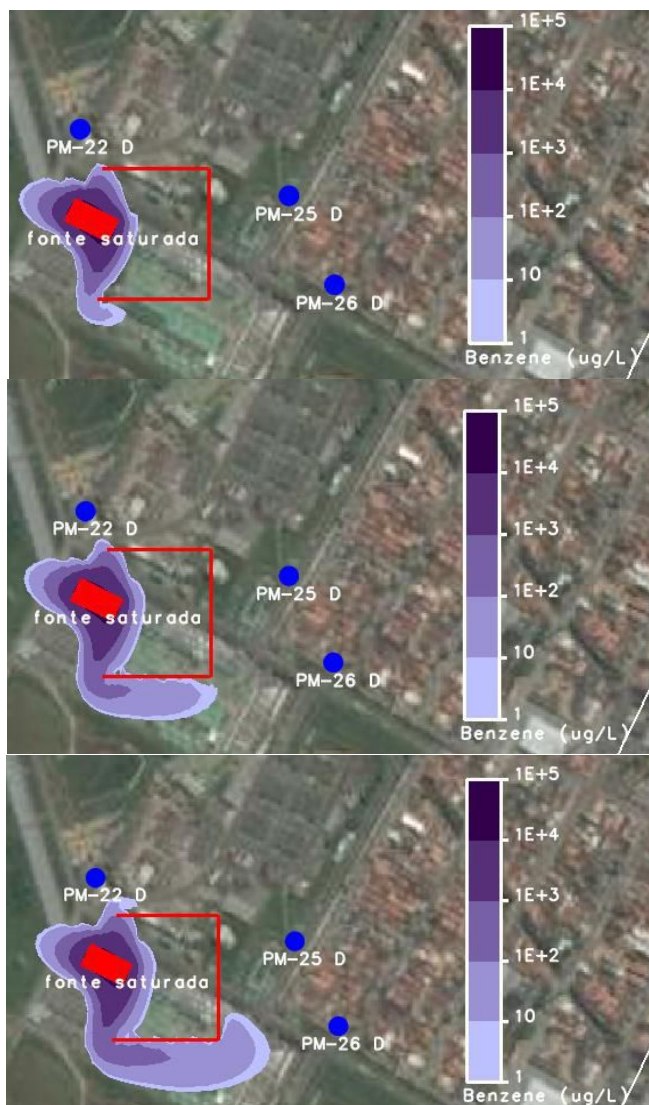


Figura 41 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) nos tempos 5, 10 e 15 anos após instalação da barreira física - Visual MODFLOW (1 camada).



Figura 42 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) nos tempos 5, 10 e 15 anos após instalação da barreira física - Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2).

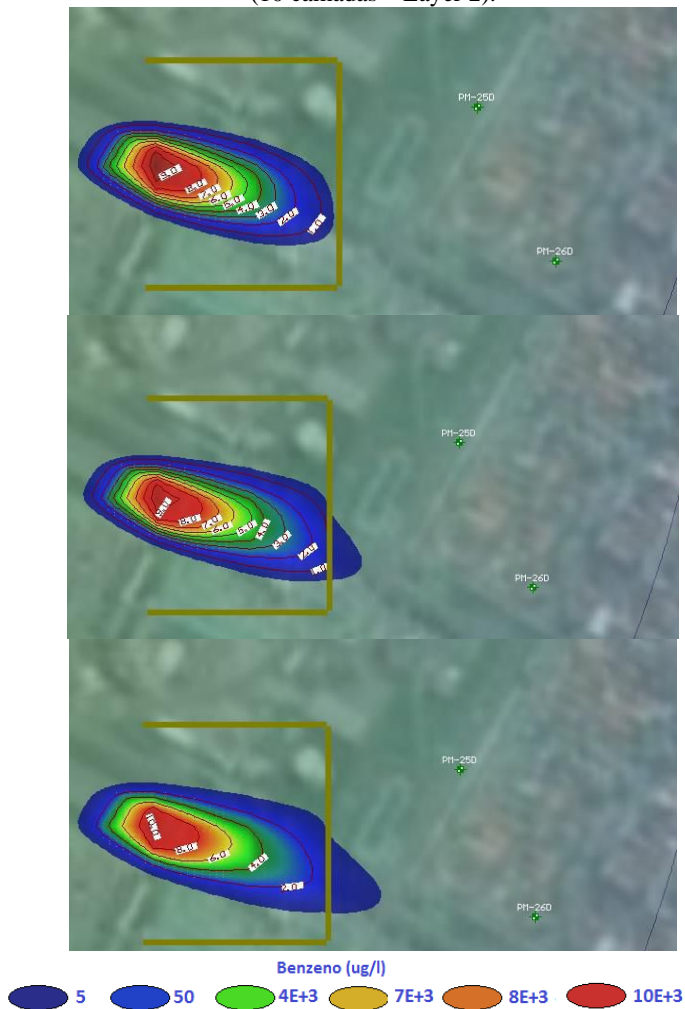


Figura 43 - Perfil da pluma de contaminante antes e depois da instalação da barreira física após 15 anos – Visual MODFLOW: 1 camada – bidimensional (a) e (b); 10 camadas – tridimensional (c) e (d).

