

**UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA SANITÁRIA E
AMBIENTAL**

José Vinícius Boing de Souza

**APLICABILIDADE DO MODELO MATEMÁTICO SCBR NA
SIMULAÇÃO DO TRANSPORTE DE COMPOSTOS AROMÁTICOS
PROVENIENTES DE DERRAMAMENTO DE BIOCOMBUSTÍVEIS
A PARTIR DE ESTUDO DE CAMPO NA ZONA NÃO SATURADA**

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

Orientador: Prof. Dr. Henry Xavier Corseuil

Coorientadora: Dra. Cristina Cardoso Nunes

Florianópolis
2018

UNIVERSIDADE FEDERAL DE SANTA CATARINA
CENTRO TECNOLÓGICO
CURSO DE GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA SANITÁRIA E
AMBIENTAL

Aplicabilidade do modelo matemático SCBR na simulação de
compostos aromáticos provenientes de derramamento de
biocombustíveis a partir de estudo de campo na zona não saturada

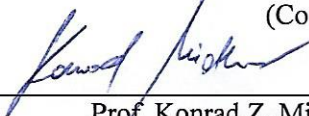
JOSÉ VINÍCIUS BOING DE SOUZA

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

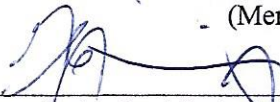
Prof. Henry Xavier Corseuil, Dr.
(Orientador)



Cristina Cardoso Nunes, Dra.
(Coorientadora)



Prof. Konrad Z. Miotlinki, DR.
(Membro da Banca)



Carlos José de Amorim Júnior, Msc.
(Membro da Banca)

FLORIANÓPOLIS (SC)
JANEIRO 2018

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

Souza, José Vinícius Boing de
Aplicabilidade do modelo matemático SCBR na
simulação de compostos aromáticos provenientes de
derramamento de biocombustíveis a partir de estudo
de campo na zona não saturada / José Vinícius Boing
de Souza ; orientador, Henry Xavier Corseuil,
coorientador, Cristina Cardoso Nunes, 2018.
105 p.

Trabalho de Conclusão de Curso (graduação) -
Universidade Federal de Santa Catarina, Centro
Tecnológico, Graduação em Engenharia Sanitária e
Ambiental, Florianópolis, 2018.

Inclui referências.

1. Engenharia Sanitária e Ambiental. 2. Zona não
saturada. 3. Biocombustível. 4. Modelo matemático
SCBR. I. Corseuil, Henry Xavier. II. Nunes,
Cristina Cardoso. III. Universidade Federal de
Santa Catarina. Graduação em Engenharia Sanitária e
Ambiental. IV. Título.

AGRADECIMENTOS

Agradeço a equipe e membros do REMA pelas amizades e aprendizado ao longo de todo o meu tempo lá. Agradeço ao Professor Henry Xavier Corseuil por aceitar ser meu orientador e pela oportunidade de realizar um trabalho nessa área. Agradeço especialmente a Cristina Cardoso Nunes, por aceitar ser minha coorientadora, me apoiar e me aguentar durante toda a realização deste trabalho.

Agradeço aos meus amigos pela compreensão e apoio durante esta fase.

Agradeço à minha mãe, pai e irmão pelo apoio e incentivo durante toda a minha graduação e formação.

RESUMO

Devido à quantidade crescente de postos de combustíveis no Brasil, há um risco cada vez maior de ocorrer vazamentos e migração de compostos químicos no solo, implicando em impactos ambientais e à saúde humana. A utilização de modelos matemáticos pode auxiliar na prevenção desses casos, assim como na remediação de solos contaminados. O objetivo geral do trabalho é avaliar a aplicabilidade do modelo SCBR para simulação do transporte de compostos aromáticos provenientes de biocombustíveis a partir de estudo de campo na zona não saturada. Este trabalho foi baseado em um estudo de campo de derramamento controlado de 200 litros do biocombustível E85 (85% etanol e 15% gasolina pura) na zona não saturada, realizado na Fazenda Experimental da Ressacada (UFSC, Florianópolis). A análise da aplicabilidade do modelo para o objetivo do trabalho foi realizada tanto por meio da comparação do tempo de chegada do benzeno na fase dissolvida no meio saturado entre o estudo de campo e a simulação com o SCBR, como também através de uma análise de sensibilidade para variáveis consideradas relevantes. O resultado da simulação com as condições do experimento de campo apontou um tempo necessário de 201 dias para o benzeno atingir o lençol freático enquanto o estudo de campo apresentou a contaminação do lençol no primeiro dia. Dentre as limitações do modelo que podem ter influenciado no resultado obtido, destacam-se a o processo de migração do etanol na fase pura e a solubilização do benzeno no álcool e a flutuação do nível do lençol, processos não simulados pelo modelo. Ainda que a estimativa de variáveis de forma secundária (recarga, massa derramada, porosidade total do solo, fração de carbono orgânico) tenha acarretado incertezas no resultado obtido, o modelo requer revisões para estabelecer as suas limitações a fim de permitir que o seu uso apoie as tomadas de decisão no gerenciamento de áreas impactadas. A comparação com outros modelos matemáticos para o mesmo cenário permitirá aprofundar a avaliação sobre as limitações e incertezas da simulação no meio não saturado influenciadas pela presença do etanol e por significativas variações do lençol freático.

PALAVRAS-CHAVE: Zona não saturada; Biocombustível; Modelo matemático SCBR.

ABSTRACT

Due to the increasing number of fuel stations in Brazil, there is an increasing risk of leaks and migration of chemical compounds in the soil, implying impacts in the environment and in human health. The use of mathematical models can help prevent such cases, as well as remediation of contaminated soils. The main goal of this work is to evaluate the applicability of the SCBR model for the simulation of aromatic compounds of biofuels based on a field study in the unsaturated zone. This work was based on a field study of controlled spillage of 200 liters of biofuel E85 (85% ethanol and 15% pure gasoline) in the unsaturated zone, performed at the Experimental Farm of Ressacada (UFSC, Florianópolis). The analysis of the applicability of the model was done both by comparing the arrival time of the benzene, in the dissolved phase, in the saturated medium between the field study and the SCBR simulation, as well as through a sensitivity analysis of the variables considered relevant. The results of the simulation with the conditions of the field experiment indicated a required time of 201 days for the benzene to reach the water table while the field study showed the contamination of the sheet on the first day. Among the limitations of the model that may have influenced the obtained result, highlight the migration of ethanol in pure phase, the solubilization of benzene in ethanol and the flotation of the level of the sheet. Although the estimation of variables of secondary form (recharge, spillage, total porosity, organic carbon fraction) has caused uncertainties in the result obtained, the model requires revisions to allow its use to support decision making in the management of impacted areas. Comparison with other mathematical models for the same scenario will allow a more in-depth evaluation of the limitations and uncertainties of the simulation in the unsaturated environment influenced by the presence of ethanol and significant variations of the water table.

KEY WORDS: Unsaturated Zone; SCBR mathematical model; Biofuel.

LISTA DE FIGURAS

Figura 1: Localização da Fazenda experimental da Ressacada e áreas experimentais.	7
Figura 2: fonte de liberação de E85.....	8
Figura 3: Representação do meio poroso na zona não saturada e saturada.....	13
Figura 4: Processos simulados na zona não saturada	18
Figura 5: Condições de contorno para a simulação no meio não saturado	19
Figura 6: Quadro das variáveis necessárias para a simulação	22
Figura 7: Camadas do solo da área experimental B100-OQP-B	32
Figura 8: Transporte do benzeno para a profundidade de 0,25 m (base da fonte) e 1,6 m (nível do lençol)	50

LISTA DE TABELAS

Tabela 1: Coleta da concentração de benzeno a 2 metros de profundidade, abaixo da fonte.....	9
Tabela 2: Propriedades físico-químicas do etanol	10
Tabela 3: Propriedades físico-químicas da gasolina C.....	11
Tabela 4: Frações de TPH e valores de toxicidade de referência.....	12
Tabela 5: Variáveis do modelo de transporte na zona não saturada	21
Tabela 6: Áreas experimentais e estudos realizados	31
Tabela 7: Características hidrogeológicas da lente	34
Tabela 8: Peso molar e massa específica do etanol e Gasolina pura.....	35
Tabela 9: Frações volumétricas das substâncias destacadas da gasolina	35
Tabela 10: Dados de entrada (combustível e composto) para simulação.	36
Tabela 11: Dados de entrada para simulação na zona não saturada.....	38
Tabela 12: Análise da relação de massa.....	40
Tabela 13: Parâmetros para análise de sensibilidade da profundidade da fonte e caminho de lixiviação	41
Tabela 14: Parâmetros para análise de sensibilidade	41
Tabela 15: Frações volumétricas das substâncias de destaque do E85 ..	44
Tabela 16: Concentrações de benzeno (C_B), TPH (C_{TPH}) e relação C_B/C_{TPH}	46
Tabela 17: Dados de entrada para simulação	47
Tabela 18: Variação da concentração do benzeno nos 10 primeiros dias	51
Tabela 19: Variáveis necessárias para simulação abaixo da fonte – Equações 6 e 7	51
Tabela 20: Análise de sensibilidade	52
Tabela 21: Dispersividade e coeficiente de dispersão simulados.....	54
Tabela 22: Resultados da presença da lente	55
Tabela 23: Precipitações medidas na base aérea para os anos de 2005 a 2010	91

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

BTEX - Benzeno, Tolueno, Etilbenzeno, o-Xileno, m-xileno e p-xileno

NAPL - Non Aqueous Phase Liquid

REMA - Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio Ambiente

SCBR - Solução Corretiva Baseada no Risco

TDR - Time Domain Reflectometry

TPH - Hidrocarbonetos Totais de Petróleo

GLOSSÁRIO

Áreas Contaminadas: Uma área é declarada contaminada sob investigação como sendo aquela em que comprovadamente for constatada, mediante investigação confirmatória, a contaminação com concentrações de substâncias no solo ou na água subterrânea acima da qual existem riscos potenciais, diretos ou indiretos, à saúde humana, considerando um cenário de exposição padronizado (i.e., acima dos valores de investigação).

BTEX: Classificação do grupo de hidrocarbonetos monoaromáticos composto por benzeno, tolueno, etilbenzeno e isômeros de xilenos, componentes da gasolina brasileira.

Modelo Matemático: Ferramenta de representação matemática de um processo físico ou natural, apresentando uma versão simplificada de um sistema complexo.

Zona não saturada: Zona entre a superfície da terra e a franja capilar caracterizada por poros preenchidos predominantemente por ar e em menor quantidade por água. O teor de umidade é inferior ao da saturação e a pressão é inferior à pressão atmosférica.

Zona saturada: Região do aquífero onde todos os vazios estão totalmente preenchidos por água. Fica situada abaixo da superfície freática e nela todos os vazios existentes no terreno estão preenchidos com água.

Fase Dissolvida: é a transferência de massa de hidrocarbonetos de maior solubilidade para a água. A quantidade de produto que se dissolve depende essencialmente da solubilidade dos constituintes dos hidrocarbonetos e do grau de mistura entre a fase livre e a água subterrânea. Esta fase representa a mais importante fonte de dispersão do meio físico.

Fase Livre ou NAPL (Non Aqueous Phase Liquid): é constituída por compostos imiscíveis de densidade relativa inferior à da água com tendência à flutuabilidade no topo do lençol freático.

Fase Adsorvida: é considerada como sendo o conjunto de contaminantes orgânicos retidos à superfície ou estrutura dos minerais constituintes do solo e do aquífero, localizados acima ou abaixo da superfície freática.

Fase Residual: é definida como o conjunto de gotas desconectadas do NAPL e que formam uma fase descontínua e estática no meio físico.

Fase de Vapor: é caracterizada pela transferência de alguns compostos orgânicos voláteis por volatilização da fase líquida para os poros vazios do material geológico. Os hidrocarbonetos da fase de vapor são muito mais móveis e podem migrar relativamente a grandes distâncias ao longo de caminhos de fluxo preferenciais como fraturas, juntas, camadas de areia e linhas de utilidades subterrâneas.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
2	OBJETIVOS	4
2.1	Objetivo Geral	4
2.2	Objetivos Específicos	4
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....	6
3.1	Biocombustíveis	6
3.2	Estudo de campo da área experimental E85	7
3.3	Etanol.....	9
3.4	Gasolina Comercial Brasileira	11
3.5	Hidrocarbonetos Totais de petróleo (TPH).....	11
3.6	Zona Não Saturada	12
3.7	Modelagem matemática.....	15
3.7.1.	Simulação do transporte na zona não saturada.....	15
3.7.2.	SCBR.....	17
3.7.3.	Características do modelo SCBR	17
3.7.4.	Transporte de contaminantes na zona não saturada.....	22
4	METODOLOGIA	31
4.1	Caracterização hidrogeológica da área E85.....	31
4.2	Dados de entrada para simulação na zona não saturada	33
4.2.1.	Solo.....	33
4.2.2.	Combustível e Composto	34
4.2.3.	Estimativa do valor de recarga	36
4.2.4.	Estimativa da concentração de benzeno e TPH no solo	37
4.3	Comparação com o estudo de campo	39
4.4	Análise de sensibilidade	39
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO	44
5.1	Simulação na zona não saturada	44

5.1.1.	Dados de entrada.....	44
5.1.2.	Comparação dos resultados simulados e de campo	48
5.2	Análise de sensibilidade	51
5.2.1.	Análise das variáveis.....	51
5.2.2.	Influência da volatilização	54
5.2.3.	Cenário conservador	56
5.3	Limitações observadas no modelo SCBR	56
6	CONCLUSÕES	59
7	RECOMENDAÇÕES.....	61
8	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	62

1 INTRODUÇÃO

No início do ano de 2017, aproximadamente quarenta mil postos de abastecimento distribuídos pelo território brasileiro (ANP, 2017) representavam fontes potenciais de contaminação para o solo subsuperficial e a água subterrânea. Considerando a problemática de contaminação por hidrocarbonetos de petróleo, desde 1994, o Núcleo de Pesquisas REMA (Núcleo Ressacada de Pesquisas em Meio ambiente), em parceria com a Petrobras, pesquisa o comportamento dessas substâncias no solo e métodos de prevenção e remediação em casos de acidentes a partir de experimentos de campo. Os resultados da pesquisa de Atenuação Natural Monitorada do derramamento controlado de gasolina brasileira (FERNANDES, 1997; KAIPPER, 2003) em relação à influência do etanol no transporte e transformação dos compostos aromáticos no meio subterrâneo motivou o desenvolvimento do modelo matemático SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) em 2001. O objetivo inicial era auxiliar na identificação e prevenção de impactos ambientais no meio saturado causados por derramamentos de combustíveis, a partir das características dos combustíveis brasileiros e seu comportamento diferenciado no meio subterrâneo e tendo como base os resultados obtidos em campo (Corseuil et al, 2006).

A partir de novas demandas da PETROBRAS, o simulador evoluiu como uma importante ferramenta de apoio à tomada de decisão em ações preventivas e no gerenciamento ambiental de áreas contaminadas. Atualmente, além da simulação do fluxo e do transporte de contaminantes na zona saturada (modelo numérico bidimensional) e não saturada (modelo analítico unidimensional), o SCBR permite a realização de planos de amostragens de solos e águas subterrâneas, avaliação de risco à saúde humana, determinação de estimativas de cubagem de solo, simulação de técnicas de remediação de aquíferos e avaliação de cenários acidentais de forma preventiva (SCBR, 2015).

O modelo SCBR vem sendo utilizado em avaliações de risco à saúde humana, simulações de derramamentos na zona saturada em casos reais da Petrobras, sendo que período de 2011-2014 foi relevante em função do uso do modelo em 22 áreas de negócio da empresa conforme contrato entre a UFSC e a empresa de Petróleo e Gás. Porém, o modelo não foi muito utilizado para simulações na zona não saturada até o momento, pois nas simulações foram priorizados cenários mais conservadores com derramamentos diretamente na zona saturada.

Para prevenir e remediar a contaminação de solos e recursos hídricos subterrâneos é relevante a utilização de modelos matemáticos

que possam descrever o transporte de substâncias químicas nos meios saturado e não saturado. O uso crescente de modelos matemáticos para o gerenciamento de áreas impactadas e na preservação de acidentes demonstra a importância do conhecimento de suas limitações na representação de processos que ocorrem no meio ambiente. Em relação ao meio não saturado, devido a demanda de modelos para este fim, atualmente existem diversos modelos capazes de realizar simulações de transporte de contaminantes no solo. Para a zona não saturada SCBR é um modelo analítico e unidimensional e serve de suporte para a quantificação do risco no modelo, entretanto há outros modelos como o HYDRUS-1D (ŠIMŮNEK, 2006) e CHEMFLO-2000 (NOFZIGER e WU, 2003), de domínio público, que são modelos numéricos e unidimensionais, ou como MODFLOW-SURFACT e HYDRUS 2D/3D, com licença comerciais, que são bidimensionais ou tridimensionais e numéricos (ŠIMŮNEK, 2006).

Assim, o objetivo geral deste trabalho é avaliar a aplicabilidade do modelo SCBR na simulação de derramamentos de biocombustíveis a partir de um estudo de campo realizado na Fazenda da Ressacada (UFSC - Florianópolis) na zona não saturada do solo. Em relação ao meio não saturado, o modelo SCBR considera a migração do contaminante através da zona não saturada apenas sob a forma dissolvida (solubilização dos contaminantes na água que passa através da zona não saturada devido à recarga do aquífero), como lixiviado, e o transporte de vapores a partir do solo para o ar. O modelo SCBR considera a existência de fase residual, isto é, uma fase aquosa imiscível, não dissolvida no termo fonte. Além disso, o modelo assume que o nível do lençol freático, a recarga, as perdas de massa por lixiviação e volatilização são constantes durante o tempo de simulação.

