

## APLICAÇÃO DO MODELO SCBR NO GERENCIAMENTO DE ÁREAS CONTAMINADAS PARA SIMULAÇÃO DE TECNOLOGIAS DE BIOESTIMULAÇÃO

*Priscilla Kern<sup>1\*</sup>; Cristina Cardoso Nunes<sup>2</sup>; Henry Xavier Corseuil<sup>3</sup>*

**Resumo** – O modelo matemático SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) é uma ferramenta de apoio à tomada de decisão em ações preventivas e no gerenciamento ambiental de áreas contaminadas. Com base em um experimento de campo de bioestimulação ativa com nitrato, em áreas contaminadas por gasolina brasileira, foi avaliada a aplicação do SCBR na simulação da tecnologia de bioestimulação. No cenário-remediação simulado, foi criada uma única zona de reação acelerada, utilizando-se dois coeficientes de biodegradação, em função da dinâmica de biodegradação do etanol e benzeno observada no experimento de campo. Na primeira etapa (entre 3 a 18 meses), foi considerado apenas o coeficiente de decaimento do etanol, no valor de  $4,8 \text{ ano}^{-1}$  e, após seu esgotamento, numa segunda etapa, considerou-se o coeficiente do benzeno, entre 19 a 33 meses, no valor de  $13 \text{ ano}^{-1}$ . A comparação entre os comprimentos de plumas simuladas e medidas em campo se deu através do conceito de amplitude de localização para diferentes tempos. Nas simulações onde houve diferença entre o comprimento das plumas simuladas e medidas (2 a 4 metros), prevaleceu o cenário mais conservador, considerado como resultado positivo, onde o comprimento da pluma simulada foi superior àquele da pluma medida.

**Palavras-Chave** - Águas subterrâneas, bioestimulação, SCBR.

## SCBR MODEL APPLICATION IN THE MANAGEMENT OF CONTAMINATED SITES FOR SIMULATION OF BIOSTIMULATION TECHNOLOGIES

**Abstract** - The SCBR (Risk-Based Corrective Solutions) mathematical model is a support tool for making decisions about preventive actions and environmental management of contaminated areas. Based on a field experiment of active biostimulation with nitrate in contaminated areas by brazilian gasoline, the application of SCBR was evaluated for biostimulation technology simulation. In the simulated remediation scenario was created one accelerated reaction zone, using two biodegradation coefficients, according to the ethanol and benzene biodegradation dynamics observed at the field experiment. In the first stage (between 3 and 18 months) only the ethanol decay coefficient of  $4.8 \text{ year}^{-1}$  was considered, and after ethanol exhaustion, in a second stage (between 19 and 33 months), the benzene decay coefficient of  $13 \text{ year}^{-1}$  was considered. The comparison between the simulated and measured plumes lengths at field was establish by the location amplitude concept for different times. Simulations that had a difference between the simulated and measured plumes lengths (2 and 4 meters) the most conservative scenario prevailed, considered as a positive result that the simulated plumes lengths was higher than measured.

**Keywords** - groundwater, bioestimulation, SCBR.

<sup>1</sup> Engenheira Sanitarista e Ambiental (UFSC). E-mail: priscilla.kern@gmail.com

<sup>2</sup> Engenheira Química pela Universidade Estadual do Rio de Janeiro (UERJ). Doutora em Engenharia Ambiental pela Universidade Federal de Santa Catarina (UFSC). E-mail: c.nunes@ufsc.br

<sup>3</sup> PhD em Engenharia Ambiental pela Universidade de Michigan. Professor Adjunto do Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental da Universidade Federal de Santa Catarina. Orientador e coordenador do Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente (REMA/UFSC). Email: henry.corseuil@ufsc.br

## 1. INTRODUÇÃO

O gerenciamento de áreas contaminadas é um conjunto de medidas que busca assegurar o conhecimento das características das áreas degradadas e dos impactos decorrentes da contaminação, proporcionando os instrumentos necessários à tomada de decisão quanto às formas de intervenção mais adequadas visando reduzir para níveis aceitáveis os riscos a que estão sujeitos a população e meio ambiente (NBR 16210, 2014). Os hidrocarbonetos derivados de petróleo representam um dos mais importantes grupos de compostos químicos devido a sua abundância natural, importância industrial, e, principalmente, ao seu intenso uso como fonte de energia primária mundial. Em casos de riscos não aceitáveis à saúde humana, o poluidor deverá proceder à investigação para remediação com o objetivo de selecionar dentre as técnicas de remediação existentes, aquelas, ou a combinação destas, que são possíveis, apropriadas e legalmente permissíveis para o caso considerado. A remediação de áreas contaminadas deve ser continuamente avaliada de modo a verificar a real eficiência das medidas implementadas, assim como dos possíveis impactos causados aos bens a proteger pelas ações de remediação. O encerramento desta etapa se dará, após anuência do órgão de controle ambiental, quando os níveis definidos no projeto de remediação forem atingidos CETESB (2015).