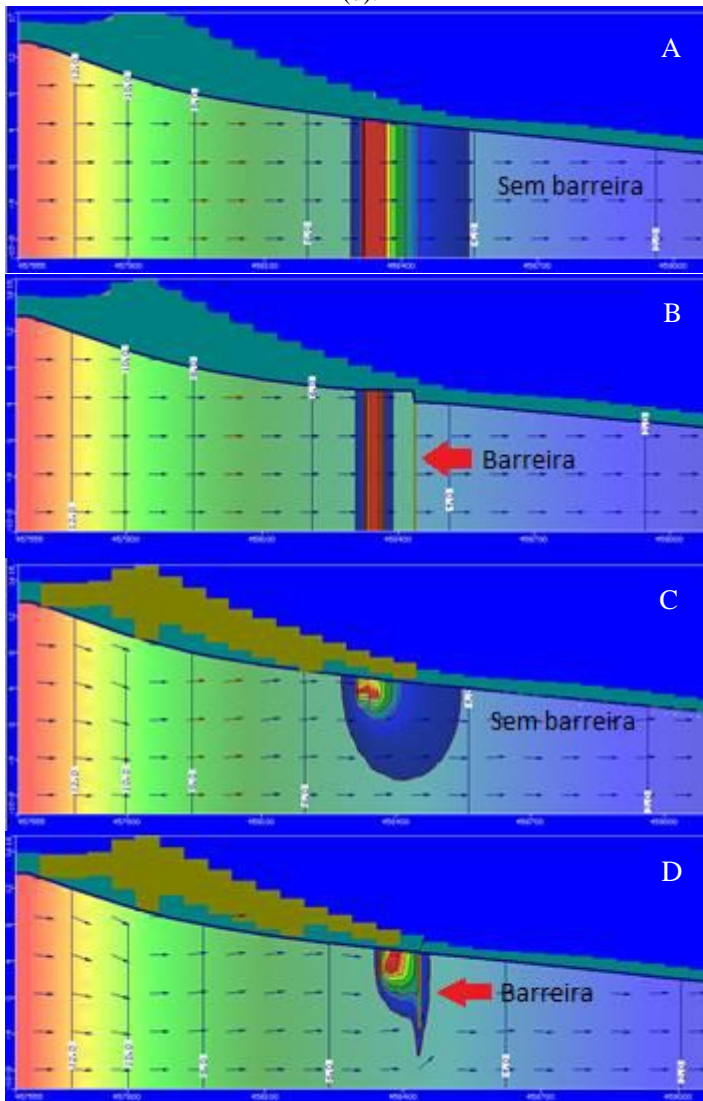


Figura 44 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento após 15 anos – SCBR.



Figura 45 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento (poço totalmente penetrante) após 15 anos - Visual MODFLOW (1 camada) – (a) planta; (b) perfil.

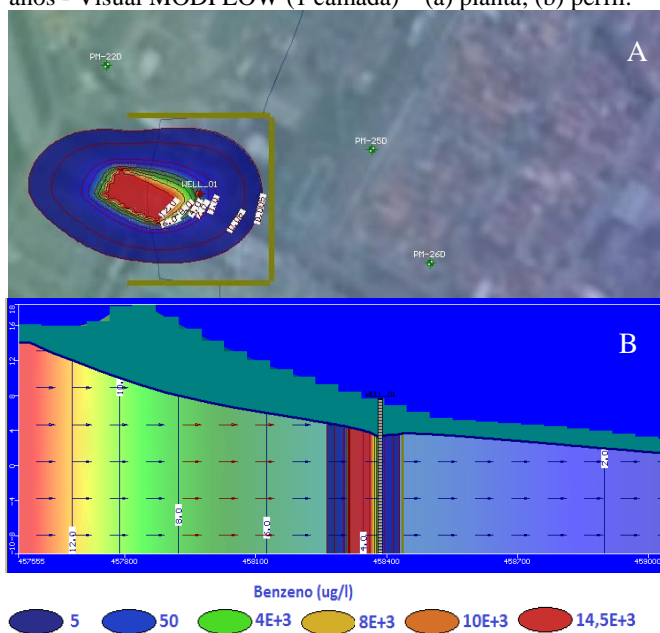


Figura 46 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento (poço parcialmente penetrante) após 15 anos - Visual MODFLOW (1 camada) – (a) planta; (b) perfil.