No presente trabalho, a avaliação da aplicabilidade do modelo para simulação de derramamentos de biocombustíveis no solo foi avaliada a partir de um estudo de campo realizado na Fazenda da Ressacada (UFSC - Florianópolis, SC) com o derramamento controlado do biocombustível E85 (15% de gasolina pura, 85% de etanol) na zona não saturada. Dada a relevância do tempo de migração de compostos químicos até o nível do lençol em caso de derramamentos em solo, a principal ênfase para o caso de estudo será o tempo de migração do composto aromático (benzeno) até o nível d'água e sua comparação com os resultados obtidos em campo. Além disso, uma análise de sensibilidade será realizada em relação a variáveis que influenciam significativamente no processo de lixiviação como a recarga, a fração de carbono orgânico, a espessura da fonte e massa do composto derramado.

2 OBJETIVOS

2.1 Objetivo Geral

O objetivo geral do trabalho é avaliar a aplicabilidade do modelo SCBR para simulação do transporte de compostos aromáticos provenientes do derramamento de biocombustíveis a partir de estudo de campo na zona não saturada.

2.2 Objetivos Específicos

- a. Comparar os resultados do modelo SCBR com os resultados de campo quanto ao tempo do hidrocarboneto aromático benzeno na fase dissolvida atingir o lençol freático.
- b. Realizar a análise de sensibilidade para variação recarga, fração de carbono orgânico, massa de composto derramado, coeficiente de biodegradação e a profundidade da fonte.
- c. Apresentar limitações do modelo matemático SCBR para simulação do transporte de biocombustíveis na zona não saturada.

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

3.1 Biocombustíveis

Produzidos a partir de biomassa renovável, os biocombustíveis são uma opção mais sustentável para a substituição de combustíveis derivados de petróleo e gás natural. Dentre os biocombustíveis produzidos no Brasil, os mais importantes são o etanol, obtido a partir de cana-de-açúcar, e o biodiesel, produzido a partir de óleos vegetais e gordura animal (ANP, 2016a).

As razões para o investimento na produção dos biocombustíveis focam principalmente na redução da dependência de petróleo, da emissão de poluição veicular e do lançamento de gases de efeito estufa na atmosfera. Cerca de 45% da energia e 18% dos combustíveis consumidos no Brasil são renováveis (Leite e Leal, 2007; ANP, 2016).

Em 2003, tiveram início os estudos para a criação de uma política para o biodiesel no Brasil e no final de 2004 foi lançado o Programa Nacional de Produção e Uso do Biodiesel. Com o programa, foi determinada a obrigatoriedade da mistura de 2% de biodiesel com petrodiesel a partir de janeiro de 2008. O plano atual é aumentar o percentual de biodiesel para 10% da mistura até março de 2019 (Leite e Leal, 2007; ANP, 2016).

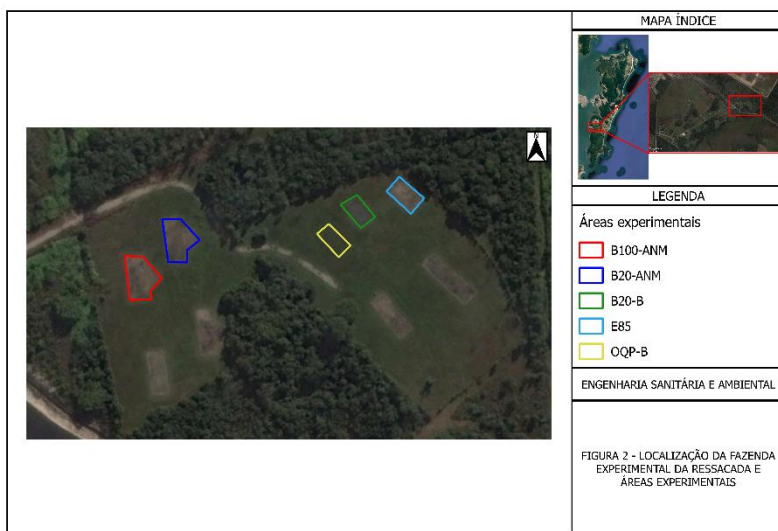
Já para o etanol, o Brasil se destaca mundialmente na sua produção a partir da cana-de-açúcar. Com o lançamento do Proálcool em 1975, o investimento no etanol aumentou, para a produção de energia, combater a crise do petróleo da época e apoiar a indústria açucareira após a queda do preço de açúcar em 1974. No início do programa foi determinada uma mistura do etanol à gasolina de cerca de 20% (BASTOS, 2007; Leite e Leal, 2007).

Dada a possibilidade técnica da mistura do etanol com combustíveis, diversas frações volumétricas de etanol e gasolina são possíveis. O E10 (10% etanol e 90% gasolina) pode de ser utilizado por qualquer veículo, sem requisitar qualquer adaptação para o etanol, e não diminui o desempenho e consumo (WORLDWATCH INSTITUTE, 2007). No Brasil a gasolina comercial brasileira apresenta em sua composição uma mistura de 27% de etanol (BRASIL, 2015). O E85 (85% etanol e 15% gasolina) é utilizado em países como os Estados Unidos, Canadá e Suécia e requer que o veículo esteja adaptado à alta presença do etanol, essa mesma tecnologia foi modificada para a realidade brasileira, devido à presença de etanol na gasolina. (WORLDWATCH INSTITUTE, 2007).

3.2 Estudo de campo da área experimental E85

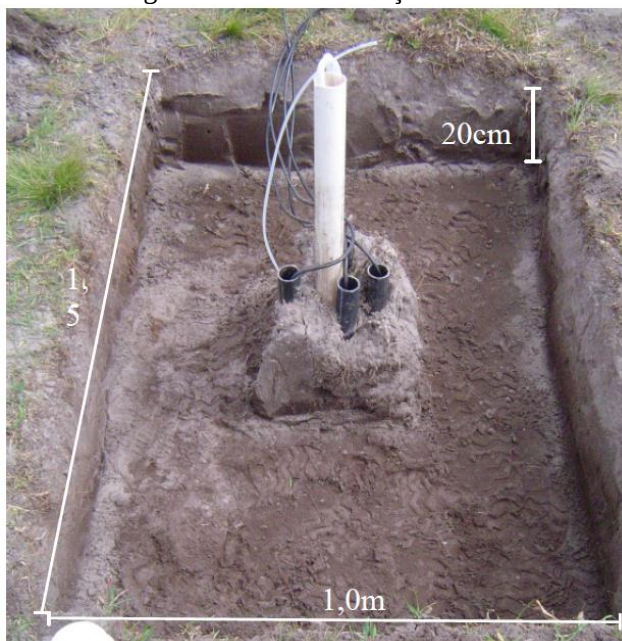
Dada a importância do uso de etanol na mistura com combustíveis fósseis, na Fazenda da Ressacada foi realizado um experimento com o combustível E85. De propriedade da Universidade Federal de Santa Catarina, a Fazenda Experimental está localizada na região sul de Florianópolis, próxima ao aeroporto Hercílio Luz. A Figura 1 apresenta a localização da Fazenda Experimental da Ressacada e as áreas experimentais.

Figura 1: Localização da Fazenda experimental da Ressacada e áreas experimentais.



O derramamento controlado de E85 foi estudado por Schneider (2012) e Farias (2011) por meio da liberação de 200 litros de E85, combustível composto de 85% etanol e 15% gasolina pura, na zona não saturada do solo da área experimental. A liberação foi realizada no dia 8 de setembro de 2010 em uma cavidade de 1,0 m de comprimento por 1,5 m de largura e 0,2 m de profundidade. A Figura 2 apresenta a fonte de liberação realizada no estudo.

Figura 2: fonte de liberação de E85



Fonte: Schneider (2012)

Schneider (2012) realizou o monitoramento do etanol na zona não saturada com a utilização de sondas TDR (*Time Domain Reflectometry* – Reflectometria no Domínio de Tempo), nas profundidades, 0,6, 0,9, 1,2 e 1,5 metros abaixo da superfície, durante 30 dias após a liberação do combustível. Farias (2012) realizou o monitoramento dos compostos BTEX e etanol na zona saturada com a utilização de poços multiníveis nas profundidades 2,0, 3,0, 4,0, 5,0 e 6,0 metros abaixo da superfície. Após o derramamento de E85 a vala cavada foi preenchida com o solo retirado e a área coberta com uma lona plástica, para reduzir a perda de massa por volatilização. Durante os 30 dias de monitoramento o nível do lençol freático variou entre 1,6 e 0,8 metros de profundidade.

O grande volume de etanol liberado causou a transferência da água presente no poro do solo para o fluido que migrava pela zona vadosa, ressecando o primeiro metro da zona não saturada. Mesmo chegando rapidamente à água subterrânea, parte do etanol permaneceu retido na zona vadosa, no período em que não houve grande variação do nível do lençol. Em casos em que grande volume de etanol é liberado, o etanol pode ficar retido na zona saturada e o volume restante de etanol pode

migrar para a zona saturada com a gasolina, em que os efeitos negativos do etanol sobre a degradação dos compostos BTEX estarão presentes (Schneider, 2012).

No estudo do derramamento do E85 Farias (2011) realizou a medição das concentrações na fase dissolvida de benzeno na profundidade de 2 metros abaixo da fonte, na zona não saturada. A Tabela 1 **Erro! Fonte de referência não encontrada.**apresenta as medições.

Tabela 1: Coleta da concentração de benzeno a 2 metros de profundidade, abaixo da fonte

Coleta	Tempo (dias)	Benzeno ($\mu\text{g/L}$)
1	1	5,82E+02
2	2	5,12E+02
3	5	2,59E+03
4	6	6,01E+03
5	7	4,06E+03
6	13	1,71E+04
7	20	7,98E+03
9	35	4,57E+03

3.3 Etanol

O etanol é o biocombustível mais utilizado no mundo, mesmo quando comparado a outros biocombustíveis como o biodiesel, que vem ganhando espaço em alguns países, como a Alemanha. O principal uso do etanol é como aditivo (anidro), misturado à gasolina com proporções da faixa de 20% a 100%. O uso do etanol como combustível (hidratado) ocorre quase exclusivamente no Brasil e Estados Unidos, enquanto o seu uso como aditivo ocorre em outros países em faixas menores que no Brasil. (BASTOS, 2007)

No Brasil o etanol é produzido através da fermentação de açúcares, principalmente o proveniente da cana-de-açúcar, e possui duas formas de utilização. Na forma de etanol anidro é usado como aditivo oxigenante da gasolina, em uma mistura de 27% (BRASIL, 2015) de etanol com gasolina, formando a chamada gasolina C (Tabela 3). A outra forma de etanol que é utilizada no Brasil é o etanol hidratado, utilizado como combustível acabado (ANP, 2016). A Tabela 2 apresenta os parâmetros físico-químicos do etanol.

Tabela 2: Propriedades físico-químicas do etanol

Fórmula	C₂H₆O	Unidade
Massa específica	0,789	g/cm ³
Peso molecular	46,1	g/mol
Coeficiente de partição de carbono orgânico (koc) (L.Kg ⁻¹)	1,19E+00	l/kg
Log do Coeficiente de partição octanol-água (logKow) (-)	0,002	-
Solubilidade em água (mg/L) 20°C	789000	Mg/l
Pressão de vapor	59,3	kPa
Coeficiente da lei de Henry (HLC) (atm·m ³ .mol ⁻¹)	2,04E-40	atm·m ³ /mol

Fonte: USEPA, 2016.

O etanol possui uma influência sobre os compostos BTEX em condições subsuperficiais. O etanol é o substrato preferencial na biodegradação por microorganismos em relação aos hidrocarbonetos da gasolina, sendo degradado mais rapidamente e reduzindo a degradação dos BTEX enquanto estiver no meio. Em misturas de etanol, água e gasolina, o etanol aumenta a solubilidade dos compostos BTEX e reduz a tensão interfacial entre gasolina e água, criando uma mistura única. A presença do etanol também realiza um efeito chamado de cossolvência e aumenta a concentração de compostos orgânicos hidrofóbicos na água, como o caso dos BTEX. O etanol também modifica o comportamento dos compostos na zona não saturada com a redução da franja capilar e causando um espalhamento horizontal maior sobre a mesma (POWERS et al, 2001; MACKAY et al, 2006; SPALDING et al, 2011; RASA et al, 2014).

O efeito cossolvência ocasionado pela presença de etanol em misturas apresenta como consequência o aumento da magnitude da contaminação pelo aumento da concentração de contaminantes na água. Esse risco ocorre em acidentes com a gasolina comercial brasileira, que possui etanol em mistura. O efeito causa um aumento da massa de contaminantes na fase aquosa e pode aumentar consideravelmente os custos de remediação (FERNANDES e CORSEUL, 1999).

3.4 Gasolina Comercial Brasileira

A gasolina é um produto derivado de petróleo, formada principalmente por uma mistura de hidrocarbonetos. Estes hidrocarbonetos estão enquadrados em maior parte nas classes das parafinas, olefinas, naftênicos e aromáticos, com cadeias formadas de quatro até 12 átomos de carbono e com ponto de ebulição variando entre 30°C a 215 °C (ANP, 2016). Das classes presentes na gasolina, os compostos aromáticos possuem em sua composição os compostos benzeno, tolueno, etilbenzeno e os xilenos, conhecidos como BTEX. A Tabela 3 apresenta propriedades físico-químicas da gasolina C.

Tabela 3: Propriedades físico-químicas da gasolina C

Propriedade	Valor	Unidade
Massa molar	100 a 105	g/mol
Massa específica a 20°C	730 a 770	kg/m ³
Pressão a vapor a 37,8°C	máx 69	kPa
Viscosidade a 29 °C	0,54	cP
Constante dielétrica a 20°C	2,07	-

Fonte: (a) ANP, 2011; (b) ANP, 2013; (c) Oliveira, 2001

Sob o aspecto ambiental a produção, transporte e armazenamento de gasolina e outros combustíveis derivados de petróleos são atividades possivelmente poluidoras. Segundo a Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis (ANP, 2017), no início do ano de 2017 havia 41.689 postos revendedores de combustíveis automotivos no Brasil, representando um alto risco de contaminação de águas subterrâneas e águas superficiais.

3.5 Hidrocarbonetos Totais de petróleo (TPH)

O termo TPH (Hidrocarbonetos totais de petróleo - *Total Petroleum Hydrocarbons*) é utilizado para descrever uma vasta família de diversos compostos químicos de originários de petróleo. Composto por diversos produtos, o TPH é uma mistura composta em maior parte por hidrogênio e carbono. Alguns exemplos de compostos que podem ser encontrados em TPHs são hexanos, benzeno, tolueno, xilenos, e outros produtos de petróleo e gasolina. (ATSDR, 1999; HHS, 1999)

Devido à diversa quantidade de produtos possíveis na composição de gasolinas e outros produtos, não é viável a medição da composição de cada produto presente na mistura. Desta forma, a medição do TPH da mistura é mais simples e prática. A quantidade de TPH pode ser um indicador geral de contaminação por petróleo no local em que foi encontrado, seja solo, água ou ar. (ATSDR, 1999; HHS, 1999)

Entretanto, a utilização de apenas um valor de TPH não é capaz de indicar a composição da mistura de hidrocarbonetos. É utilizado, então, o índice de número de carbono equivalente (*Equivalent Carbon Number Index* - EC), que utiliza o ponto de ebulição de hidrocarbonetos para a separação dos compostos de petróleo. Dessa forma o TPH pode ser dividido em frações alifáticas e aromáticas de interesse (HHS, 1999; MADEP 2002). A Tabela 4 apresenta as frações de TPH de interesse e os seus valores de toxicidade segundo MADEP (2003).

Tabela 4: Frações de TPH e valores de toxicidade de referência.

Fração de hidrocarboneto	Via Oral (mg/kg/dia)	Via Inalação (mg/m ³)
Alifáticos		
C5-C8	0,04	0,2
C9-C18	0,1	0,2
C19-C36	2	SV
Aromáticos		
C6-C8 (BTEX)	TC	TC
C9-C18	0,03	0,05
C19-C32	0,03	SV

TC: Valor de toxicidade do composto (benzeno, tolueno, etilbenzeno e xilenos) previsto em legislação nacional e internacional; SV: sem valor definido.

Fonte: MADEP, 2003.

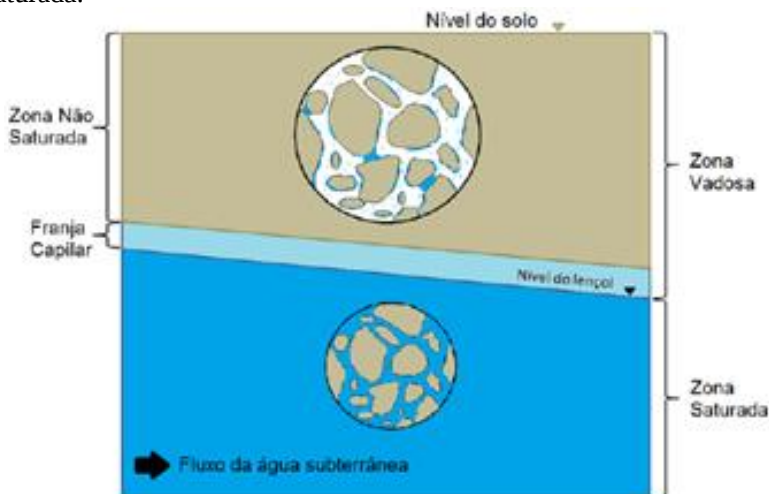
3.6 Zona Não Saturada

A zona não saturada é a camada de terra situada entre a superfície até a parte superior da franja capilar ou da superfície freática. É um meio poroso de saturação incompleta que possui vazios preenchidos por água ou ar. A água presente está sob o efeito da pressão negativa, que mantém a umidade presa aos sólidos, evitando que cheguem até a zona saturada. A zona não saturada pode ser separada em duas fases, a sólida e não sólida (ou fluida), está por sua vez é dividida em líquida e gasosa.

(FEITOSA, 2000; NIELSEN, 2006; CLEARY, 2007). A Figura 3 demonstra o meio poroso da zona saturada e zona não saturada.