Neste contexto, os modelos matemáticos desempenham um papel importante para avaliar a eficiência das tecnologias de remediação, além de auxiliar na tomada de decisões em casos de contaminação. Dada a especificidade dos combustíveis brasileiros e os resultados das pesquisas realizadas na Fazenda Ressacada (UFSC/SC), desde 1998, no desenvolvimento das tecnologias de remediação, a UFSC (Universidade Federal de Santa Catarina) e a PETROBRAS (Petróleo Brasileiro S.A) desenvolveram o modelo matemático SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) para auxiliar na gestão e prevenção de áreas impactadas. Atualmente, na versão 3.8, o SCBR, modelo numérico, permite a realização de planos de amostragens, simulação de fluxo subterrâneo e transporte de contaminantes, avaliação de risco à saúde humana com mapas 2D, conforme decisão de diretoria de CETESB (263/2009). Além disso, o modelo matemático SCBR simula tecnologias de remediação como barreiras físicas, bombeamentos, cubagem e tecnologias de bioestimulação por meio da criação de zona com reação acelerada (funcionalidade denominada área reativa). As áreas reativas representam regiões com propriedades diferenciadas dentro do domínio de simulação, sendo possível por meio do coeficiente de biodegradação (coeficiente de decaimento ou meia vida), simular uma bioestimulação, isto é, acelerar o processo de biodegradação dos contaminantes através da injeção de receptores de elétrons na área impactada.

Este trabalho tem o intuito de avaliar o modelo SCBR para simular tecnologias de bioestimulação por meio da criação de áreas reativas. Os resultados obtidos nas simulações serão comparados com um experimento de campo realizado na Fazenda Experimental Ressacada (REMA/UFSC) que aplicou a tecnologia de remediação bioestimulação com nitrato em uma área impactada com gasolina brasileira. No referido experimento realizado por Costa (2008). A injeção de nitrato permitiu o esgotamento do etanol, e com a sua exaustão, o início a biodegradação dos compostos BTEX.

## 2. METODOLOGIA

### 2.1. Área de Estudo

O experimento de bioestimulação anaeróbia, utilizado como base para a simulação desta tecnologia de remediação com o modelo matemático SCBR, foi realizado em escala real, na área experimental II da Fazenda da Ressacada, de propriedade da Universidade Federal de Santa Catarina. A fazenda experimental está localizada no sul da Ilha de Santa Catarina, na região da Tapera, próxima ao Aeroporto Hercílio Luz, no município de Florianópolis. A Figura 1 à esquerda, apresenta a área

experimental II, delimitada pela linha vermelha (10.026 m<sup>2</sup>), onde se encontra o experimento de bioestimulação ativa, delimitado pela linha verde. A Figura 1 à direita, mostra uma imagem aproximada da localização dos poços, com todos os poços de monitoramento já instalados na região do experimento de bioestimulação ativa que ocupa uma área de 390m<sup>2</sup>, com 30m de comprimento e 13m de largura.