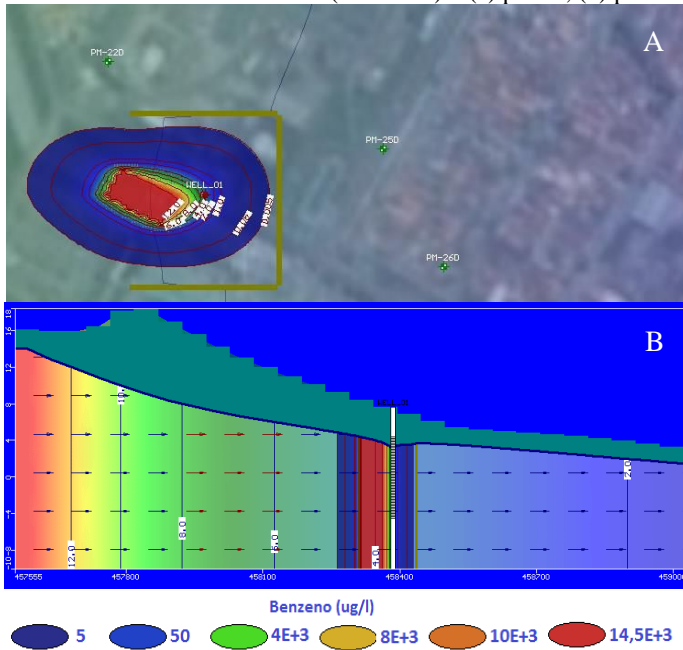
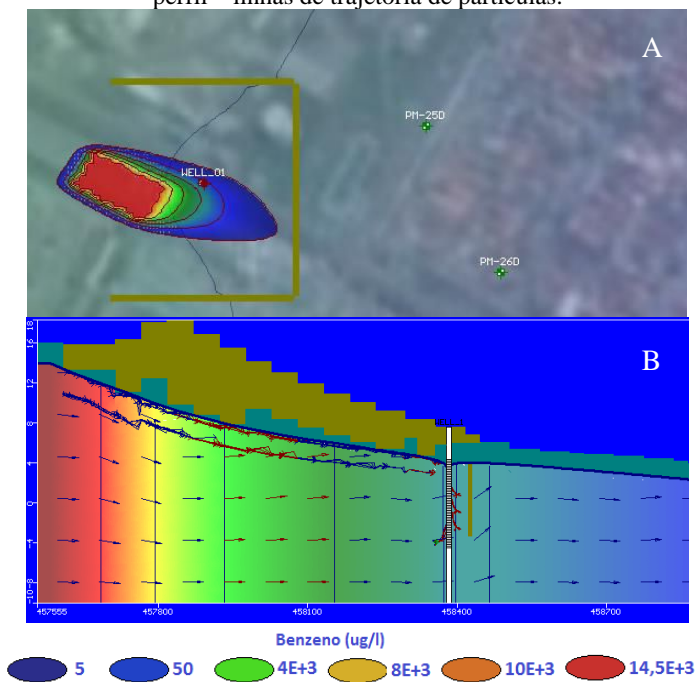


Figura 47 - Pluma de simulação de benzeno (gasolina pura) contida pela barreira física e bombeamento (poço parcialmente penetrante) após 15 anos - Visual MODFLOW (10 camadas – Layer 2) – (a) planta; (b) perfil – linhas de trajetória de partículas.



6 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Tendo como base o objetivo de comparar a aplicabilidade do modelo matemático bidimensional SCBR com o modelo tridimensional MODFLOW, foi possível obter importantes conclusões após a realização deste trabalho. Todas as conclusões levaram em consideração as etapas do trabalho e seus resultados.

A calibração do fluxo subterrâneo, tanto no SCBR quanto no Visual MODFLOW foi feita através de ajustes nas condições de contorno e nas condutividades hidráulicas dos poços.