A franja capilar é a zona intermediária entre a zona não saturada e a zona saturada. A sua altura varia com o tipo da geologia do solo, sendo maior em solos com uma menor granulação. Essa zona apresenta um nível de saturação, que decresce de sua base até o topo, representando um limite de profundidade, que abaixo dela o solo é considerado saturado. Essa zona se destaca por apresentar saturação e ao mesmo tempo pressão negativa, característica da zona não saturada. Desse modo, quando incluída junto da zona não saturada, essa região é denominada zona vadosa (FEITOSA, 2000; CLEARY, 2007)

Figura 3: Representação do meio poroso na zona não saturada e saturada.



Fonte: Schneider, 2012.

Esta região é caracterizada por ser um ambiente multifásico, com propriedades que diferem da zona saturada, por apresentar fase sólida (partículas do solo), fase líquida (água de constituição, umidade do solo, líquidos que podem estar presentes no meio) e fase gasosa (ar e vapores).

A fase sólida é composta por partículas de rochas, cascalhos, areia, silte, argila ou material orgânico, como raízes e folhas. Esta fase é a estrutura principal da zona não saturada e é o meio em que fluidos se movimentam ou ficam retidos. Características dessa fase são a

distribuição do tamanho das partículas, porosidade, arredondamento, angularidade, uniformidade e superfície específicas. Essas características estão conectadas com a zona fluida, modificando a velocidade, volume e outras variáveis (NIELSEN, 2006).

A presença de gases é o que diferencia a zona não saturada da zona saturada. A fase gasosa é o equilíbrio de gases e de líquidos presentes na zona. Quando ocorre algum evento de recarga ou precipitação, há um aumento de líquidos e diminuição de gases e após a água escorrer para a zona saturada, há um aumento de gases e diminuição de líquidos (NIELSEN, 2006).

A fase líquida é constituída por água, mas pode haver a presença de outro líquido que pode se miscível ou não na água. Os líquidos não miscíveis em água competem com a água para ocupar os espaços vazios dos poros e acabam ocorrendo misturas, um exemplo é a mistura de gasolina, água e gases. Os parâmetros que influenciam o comportamento dos líquidos imiscíveis são os mesmos que o da água, sendo estes: densidade, peso específico, viscosidade cinética e dinâmica, pressão de vapor, tensão superficial e molhabilidade. É dado um destaque a molhabilidade, que representa a afinidade de um líquido ficar aderido a um sólido, sendo que o líquido com melhor molhabilidade se adere e o outro não (NIELSEN, 2006).

Os hidrocarbonetos podem estar presentes na zona não saturada em fases diferentes. USEPA (1996) apresentou as seguintes definições:

Fase Dissolvida: é a transferência de massa de hidrocarbonetos de maior solubilidade para a água. A quantidade de produto que se dissolve depende essencialmente da solubilidade dos constituintes dos hidrocarbonetos e do grau de mistura entre a fase livre e a água subterrânea. Esta fase representa a mais importante fonte de dispersão do meio físico.

Fase Livre ou NAPL (Non Aqueous Phase Liquid): é constituída por compostos imiscíveis de densidade relativa inferior à da água com tendência à flutuabilidade no topo do lençol freático.

Fase Adsorvida: é considerada como sendo o conjunto de contaminantes orgânicos retidos à superfície ou estrutura dos minerais constituintes do solo e do aquífero, localizados acima ou abaixo da superfície freática.

Fase Residual: é definida como o conjunto de gotas desconectadas do NAPL e que formam uma fase descontínua e estática no meio físico.

Fase de Vapor: é caracterizada pela transferência de alguns compostos orgânicos voláteis por volatilização da fase líquida para os poros vazios do material geológico. Os hidrocarbonetos da fase de vapor são muito

mais móveis e podem migrar relativamente a grandes distâncias ao longo de caminhos de fluxo preferenciais como fraturas, juntas, camadas de areia e linhas de utilidades subterrâneas.

3.7 Modelagem matemática

Os modelos matemáticos são aproximações ou descrições conceituais que descrevem ou simulam sistemas naturais utilizando equações matemáticas. A aplicabilidade e usabilidade do modelo depende de quão próximo da realidade as equações matemáticas conseguem simular. Os modelos são uma representação simplificada e artificial de um sistema complexo e possui resultados imperfeitos. Para avaliar a sua aplicabilidade e poderem ser utilizados, é necessário ter conhecimentos e entendimento do sistema físico, experiência e dados de campos. O modelo então permite compreender melhor o sistema modelado e prever situações futuras ou passadas e direcionar uma tomada de decisões técnicas que poderiam não ser encontradas por outros meios (IRITANI, 1998; CLEARY, 2007; MDEQ, 2014).

A representação do sistema físico pode ser dada por um modelo analítico ou numérico. Modelos analíticos representam uma abordagem clássica da matemática para resolver equações diferenciais e apresentar um resultado exato para o problema. Entretanto, geralmente são sistemas simplificados e podem ser utilizados para cálculos com solos homogêneos, geometrias ou condições de contorno simplificadas, por exemplo. O modelo numérico é em geral mais eficiente para a solução de casos complexos e problemas práticos, permitindo a criação de casos que reflitam condições geológicas e hidrogeológicas complexas ou o controle de parâmetros e variáveis ao longo do tempo e espaço (ŠIMÚNEK, 2006).

Segundo Cleary (1998) e Bonganha et al. (2007), a modelagem matemática possui diversas aplicações, como: determinar poços de abastecimento de água; entender tridimensionalmente o sistema de fluxo de água subterrânea; avaliar alternativas de descontaminação de águas subterrâneas; prever destino e transporte de contaminantes.

3.7.1. Simulação do transporte na zona não saturada

Um grande número de substâncias químicas tem sido criado nas últimas décadas e frequentemente entram em contato com o ambiente, através da utilização de certas práticas agrícolas ou acidentalmente liberadas por indústrias ou por resíduos. Muitos desses compostos

representam um perigo de contaminação para o solo, água subterrânea e superficial e consequentemente a saúde humana (ŠIMŮNEK, 2006).

Devido ao uso contínuo de compostos químicos no solo e vazamentos em aterros e em tanques de armazenamento subterrâneo, essas substâncias tendem a se acumular na zona não saturada. Com uma migração gradual para aquíferos e recursos hídricos, apresentam um risco para a contaminação da água que pode ser utilizada para consumo humano, agrícola ou industrial (PIVER, 1991).

Para prevenir a contaminação de recursos hídricos subterrâneos e desenvolver métodos mais efetivos para tratamento de áreas e aquíferos contaminados é necessário utilizar modelos matemáticos que possam descrever o transporte de substâncias químicas na zona não saturada. Esses modelos podem ser ferramentas indispensáveis para entender e quantificar os processos de fluxo de água no solo e os processos de transporte de contaminantes (PIVER, 1991; ŠIMŮNEK, 2006).

Vários modelos matemáticos existentes possuem a capacidade de simular o transporte de contaminantes na zona não saturada, podendo ser de domínio público ou modelos comerciais, analíticos ou numéricos e unidimensionais a tridimensionais. Destes, podem se destacar alguns modelos como o HYDRUS, CHEMFLO-2000, MODFLOW-SURFACT e RISC.

O modelo HYDRUS apresenta diferentes versões para diferentes condições e casos. Para a zona não saturada o software de domínio público HYDRUS-1D apresenta um modelo numérico unidimensional para o transporte de contaminantes na fase dissolvida. O HYDRUS 2D/3D, é comercial, e apresenta modelos numéricos bidimensional e tridimensionais. Esses modelos foram desenvolvidos pela empresa PC-PROGRESS e são baseados na equação de Richards, resolvendo a equação com a utilização de elementos finitos para o fluxo de água na zona não saturada. Para o transporte de solutos assume um transporte advectivo-dispersivo na fase líquida e difusão na fase gasosa (ŠIMŮNEK, 2006).

O CHEMFLO-2000 é um modelo numérico unidimensional de domínio público e disponibilizado gratuitamente. É um modelo numérico que permite a simulação do movimento da água e o transporte de compostos químicos na zona não saturada. O software foi desenvolvido em uma parceria entre a USEPA e a Universidade Estadual de Oklahoma (NOFZIGER e WU, 2003).

Desenvolvido pela Waterloo Hydrogeologic, MODFLOW-SURFACT é um pacote baseado no modelo MODFLOW, de modelagem de água subterrânea. O pacote expande a aplicabilidade do

modelo para a zona não saturada, permitindo a simulação do fluxo da água. Também realiza a simulação do transporte de contaminantes, transporte multifásico, dissolução de NAPLs e o processos de volatilização (ŠIMŮNEK, 2006).

O último modelo citado é o RISC (Risk-Integrated Software for Clean-ups). Atualmente estão disponíveis as versões RISC4 e RISC5 no mercado. O software foi desenvolvido com o foco na quantificação do risco à saúde humana. Para o suporte no cálculo do risco, o software contém um modelo analítico para o transporte de contaminantes para a zona não saturada e um modelo numérico para o transporte na zona saturada (SPENCE e WALDER, 2011).

3.7.2. SCBR

O SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) é um modelo matemático para gerenciamento de áreas impactadas, desenvolvido para auxiliar a tomada de decisão no gerenciamento ambiental ou em áreas onde são desenvolvidas atividades potencialmente poluidoras. O SCBR permite a determinação do fluxo da água subterrânea (modelo numérico 2D); o transporte de contaminantes na zona não saturada (modelo analítico 1D com volatilização e lixiviação dos contaminantes) e na zona saturada (modelo numérico 2D). Além disso, o modelo permite a definição de perímetros de proteção de aquíferos, a adoção de esquemas de distribuição de pontos para amostragem na área investigada, o cálculo e o mapeamento do risco à saúde humana e das concentrações máximas aceitáveis (CMA), considerando diversas rotas de exposição, a simulação de diversas tecnologias de remediação. No caso de contaminações por derramamentos de combustíveis brasileiros, onde existe a adição de etanol, o modelo SCBR considera a interferência do etanol sobre a biodegradação e a solubilidade dos hidrocarbonetos de petróleo apenas no meio saturado (SCBR, 2015).

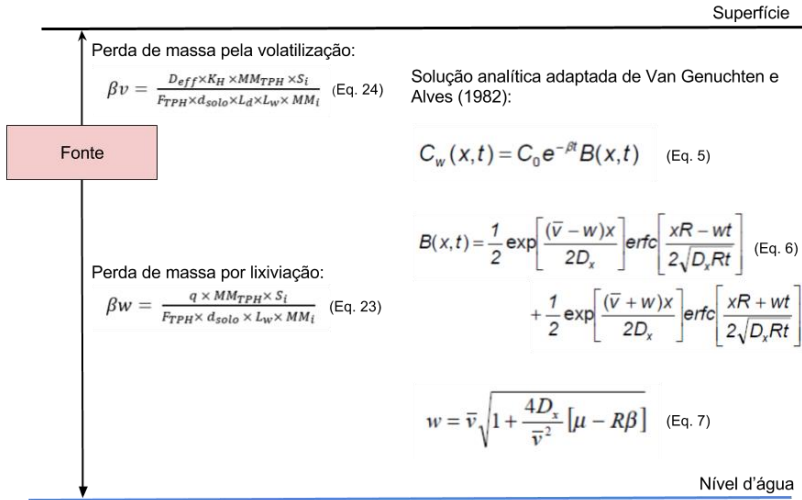
Com base em estudos de campo e de laboratório realizados pela Universidade Federal de Santa Catarina na Área Experimental da Fazenda Ressacada, o modelo SCBR (Solução Corretiva Baseada no Risco) foi desenvolvido pela Universidade Federal de Santa Catarina, em parceria com a PETROBRAS e a empresa de base tecnológica ESSS (*Engineering Simulation and Scientific Software*). Os resultados obtidos com os estudos motivaram o desenvolvimento de uma ferramenta de fácil utilização e que atendesse as especificidades de cenários de contaminação por gasolina com etanol encontrados no Brasil. (Corseuil et al, 2006).

3.7.3. Características do modelo SCBR

No SCBR, a simulação do transporte e transformação no meio não saturado obedece a um modelo analítico unidimensional. O modelo não simula a migração da fase livre, somente a fase dissolvida, a partir de uma fase retida no solo. A simulação do transporte na zona não saturada realizada pelo modelo SCBR é baseada na equação de advecção-dispersão descrita na equação 1, item 3.7.4. Os processos considerados pelo modelo, os quais influenciam no transporte do composto no meio, são: a advecção, dispersão, o retardo e a biodegradação. Destes, a advecção e dispersão são responsáveis pelo transporte do contaminante no solo, enquanto a biodegradação e o retardo são interações entre o composto e o meio, diminuindo a concentração e massa na fase dissolvida.

O modelo utiliza uma solução analítica proposta por Van Genuchten e Alves (1982) para as condições de contorno (equações 2, 3 e 4), apresentada pelas equações 5, 6 e 7 no item 3.6.3. A Figura 4 apresenta um quadro dos processos simulados (perda por volatilização e perda por lixiviação) e a solução analítica adaptada de Van Genuchten e Alves (1982).

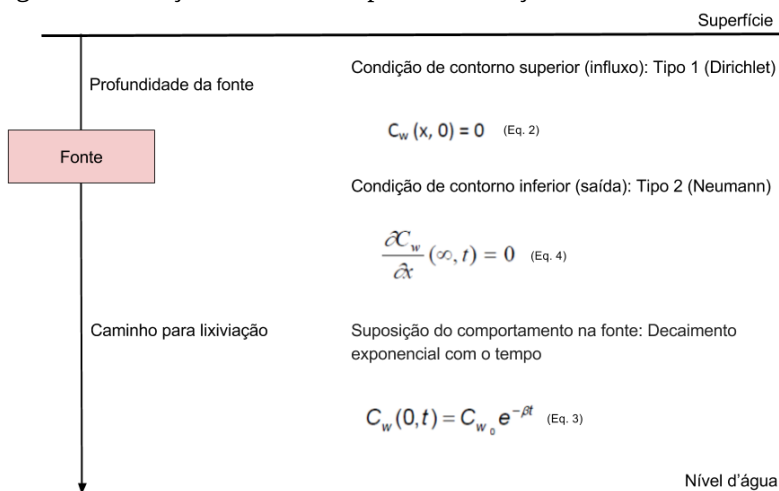
Figura 4: Processos simulados na zona não saturada



Para solucionar a equação de advecção-dispersão (equação 1) de forma analítica, Van Genuchten e Alves (1982) propuseram condições iniciais de contorno. Essas condições iniciais servem para

definir a concentração inicial do composto no tempo em que a entrada do composto no solo se inicia. A primeira condição proposta é a equação 2, no item 3.7.4, e é uma condição do tipo Dirichlet, para a entrada e condição inicial do composto no meio. A equação 4, uma condição do tipo Neumann, é utilizada para a saída do composto do meio. Além das condições de contorno citadas, foi adicionada uma terceira condição adicional, a equação 3, para o comportamento do composto na fonte após o início das simulações. A Figura 5, apresenta um esquema com as condições de contorno iniciais.

Figura 5: Condições de contorno para a simulação no meio não saturado



Para aplicar a solução analítica, equações 5, 6 e 7 (item 3.7.4), são necessários dados de entrada para as seguintes variáveis: C_0 , a concentração inicial do composto na fonte; v , a velocidade intersticial da água nos poros; D_z , o coeficiente de dispersão da zona não saturada; R , o coeficiente de retardo do composto no meio, μ , a taxa de biodegradação do composto; e β , a taxa de perda de massa por lixiviação (equação 23) e volatilização (equação 24).

O modelo SCBR considera a existência de fase residual, isto é, uma fase aquosa imiscível não dissolvida no termo fonte. A presença da fase residual é verificada pela comparação entre a concentração na fase aquosa do contaminante (equação 22, item 3.6.3) e a concentração na fase dissolvida calculada pela Lei de Raoult (equação 21, item 3.6.3). Quando a concentração na fase dissolvida calculada pela equação 22 é

superior à concentração na fase dissolvida pela lei de Raoult, a solubilização máxima do composto foi atingida e existe a presença da fase residual. Assim, o transporte do contaminante no meio não saturado é limitado pela lei de Raoult, isto é, a máxima concentração a ser lixiviada é o valor da concentração calculada pela lei de Raoult. Destaca-se que quando não houver a presença de fase residual, a simulação também pode ser realizada.

A concentração de solubilidade do composto, segundo a Lei de Raoult (equação 21, item 3.6.3) é quantificada por meio da fração molar, a qual é obtida pela relação da concentração de TPH e do composto no solo, e multiplicada pela concentração de solubilidade do composto em água.

O processo de advecção é representado pela velocidade intersticial, que no modelo é a velocidade média da movimentação da água no meio poroso. No modelo, a velocidade é determinada a partir da recarga e da umidade volumétrica do meio, pela equação 12, item 3.7.4. Entretanto, como o valor para a recarga e umidade volumétrica permanecem constantes durante toda a simulação, o modelo não considera flutuações do nível do lençol freático, nem do efeito causado pela mudança de precipitação e recarga no transporte de compostos químicos.

O processo de dispersão unidimensional no meio não saturado é representado pelo coeficiente de dispersão, determinado a partir da velocidade intersticial, apresentado pela equação 14 (item 3.6.3).

O retardo representa a sorção do composto no meio poroso. É uma reação das interações do soluto com a fase sólida do meio e resulta na diminuição da velocidade de transporte no meio, e é determinada pela equação 29, no item 3.7.4.