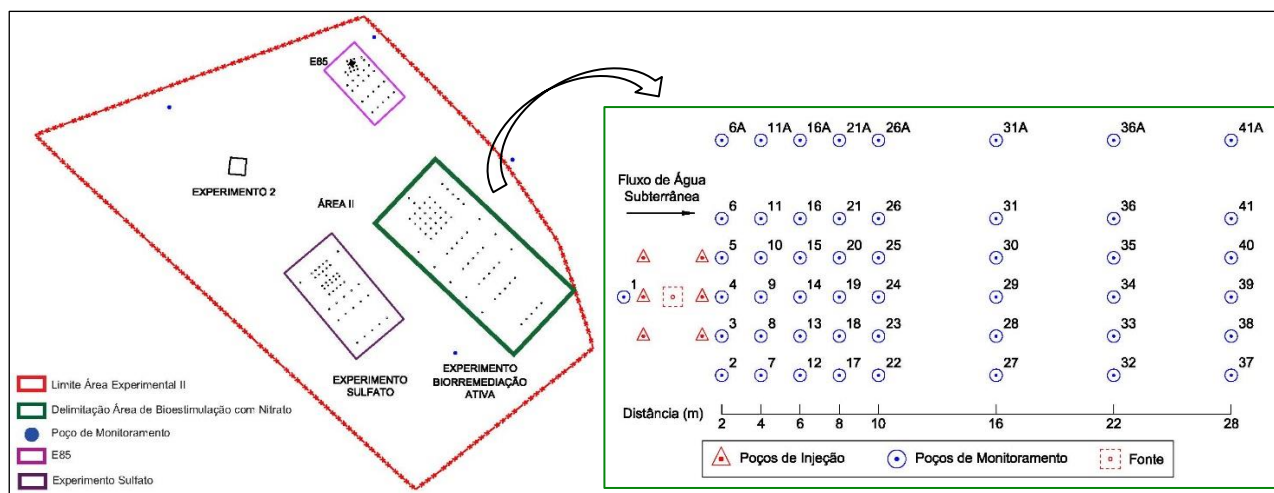


Figura 1: À esquerda: Planta com localização do experimento de bioestimulação com nitrato. À direita: Identificação dos poços de monitoramento e injeção do experimento de bioestimulação.

Em 22 de dezembro de 2004, foram liberados ao nível do lençol freático 100 litros de gasolina comum contendo, aproximadamente, 25% de etanol. O derramamento de gasolina foi realizado em uma área de 1m<sup>2</sup>, onde o solo foi escavado até a profundidade de 1m a partir da superfície do solo.

O georreferenciamento da imagem da área experimental II (Figura 1, à esquerda) foi realizado para auxiliar na construção do cenário da simulação e na interpretação dos resultados. A caracterização hidrogeológica apresentada a seguir foi realizada a partir das informações, perfis de sondagens e poços de monitoramento da área experimental II. Para definição das condições de contorno, o aquífero foi considerado como sendo livre e heterogêneo e que o escoamento se desenvolve em regime permanente (estado estacionário).

A simulação da tecnologia de remediação com nitrato levou em consideração os resultados do experimento de campo. Dos 5 níveis monitorados (2,3 m; 2,8 m; 3,8 m; 4,8 m e 5,8 m). Para o presente trabalho considerou-se os dados referentes ao o primeiro nível (2,3m) por ter sido o nível onde ocorreu a exaustão completa do etanol em 25 meses, acelerada pela bioestimulação com nitrato. O valor de corte adotado para o etanol foi de 10mg.L<sup>-1</sup> pois no experimento de campo, na profundidade de 2,3m, aos 25 meses, as concentrações de etanol eram inferiores a 10mg.L<sup>-1</sup> nas águas subterrâneas. Para o benzeno, o valor de corte de 5µg.L<sup>-1</sup> foi escolhido com base no padrão de potabilidade estabelecido pela portaria n° 2.914/11 do Ministério da Saúde (2011). A velocidade média do fluxo subterrâneo foi estimada a partir do traçador brometo (5,2 m.ano<sup>-1</sup>), utilizando-se os PMs que apresentaram concentração de brometo superior a 1mg.L<sup>-1</sup>.

## 2.2. Calibração do fluxo subterrâneo

Para a simulação do fluxo subterrâneo, o modelo foi calibrado com base nos dados dos poços de monitoramento disponíveis com medições no mesmo dia, ajustando o domínio de simulação com os pontos de análise (carga hidráulica) o mais próximo possível de suas extremidades, devido às condições de contorno que o modelo utiliza na resolução numérica de suas equações. Uma análise residual dos dados de carga hidráulica simulados será efetuada de acordo com o recomendado pelas normas ASTM D5981-96 (2008) e ASTM D5490-93 (2014).