No que se diz respeito às condições de contorno, como a relação do arranjo dos poços de monitoramento com o domínio de simulação é fundamental para uma efetiva calibração dos parâmetros de fluxo subterrâneo no SCBR, o modelo fica condicionado em ter uma geometria do domínio de simulação favorável, ou seja, haver poços próximos ao limite do domínio. Isto representa um problema se o domínio de interesse seja maior. As duas modificações na geometria do domínio de simulação permitiram esta conclusão. Entretanto, para este trabalho, a determinação da condição de contorno no SCBR mostrou-se mais simples do que do Visual MODFLOW. Para este último, define-se a condição de contorno informando a valor de carga hidráulica. Como havia o conhecimento das cargas somente nos poços de monitoramento, foi preciso o uso de um *software* para interpolação das mesmas. Por essa razão, o processo requer mais tempo, é mais laborioso. Por outro lado, como o SCBR interpola internamente os valores das cargas hidráulicas e aloca automaticamente os valores de condição de contorno ao longo de todas as fronteiras baseada nesta interpolação, existe o problema de, por exemplo representar o efeito de períodos de taxas de recarga mais ou menos altas pois isto representaria uma variação das cargas hidráulicas que não é considerada no modelo.

Pôde-se concluir que o Visual MODFLOW apresenta vantagens quanto o refinamento das malhas, pois permite que o mesmo seja realizado somente na região de interesse, caso haja a simulação do transporte de contaminantes por exemplo. Sugere-se que o SCBR adote essa opção de refinamento, minimizando assim o tempo de espera para o programa rodar.

O modelo de fluxo subterrâneo para ambos os modelos permitiu observar a importância de simular a heterogeneidade do aquífero, ou seja, quais as regiões com menor e maior velocidade. Ambos resultados obtidos pelos mapas potenciométricos apresentaram cargas hidráulicas semelhantes, mostrando a representatividade adequada das condições de

fluxo da água subterrânea. Por se tratar de um modelo tridimensional, o Visual MODFLOW permite a visualização vertical dos vetores de velocidades e a sua magnitude.

Com relação ao transporte de contaminantes, o SCBR possui uma melhor resolução da fonte de contaminação, uma vez que controla a dissolução, que é o principal mecanismo responsável pela transferência de massa de contaminantes da fonte para a água subterrânea. Apesar do Visual MODFLOW ser possível a observação das plumas em camadas, constituindo-se como uma vantagem, o mesmo não controla a dissolução, sendo menos preciso quanto ao comportamento do transporte das plumas.

Como o Visual MODFLOW apresenta vantagem no que se diz respeito ao cálculo de fluxo, sendo mais preciso, recomenda-se adequar o SCBR para que futuramente incremente para 3D a parte de fluxo subterrâneo, permitindo o usuário ter maior controle com base em cargas medidas. Para as recomendações do Visual MODFLOW, a criação de um módulo para representar a massa remanescente e concentrações na fonte.

Após a caracterização da fonte de contaminação, pôde-se avaliar o tempo necessário para que a pluma de benzeno atingisse um bem a proteger com concentrações aquosas acima do valor máximo permitido de $5\mu\text{g/L}$. Isto permitiu a simulação de qual intervenção surtiria efeito para que não houvesse a migração da pluma em direção à residências vizinhas. Para ambos os modelos, somente a instalação de uma barreira física de baixa permeabilidade não seria o suficiente. Observou-se ainda, que mesmo que o modelo bidimensional se mostrasse eficiente na contenção da pluma, não poderia ser analisada seu efeito no eixo z, onde há uma continuidade do fluxo por debaixo da barreira. Ou seja, este comportamento é mais realista e somente um modelo tridimensional pode avaliar estes efeitos.

Para que a pluma não atingisse as residências vizinhas, sugeriu-se a instalação de bombeamento junto com a barreira física. Como vantagem do Visual MODFLOW, a confecção dos poços de bombeamento pode ser realizada com maior autonomia, uma vez que pode-se escolher o tamanho da seção filtrante, sendo possível adotar um poço totalmente penetrante ou parcialmente penetrante. Este último é mais viável economicamente, pois a seção filtrante não vai até o fundo do aquífero, ajudando na redução dos custos no processo de contenção e remediação das plumas. Através das simulações somente com poços totalmente penetrantes em ambos os modelos, verificou-se que a intervenção é eficiente para a captura e contenção da pluma. Entretanto, ao simular no Visual MODFLOW com poço parcialmente penetrante, o efeito foi o mesmo que o anterior, concluindo que não há necessidade de se usar uma seção filtrante para

toda a zona saturada do aquífero. Essa análise não é possível para o SCBR.

7 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

ABNT - ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **ABNT NBR 15515-1**: Passivo ambiental em solo e água subterrânea – Parte 1: Avaliação preliminar. Rio de Janeiro, 2007 (Versão corrigida 2011). 47 p.

ABNT – ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **ABNT NBR 15515-2**: Passivo ambiental em solo e água subterrânea – Parte 2: Investigação confirmatória. Rio de Janeiro, 2011. 19 p.