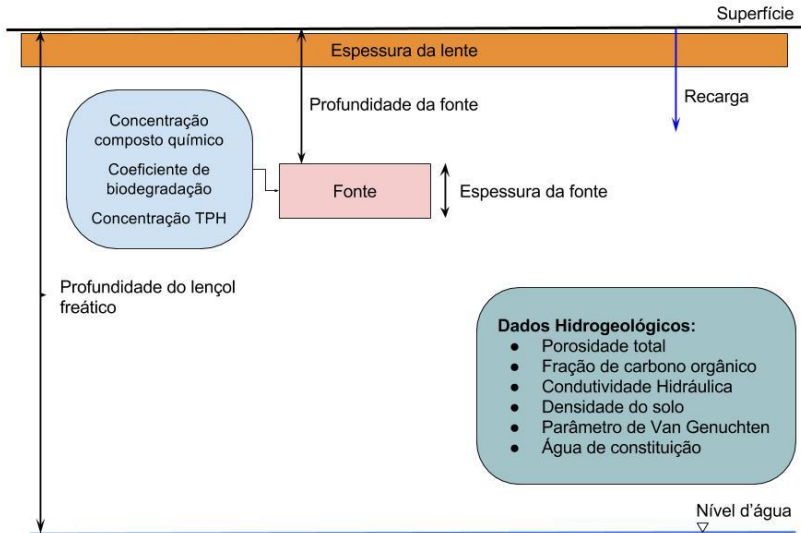
No modelo SCBR, o coeficiente de biodegradação é de primeira ordem. Além disso, durante o transporte do contaminante há uma perda por lixiviação e volatilização, que representa uma taxa de perda de massa que ocorre na fonte, é quantificada pelas equações 23, 24, 26 e 27 (item 3.6.3). A Tabela 5 apresenta as principais variáveis discutidas neste item e as respectivas equações necessárias que o modelo utiliza para a sua simulação no modelo SCBR.

Tabela 5: Variáveis do modelo de transporte na zona não saturada

Variável	Nome	Descrição	Equações utilizadas (item 3.6.3)
C_w	Concentração na fase dissolvida	Concentração do composto na fase dissolvida em uma distância x abaixo da fonte e tempo t	5
C_o	Concentração inicial	Concentração do composto na fase dissolvida na fonte no início da simulação (t=0)	21 e 22
β	Perda por lixiviação e volatilização	Coeficiente de depleção da fonte	23, 24, 26 e 27
$\bar{v}$	Velocidade intersticial	Velocidade média da água na zona não saturada	8, 9, 10 e 12
D_x	Coeficiente de dispersão	Coeficiente do efeito da dispersão sobre o composto	12, 13 e 14
R	Fator de retardo	Sorção do composto no meio poroso	29
μ	Coeficiente de biodegradação	Coeficiente de decaimento de primeira ordem do composto	Parâmetro de entrada

Para aplicar as equações citadas na Tabela 5, o modelo utiliza diversas variáveis hidrogeológicas e físico-químicas. A Figura 6 apresenta um quadro das variáveis que o usuário necessita inserir no modelo para que possam ser realizadas as simulações. Os parâmetros químicos dos compostos estão disponíveis no banco de dados do SCBR.

Figura 6: Quadro das variáveis necessárias para a simulação



3.7.4. Transporte de contaminantes na zona não saturada

O modelo considera que os contaminantes irão migrar na zona não saturada sob a forma dissolvida na água, como lixiviado, a partir da fonte, descrita como uma mistura de concentração uniforme que se esgota ao longo do tempo. A equação 1 representa o transporte unidimensional de contaminantes na zona não saturada (Bear, 1979).

$$R \frac{\partial C_w}{\partial t} = D_x \frac{\partial^2 C_w}{\partial x^2} - \bar{v} \frac{\partial C_w}{\partial x} - \mu C_w \quad (1)$$

Onde C_w é a concentração na fase dissolvida do composto (mg/l); D_x é o coeficiente de dispersão na zona não saturada (cm²/d); $\bar{v}$ é a velocidade intersticial da água de infiltração do solo (cm/d); μ é a taxa de biodegradação (1/d); x é a distância abaixo da fonte (medido de forma positiva para baixo) (cm); t é o tempo (dia); e R é o coeficiente de retardo (-).

Para solucionar a equação de transporte, o modelo utiliza condições de contorno para a solução da equação 1. Assume-se que no tempo = 0 a

concentração abaixo da fonte é igual a zero, como apresentado na equação 2:

$$C_w(x, 0) = 0 \quad (2)$$

Além disso é assumido que a concentração na fonte sofre um processo de decaimento ao longo do tempo

$$C_w(0, t) = C_{w0}e^{-\beta t} \quad (3)$$

Sendo C_{w0} a concentração do composto na fonte no início das simulações (mg/l) e β é a taxa de perda de massa por volatilização e lixiviação (1/d).

A última condição de contorno assumida é que a longa distância abaixo da fonte o gradiente de concentração é igual a zero.

$$\frac{\partial C_w}{\partial t}(\infty, t) = 0 \quad (4)$$

Com a utilização das condições propostas, descritas pelas equações 2, 3 e 4, Van Genuchten e Alves (1982) apresentaram a seguinte solução analítica apresentada pela equação 5, 6 e 7:

$$C_w(z, t) = C_{w0}e^{-\beta t}B(z, t) \quad (5)$$

Sendo:

$$B(z, t) = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(\bar{v}-w)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz-wt}{2\sqrt{D_z Rt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(\bar{v}+w)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz+wt}{2\sqrt{D_z Rt}}\right) \quad (6)$$

E

$$w = \bar{v} \sqrt{1 + \frac{4D_z}{\bar{v}^2} [\mu - R\beta]} \quad (7)$$

Sendo C_{w0} a concentração do composto na fonte no início das simulações (mg/l); β é a taxa de perda de massa por volatilização e lixiviação (1/d); Sendo $\bar{v}$ a velocidade de percolação (cm/d); z a profundidade (cm); D_z é o coeficiente de dispersão (cm²/d); R é o retardo; t é o tempo (dia); e μ é o coeficiente de biodegradação (1/d).

As seguintes equações são usadas pelo modelo baseado nas variáveis inseridas pelo usuário. A equação 8 apresenta a determinação da permeabilidade relativa a partir da condutividade hidráulica e recarga.

$$Kr = \frac{q}{K_{sw}} \quad (8)$$

Sendo Kr a permeabilidade relativa (-); q a recarga líquida do aquífero (cm/d); e K_{sw} a condutividade hidráulica da zona não saturada como se fosse saturada (cm/d).

A distribuição de tamanho do poro, utilizado seguidamente, pode ser estimada a partir do parâmetro de van Genuchten utilizando a equação 9 a seguir.

$$y = 3 + \frac{2}{(n-1) \times (1-0,5^{(\frac{n}{n-1})})} \quad (9)$$

Sendo y o coeficiente de distribuição de tamanho do poro (-); e n sendo o parâmetro de van Genuchten (-).

No modelo de Brooks and Corey (1964), a condutividade hidráulica varia em função umidade no solo, assumindo-se então uma relação apresentada na equação 10.

$$Kr = \left(\frac{\theta_w - \theta_r}{\theta_t - \theta_r} \right)^y \quad (10)$$

Sendo θ_t a porosidade total (-); θ_r a água de constituição (-); e θ_w umidade volumétrica do solo (-).

O modelo considera que para a simulação a porosidade é totalmente preenchida por algum fluido, logo a porosidade total pode ser determinada a partir da equação 11.

$$\theta_t = \theta_a + \theta_w \quad (11)$$

Sendo θ_a a porosidade preenchida de ar (-).

Utilizando a umidade volumétrica encontrada a partir da equação 10, a velocidade de percolação pode ser determinada pela equação 12.

$$\bar{v} = \frac{q}{\theta_w} \quad (12)$$

Sendo $\bar{v}$ a velocidade intersticial (cm/d); q a recarga (cm/d) e θ_w umidade volumétrica do solo (-).

A dispersividade longitudinal, utilizada em seguida para a determinação do coeficiente de dispersão, pode ser encontrada em função da distância da fonte até o nível do lençol freático, a partir da equação 13 (Gelhar et al 1985).

$$\begin{cases} \ln \alpha l = -4,933 + 3,811 \times \ln x_m & (x_m < 2) \\ \ln \alpha l = -2,727 + 0,584 \times \ln x_m & (x_m \geq 2) \end{cases} \quad (13)$$

Sendo x_m o comprimento disponível para lixiviação (m); e αl a dispersividade longitudinal (m).

Assumindo que o coeficiente de dispersão é uma função linear da velocidade de percolação, pode ser determinado a partir da equação 14.

$$D = \alpha l \times \bar{v} \left(\frac{m}{100cm} \right) \quad (14)$$

Sendo D o coeficiente de dispersão (m²/d).

As informações sobre o termo fonte são descritas a seguir. O volume da fonte é calculado pelo modelo com a utilização da equação 15. A massa da fonte pode ser obtida a partir da densidade do solo com a equação 16. A massa de TPH na fonte pode ser obtida a partir da massa de solo na fonte e concentração de TPH no solo, com a equação 17. E a massa de contaminante pode ser determinada a partir da sua concentração no solo, com a equação 18.

$$V = A \times L_w \quad (15)$$

Sendo V o volume da fonte (m³); A a área da fonte (m²); e L_w a espessura da fonte (m).

$$m_{solo} = d_{solo} * V \quad (16)$$

Sendo m_{solo} a massa de solo na fonte (kg); e d_{solo} a densidade do solo (kg/m³).

$$m_{TPH} = C_{TPH} \times m_{solo} \quad (17)$$

Sendo m_{TPH} a massa de TPH na fonte (mg); e C_{TPH} a concentração de TPH no solo (mg de TPH/ kg de solo).

$$m_{cont} = C_{cont} * fonte \quad (18)$$

Sendo m_{cont} a massa de contaminante (mg); e C_{cont} a concentração do composto no solo da fonte (mg de contaminante/ kg de solo).

A partir das massas encontradas e do peso molecular do TPH e contaminante, são determinados os números de mol para contaminante e TPH, representado pela equação 19.

$$n_i = \frac{m_i}{MM_i} \quad (19)$$

Sendo n_i o número de mols do contaminante ou TPH (-); m_i é a massa do que há na fonte (g); e MM_i o peso molecular (g/mol).

A partir dos números de mol de cada contaminante e do TPH. É calculada a fração molar do contaminante, a partir da equação 20.

$$F_{iTPH} = \frac{n_i}{n_{TPH}} \quad (20)$$

Sendo F_{iTPH} a fração molar do contaminante na mistura (-); n_i o número de mols do contaminante (mol); e n_{TPH} o número de mols de TPH (mol).

A partir das equações 8 a 20, são realizados os cálculos para a concentração do contaminante na zona não saturada. É feita a verificação da existência da fase residual pela comparação das equações 21 e 22.

$$C_{ws} = F_{iTPH} \times S_i \quad (21)$$

Sendo C_{ws} a concentração de equilíbrio na fase aquosa (mg/l); F_{iTPH} a fração molar do contaminante e TPH (mol/mol); e S_i a solubilidade do composto em água (mg/l).

$$C_w = \frac{C_{cont} \times d_{solo}}{d_{solo} \times f_{oc} \times K_{oc} + \theta_w + K_H \times \theta_a} \quad (22)$$

Sendo C_w a concentração na fase aquosa do contaminante (mg/l); C_{cont} a concentração do contaminante no solo (mg/kg de solo); d_{solo} a densidade do solo (g/cm³); f_{oc} a fração de carbono orgânico (%); K_{oc} o coeficiente de sorção (-); θ_w a umidade volumétrica (-); K_H a constante de Henry do composto (mg/l vapor / mg/l água); e θ_a porosidade preenchida por ar (-).

A verificação da fase residual é feita pela comparação entre os dois valores de concentração na fase aquosa. Caso a concentração pelo método de Raoult (equação 21) seja menor, a solubilização máxima do composto foi atingida e a fase residual está presente.

Caso a fase residual esteja presente, a perda de massa total do sistema é obtida através da soma da perda por lixiviação, equação 23, e perda por volatilização, equação 24, apresentadas a seguir:

$$\beta_w = \frac{q \times MM_{TPH} \times S_i}{F_{TPH} \times d_{solo} \times L_w \times MM_i} \quad (23)$$

$$\beta_v = \frac{D_{eff} \times K_H \times MM_{TPH} \times S_i}{F_{TPH} \times d_{solo} \times L_d \times L_w \times MM_i} \quad (24)$$

$$\beta = \beta_w + \beta_v \quad (25)$$

Sendo β é a taxa de perda total de massa por volatilização e lixiviação (1/d), β_w é a taxa de perda de massa por lixiviação (1/d), β_v é a taxa de perda de massa por volatilização (1/d), D_{eff} é o coeficiente de difusão efetiva (cm²/s); L_d é o comprimento do caminho de difusão (m); L_w é a espessura da fonte (m); MM o peso molecular do contaminante ou TPH (g/mol); e F_{TPH} a fração de massa do TPH (g/g), d_{solo} a densidade do solo (g/cm³), K_H a constante de Henry do composto (mg/l vapor / mg/l água), q a recarga (cm/d) e S_i a solubilidade do composto em água (mg/l).

Caso a fase residual não esteja presente, as perdas por volatilização e por lixiviação são calculadas seguindo as equações 26 e 27:

$$\beta_w = \frac{q}{(d_{solo} \times K_{oc} \times F_{oc} + \theta_w + \theta_a \times K_H) \times L_w} \quad (26)$$

$$\beta_v = \frac{D_{eff} \times K_H}{(d_{solo} \times K_{oc} \times F_{oc} + \theta_w + \theta_a \times K_H) \times L_d \times L_w} \quad (27)$$

Sendo que D_{eff} é o coeficiente de difusão efetiva (cm²/s); L_d é o comprimento do caminho de difusão (m); L_w é a espessura da fonte (m); MM o peso molecular do contaminante ou TPH (g/mol); e F_{TPH} a fração de massa do TPH (g/g). As outras variáveis já foram definidas previamente.

Para determinar a perda de massa pela volatilização o modelo calcula a difusão efetiva do contaminante na zona não saturada pelas

relações de Millington-quirk, a partir dos coeficientes de difusão na água e ar do contaminante, realizada a partir da equação 21.

$$D_{eff} = D_{air} \times \left(\frac{\theta_a^{10/3}}{\theta_t^2} \right) + D_{water} \times \frac{1}{K_H} \times \left(\frac{\theta_w^{10/3}}{\theta_t^2} \right) \quad (28)$$

Sendo D_{eff} o coeficiente de difusão efetiva (cm^2/s); D_{air} o coeficiente de difusão do ar (cm^2/s); D_{water} o coeficiente de difusão da água (cm^2/s); K_H a constante de Henry ($\text{mg/l vapor} / \text{mg/l água}$); θ_w a umidade volumétrica (-); θ_a porosidade preenchida por ar (-); e θ_t a porosidade total (-); Os coeficientes de difusão da água e do ar estão presentes estão presentes no banco de dado do SCBR.

Para o cálculo do coeficiente de retardo na zona não saturada a equação 29 é utilizada:

$$R = 1 + \frac{d_{solo} \times f_{oc} \times K_{oc}}{\theta_w} \quad (29)$$

Onde d_{solo} é a densidade do aquífero (g/cm^3); k_{oc} o coeficiente de partição carbono orgânico-água (L/kg); f_{oc} a fração de carbono orgânico no solo não contaminado (adimensional); θ_w a umidade volumétrica (cm^3 de água/ cm^3 de solo).

O modelo ainda permite a incorporação de uma lente no sistema. A lente é uma camada de solo, com características hidrogeológicas diferentes do solo da zona não saturada, localizada acima da fonte e é utilizada para influenciar a perda de massa por volatilização. A equação 30 apresenta o cálculo da difusão efetiva da camada da lente.

$$D_{effL} = D_{air} \times \left(\frac{\theta_{aL}^{10/3}}{\theta_{tL}^2} \right) + D_{water} \times \frac{1}{K_H} \times \left(\frac{\theta_{wL}^{10/3}}{\theta_{tL}^2} \right) \quad (30)$$

Sendo D_{effL} o coeficiente de difusão efetiva da lente (cm^2/s); D_{air} o coeficiente de difusão do contaminante no ar (cm^2/s); D_{water} o coeficiente de difusão do contaminante na água (cm^2/s); K_H a constante de Henry ($\text{mg/l vapor} / \text{mg/l água}$); θ_{wL} a umidade volumétrica do solo da lente (-); θ_{aL} porosidade preenchida por ar do solo da lente (-); e θ_{tL} a porosidade total do solo da lente (-); Os coeficientes de difusão da água e do ar estão presentes estão presentes no banco de dado do SCBR.

Com a presença da lente, o coeficiente da difusão efetiva utilizado para a simulação é uma combinação do coeficiente da zona não saturada

(equação 28) e do coeficiente da lente (equação 30). O coeficiente de difusão combinado pode ser estimado pela equação 31.

$$D_{eff} = \frac{h_L + h_v}{\frac{h_L}{D_{effL}} + \frac{h_v}{D_{effv}}} \quad (31)$$

Sendo h_L a espessura da camada de solo da lente (cm); h_v a espessura da camada de solo entre a superfície e a lente (cm).

4 METODOLOGIA

4.1 Caracterização hidrogeológica da área E85

As características hidrogeológicas utilizadas para as simulações deste trabalho são provenientes do estudo de Schneider (2012) e Farias (2011). Para as variáveis sem dados disponíveis para a área do derramamento do E85 foram utilizados os dados obtidos em trabalhos anteriores do REMA para áreas vizinhas (Chiaranda, 2011; Fedrizzi, 2016; Müller, 2017). A localização das áreas está apresentada na **Erro! Fonte de referência não encontrada.** e a Tabela 6 cita a autoria do trabalho correspondente.