Os valores utilizados como dados de entrada do modelo matemático SCBR para caracterizar o solo e calibrar o fluxo subterrâneo no local do experimento são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1: Dados de entrada do Modelo SCBR

Dispersividade Longitudinal	0,12 m
Densidade do solo	1700 Kg/m <sup>3</sup>
Carbono Orgânico	0,06 %
Porosidade Efetiva (nível superior)	0,15%

As condutividades hidráulicas adotadas foram medidas nos pontos mais próximos à área do experimento de bioestimulação. Para a simulação do fluxo, foram adotadas as medidas dos poços piezométricos (PE01, PE02 e PZ01) realizadas no dia 19 de novembro de 2004, sendo o gradiente obtido igual a 6,5%. Cabe ressaltar que para a simulação do fluxo subterrâneo são necessários dados de carga hidráulica obtidos em uma mesma data, de modo a evitar a influência de eventos (principalmente da pluviosidade e maré) sobre a variação das cargas hidráulicas ao longo do tempo.

### 2.3. Simulação do transporte e transformação dos compostos químicos

O modelo matemático SCBR possui modelo de fonte, onde produtos como a gasolina são simulados pela Lei de Raoult, onde a concentração efetiva de solubilidade do composto na água depende de sua fração molar no produto. A partir da simulação do vazamento completo da fonte potencial de contaminação (100 L de gasolina comercial) diretamente na zona saturada do solo (cenário crítico) foram simulados os compostos químicos (etanol e benzeno) e foi avaliada sua migração para a água subterrânea. A biodegradação destes compostos foi simulada a partir de coeficientes de biodegradação, os quais foram calibrados em função do comprimento de pluma dos compostos monitorados em campo. Para comparação do comprimento das plumas elaboradas com os valores de campo e as plumas simuladas com o modelo matemático, os passos temporais escolhidos foram os mesmos onde houve análises de qualidade da água no experimento de campo (4, 6, 14, 17 e 26 meses para o etanol e 4, 6, 10, 14, 18, 25 e 33 meses para o benzeno).

No cenário simulado, foi criada uma única área reativa, com as mesmas propriedades hidrogeológicas do domínio de simulação, porém, foram utilizados dois coeficientes de biodegradação distintos, em função da dinâmica de biodegradação do etanol e benzeno ao longo do processo.

A fim de simular os processos de transporte e transformação dos compostos químicos como no experimento de campo, optou-se por, no primeiro momento não considerar a biodegradação do benzeno enquanto o etanol estava presente na área, e ativar coeficiente de decaimento do benzeno na área reativa apenas após a exaustão do etanol. Os valores adotados como coeficientes de decaimento do etanol e benzeno foram obtidos por tentativa e erro para igualar as plumas de ambos os compostos da simulação às plumas do experimento de campo. Os valores dos coeficientes utilizados representam uma tendência central entre os valores de coeficientes encontrados na fonte e nas plumas.

A configuração da área reativa considerou a área de abrangência das plumas de etanol e de benzeno, onde ocorre o processo de biodegradação. Sendo assim, as dimensões da área reativa para este cenário foram adotadas a partir do maior comprimento de pluma (etanol/benzeno) obtido em campo.

### 2.4. Avaliação do modelo SCBR na simulação da tecnologia bioestimulação com nitrato

A avaliação do modelo SCBR para simular a tecnologia bioestimulação foi realizada pela comparação entre o comprimento de pluma dos compostos simulados e medidos, utilizando-se o

conceito de amplitude de localização, isto é, a possível localização do composto na área em estudo. A amplitude de localização foi definida na direção do fluxo predominante, sendo a distância entre o poço de monitoramento (PM) onde a concentração medida foi maior que o valor de corte e o PM onde o composto não foi detectado. Desta forma, o resultado dos comprimentos de pluma do experimento de campo (medido) é verificado em função da detecção dos compostos químicos nos poços de monitoramento (PM) cuja distância da fonte é conhecida (2, 4, 6, 8, 10 metros e assim por diante - Figura 1, direita). O erro foi identificado comparando-se as duas amplitudes de localização, amplitude simulada e amplitude medida, sendo verdadeiro (V) se as amplitudes coincidem e falso (F), em caso contrário. A estimativa do erro foi obtida a partir dos limites das amplitudes, subtraindo-se o limite superior da amplitude medida da simulada. Nos casos de não coincidência de comprimento de plumas, foi atribuído um sinal positivo (+) para o erro quando o comprimento da pluma simulada foi superior à pluma medida em campo, e um sinal negativo (-) em caso oposto.