ABNT – ASSOCIAÇÃO BRASILEIRA DE NORMAS TÉCNICAS. **ABNT NBR 15515-3**: Passivo ambiental em solo e água subterrânea – Parte 3: Investigação detalhada. Rio de Janeiro, 2013. 13 p.

ANDERSON, M.P.; WOESSNER, W.W. **Applied groundwater modeling. Simulation of flow and advective transport**. San Diego : Academic Press, 1992. 381 p.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING MATERIALS (ASTM). D6025 – 96: **Standard Guide for Developing and Evaluating Ground - Water Modeling Codes**. Philadelphia, 2002. 16 p.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING MATERIALS (ASTM). D5981-96: **Standard Guide for Calibrating a Groundwater Flow Model Application**. Philadelphia, 2008-a.

AMERICAN SOCIETY FOR TESTING MATERIALS (ASTM). D5490-93: **Standard Guide for Comparing Groundwater Flow Model Simulations to Site-Specific Information**. Philadelphia, 2008-b

BEDIENT, P.B.; RIFAI, H.S.; NEWELL, C.J. **Ground Water Contamination: Transport and Remediation**. 2nd ed. New Jersey: Prentice Hall PTR, 1997. 604 p.

BONGANHA, C. A. et al. Conceitos e fundamentos da modelagem matemática para gerenciamento de recursos hídricos subterrâneos. **Revista Analytica**, São Paulo, n. 30, p. 116 – 120, ago./set. 2007.

BRAIN TECNOLOGIA. **Relatório de Diagnóstico Ambiental – Terminal Aquaviário de São Sebastião**. Técnicas GPR 2D/Tomografia

Elétrica/Sondagens/Hidrogeologia/Análises Geoquímicas e Hidroquímicas. v. 1 - 4. São Sebastião. 2004.

BRASIL. Ministério da Saúde. **Portaria MS nº 2.914, 12 de dezembro de 2011**- Dispõe sobre os procedimentos de controle e de vigilância da qualidade da água para consumo humano e seu padrão de potabilidade. Governo do Brasil. Brasília: Editora do Ministério da Saúde, 2011.

CAPUCCI, E. et al. **Poços tubulares e outras captações de águas subterrâneas**. Rio de Janeiro : DRM, 2001. 67 p.

CARVALHO FILHO, C. A.; COTA, S. D. S. Análise de sensibilidade para o parâmetro condutância de contorno de tipo 3 do modelo MODFLOW. **Revista Águas Subterrâneas**, São Paulo, n. 17, p. 23 – 30, Maio. 2003.

CETESB - COMPANHIA AMBIENTAL DO ESTADO DE SÃO PAULO. **Manual de Gerenciamento de Áreas Contaminadas**. São Paulo, 2001. 389p.

CHAPELLE, F. H. **Groundwater microbiology & geochemistry**. New York: J. Wiley & Sons, Inc., 1993. 424 p.

CHAPRA S. C. **Surface water-quality modeling**. New York: McGraw-Hill Companies, 1997. 844 p.

CNRH - CONSELHO NACIONAL DE RECURSOS HÍDRICOS. **Resolução nº. 15 de 11 janeiro de 2001**. Delega competência a SINGRH e dá outras providências. Brasília, 1997. 03p.

COLONESE, B. L. **Aplicação do Modelo SCBR no Gerenciamento de Áreas Contaminadas - Estudo de Caso: Terminal de Petróleo de São Sebastião**. 2010. 143 f. Dissertação (Mestrado em Engenharia Ambiental) – Programa de Pós-Graduação em Engenharia Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2010.

CONAMA – CONSELHO NACIONAL DO MEIO AMBIENTE. **Resolução nº 420, de 28 de Dezembro de 2009**: Dispõe sobre critérios e valores orientadores de qualidade do solo quanto à presença de substâncias químicas e estabelece diretrizes para o gerenciamento ambiental de áreas contaminadas por essas substâncias em decorrência de

atividades antrópicas. Disponível em:
<<http://www.mma.gov.br/conama/>>.

CORSEUIL, H. X. et al. Solução corretiva baseada no risco (SCBR): modelo matemático de tomada de decisão para o gerenciamento ambiental de águas subterrâneas contaminadas. In: XIV Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas, 14., 2006, Curitiba. **Anais...** São Paulo: ABAS, 2006. p. 1-14.

DOMENICO, P.A.; SCHWARTZ, F. W. **Physical and Chemical Hydrogeology**. 2nd ed, New York: Ed. John Wiley & Sons, Inc., 1998. 506 p.