Tabela 6: Áreas experimentais e estudos realizados

Área experimental	Estudos realizados
E85	Farias (2011) e Schneider (2012)
B20-ANM	Chiaranda (2011)
B100-ANM	Chiaranda (2011)
B100-OQP-B	Fedrizzi (2016)
B20-B	Müller (2017)

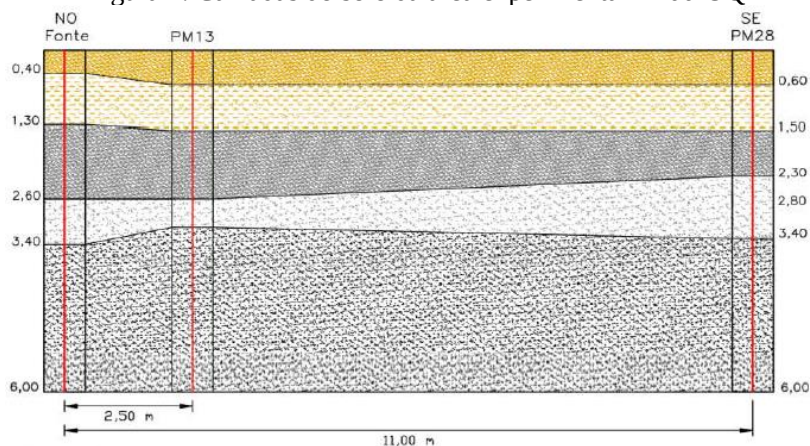
B20: Mistura de 20% biodiesel e 80% diesel; B100: 100% biodiesel; ANM: Atenuação natural monitorada; OQP-B: Oxidação química parcial associada à biodegradação; B20-B: Bioestimulação combinada de Ferro e sulfato redução.

Destaca-se uma condição importante do estudo realizado por Farias (2011) e Schneider (2012) em que foi posicionada uma lona plástica acima da área para reduzir a perda por volatilização. Para atender a esta condição, a perda por volatilização na simulação com o modelo SCBR será minimizada pela adição de uma camada de lente de argila acima da fonte.

Schneider (2012) determinou através de análise granulométrica a densidade da partícula da área no valor de $2,65 \text{ g.cm}^{-3}$, porém, não foi estimada a densidade aparente do solo, necessária para se obter a porosidade total do solo (eq. 30). Em testes realizados no estudo de Fedrizzi (2016), a densidade aparente e de partículas foram determinadas por meio de análise granulométrica para as camadas, “areia fina, marrom escura, com matéria orgânica”, “areia fina, argilosa, marrom clara” e “areia Fina, cinza escura” (Figura 7). Os valores obtidos por Fedrizzi (2016) foram: $2,80 \text{ g/cm}^3$, $2,75 \text{ g/cm}^3$ e $2,56 \text{ g/cm}^3$

de densidade de partículas e $1,35 \text{ g/cm}^3$, $1,42 \text{ g/cm}^3$ e $1,36 \text{ g/cm}^3$ de densidade aparente, respectivamente. A Figura 7 apresenta o perfil da área de estudo de Fedrizzi (2016) e as camadas de solo.

Figura 7: Camadas do solo da área experimental B100-OQP-B



Legenda:

- | | | | |
|--|---|--|-----------------------------------|
| | Areia fina, marrom escura.
Com matéria orgânica. | | Areia fina, cinza clara. |
| | Areia fina, argilosa, marrom clara. | | Areia fina, cinza clara (branca). |
| | Areia fina, cinza escura. | | |

Fonte: Fedrizzi (2016)

Segundo Schneider (2012), a condutividade hidráulica do solo saturado ($9,25\text{E-}4 \text{ cm.s}^{-1}$) foi determinada em campo com o permeâmetro Guelph 2800K1. As áreas no entorno (Figura 1) apresentam valores na mesma ordem de grandeza, como $3,32\text{E-}4 \text{ cm.s}^{-1}$, $4,45\text{E-}4 \text{ cm.s}^{-1}$ e $10\text{E-}4 \text{ cm.s}^{-1}$, como encontrado por Chiaranda (2011), Müller (2017) e Fedrizzi (2016), respectivamente, em seus estudos.

Para a porosidade efetiva do solo, Schneider (2012) considerou em seu trabalho o valor determinado por Chiaranda (2011), pelo método da mesa de tensão, para a área experimental, na faixa de 18 a 20%.

Porosidade Total

Devido à ausência de dados de campo, a porosidade total do solo foi estimada a partir dos valores de densidade aparente do solo e densidade da partícula apresentados por Fedrizzi (2016) conforme a equação 32.

$$n_t = \frac{a-b}{a} \times 100 \quad (32)$$

Onde n_t é a porosidade total em porcentagem; a é a densidade da partícula em g/cm^3 ; e b é a densidade aparente em g/cm^3 .

Densidade do solo

A densidade do solo aparente, necessária para a simulação, não foi estimada por Schneider (2012), apenas a densidade das partículas. Utilizando-se a equação 32, a densidade aparente do solo pode ser estimada a partir da densidade de partículas apresentada e pela porosidade total, estimada pelos valores de Fedrizzi (2016).

Fração de Carbono Orgânico

Schneider (2012) realizou a análise das propriedades do solo para as profundidades 40, 60, 75, 85, 95 e 125 centímetros abaixo da superfície, porém não estimou a fração de carbono orgânico, necessária para a simulação com o modelo SCBR, apenas a matéria orgânica. Segundo Jaramillo (1996) a fração de carbono orgânico representa 58% da matéria orgânica. Assim, o valor de fração de carbono orgânico foi estimado a partir dos valores apresentados por Schneider (2012) e pela relação proposta por Jaramillo (1996). Pela presença de diferentes valores de matéria orgânica para as profundidades analisadas, o valor estimado para inserção no modelo será a média dos valores encontrados para a fração de carbono orgânico. Devido às incertezas no valor da fração de carbono orgânico, esta variável será utilizada para a análise de sensibilidade.

4.2 Dados de entrada para simulação na zona não saturada

4.2.1. Solo

Para a simulação do transporte de contaminantes na zona não saturada o modelo SCBR utiliza as equações apresentadas anteriormente no item 3.7.4.

A configuração da fonte para a simulação foi determinada a partir do estudo realizado por Farias (2011) e Schneider (2012), onde a fonte

para a liberação do E85 foi escavada a partir da superfície do solo, com uma área de 1,5 metros de comprimento por 1 metro de largura. No trabalho de Farias (2011), a profundidade constatada foi 0,25 metro, enquanto no trabalho de Schneider (2012) foi apresentado o valor de 0,2 metro de profundidade, como visto na Figura 2. Para a geometria da fonte foi considerado o comprimento de 1,5 metros e largura de 1 metro, com espessura de 0,2 metro, os mesmos valores apresentados por Schneider (2012). O modelo SCBR considera que a fonte está abaixo do topo do solo, por isso foi considerada a profundidade (mínima) de 0,05 metro.

A fim de minimizar a volatilização como foi proposto no experimento por meio da lona plástica, uma camada de lente de argila foi considerada acima da fonte. Da distância entre a fonte e o topo do solo (0,05 m), considerou-se que a camada de argila teria uma espessura de 0,045 metro. Os valores das características hidrogeológicas do solo que compõe a lente foram retirados do banco de dados presente no SCBR para o tipo de solo “Argila”. Estes valores estão apresentados na Tabela 7 a seguir.

Tabela 7: Características hidrogeológicas da lente

Variável	Parâmetro
Porosidade total (-)	0,45
Condutividade Hidráulica (cm/s)	1,00E-06
Van Genuchten (-)	1,09
Água de constituição (-)	0,17

Fonte: SCBR 3.10

4.2.2. Combustível e Composto

O modelo SCBR permite criar novos produtos a partir de fração volumétrica de seus constituintes e suas características físico-químicas. Desta forma, o produto E85 foi criado no modelo para a simulação do biocombustível.

No modelo SCBR, estando os componentes do produto no banco de dados, é necessário especificar a fração volumétrica de cada composto no produto a ser criado e a massa específica do mesmo (E85).

As estimativas para as frações volumétricas dos constituintes do E85 e da massa molar e específica do produto E85 foram baseadas na proporção destes compostos, 15% de gasolina pura e 85% de etanol anidro, dada a ausência de valores de laboratório ou de literatura.

Assim, considerando que 85% do combustível é o composto etanol anidro e os demais 15% gasolina pura, a massa específica e o peso molar da mistura serão proporcionais a quantidade de cada componente. A Tabela 8 apresenta os valores de massa específica e peso molecular do etanol e gasolina pura e a Tabela 9 as substâncias químicas de interesse da gasolina pura e a fração volumétrica.

Tabela 8: Peso molar e massa específica do etanol e Gasolina pura

Parâmetro	Etanol	Gasolina pura	Unidade
Peso molar	46,07	100	g/mol
Massa específica	0,808	0,75	g/cm ³

Fonte: SCBR 3.10

Tabela 9: Frações volumétricas das substâncias destacadas da gasolina

Substância Química	Fração volumétrica (%)
Benzeno	0,5288
Etilbenzeno	1,041
Tolueno	3,4202
Xileno, m-	3,0294
Xileno, o-	1,6081
Xileno, p-	1,1352

Fonte: SCBR 3.10

Assim, a fração volumétrica dos compostos, massa específica e massa molar do produto foram estimadas a partir das frações presentes na gasolina pura e dos valores de massa específica e molar da gasolina pura e etanol.

Na Tabela 10 estão especificados os valores das características físico-químicas do benzeno, composto químico escolhido para simulação do transporte na zona não saturada.

Tabela 10: Dados de entrada (combustível e composto) para simulação.

Dados do composto (Benzeno)		
Parâmetro para simulação	Valor	Unidade
Massa específica	0,8765	g/cm ³
Massa molar	17,11	g/mol
Solubilidade	1790	mg/L
Partição solo/carb	61,7	L/Kg
KH (Coef. Lei de Henry)	0,226901	-
Coef. Difusão água	1,03E-05	cm ² /s
Coef. Difusão de ar	8,95E-02	cm ² /s
Dados do TPH/combustível		
Massa molar	Estimada	g/mol

Fonte: SCBR 3.10

4.2.3. Estimativa do valor de recarga

Para o estudo em questão não há dados de recarga, apenas da precipitação. Assim, para uma estimativa inicial da infiltração será utilizado o trabalho de Connor (1997) que relaciona a precipitação anual média, em cm/ano, com o tipo de solo cujas equações correspondentes estão apresentadas a seguir (31, 32 e 33). Destaca-se que as relações encontradas por Connor (1997) estão vinculadas a solos americanos e servem apenas como primeira estimativa para o valor inicial.

O trabalho de Connor (1997) apresenta curvas para três tipos de solo, a saber, areia, silte ou argila. Conforme Schneider (2012) apresentou em seu trabalho, o solo da área experimental E85 é composto por 93,05% areia, 3,5% silte e 3,45% argila. Estes valores serão aqueles considerados para a estimativa do valor inicial da infiltração. A precipitação anual média, necessária como valor de entrada para obtenção da infiltração, foi obtida através da análise das medições realizadas no aeroporto Hercílio Luz, próximo da Fazenda da Ressacada (raio de distância de aproximadamente 1,5 Km), nos 5 anos anteriores à data de liberação do combustível E85. Esses dados são utilizados para estimar a infiltração e consequentemente a recarga com as equações 31, 32 e 33.

$$I_{f\text{Areia}} = 0,0018 \times P^2 \quad (31)$$

$$I_{f\text{Silte}} = 0,0009 \times P^2 \quad (32)$$

$$I_{f\text{Argila}} = 0,00018 \times P^2 \quad (33)$$

Sendo I a recarga para o solo (cm/ano) e P a precipitação média anual (cm/ano).

Schneider (2012) realizou durante o seu estudo a medição da precipitação diária de durante os 30 dias após a liberação de E85 no solo, entretanto o modelo utiliza apenas um valor de recarga anual (mm/ano) e a estimativa de um valor anual a partir de uma escala diária acarretaria significativas incertezas na sua estimativa já que as simulações serão realizadas para períodos superiores a 30 dias. Dessa forma, o valor estimado a partir de dados históricos da área pode não representar fielmente as condições do estudo realizado por Farias (2011) e Schneider (2012).

4.2.4. Estimativa da concentração de benzeno e TPH no solo

A concentração de benzeno e TPH no solo são também variáveis necessárias para a simulação do transporte na zona não saturada. Como no estudo realizado por Farias (2011) e Schneider (2012) não houve medição da concentração dos compostos BTEX do combustível E85 no solo, e nem tampouco de concentrações de TPH, estes valores serão arbitrados conforme abaixo especificado.

Para auxiliar na escolha de um valor inicial para as concentrações de benzeno e TPH, foram analisados relatórios PETROBRAS da biblioteca do REMA para casos reais de contaminação no solo por benzeno. Além disso, quantificou-se a massa de benzeno no volume derramado de E85 para auxiliar na determinação do valor inicial de concentração do benzeno no solo.

A Tabela 11 apresenta os dados de entrada para a simulação do transporte da zona não saturada e as fontes correspondentes apresentados ao longo do item 4.3 e 4.4.

Tabela 11: Dados de entrada para simulação na zona não saturada.

Parâmetro para simulação	Valor	Unidade	Fonte do valor
Recarga	Estimado	mm/ano	Dados históricos da precipitação medida no aeroporto
Profundidade do nível d'água	1,6	m	Experimento de Schneider (2012) e Farias (2011)
Área da fonte	1,5	m ²	Experimento de Schneider (2012) e Farias (2011)
Profundidade da fonte	0,05	m	Experimento de Schneider (2012) e Farias (2011)
Espessura da fonte	0,2	m	Experimento de Schneider (2012) e Farias (2011)
Peso molar (TPH)	Estimado	g/mol	Item 4.4.2
Concentração de TPH no solo	Estimado	mg/kg	Item 4.4.4
Concentração de composto no solo	Estimado	mg/kg	Item 4.4.4
Porosidade total	Estimada	%	Item 4.3
Condutividade hidráulica	9,25E-4	cm/s	Condutividade hidráulica saturada do solo da zona não saturada, Schneider (2012)
Fração de carbono orgânico	Estimada	%	Item 4.3
Densidade do solo	Estimada	kg/m ³	Item 4.3
Água de constituição	0,05	-	Banco de dados do SCBR para Areia média e Areia Fina
Parâmetro de Van Genuchten	2,68	-	Banco de dados do SCBR para Areia média e Areia Fina
Biodegradação	0	1/ano	Cenário conservador

4.3 Comparação com o estudo de campo

Será feita uma comparação com as medições de campo apresentadas na Tabela 1. As variáveis que serão comparadas são o tempo de chegada do benzeno ao lençol freático e a sua concentração ao atingir o meio subterrâneo.

Destaca-se que o tempo para o contaminante benzeno atingir o lençol, no experimento de campo, considera a profundidade do poço de dois metros de profundidade enquanto que a simulação com o modelo utiliza o nível do lençol na data de derramamento, de 1,60 metros. Está sendo considerado que as concentrações de benzeno no nível do lençol serão iguais ou maiores que as concentrações medidas a 2 metros de profundidade.

Por último, será apresentada a variação da concentração do benzeno em relação a sua profundidade no solo: $z = 0$ m (valor imediatamente abaixo da fonte) e no nível do lençol freático ($z=1,35$ m). Conforme as equações 5 e 6, abaixo destacada, quando $z = 0$ (na fonte), o termo B assume o valor unitário e a redução da concentração na fase dissolvida (C_w) dependente apenas da perda por lixiviação e volatilização (β), enquanto que para valores de z maiores que zero, o termo B entre em vigor, e com isso o coeficiente de dispersão (D_z), retardo (R), biodegradação, dentre outras variáveis passam a atuar na redução do valor da concentração dissolvida (C_w).

$$C_w(z, t) = C_{w0} e^{-\beta t} B(z, t) \quad (5)$$

$$B(z, t) = \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(\bar{v}-w)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz-wt}{2\sqrt{D_z Rt}}\right) + \frac{1}{2} \exp\left(\frac{(\bar{v}+w)z}{2D_z}\right) \operatorname{erfc}\left(\frac{Rz+wt}{2\sqrt{D_z Rt}}\right) \quad (6)$$

4.4 Análise de sensibilidade

Dada às incertezas em relação avariáveis hidrogeológicas e variáveis relacionadas à contaminação, a análise de sensibilidade visa avaliar a influência das mesmas nos resultados das simulações realizadas com o modelo SCBR. A

Tabela 14 apresenta as variáveis escolhidas (recarga, fração de carbono orgânico, relação da concentração de benzeno/TPH, coeficiente de biodegradação e profundidade da fonte) para realizar a análise de

sensibilidade e os valores escolhidos para análise. Para a análise de sensibilidade será considerada a profundidade do lençol de 1,6m.

Recarga

A recarga é uma variável que não é habitualmente monitorada em experimentos de campo ou em investigações ambientais. Assim, a análise de sensibilidade da recarga também foi considerada importante para a avaliação dos resultados obtidos nas simulações.

Fração de Carbono Orgânico

Das cinco variáveis (

Tabela 14) escolhidas (recarga, fração de carbono orgânico, relação da concentração de benzeno/TPH, coeficiente de biodegradação e profundidade da fonte), somente para a fração de carbono orgânico foram obtidos valores a partir de dados de campo (matéria orgânica). Porém, como o modelo SCBR assume um único tipo de solo, foi necessária a escolha de apenas um valor de fração de carbono orgânico para representar o solo do experimento. Além disso, como o K_{oc} (coeficiente de partição de carbono orgânico) do composto benzeno é elevado (61,7 L/kg), o valor da fração de carbono orgânico pode influenciar significativamente a sorção do composto no solo. Assim, a análise de sensibilidade para valores da fração de carbono orgânico das diferentes profundidades analisadas foi considerada relevante.

Massa do composto derramado

O modelo SCBR utiliza a fração molar do composto em relação à concentração de TPH (equação 21). Assim, a alteração da massa de benzeno (portanto a concentração) será utilizada para a análise de sensibilidade. Para isso, conforme apresentado na Tabela 12, serão avaliadas três magnitudes da relação de massa entre benzeno e E85, 1E-04, 1E-03 e 1E-02, sendo alterados apenas os valores de benzeno. Alterando a massa (concentração de benzeno) (Tabela 12), teremos uma modificação da fração molar e, com isso, um aumento da concentração da solubilidade efetiva (Lei de Raoult).