Para a avaliação do comprimento de plumas, os passos temporais utilizados foram selecionados a partir das coletas realizadas em campo, e, dentre elas, selecionou-se as coletas onde o valor medido foi maior que o valor de corte adotado para cada composto.

### 3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

#### 3.1. Calibração do Modelo SCBR

A simulação do fluxo subterrâneo foi realizada utilizando-se os dados de entrada para a caracterização hidrogeológica. A partir da análise residual efetuada, considerou-se o modelo como calibrado, pois o valor do quociente entre desvio padrão e amplitude é significativamente inferior a 15%, conforme o recomendado por Anderson e Woessner (1992).

Os resultados das simulações do fluxo indicaram que a velocidade da água subterrânea, varia de  $5 \text{ m.ano}^{-1}$  a  $8 \text{ m.ano}^{-1}$  estando de acordo com a velocidade estimada pelo traçador. O mapa potenciométrico aponta que o escoamento subterrâneo local ocorre preferencialmente no sentido noroeste-sudeste do maior potencial para o menor potencial. A região sudoeste da área do experimento de bioestimulação com nitrato possui maior condutividade hidráulica ( $6,67 \times 10^{-4} \text{ cm.s}^{-1}$ ) e conseqüentemente uma maior velocidade do fluxo subterrâneo em comparação com a região nordeste da área (aproximadamente  $4,25 \times 10^{-4} \text{ cm.s}^{-1}$ ).

#### 3.2. Avaliação do modelo SCBR na simulação da tecnologia de bioestimulação com nitrato

O modelo SCBR permite testar ações que alteram o cenário simulado, em um momento posterior ao início do derramamento, estas alterações apenas surtirão efeito no passo de tempo posterior ao que foram inseridas. Na simulação, a área reativa foi inserida no segundo mês de simulação, conforme experimento de campo e durante as simulações foram realizadas duas alterações nos coeficientes de biodegradação dos compostos químicos simulados. Na primeira etapa foi considerada apenas a biodegradação do etanol ( $k = 4,8 \text{ ano}^{-1}$ ). Na segunda etapa, no 18º mês foi alterado o coeficiente de biodegradação do benzeno ( $k = 13 \text{ ano}^{-1}$ ), devido ao esgotamento do etanol, passando a ter efeito no 19º mês. As configurações da área reativa encontram-se na Tabela 2.

Tabela 2: Coeficientes de decaimento inseridos na área reativa

Etapas	Intervalo de atuação (meses)	$k$ -etanol ( $\text{ano}^{-1}$ )	$k$ -benzeno ( $\text{ano}^{-1}$ )
1	3-18	4,8	Não considerado
2	19-33	Não considerado	13

A Tabela 3 apresenta a comparação do comprimento entre a pluma de etanol medida em campo e simulada no modelo. Para os cinco passos temporais comparados (4, 6, 14, 17 e 26 meses),

com exceção do tempo 26 meses o comprimento da pluma onde houve coincidência, para os demais tempos a pluma simulada foi superior em comprimento que a medida, fato positivo, visto que o modelo busca apresentar sempre o cenário conservador por questões de segurança.

Tabela 3: Análise da amplitude de detecção entre a pluma de etanol medida em campo e simulada.

<b>Etanol</b>				
<b>Tempo (meses)</b>	<b>Amplitude em campo (m)</b>	<b>Amplitude na simulação (m)</b>	<b>Coincidem? (V/F)</b>	<b>Erro (m)</b>
<b>4</b>	2-4	4-6	F	+2
<b>6</b>	2-4	6-8	F	+4
<b>14</b>	4-6	8-10	F	+4
<b>17</b>	6-8	8-10	F	+2
<b>26</b>	0	0	V	0

O mesmo procedimento foi aplicado para o benzeno, as concentrações superiores ao valor de corte, no experimento de campo aos primeiros 10 meses, eram observadas principalmente na região da fonte de contaminação. Dos 10 meses aos 25 meses a pluma de benzeno avançou, alcançando a faixa dos 10-16 metros, após esse período a pluma de benzeno retraiu para 4m.

O esgotamento do etanol no experimento de campo, no nível 2,3 m, ocorreu entre o 17° e o 25° mês, sendo assim, a biodegradação do benzeno na área reativa da simulação só foi iniciada a partir do 19° mês (Tabela 2). A partir do momento em que foi inserido o coeficiente de decaimento do benzeno na simulação, houve grande redução na evolução da pluma e no 22° mês ocorreu o início da retração da mesma. Como pode ser verificado na Tabela 4, após o esgotamento do etanol, a partir dos 18 meses, houve o comprimento de pluma do benzeno medido e simulado foi equivalente.