FEITOSA, A. C. F. et al. **Hidrogeologia: conceitos e aplicações**. 3. ed. rev. e amp. Fortaleza: CPRM, 2008. 812 p.

FETTER, C. W. **Applied Hydrogeology**. 3th ed. New Jersey: Prentice-Hall, Inc., 1994. 691 p.

FITTS, C. R. **Groundwater Science**. San Diego: Academic Press, 2002. 450 p.

FRANKE, O. R.; REILLY, T.E. ; BENNET, G.D. **Definition of Boundary and Initial Conditions in the Analysis of Saturated Ground-Water Flow Systems – An Introduction**. Reston, Virginia. 1987. vii, 15 p. (Serie Techniques of Water-Resources Investigations of the U. S. Geological Survey. Applications of Hydraulics, Books 3: Chapter B5).

FRTR. Federal Remediation Technologies Roundtable. **Remediation Technologies Screening Matrix and Reference Guide, Version 4.0**, 2002. Disponível em: <http://www.frtr.gov/matrix2/top_page.html>. Acesso em: out. 2015.

GELHAR, L.W. Stochastic subsurface hydrology from theory to applications, **Water Resources Research**, Cambridge, Massachusetts, v.22, n.9, p. 135 – 145, Agosto. 1986.

GUIGUER JUNIOR, N.; FRANZ, T. **Visual MODFLOW. User's Manual**. Waterloo Hydrogeologic Inc.. Waterloo, Canada. 1996. 231p.

LYMAN, W. J.; RHEEL, W. F.; ROSENBLATT, D. H. **Handbook of Chemical Property Estimation Methods: Environmental Behavior of Organic Compounds.** Washington, DC: American Chemical Society, 1990. 960 p.

MANDLE, R. J. **Groundwater Modeling Guidance.** Ground Water Modeling Program. Michigan, 2002. 55p.

Mc DONALD, M.G.; HARBAUGH, A.W. **A Modular Three dimensional finite difference ground water flow model.** Techniques of Water Resources Investigation of U.S. Geological Survey. USGS. Washington D.C. EUA. 1988. 576 p.

MULLER, C. C.; ROSARIO, M.; CORSEUIL, H. X. Investigações forenses e a estimativa da idade da fonte em áreas contaminadas por gasolina com etanol. **Revista Águas Subterrâneas**, São Paulo, n. 27, p. 88-100, 2013.

PETROBRAS – PETRÓLEO BRASILEIRO S.A.; UFSC – UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA; ESSS – ENGINEERING SIMULATION AND SCIENTIFIC SOFTWARE. **Solução Corretiva Baseada no Risco (SCBR) – versão 3.1: Guia do Usuário.** Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, 2015a. 121p. (Trabalho não publicado).

PETROBRAS – PETRÓLEO BRASILEIRO S.A.; UFSC – UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA; ESSS – ENGINEERING SIMULATION AND SCIENTIFIC SOFTWARE. **Solução Corretiva Baseada no Risco (SCBR) – Manual de Referências Técnicas.** Universidade Federal de Santa Catarina. Florianópolis, 2015b. 125p. (Trabalho não publicado).

SCHNOOR, J.L. **Environmental modeling: fate and transport of pollutants in water, air and soil.** New York: John Wiley & Sons, Inc., 1996. 682 p.

SCHWARZENBACH, R. P.; GSCHWEND, P. M.; IMBODEN, D. M. **Environmental Organic Chemistry.** 2nd ed. New York: Wiley-Interscience, 2003. 1313p.

TODD, D. K. - **Ground Water Hydrology**. 2nd ed , New York: Ed. John Wiley & Sons, Inc., 1980. 535 p.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (USEPA). EPA/540/290/018. **A Guide to Pump and Treat Groundwater Remediation Technology**. Washington D.C., 1990.

UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY (USEPA). EPA/510/R-04/002. **How to Evaluate Alternative Cleanup Technologies for Underground Storage Tank Sites: A Guide for Corrective Action Plan Reviewers**. Washington D.C., 2004.

WANG, H. F., ANDERSON, M. P. **Introduction to Groundwater Modelling: Finite Diference and Finite Element Methods**. San Diego, California, USA: Academic Press Limited, 1995.246p.

WENDLANDER, E. **Modelos Matemáticos e Métodos Numéricos em águas subterrâneas**. São Carlos, SP: SBMAC, 2003. 95 p.

WIEDEMEIER, T. H. et al. **Natural Attenuation of Fuels and Chlorinated Solvents in the Subsurface**. New York: John Wiley & Sons, Inc., 1999. 617 p.