Tabela 12: Análise da relação de massa

Parâmetro	Valor 1	Valor 2	Valor 3
(A) Concentração Benzeno (mg/kg)	0,3	3	30
(B) Concentração TPH (mg/kg)	3000	3000	3000
Relação (A/B)	1E-04	1E-03	1E-02

Coeficiente de Biodegradação

O coeficiente de biodegradação do benzeno também foi considerado na análise de sensibilidade devido ao desconhecimento de sua presença e magnitude no estudo de campo, variando de zero, 1 e 10.

Profundidade da fonte

Para avaliar a influência da profundidade da fonte sobre o caminho de lixiviação e o tempo de migração do composto até o lençol freático. A profundidade da fonte será alterada, mantendo-se o lençol freático na profundidade de 1,6 metros e a espessura de fonte de 0,2 metros. A Tabela 13 apresenta os valores utilizados na análise de sensibilidade da profundidade da fonte

Tabela 13: Parâmetros para análise de sensibilidade da profundidade da fonte e caminho de lixiviação

Parâmetro	Valor 1	Valor 3	Valor 4
Profundidade da fonte	0,05	1	1,39
Caminho de lixiviação	1,35	0,4	0,01

Tabela 14: Parâmetros para análise de sensibilidade

Parâmetro	Valor 1	Valor 2	Valor 3
Recarga (mm/ano)	400	800	1200
Fração de carbono orgânico (-)	0,058	0,232	0,58
Relação concentração Benzeno/concentração TPH (-)	1E-4	1E-3	1E-2
Coeficiente de biodegradação (1/ano)	0	0,5	1
Profundidade da fonte	0,05	1	1,39

Cenários com e sem volatilização

Além das condições supracitadas, serão simulados cenários com e sem a presença da camada lente, para possibilitar a análise da influência da perda de massa por volatilização sobre o transporte do contaminante na zona não saturada. As perdas por lixiviação e volatilização com e sem a presença de lente serão comparadas nos dois casos, o primeiro com uma camada de lente e o outro sem a camada de lente. As variáveis para essa simulação são as mesmas que a simulação para comparação com o estudo de campo de Farias (2011) e Schneider (2012).

Cenário conservador

Por último, também será simulado um cenário conservador a fim de acelerar o transporte do contaminante da zona não saturada para o lençol, considerando os valores utilizados anteriormente na análise de sensibilidade. Assim, os seguintes critérios foram considerados: sem biodegradação, recarga 1200 mm/ano relação entre concentração de benzeno e TPH $1\text{E-}02$, fração de carbono orgânico igual a 0,056 e com uma camada de lente de argila. A profundidade da fonte utilizada será a mesma do experimento (0,05 m).

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Simulação na zona não saturada

5.1.1. Dados de entrada

Biocombustível (E85)

No biocombustível, E85, o etanol representa 85% do seu volume (fração volumétrica), e os 15% restante são representados pela gasolina pura (Tabela 8). Considerando a fração volumétrica do benzeno na gasolina pura (0,5288%) e o percentual de 15% no combustível E85, a sua fração volumétrica passará a 0,079% ($0,5288 \cdot 0,15$). As demais frações volumétricas dos compostos BTEX foram quantificadas da mesma forma. As frações volumétricas do E85 estão apresentadas na Tabela 15.

Tabela 15: Frações volumétricas das substâncias de destaque do E85

Substância Química	Fração volumétrica (%)
Benzeno	0,079
Etanol	85
Etilbenzeno	0,156
Tolueno	0,513
Xileno, m-	0,454
Xileno, o-	0,241
Xileno, p-	0,817

Além disso, as variáveis peso molar e a massa específica foram estimadas para o E85. A massa específica foi estimada de forma ponderada, considerando 85% da massa específica do etanol ($0,808 \text{ g/cm}^3$) e 15% da gasolina pura ($0,75 \text{ g/cm}^3$), resultando na massa específica estimada de $0,7933 \text{ g/cm}^3$ ($=0,85 \cdot 0,808 + 0,15 \cdot 0,75$). O peso molar foi estimado da mesma forma, sendo os pesos molares do etanol e gasolina pura $46,07 \text{ g/mol}$ e 100 g/mol respectivamente e o peso molar do E85 foi estimado como sendo $52,1595 \text{ g/mol}$ ($=0,85 \cdot 46,07 + 0,15 \cdot 100$).

Solo

A porosidade total foi estimada com a utilização da equação 32, apresentada no item 4.1, e das densidades de partículas e aparente de solo em Fedrizzi (2016). Para a primeira camada, “Areia fina, marrom escura, com matéria orgânica”, com uma densidade de partícula de $2,80 \text{ g/cm}^3$ e densidade aparente de $1,35 \text{ g/cm}^3$, foi calculada uma porosidade total de 51,76%. Repetindo o mesmo procedimento para as demais camadas foram obtidas as seguintes porosidades totais: 48,36% e 46,88%. Para a inserção no modelo é necessário apenas um valor, sendo realizada a média aritmética dos 3 valores encontrados (51,76%, 48,36% e 46,88%), tendo uma porosidade total de 49% para a simulação.

Para a estimativa da fração de carbono para a simulação foram utilizados como base os valores de matéria orgânica apresentados em Schneider (2012). A partir da relação proposta por Jaramillo (1996), que estabelece que a fração de carbono orgânico representa 58% da matéria orgânica, foi realizada a estimativa da fração de carbono. Para o primeiro valor apresentado por Schneider (2012), a 30 centímetros abaixo da superfície, de 1% de matéria orgânica foi obtida uma fração de carbono orgânico de 0,58% (58% de 1%). O mesmo procedimento foi repetido para as outras profundidades de 60, 75, 85, 95 e 125 centímetros abaixo de superfície e seus valores de matéria orgânica de 0,4%, 0,7%, 0,8%, 0,7% e 0,1% respectivamente. Assim, os valores de fração de carbono obtidos foram de 0,232%, 0,464%, 0,506%, 0,464% e 0,058%. O valor utilizado para a simulação foi considerado como uma média dos valores obtidos citados, resultando em 0,36%.

Para quantificar a densidade do solo da área experimental do E85 foi utilizada também a equação 32. Schneider (2012) não apresentou um valor para a densidade aparente do solo, apenas a densidade de partículas de $2,65 \text{ g/cm}^3$, entretanto devido à ausência da porosidade da área, foi utilizada a porosidade total estimada anteriormente (49%). Desta forma, a densidade aparente é a diferença entre a densidade das partículas ($2,65 \text{ g/cm}^3$) e a densidade das partículas multiplicada pela porosidade total, resultando na densidade aparente do solo foi calculada como $1,3515 \text{ g/cm}^3$.

Para a estimativa da recarga foram utilizadas as equações 31, 32 e 33 apresentadas por Connor (1997). A precipitação anual média foi determinada como a média anual dos cinco anos anteriores a medição (setembro de 2005 a agosto de 2010). As medições foram realizadas pelo aeroporto próximo à área experimental e nesses cinco anos houve 4 meses para os quais não foram realizadas medição por um defeito em equipamentos, sendo então desconsiderados para determinar a média (Anexo A). A média anual dos últimos cinco anos foi determinada como

192,02 cm/ano. Utilizando as equações 31, 32 e 33, com a precipitação encontrada anteriormente (195,02 cm/ano), foi determinada a recarga para cada tipo de solo (como exemplo para a areia: $0,0018 \cdot 192,02^2 = 68,46$ cm/ano). Considerando as frações de areia (93,05%), argila (3,45%) e silte (3,5%) apresentadas por Schneider (2012) no item 4.2.3, as recargas encontradas foram multiplicadas pelas suas frações, estimando a recarga do solo da área como 651,38 mm/ano (Para a areia: $684,6 \text{ mm/ano} \cdot 0,9305 = 637,03 \text{ mm/ano}$).

Para a estimativa da concentração de benzeno e TPH no solo foram analisados relatórios com resultados de medições de concentração de benzeno e TPH em áreas contaminadas da PETROBRAS. A Tabela 16 apresenta os valores (máximo, mínimo e mediana) para a concentração benzeno, as concentrações de TPH, e a relação de massa entre o benzeno e TPH.

Tabela 16: Concentrações de benzeno (C_B), TPH (C_{TPH}) e relação C_B/C_{TPH}

	Concentração Benzeno (mg/kg)	Concentração TPH (mg/kg)	Relação Benzeno/TPH
Máxima	8,3	6952,92	1,19E-03
Mínima	0,0013	13,003	1,00E-04
Mediana	0,027	1942,4	1,34E-04

A fim de auxiliar na quantificação da concentração de benzeno e TPH, foi calculada também a relação entre a massa de benzeno e do combustível derramado. Nos 200 litros de E85 derramados no estudo de Farias (2011) e Schneider (2012), a massa liberada de benzeno foram 0,138 kg foi obtida multiplicando-se a fração molar do benzeno (0,079%) por 200 litros derramados e pela densidade do benzeno (0,8765 g/cm³). A massa derramada de 159,86 kg foi obtida multiplicando-se a densidade do E85 (0,7993 g/cm³) pelos 200 litros derramados de E85. A relação de massa entre o benzeno (0,138 Kg) e o E85 (159,86 Kg) resulta em 8,66 E-4, estando entre os valores máximo e mínimo apresentados. A concentração do benzeno e TPH no solo foram estimadas a partir dos valores encontrados nas áreas da PETROBRAS, sendo considerado uma concentração de 3 mg/kg para o benzeno e uma concentração de 3000 mg/kg para o E85, de forma que a relação de massa (1E-03) fique próxima do valor encontrado (8,66E-4).

A Tabela 17 apresenta todos os dados de entrada necessários para a simulação do transporte na zona não saturada.

Tabela 17: Dados de entrada para simulação

Inseridos pelo Usuário		
Dados hidrogeológicos	Valor	Unidade
Recarga	651	mm/ano
Profundidade do nível d'água	1,6	m
Área da fonte	1,5	m ²
Profundidade da fonte	0,05	m
Espessura da fonte	0,2	m
Porosidade total	0,49	%
Condutividade hidráulica	0,000925	cm/s
Fração de carbono orgânico	0,36	%
Densidade do solo	1351,5	kg/m ³
Água de constituição	0,05	-
Parâmetro de Van Genuchten	2,68	-
Lente de argila		
Espessura	0,045	m
Porosidade total	0,45	-
Condutividade Hidráulica	1E-06	cm/s
Van Genuchten (-)	1,09	-
Água de constituição (-)	0,17	-
Dados do composto (Benzeno)		
Massa específica	0,8765	g/cm ³
Massa molar	17,11	g/mol
Solubilidade	1790	mg/L
Partição solo/carb	61,7	L/Kg
KH (Coef. Lei de Henry)	0,226901	mg/L/mg/L
Coef. Difusão água	1,03E-05	cm ² /s
Coef. Difusão de ar	0,0895	cm ² /s
Biodegradação	0	1/ano
Concentração de composto no solo	3	mg/kg

Tabela 17: Dados de entrada para simulação (continuação)

Dados do TPH/combustível		
Massa molar	54,1595	g/mol
Concentração de TPH no solo	3000	mg/kg

5.1.2. Comparação dos resultados simulados e de campo

A simulação do transporte de contaminantes na zona não saturada foi realizada com os dados de entrada apresentados na Tabela 17, com o intuito de verificar a aplicabilidade do modelo para simulação de compostos aromáticos provenientes do derramamento de biocombustíveis na zona não saturada em estudos de casos reais.

O derramamento controlado do E85 foi avaliado em dois estudos de campo, o comportamento no meio não saturado do etanol, realizado por Schneider (2012), e o comportamento no meio saturado do etanol e compostos BTEX por Farias (2011). O trabalho de Farias (2011) serve como base para a avaliação do tempo de migração do benzeno até o lençol freático. E o estudo de Schneider (2012) fornece os dados hidrogeológicos e características da fonte no meio não saturado.

O modelo SCBR apresenta na saída dos resultados da simulação do não saturado, o passo temporal de chegada do contaminante no lençol freático. O modelo avalia a chegada para concentrações em fase dissolvida superiores a 1 $\mu\text{g/l}$. Para os dados de entrada citados na Tabela 17, com lente de argila, reduzindo, portanto, o processo de volatilização, a simulação do transporte de benzeno com o modelo SCBR apresentou no nível do lençol freático uma contaminação maior que 1 $\mu\text{g/l}$ no passo temporal de 201 (dias), enquanto que no estudo de Farias (2011), foi observada a concentração de benzeno de 582 $\mu\text{g/l}$, dissolvido na água subterrânea, após um dia de liberação do combustível E85.

Na simulação com o modelo SCBR, o composto benzeno sofreu o processo de sorção, com um retardo de 2,74 devido a sua alta partição solo e carbono. Como citado no item 5.2, o modelo não permite utilizar o retardo unitário para simular um cenário mais conservador. Na análise de sensibilidade, o retardo será reduzido a partir da diminuição da fração de carbono orgânico no solo.

As diferenças entre os resultados de Farias (2011) e os resultados da simulação do transporte com o SCBR podem estar relacionadas com a presença em alta quantidade de etanol, que possui um retardo baixo, devido a sua baixa partição de carbono (1,19), a solubilização do

benzeno no etanol e o aumento da velocidade de migração do benzeno no meio. Também citado nas limitações do modelo (item 5.2), o efeito de cossolvência que não é considerado pelo modelo para a simulação no não saturado e, que influencia no aumento da solubilidade dos compostos aromáticos, pode também ter sido uma das causas da diferença encontrada. Outro fator que influenciou no campo é a movimentação da fase livre junto do composto e etanol, que não é simulada pelo modelo.

Além das interações do benzeno com o etanol, as incertezas dos valores adotados podem ter contribuído na diferença encontrada para o valor de campo (1 dia) e o valor simulado (200 dias). Como apresentado por Schneider (2012), a fração de carbono orgânico varia ao longo da profundidade da zona não saturada (de 0,058% a 0,58%), com uma alta amplitude, e devido a sua relação com o retardo do benzeno, a velocidade do composto varia ao longo da profundidade, não sendo considerado pelo modelo. A incerteza na recarga também influenciou no tempo de chegada do benzeno até o lençol freático. Assim, a ausência de valores de campo e/ou a estimativa de variáveis de forma secundária, com certeza contribuíram para as incertezas na simulação e os resultados encontrados.

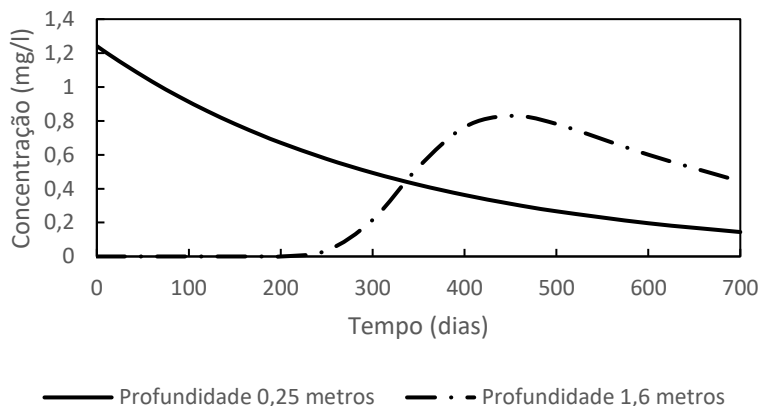
Transporte do composto químico para a profundidade 0,25 (z = 0), base da fonte, e 1,6m (z = 1,35), nível do lençol

É também relevante verificar o comportamento do transporte do benzeno ao longo do tempo em duas profundidades, a 0,25 metros (base da fonte, z = 0), e no final do lençol freático, a 1,6 m (z = 1,35) conforme explicitado na metodologia.

A simulação com o modelo SCBR indicou a presença de fase residual do benzeno, isto é, a concentração na fase aquosa é superior a concentração na fase dissolvida. A concentração inicial foi calculada pela Lei de Raoult (equação 21), sendo, portanto, a concentração de solubilidade do benzeno 1,24 mg/L (C_{wo}) proveniente do biocombustível E85, valor de entrada da equação 5 (item 3.6.3). O modelo realiza a verificação da presença da fase residual apenas no início da simulação e que se confirmada, é assumido que há fase residual durante todo o tempo de simulação. A Figura 8 apresenta as concentrações nessas profundidades ao longo do tempo considerando 700 dias de simulação. É possível visualizar a concentração inicial para z=0, correspondente a concentração de solubilidade do composto (1,24 mg/L). Além disso, verifica-se que a chegada do benzeno no nível do lençol ocorreu

aproximadamente aos 200 dias. Entre 200 e 450 dias, houve aumento da concentração do benzeno no meio saturado, atingindo aproximadamente 0,85 mg/L, e depois desse período, houve o seu decréscimo.

Figura 8: Transporte do benzeno para a profundidade de 0,25 m (base da fonte) e 1,6 m (nível do lençol)



Os resultados para os primeiros dez dias na profundidade 0,25 m (base da fonte) é apresentado na Tabela 18, pois este detalhamento não pode ser observado na escala apresenta pela Figura 8. A redução da concentração é devido a perda de massa por lixiviação e volatilização, no valor total de $4,54E-03$ 1/d (Apêndice A – S1). A diminuição da concentração nessa profundidade (0,25m, $z = 0$) é dada pela equação 5, 6 e 7, sendo que B resulta no valor 1 para essa profundidade e as equações 6 e 7 não são utilizadas.

Tabela 18: Variação da concentração do benzeno nos 10 primeiros dias

Tempo (dia)	Concentração (mg/l)
0	1,24112
1	1,2373
2	1,2335
3	1,2297
4	1,2259
5	1,22218
6	1,2184
7	1,21468
8	1,21095
9	1,20723
10	1,20352

Para a profundidade 1,6 m ($z = 1,35$ m, profundidade do lençol), as mesmas equações são utilizadas (5, 6 e 7), entretanto, para uma profundidade abaixo da fonte ($z \neq 0$) são necessárias as demais variáveis da equação 6 e 7, destacadas na Tabela 19 a seguir.