Tabela 4: Análise da amplitude de detecção entre a pluma de benzeno medida em campo e simulada.

<b>Benzeno</b>				
<b>Tempo (meses)</b>	<b>Amplitude em campo (m)</b>	<b>Amplitude na simulação (m)</b>	<b>Coincidem? (V/F)</b>	<b>Erro (m)</b>
<b>4</b>	2-4	4-6	F	+2
<b>6</b>	2-4	4-6	F	+2
<b>10</b>	4-6	6-8	F	+2
<b>14</b>	4-6	8-10	F	+4
<b>18</b>	10-16	10-16	V	0
<b>25</b>	10-16	10-16	V	0
<b>33</b>	2-4	2-4	V	0

#### 4. Conclusão

A simulação da tecnologia bioestimulação com nitrato com o modelo SCBR com a criação de área reativa mostrou-se eficaz na retração e biodegradação das plumas simuladas (etanol e benzeno). Os coeficientes de decaimento encontrados para o etanol e benzeno,  $4,8 \text{ ano}^{-1}$  e  $13 \text{ ano}^{-1}$ , respectivamente, nas áreas reativas dependem não só do volume derramado, mas também podem

variar de acordo com as características hidrogeológicas do local, biodisponibilidade do receptor de elétrons utilizado no meio subterrâneo e a dimensão do acidente.

No estudo específico, o tamanho da área reativa foi escolhido em função dos resultados apresentados por Costa (2008). Em casos reais, recomenda-se que a área reativa possua as mesmas dimensões da área de estudo (domínio de simulação), pois o coeficiente de biodegradação atua somente sobre a área reativa. Sendo assim, se a área reativa for configurada com as mesmas dimensões da área da fonte, é possível que a massa do composto migre com o transporte advectivo ultrapassando os limites da área reativa e deixe de ser submetido as suas condições e taxa de decaimento. Com a funcionalidade área reativa, o gestor da área impactada pode avaliar o coeficiente de biodegradação proposto pela empresa de remediação, e iniciar o processo de remediação, considerando o tempo já decorrido após o derramamento.

A aplicação do conceito amplitude de localização foi necessária devido ao reduzido número de pontos com concentrações detectadas em campo e consequente reduzida malha amostral. A estimativa de erro identificou que o comprimento de pluma do modelo matemático foi superior àquele do experimento de campo, sendo a maior diferença identificada entre o comprimento de pluma simulado e medido de 4 metros, tanto para o benzeno quanto para o etanol. O fato das plumas simuladas terem comprimento superior às plumas medidas foi considerado positivo, pois por medidas de segurança, os resultados conservadores são desejáveis.

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ANDERSON, M. P; WOESSNER, W. M. (1992). *Applied Groundwater Modeling: Simulation of Flow and Advective Transport*. Academic Press, Inc., San Diego, California, 381p.
- ASTM D5981-96. (2008). *Standard Guide for Calibrating a Groundwater Flow Model Application* (Withdrawn 2017), ASTM International, West Conshohocken, PA.
- ASTM D5490-93. (2014)e1. *Standard Guide for Comparing Groundwater Flow Model Simulations to Site-Specific Information*. ASTM International, West Conshohocken, PA.
- CETESB (2009). *Decisão de Diretoria N° 263/2009/P*. Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. São Paulo-SP.
- CETESB (2015). *O gerenciamento de áreas contaminadas no Estado de São Paulo. Cadastro de áreas contaminadas e reabilitadas no Estado de São Paulo*. Companhia Ambiental do Estado de São Paulo. São Paulo-SP.
- COSTA, A. H. R. (2008). *Bioestimulação com injeção de nitrato em águas subterrâneas impactadas por derramamento de gasolina com etanol*. Tese de Doutorado em Engenharia Ambiental. UFSC - Florianópolis. 229p.
- MS (2011). *Portaria ministerial N° 2.914/2011*. Ministério da Saúde. Brasil.
- NBR 16210 (2013). *Modelo conceitual no gerenciamento de áreas contaminadas – Procedimento*. Associação Brasileira de Normas Técnicas (ABNT). ABNT/CEE-068