XU, M.; ECKSTEIN, Y. Use of Weighted Least Squares Method in Evaluation of the Relationship Between Dispersivity and Scale. **Journal of Ground Water**, Kent, Ohio, v.33, n.6, p. 905 - 908. Novembro. 1995.

APÊNDICES

APÊNDICE A - Cálculo do coeficiente de retardo do benzeno na área de estudo.

Coeficiente de distribuição octanol-água (Kow):

$\log K_{ow} = 2.13$ (SCHNOOR, 1996).

$K_{ow} = 10^{\log K_{ow}} = K_{ow} 134,89$

Coeficiente de distribuição carbono orgânico (Koc):

$\log K_{oc} = 1.01 \times \log K_{ow} - 0.72$ (LYMAN, RHEEL e ROSENBLATT, 1990)

$K_{oc} = 10^{\log K_{oc}} \text{ L/kg}$ $K_{oc} = 26,99 \text{ L/kg}$

Fração de carbono orgânico no solo (foc):

$foc = 0.3\%$ (BRAIN, 2004)

Coeficiente de distribuição solo-água (Kd):

$Kd = foc \times K_{oc}$ $Kd = 0,081 \text{ L/kg}$

Densidade do solo (ρ_d):

$\rho_d = 2600 \text{ kg/m}^3$ (BRAIN, 2004)

Porosidade efetiva (η_e):

$\eta_e = 21\%$ (BRAIN, 2004)

Coeficiente de retardo (R):

$$R = 1 + \frac{\rho_b \cdot Kd}{\eta_e}$$

$$R = 2$$

ANEXOS

ANEXO A - Cálculo da fração molar feito pelo SCBR na primeira iteração.

```

>> Componente: Benzene
>>>> tipo: contaminante
>>>> Concentracao prescrita: 0.0143
!!!!!!! Start plume solution for Benzene !!!!!!!
>> density: 876
>> type: contaminant
<----- Decay Points ----->
>> 0: Pos: ( 6.400000e+002 9.175000e+002 ) | Val: 1.26752e-008
<----->
<----- Decay Areas ----->
<----->
<----- Retardation Points ----->
>> 0: Pos: ( 6.400000e+002 9.175000e+002 ) | Val: 2
<----->
<----- Retardation Areas ----->
<----->
initialize sources...
  total volume: 50
  component: Benzene
  fixed? true
  concentration: 0.0143014
  volume: 0.267
sources are initialized!!
  Current component: "Benzene"

CONCENTRATION CALCULATION
Iteration: 0

```

Component molar fraction (in source) calculation:

component volume in source (V_i): 0.267 [m³]

component density (D_i): 876.5 [kg/m³]

component molar mass (M_i): 0.07811 [kg/mol]

component moles in source ($n_i = V_i * D_i / M_i$): 2996.1 [mol]

product volume in source (V_p): 50 [m³]

product density (D_p): 750 [kg/m³]

product molar mass (M_p): 0.1 [kg/mol]

product moles in source ($n_p = V_p * D_p / M_p$): 375000 [mol]

component molar fraction ($x_i = n_i / n_p$): 0.0079896 [mol/mol]

Cosolvency effect calculation:

component $\log(K_{ow})$: 1.993

$B = 0.76 * \log(K_{ow}) - 0.83$: 0.68468

pure component solubility in H₂O (sol_{c_h2o}): 1.79 [kg/m³]

component solubility in H₂O with Raoult's Law ($sol_{c_raoult} = x_i * sol_{i_h2o}$): 0.0143014 [kg/m³]

component solubility with cosolvency ($sol_i = sol_{c_raoult} * 10^{(B * Vfe)}$): 0.0143014 [kg/m³]

Maximum concentration calculation (limited by available mass):

component volume in source (V_i): 0.267 [m³]

component volume in mixing zone under source (V_{i_u}): 0 [m³]

total component volume ($V_{i_t} = V_i + V_{i_u}$): 0.267 [m³]

total component mass ($m_{i_t} = V_{i_t} * D_i$): 234.025 [kg]

solution volume in mixing zone under source (V_s): 439.321 [m³]

maximum concentration ($C_{i_max} = m_{i_t} / V_s$): 0.532699 [kg/m³]

component concentration ($C_i = \min(sol_i, C_{i_max})$): 0.0143014 [kg/m³]

Current component: "Benzene"

ANEXO B - Dados de saída da fonte do SCBR inseridos no Visual MODFLOW (benzeno como parte da composição da gasolina pura).