Tabela 19: Variáveis necessárias para simulação abaixo da fonte – Equações 6 e 7

Variável	Valor	Unidade
$\bar{v}$	1,032	cm/d
Z	1,35	m
Dz	2,334	cm ² /d
R	2,739	-
μ	0	1/d
β	4,54E-03	1/d

(Apêndice A – S1)

5.2 Análise de sensibilidade

5.2.1. Análise das variáveis

O objetivo da análise de sensibilidade é observar a influência de determinadas variáveis nos resultados da simulação do benzeno no meio

não saturado apresentadas no item 5.1.1. Destaca-se que a análise de sensibilidade foi realizada somente para a profundidade de 1,60 m, no nível do lençol freático. As variáveis escolhidas para avaliar as alterações no tempo de chegada do benzeno no lençol freático foram: recarga (A), fração de carbono orgânico (B), massa de benzeno (relação entre a concentração do benzeno e a concentração do TPH - C), coeficiente de biodegradação (D) e profundidade da fonte (E) conforme apresentado na Tabela 20. Para a simulação dos casos de análise de sensibilidade, as variáveis de simulação são as mesmas que o caso de comparação (Tabela 17, item 5.1.1), sendo as variações escolhidas citadas na metodologia (

Tabela 14), aqui novamente apresentadas. Os resultados obtidos são representados pelas Tabela 20 e 21.

Tabela 20: Análise de sensibilidade

A) Recarga			B) Fração de Carbono Orgânico		
	Valor (mm/ano)	Tempo (dia)		Valor (%)	Tempo (dia)
Caso 1	400	318	Caso 1	0,058	94
Caso 2	800	165	Caso 2	0,232	155
Caso 3	1200	113	Caso 3	0,58	279
C) Cbenz/CTPH			D) Coeficiente de biodegradação		
	Valor (-)	Tempo (dia)		Valor (1/d)	Tempo (dia)
Caso 1	1,00E-04	229	Caso 1	0	201
Caso 2	1,00E-03	201	Caso 2	1	203
Caso 3	1,00E-02	180	Caso 3	10	227
E) Profundidade da fonte					
	Valor (m)	Tempo (dia)			
Caso 1	0,05	201			
Caso 2	1	96			
Caso 3	1,39	3			

A variável recarga (Tabela 20, item A – Apêndice A, simulações 2, 3 e 4) influencia diretamente na velocidade intersticial, mostrando-se um dos fatores que mais acelera o transporte na zona saturada. A duplicação do valor de recarga (400 para 800 mm/ano) reduz pela metade o tempo

de migração do composto até o lençol (Tabela 20). Da mesma forma, o valor de recarga de 1200 mm/ano (triplo do valor inicial), reduz em um terço o tempo de migração do composto até o lençol.

A variação da fração de carbono orgânico (Tabela 20, item B – Apêndice A, simulações 5, 6 e 7) influencia a variável retardo (equação 29). Quanto maior a fração de carbono orgânico, maior o retardo, isto é, a sorção do composto no solo. Reduzindo-se a fração de carbono orgânico na magnitude de 10 (0,58 para 0,058) reduziu-se o tempo de migração em aproximadamente um terço (279 para 94) obtido pela equação 5. Esse caso é observado pelo alto valor de partição de solo e carbono do benzeno.

Os resultados apresentados Tabela 20 (item C – Apêndice A, simulações 8, 9 e 10) para a variação da massa de benzeno e a relação entre a sua concentração e a concentração do TPH, obtidos pela modificação da concentração de benzeno (0,3, 3 e 30 mg/kg) e mantendo a concentração de TPH constante (3.000 mg/kg). A modificação da fração molar influencia diretamente no cálculo da concentração inicial (equação 21) quando existe a presença de fase residual. Destaca-se que para a relação de 1E-03, a concentração inicial calculada foi de 1,24 mg/L, para a relação 1E-04, 0,124 mg/L e para 1E-02, 12,41 mg/L. De forma que a concentração do composto influencia apenas no cálculo inicial da concentração dissolvida, enquanto a concentração de TPH apresenta influências em outros cálculos (perda por lixiviação e volatilização).

A biodegradação (tabela 20, item D – Apêndice A, simulações 11, 12 e 13) está incluída na equação 7, através do termo w (abaixo identificado) integrante da equação 6. Destaca-se que o termo w é obtido por meio da raiz quadrada, reduzindo o valor de w na equação 6 e a influência do coeficiente de biodegradação.

$$w = \bar{v} \sqrt{1 + \frac{4D_z}{\bar{v}^2} [\mu - R\beta]} \quad (7)$$

O aumento do coeficiente de biodegradação de 1 para 10 dia⁻¹ (Tabela 20 – D) ampliou o tempo de chegada no lençol de 203 para 227 dias. O aumento do coeficiente de biodegradação na ordem de grandeza de 10, aumentou o tempo de chegada do composto no lençol em um percentual aproximadamente de 10% ((227-203)/203).

A profundidade e espessura da fonte influenciam no caminho de lixiviação e volatilização. Em relação ao caminho de lixiviação,

distância até o lençol freático, o aumento da profundidade da fonte e espessura reduz o caminho de lixiviação e aumenta o caminho de volatilização. Tratando-se aqui apenas do caminho de lixiviação, a sua redução ocasionou em uma redução do tempo necessário para chegar até a água subterrânea, conforme esperado (Tabela 20, item E – Apêndice A, simulações 14, 15 e 16). Dividindo-se a distância (caminho de lixiviação), pelo tempo utilizado pelo contaminante para atingir o lençol, observou-se que a velocidade do transporte do composto (distância até o lençol dividido pelo tempo para chegar) diminui com a redução do caminho de lixiviação. As velocidades foram calculadas como 0,67 cm/s, 052 cm/s e 0,33 cm/s para os casos 1, 2 e 3 respectivamente.

Como foi explicitado anteriormente, para valores de $z > 0$, a equação 5, considera o valor de B (equação 6). Na quantificação do termo B, a variação do coeficiente de dispersão (D_z) é inversamente proporcional ao valor de B. Sabendo-se que o coeficiente de dispersão é quantificado em função da dispersividade (equação 14) e que a dispersividade é calculada em função do caminho de lixiviação (x_m) na equação 13 (abaixo citada) para $x_m < 2$, quanto menor o caminho de lixiviação, menor a dispersividade e o coeficiente de dispersão (Tabela 21).

$$\ln al = -4,933 + 3,811 \times \ln x_m \quad (x_m < 2) \quad (13)$$

Tabela 21: Dispersividade e coeficiente de dispersão simulados

Caminho de lixiviação			
Caso	Valor (m)	Dispersividade (cm)	Coeficiente de dispersão (cm ² /d)
1	1,35	2,26	1,67
2	0,4	2,19E-02	1,62E-02
3	0,01	1,72E-08	1,27E-08

Conforme Tabela 21, uma redução do caminho de lixiviação na ordem de grandeza de 10^2 (135 para 1 cm), ocasionou a redução da dispersividade na ordem de grandeza 10^8 (2,26 para 1,72E-08). Analisando a equação 6, os valores muito baixos do coeficiente de dispersão resultam em altos valores dentro da exponencial presente na fórmula, permitindo que a concentração resultante e o tempo de chegada sejam subestimados.

5.2.2. Influência da volatilização

No estudo realizado por Farias (2011) e Schneider (2012) não houve a quantificação da perda de massa pela volatilização, devido ao uso da lona plástica utilizada durante o experimento para minimizar a perda do combustível. Para avaliar e verificar a perda de massa por volatilização foi simulado o mesmo cenário do 5.1.2, sem a presença da lente de argila. Os dois cenários possuem os mesmos valores para as variáveis utilizadas na simulação de comparação com o estudo de campo, citados na Tabela 17.

A Tabela 22 apresenta o tempo para chegar no lençol freático para os dois cenários (com e sem lente), assim como a perda por lixiviação (β_w) e volatilização (β_v) em cada cenário e seu percentual em relação a perda total (β) calculados pelo modelo. As variáveis e cálculos intermediários estão apresentadas no apêndice A, simulações 17 e 18.

Tabela 22: Resultados da presença da lente

Lente	Tempo de chegada no lençol	β_w (1/d)	β_v (1/d)	β (1/d)	β_w/β (%)	β_v/β (%)
Com	201	2,73E-03	3,48E-04	3,08E-03	88,69	11,31
Sem	Nunca	2,73E-03	1,63E-01	1,65E-01	1,65	98,35

Com a remoção da lente de argila, a perda por volatilização (sem lente) é cerca de 500 vezes maior que o cenário com lente (1,63E-01/3,47E-04). Considerando a perda total (β), o cenário sem lente representa 98,35% (β_v/β) da perda total, configurando a perda por volatilização quase como exclusiva. O aumento da perda por volatilização interferiu nas simulações, de modo que a alta perda de massa ao longo do tempo impede que o contaminante atinja o nível do lençol freático. A redução da perda por volatilização ocorreu pela combinação do baixo valor do coeficiente de difusão efetiva (equação 31) da lente com o coeficiente de difusão efetiva. Nota-se que pela equação 31 (abaixo destacada) tanto a espessura da camada da lente ($h_L =$ 0,045)

quanto a camada sem lente ($h_v = 0,05$) influenciam no cálculo, de forma que se a fonte for movida para uma posição mais profunda, a redução da perda por volatilização será menor.

$$D_{eff} = \frac{h_L + h_v}{\frac{h_L}{D_{effL}} + \frac{h_v}{D_{effv}}} \quad (31)$$

5.2.3. Cenário conservador

Considerando as variáveis analisadas no item anterior e os resultados apresentado pelo modelo, foi realizada a simulação de um cenário com as condições mais conservadoras e comparadas com os valores apresentados por Farias (2011). Os valores das variáveis são os mesmos que os apresentados Tabela 17, com as alterações decorrentes da análise de sensibilidade das variáveis recarga, fração de carbono orgânico, relação entre a concentração de benzeno e TPH que assumiram os valores de 1200 mm/ano, 0,058%, 30 mg/kg e 3.000 mg/kg, respectivamente. Neste cenário conservador foi considerada a lente de argila para diminuir a perda por lixiviação.

A simulação assim configurada apresentou um tempo de 50 dias para o benzeno alcançar o nível da água subterrânea, uma redução quatro vezes menor (50dias/200dias) que a simulação para as condições citadas no item 5.1.2, e mais próximo dos resultados apresentados por Farias (2011). A profundidade da fonte não foi alterada por alterar demais a o cenário base.

5.3 Limitações observadas no modelo SCBR

O modelo SCBR para a simulação no meio não saturado é unidimensional e analítico, apresentando limitações:

1. Todas as variáveis de entrada são constantes ao longo do tempo no processo de transporte do contaminante, não sendo possível avaliar os resultados do modelo para casos com variações de recarga e nível de lençol freático.
2. A zona não saturada é considerada homogênea e uniforme abaixo da fonte e a condutividade hidráulica é calculada como uma função da umidade volumétrica, entretanto, a umidade volumétrica é assumida constante para toda a coluna de solo.
3. O modelo não permite desativar a perda por volatilização, a qual é quantificada para um cenário bastante conservador. Assim no estudo realizado para reduzir a perda por volatilização foi utilizado uma lente de argila.
4. Não simula o produto puro na fase livre em cenários de migração de NAPL.
5. O modelo SCBR para simulação na zona não saturada permite na versão atual (3.10) a simulação de

biocombustíveis (gasolina brasileira) e seus constituintes, por exemplo, benzeno e etanol. Para esta simulação, o usuário deve inserir as concentrações de benzeno no solo (Concentração do composto químico), etanol no solo (Concentração do composto químico) e concentração de TPH. Para o balanço de massa da fonte, o modelo quantifica a fração molar do composto a partir da concentração de TPH no solo (equação 20). No caso da simulação de biocombustíveis no solo (gasolina brasileira, E10, E85), a fração molar do composto orgânico pouco solúvel, como o benzeno, será quantificada a partir de uma concentração de TPH. Ainda que esteja disponível a concentração de TPH de campo, por questões metodológicas (3.5), ela não inclui o etanol (presente no biocombustível. Com isso, a relação entre a concentração de benzeno no solo e o valor de TPH será superestimado, pois a concentração do TPH não considera o etanol. Assim, para vazamentos de biocombustíveis, a fração molar do composto orgânico pouco solúvel (BTEX) será superestimada e com isso, a concentração de solubilidade calculada pela lei de Raoult também.

6. Para simulação de combustíveis fósseis, diesel, gasolina pura, o balanço de massa realizado a partir da fase residual e da fração molar em relação ao TPH não apresenta limitações, porém para a simulação de biocombustíveis (gasolina brasileira, E85, E10), recomenda-se a revisão do modelo em função das limitações supracitadas.
7. A versão atual (3.10) permite também a simulação do etanol na zona não saturada a partir da relação entre a concentração do composto etanol e a concentração de TPH. Recomenda-se a revisão deste item já que a presença do etanol não está incluída na concentração de TPH e a metodologia da Lei de Raoult utilizada pelo modelo para estimar a concentração de solubilidade do composto não se aplica ao etanol.
8. O modelo não considera o efeito cossolvência.
9. O modelo também não permite desativar o retardo, como é permitido na simulação da zona saturada quando o usuário especifica que o retardo é unitário. Para condições conservadores, utilizar o retardo unitário pode ser relevante.

6 CONCLUSÕES

O objetivo geral do trabalho foi avaliar a da aplicabilidade do modelo SCBR para simulação do transporte de compostos aromáticos provenientes de derramamento de biocombustíveis a partir de um estudo de campo na zona não saturada.

Este trabalho foi baseado em um estudo de campo de derramamento controlado de 200 litros do biocombustível E85 (85% etanol e 15% gasolina pura) na zona não saturada, realizado na Fazenda Experimental da Ressacada, de propriedade da Universidade Federal de Santa Catarina.

A análise da aplicabilidade do modelo para o objetivo do trabalho foi realizada tanto por meio da comparação do tempo de chegada do benzeno no meio saturado entre o estudo de campo e a simulação com o SCBR, como por meio de uma análise de sensibilidade para variáveis consideradas relevantes.

Os dados hidrogeológicos utilizados na simulação foram obtidos junto à análise realizada pelo estudo de campo do derramamento controlado do E85, sendo que as variáveis como recarga, fração de carbono orgânico, porosidade total foram estimados de forma secundária. Os dados do combustível E85, concentração de benzeno no solo e valor de TPH, necessários para a simulação do composto e seu balanço de massa no meio também foram estimados em função de estudos de avaliação de impacto ambiental de áreas de negócio da PETROBRAS existentes na biblioteca interna do REMA e em função da massa derramada do combustível E85. Além disso, na simulação foi utilizada uma lente de argila para reduzir o processo de volatilização, que no experimento de campo foi realizada através de lona plástica.

Enquanto para o estudo de campo o benzeno atingiu o lençol em 1 dia, com uma concentração na fase dissolvida de aproximadamente 500 µg/L, a simulação com o modelo SCBR necessitou de 200 dias para o mesmo processo.

Devido às incertezas nos dados de entrada utilizados foi simulado um cenário mais conservador onde a recarga passou de 651 mm/ano para 1200 mm/ano, a fração de carbono orgânico de 0,58 para 0,058, e a relação entre a concentração de benzeno e TPH, de $1\text{E-}03$ para $1\text{E-}02$. Neste cenário, o tempo de simulação até o lençol foi de 50 dias.

Dentre as limitações do modelo que podem ter influenciado no resultado obtido, destacam-se a o processo de migração do etanol na fase pura, a solubilização do benzeno no etanol e a flutuação do nível do lençol, processos não simulados pelo modelo. No experimento de

campo que serviu de base para a simulação, o lençol variou de 1,6 m a 0,8 m em 30 dias.

A análise de sensibilidade para as variáveis recarga, fração de carbono orgânico, relação entre a concentração de benzeno e TPH (massa do composto derramada), coeficiente de biodegradação e profundidade da fonte deu ênfase à influência da recarga no processo de migração do composto químico no meio não saturado e revelou que para caminhos de lixiviação inferiores a 2 metros, isto é, para aquíferos pouco profundos, a formulação matemática utilizada pelo modelo para a determinação da dispersividade e coeficiente de dispersão resulta em incertezas. No cenário simulado, para o caminho de lixiviação de 1,35 m, a dispersividade foi de aproximadamente 2 cm.

A avaliação da influência do processo de volatilização ressaltou o peso do processo de volatilização na perda total de massa do composto (lixiviação e volatilização). A utilização de uma lente sobre a argila na simulação, mostrou-se eficaz na redução das perdas por volatilização, apresentando uma diminuição de 500 vezes em relação à simulação com ausência de lente.

Ainda que a estimativa de variáveis de forma secundária (recarga, massa derramada, porosidade total do solo, fração de carbono orgânico) tenha acarretado incertezas no resultado obtido, o modelo requer revisões para estabelecer as suas limitações a fim de permitir que o seu uso apoie as tomadas de decisão no gerenciamento de áreas impactadas. A comparação com outros modelos matemáticos para o mesmo cenário permitirá aprofundar a avaliação sobre as limitações e incertezas da simulação no meio não saturado influenciadas pela presença do etanol e por significativas variações do lençol freático. .

7 RECOMENDAÇÕES

- Utilizar outros modelos matemáticos para o cenário simulado e comparar com os resultados do modelo SCBR.
- Realizar uma revisão do modelo conceitual do modelo SCBR para permitir a simulação de outros compostos orgânicos e inorgânicos, independente da concentração de hidrocarbonetos totais de petróleo (TPH);
- Avaliar o uso das equações propostas para a dispersividade em função do caminho de lixiviação e especificar os seus limites para aquíferos rasos;
- Avaliar a possibilidade do uso do retardo e dispersividade simulado pelo modelo e inserido pelo usuário, como está implementado no meio saturado;
- Avaliar a importância da inclusão do efeito cosolvência em simulações no meio não saturado com a presença de etanol.
- Aplicar melhorias na interface do usuário, para uma melhor apresentação dos cálculos intermediários (w e B) e finais, assim como uma melhor apresentação dos resultados, tanto na forma gráfica, quanto no resultado em tabelas, com a possibilidade de exportar os resultados.