Start_Time[day]	Stop_Time[day]	Benzeno[mg/L]
0	30	7.025
30	61	13.956
61	91	13.847
91	122	13.82
122	152	13.794
152	183	13.769
183	213	13.745
213	243	13.722
243	274	13.699
274	304	13.677
304	335	13.655
335	365	13.633
365	395	13.611
395	426	13.59
426	456	13.569
456	487	13.548
487	517	13.528
517	548	13.507
548	578	13.487
578	608	13.466
608	639	13.446
639	669	13.426
669	700	13.406
700	730	13.386
730	760	13.366
760	791	13.347
791	821	13.327
821	852	13.307

Start_Time[day]	Stop_Time[day]	Benzeno[mg/L]
852	882	13.288
882	913	13.268
913	943	13.249
943	973	13.23
973	1004	13.21
1004	1034	13.191
1034	1065	13.172
1065	1095	13.153
1095	1125	13.134
1125	1156	13.115
1156	1186	13.096
1186	1217	13.077
1217	1247	13.058
1247	1278	13.039
1278	1308	13.02
1308	1338	13.001
1338	1369	12.982
1369	1399	12.964
1399	1430	12.945
1430	1460	12.926
1460	1490	12.908
1490	1521	12.889
1521	1551	12.87
1551	1582	12.852
1582	1612	12.833
1612	1643	12.815
1643	1673	12.796
1673	1703	12.778
1703	1734	12.76
1734	1764	12.741
1764	1795	12.723
1795	1825	12.705

Start_Time[day]	Stop_Time[day]	Benzeno[mg/L]
1825	1855	12.686
1855	1886	12.668
1886	1916	12.65
1916	1947	12.632
1947	1977	12.614
1977	2008	12.596
2008	2038	12.577
2038	2068	12.559
2068	2099	12.541
2099	2129	12.523
2129	2160	12.505
2160	2190	12.487
2190	2220	12.469
2220	2251	12.451
2251	2281	12.434
2281	2312	12.416
2312	2342	12.398
2342	2373	12.38
2373	2403	12.362
2403	2433	12.345
2433	2464	12.327
2464	2494	12.309
2494	2525	12.291
2525	2555	12.274
2555	2585	12.256
2585	2616	12.239
2616	2646	12.221
2646	2677	12.204
2677	2707	12.186
2707	2738	12.169
2738	2768	12.151
2768	2798	12.134

Start_Time[day]	Stop_Time[day]	Benzeno[mg/L]
2798	2829	12.116
2829	2859	12.099
2859	2890	12.081
2890	2920	12.064
2920	2950	12.047
2950	2981	12.029
2981	3011	12.012
3011	3042	11.995
3042	3072	11.978
3072	3103	11.961
3103	3133	11.943
3133	3163	11.926
3163	3194	11.909
3194	3224	11.892
3224	3255	11.875
3255	3285	11.858
3285	3315	11.841
3315	3346	11.824
3346	3376	11.807
3376	3407	11.79
3407	3437	11.773
3437	3468	11.756
3468	3498	11.739
3498	3528	11.722
3528	3559	11.706
3559	3589	11.689
3589	3620	11.672
3620	3650	11.655
3650	3680	11.639
3680	3711	11.622
3711	3741	11.605
3741	3772	11.588

Start_Time[day]	Stop_Time[day]	Benzeno[mg/L]
3772	3802	11.572
3802	3833	11.555
3833	3863	11.539
3863	3893	11.522
3893	3924	11.506
3924	3954	11.489
3954	3985	11.473
3985	4015	11.456
4015	4045	11.44
4045	4076	11.423
4076	4106	11.407
4106	4137	11.39
4137	4167	11.374
4167	4198	11.358
4198	4228	11.341
4228	4258	11.325
4258	4289	11.309
4289	4319	11.293
4319	4350	11.276
4350	4380	11.26
4380	4410	11.244
4410	4441	11.228
4441	4471	11.212
4471	4502	11.196
4502	4532	11.18
4532	4563	11.164
4563	4593	11.148
4593	4623	11.131
4623	4654	11.116
4654	4684	11.1
4684	4715	11.084
4715	4745	11.068

Start_Time[day]	Stop_Time[day]	Benzeno[mg/L]
4745	4775	11.052
4775	4806	11.036
4806	4836	11.02
4836	4867	11.004
4867	4897	10.988
4897	4928	10.973
4928	4958	10.957
4958	4988	10.941
4988	5019	10.925
5019	5049	10.91
5049	5080	10.894
5080	5110	10.878
5110	5140	10.863
5140	5171	10.847
5171	5201	10.832
5201	5232	10.816
5232	5262	10.801
5262	5293	10.785
5293	5323	10.77
5323	5353	10.754
5353	5384	10.739
5384	5414	10.723
5414	5445	10.708
5445	5475	10.692