8 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Agency for Toxic Substances and Disease Registry (ATSDR). 1999. Total Petroleum Hydrocarbons (TPH). Atlanta, GA: U.S. Department of Health and Human Services, Public Health Service.

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **biocombustíveis**. 2016a. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br/wwwanp/biocombustiveis>>. Acesso em maio 2017.

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Etanol**. 2016b. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br/wwwanp/biocombustiveis/etanol>>. Acesso em maio 2017.

ANP - Agência Nacional do Petróleo, Gás Natural e Biocombustíveis. **Gasolina**. 2016c. Disponível em: <<http://www.anp.gov.br/wwwanp/biocombustiveis/etanol>>. Acesso em maio 2017.

ANP. **Boletim de Abastecimento**: Superintendência de Abastecimento. 53. ed. Rio de Janeiro: Anp, 2017.

ANP. **Resolução ANP °40**. Rio de Janeiro: Anp, 2013.

ANP. **Cartilha do Posto Revendedor de Combustíveis**. Rio de Janeiro: Anp, 2011.

BASTOS, V. D. **Etanol, Alcoolquímica e Biorrefinarias**. Rio de Janeiro. BNDES, 2007.

BEAR, J. **Groundwater Hydraulics**. McGraw-Hill, New York. 1979.

BONGANHA, Carlos André et al. **CONCEITOS E FUNDAMENTOS DA MODELAGEM MATEMÁTICA PARA GERENCIAMENTO DE RECURSOS HÍDRICOS SUBTERRÂNEOS**. Analytica, Araraquara, v. 30, p.116-120, ago. 2007.

BRASIL. Ministério da Agricultura, Pecuária e Abastecimento. Portaria nº 75. **Diário Oficial da União**. Brasília, 6 mar. 2015.

CHIARANDA, H. S. **Alterações biogeoquímicas em águas subterrâneas impactadas por biodiesel de soja e misturas de diesel/biodiesel (B20)**. 2011. 221 (Doutor em Engenharia Ambiental). Departamento de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina

CLEARY, Robert W. **Águas subterrâneas**. Clean Environment Brasil, 2007. 117 p.

CONNOR, J. A. et al. **Soil Attenuation Model for Derivation of Risk-Based Soil Remediation Standards**. 34p. jul. 1997.

CORSEUIL, H. X.; FERNANDES, M. EFEITO DO ETANOL NO AUMENTO DA SOLUBILIDADE DE COMPOSTOS AROMÁTICOS PRESENTES NA GASOLINA BRASILEIRA. **Revista Engenharia Sanitária e Ambiental**, Florianópolis, v. 4, n. 12, p.71-75, 1999.

CORSEUIL, H. X.; SCHNEIDER, M. R.; ROSÁRIO, M.; MALISKA, C. 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. Curitiba. Anais do 14º Congresso Brasileiro de Águas Subterrâneas. São Paulo: ABAS, 2006. p. 1-14.

FARIAS, M. M. F. **Transporte de etanol e compostos monoaromáticos do solo para a água subterrânea em experimento de campo**. 2011. 112 f. Dissertação (Mestrado) – Curso de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina.

FEDRIZZI, F. **Oxidação química parcial (com peróxido de magnésio e óxido de ferro) associada à biodegradação para remoção acelerada de LNAPLs em sistemas subsuperficiais contaminados com biodiesel (B100)**. 2016. 196 f. Tese (Doutorado) - Curso de Engenharia Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2016.

FEITOSA, Fernando A. C.; MANOEL FILHO, João. **Hidrogeologia: Conceitos e Aplicações**. 2. ed. Fortaleza: CPRM/REFO, 2000. 391 p.

FERNANDES, M. **Influência do etanol na solubilidade de hidrocarbonetos monoaromáticos em aquíferos contaminados com gasolina.** 1997. 125 f. Dissertação (Mestrado) – Curso de Engenharia Sanitária e Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis.

LEITE, R. C. C.; LEAL, M. R. **O biocombustível no Brasil.** *Novos Estudos*, São Paulo, n. 78, p 15-21, Julho 2007.

HHS. **Toxicological profile for total petroleum hydrocarbons (TPH).** U.S. DEPARTMENT OF HEALTH AND HUMAN SERVICES. Atlanta, 1999. 315 p.

IRITANI, Mara Akie. **Modelação matemática tridimensional para proteção das captações de água subterrânea.** 1999. 210 f. Tese (Doutorado) - Curso de Recursos Minerais e Hidrogeologia, Universidade de São Paulo, São Paulo, 1998.

JARAMILLO, I. R. **Fundamentos teóricos-práticos de temas selectos de la ciência del suelo. Parte 1.** Universidad Autónoma Metropolitana, México. 1996.

KAIPPER, B. I. A. **Influência do etanol na solubilidade de hidrocarbonetos aromáticos em aquíferos contaminados por óleo diesel.** 2003. 199 f. Tese (Doutorado) – Curso de Química, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2003.

MACKEY, D. M et al. Impact of Ethanol on the Natural Attenuation of Benzene, Toluene, and o- Xylene in a normally Sulfate-Reducing Aquifer. **Environmanetal Science And Technology**, Davis, p.6123-6130, nov. 2006.

MADEP. Characterizing Risks Posed by Petroleum Contaminated Sites (Policy No. WSC-02-41-1); Massachusetts Department of Environmental Protection: Boston, MA, USA, 2002.

MADEP. Updated Petroleum Hydrocarbon Fraction Toxicity Values for the VPH/EPH/EPH Methodology; Massachusetts Department of Environmental Protection, Bureau of Waste Site Cleanup: Boston, MA, USA, 2003.

MDEQ - MICHIGAN DEPARTMENT OF ENVIRONMENTAL QUALITY. **GroundWater Modeling: Remediation and Redevelopment Division Resource Materials.** Lansing: MDEQ, 2014. 52 p.

MULLER, J.B. **Bioestimulação combinada de ferro e sulfatorredução utilizando óxidos de ferro recuperados do tratamento da drenagem ácida de mina e acetato de amônio em águas subterrâneas impactadas com diesel B20.** 2017. 206p. Tese de Doutorado em Engenharia Ambiental – Universidade Federal de Santa Catarina.

NIELSEN, David M. **Practical Handbook of ENVIRONMENTAL SITE CHARACTERIZATION AND GROUND-WATER MONITORING.** 2. ed. Taylor & Francis Group, 2006. 1330 p.

NOFZIGER, D. L. WU, J. **CHEMFLO-2000: Interactive Software for Simulating Water and Chemical Movement in Unsaturated Soils.** U.S. Environmental Protection Agency, Washington, DC, 2003

POWERS, S. E.; et al. The Transport and Fate of Ethanol and BTEX in Groundwater Contaminated by Gasohol. *Critical Reviews in Environmental Science and Technology*, v. 31, n. 1, p. 79–123, 2001.

OLIVEIRA, J. C. S. **Contaminação de sedimentos argilosos por combustíveis automotivos. Problema de avaliação da permeabilidade.** 2001. 102 (Doutor em geologia). Instituto de geociências, Universidade Federal da Bahia, Salvador.

PIVER, W. T. **Modeling Chemical Transport in the Unsaturated Zone of the Subsurface.** Methods for Assessing Exposure of Human and Non-Human Biota. 12 p. Scope. 1991.

RASA, E. et al. **Impacts of an ethanol-blended fuel release on groundwater and fate of produced methane: simulation of field observations.** National Institutes of Health, Oakland, 41 p. ago. 2013.

SCBR; 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).

SCHNEIDER, Ana Cláudia. **ESTUDO EM TEMPO REAL DA MIGRAÇÃO DE ETANOL NA ZONA VADOSA EM EXPERIMENTO DE CAMPO.** 2012. 115 f. Dissertação (Mestrado) - Curso de Engenharia Ambiental, Universidade Federal de Santa Catarina, Florianópolis, 2012.

SPENCE, L.R., WALDEN, T., 2001. Risk Integrated Software for Cleanups: RISC5 User's Manual. BP, October. 2011.

ŠIMŮNEK, J.; VAN GENUCHTEN, M. TH. Contaminant Transport in the Unsaturated Zone Theory and modeling. In: DELLEUR, J. W. (Editor). **The Handbook Of Groundwater Engineering.** Florida: CRC Press, 2006.

SPALDING, R. F. et al. Long-Term Groundwater Monitoring Results at Large, Sudden Denaturated Ethanol Releases. **Ground Water Monitoring And Remediation**, Lincoln, v. 3, n. 31, p.69-81, jan. 2011.

VAN GENUCHTEN, M. Th.; ALVES, W. J. Analytical Solutions of the One-Dimensional Convective-Dispersive Solute Transport Equation. United Department of Agriculture. 152p. 1982.

WORLDWATCH INSTITUTE. **Biofuels for transport:** Global potential and implications for sustainable energy and agriculture. London: Earthscan, 2007.

USEPA – UNITED STATES ENVIRONMENTAL PROTECTION AGENCY. Choosing the correct procedure. Chapter two, 1996.

USEPA. **Regional Screening Levels (RSLs) - Generic Tables (May 2016).** 2016. Disponível em: <<https://www.epa.gov/risk/regional-screening-levels-rsls-generic-tables-may-2016>>. Acesso em maio 2017.

APÊNDICE A – Resultados da saída do simulador do modelo SCBR para o transporte de contaminante no solo

S1 - Caso do estudo de campo (item 5.1.2)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		

Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282068	[mg/m ² /day]

S2 - Análise de sensibilidade – Recarga (400 mm/ano)

Infiltration Rate:	40	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.0013703	[-]

Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.16076	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.681225	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	1.26752	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.243365	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.0013703	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.16076	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.681225	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.0013703	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.16076	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.681225	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	1.54034	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	794.068	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	794.068	[cm ² /day]

Effective Air Diffusion:	1.50247	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00167616	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347854	[1/day]
Total Loss Rate:	0.00202401	[1/day]
Retardation:	2.86734	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26476e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282075	[mg/m ² /day]

S3 - Análise de sensibilidade – Recarga (800 mm/ano)

Infiltration Rate:	80	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00274059	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.178047	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.23017	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.53505	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.486729	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		

(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00274059	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.178047	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.23017	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00274059	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.178047	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.23017	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.78158	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	663.43	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	663.43	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50242	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00335232	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347841	[1/day]
Total Loss Rate:	0.00370016	[1/day]
Retardation:	2.68604	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26464e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282064	[mg/m ² /day]

S4 - Análise de sensibilidade – Recarga (1200 mm/ano)

Infiltration Rate:	120	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		

Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00411089	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.189384	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.73479	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	3.80257	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.730094	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00411089	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.189384	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.73479	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00411089	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.189384	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.73479	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	3.92261	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]

TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	586.432	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	586.432	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50237	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00502848	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347831	[1/day]
Total Loss Rate:	0.00537631	[1/day]
Retardation:	2.58511	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26454e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282056	[mg/m ² /day]

S5 - Análise de sensibilidade – Fração de carbono orgânico (0,058 %)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.00058	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]

Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.00058	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.035786	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	1.28014	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		

Initial Vapor Flux (Steady Model: 3.26468e-013 [g/cm²/s]
 Initial Vapor Flux (Steady Model: 0.282068 [mg/m²/day]

S6 - Análise de sensibilidade – Fração de carbono orgânico (0,232 %)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]

Layers:

Layer 0 (above source):

Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.00232	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]

Layer 1 (above source):

Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.00232	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]

Layer 2 (above source):

Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]

Layer 3 (below source):

Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		

(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.143144	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	2.12058	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282068	[mg/m ² /day]

S7 - Análise de sensibilidade – Fração de carbono orgânico (0,58 %)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0058	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]

Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0058	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersion:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]

Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.35786	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	3.80144	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282068	[mg/m ² /day]

S8 - Análise de sensibilidade – Relação concentração benzeno e TPH (1E-04)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		

Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.000121635	[kg]
Moles:	0.00155723	[mol]
Molar Fraction:	6.93362e-005	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H2O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	0.124112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-014	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.0282068	[mg/m ² /day]

S9 - Análise de sensibilidade – Relação concentração benzeno e TPH (1E-03)

Mesmo resultado que o estudo de campo

S10 - Análise de sensibilidade – Relação concentração benzeno e TPH (1E-02)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genutchen's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genutchen's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]

Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersion:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.0121635	[kg]
Moles:	0.155723	[mol]
Molar Fraction:	0.00693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	12.4112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-012	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	2.82068	[mg/m ² /day]

S11 - Análise de sensibilidade – Biodegradação (0 1/d)

Mesmo resultado que a simulação do estudo de campo

S12 - Análise de sensibilidade – Biodegradação (1 1/d)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]

Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]

Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282068	[mg/m ² /day]

S13 - Análise de sensibilidade – Biodegradação (10 1/d)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]

Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50243	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347846	[1/day]
Total Loss Rate:	0.0030758	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26468e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.282068	[mg/m ² /day]

S14 - Análise de sensibilidade – Profundidade da fonte (0,05 m)

Mesmo resultado que o estudo de campo

S15 - Análise de sensibilidade – Profundidade da fonte (1 m)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.954	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	0.4	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]

Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	0.4	[m]
Longitudinal Dispersion:	0.0219319	[cm]
Dispersion Coefficient:	0.0226422	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	1.1	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	28.8754	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000911627	[1/day]
Total Loss Rate:	0.00363958	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	8.55599e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.739238	[mg/m ² /day]

S16 - Análise de sensibilidade – Caminho de lixiviação (0,01 m)

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]

Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	2.06289	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.396076	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	1.344	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	0.01	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	0.01	[m]
Longitudinal Dispersivity:	1.72038e-008	[cm]
Dispersion Coefficient:	1.7761e-008	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	1.49	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	39.5035	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H2O]

Residual phase is present for Benzene:

Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000920728	[1/day]
Total Loss Rate:	0.00364868	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	8.64142e-013	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	0.746619	[mg/m ² /day]

S17 - Análise de sensibilidade – Caso com lente

Mesmo resultado que o estudo de campo

S18 - Análise de sensibilidade – Caso 1 sem lente

Infiltration Rate:	65.1	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.05	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.0036	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Layer 1 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1"		
(same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00223016	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.172643	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.03239	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	2.33437	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		

TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.00121635	[kg]
Moles:	0.0155723	[mol]
Molar Fraction:	0.000693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	702.514	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	702.514	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.22212	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	1.24112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00272795	[1/day]
Volatilization Rate:	0.162647	[1/day]
Total Loss Rate:	0.165375	[1/day]
Retardation:	2.73882	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	1.52651e-010	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	131.89	[mg/m ² /day]

Análise de sensibilidade – Caso conservador

Infiltration Rate:	120	[cm/year]
Source Area:	1.5	[m ²]
Source Height:	0.2	[m]
Layers:		
Layer 0 (above source):		
Height:	0.001	[m]
Soil: "default-fn_1"		
Total Porosity:	0.49	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.05	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.7992	[m/day]
Van Genuchten's N:	2.68	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.00058	[g o.c. / g soil]
Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	0.00411089	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.189384	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.73479	[cm/day]
Layer 1 (above source):		
Height:	0.045	[m]
Soil: "lens-fn_1"		
Total Porosity:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Irreducible Content of Water:	0.17	[cm ³ water / cm ³ soil]
Hydraulic Conductivity:	0.000864	[m/day]
Van Genuchten's N:	1.09	[-]
Organic Carbon Fraction:	0.00058	[g o.c. / g soil]

Dry Soil Density:	1.3515	[g/cm ³]
Relative Permeability:	3.80257	[-]
Pore Size Distribution:	25.2272	[-]
Porosity Filled with Water:	0.45	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	0.730094	[cm/day]
Layer 2 (above source):		
Height:	0.004	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00411089	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.189384	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.73479	[cm/day]
Layer 3 (below source):		
Height:	1.35	[m]
Soil: "default-fn_1" (same as layer 0)		
Relative Permeability:	0.00411089	[-]
Pore Size Distribution:	4.7794	[-]
Porosity Filled with Water:	0.189384	[cm ³ pore / cm ³ soil]
Interstitial Velocity:	1.73479	[cm/day]
Length of Leaching Path:	1.35	[m]
Longitudinal Dispersivity:	2.26114	[cm]
Dispersion Coefficient:	3.92261	[cm ² /day]
Length of Air Diffusion Path:	0.15	[m]
Product:		
TPH Mass Fraction (conc.):	3000	[mg TPH / kg soil]
TPH Molecular Weight:	54.1585	[g/mol]
Moles of Hydrocarbon (TPH):	22.4591	[mol]
Component 0 ("Benzene"):		
Mass:	0.0121635	[kg]
Moles:	0.155723	[mol]
Molar Fraction:	0.00693362	[mol/mol]
Eff. Diffusion for Layer 0:	586.432	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 1:	1.35248	[cm ² /day]
Eff. Diffusion for Layer 2:	586.432	[cm ² /day]
Effective Air Diffusion:	1.50237	[cm ² /day]
Distribution Coefficient (Kd):	0.035786	[mg/kg soil / mg/L H ₂ O]
Residual phase is present for Benzene:		
Aqueous Phase Concentration:	12.4112	[mg/L]
Leaching Rate:	0.00502848	[1/day]
Volatilization Rate:	0.000347831	[1/day]
Total Loss Rate:	0.00537631	[1/day]
Retardation:	1.25538	[-]
Solving Vapor Flux in Unsaturated Zone:		
Initial Vapor Flux (Steady Model:	3.26454e-012	[g/cm ² /s]
Initial Vapor Flux (Steady Model:	2.82056	[mg/m ² /day]

Anexo A – Precipitações medidas na base aérea nos anos de 2005 a 2010

Tabela 23: Precipitações medidas na base aérea para os anos de 2005 a 2010

Mês	Precipitação (mm)					
	2005	2006	2007	2008	2009	2010
Janeiro	137,4	284,8	64,5	478	62,1	187,1
Fevereiro	178,3	204,2	95,1	198,2	18,8	122,3
Março	105,7	53,7	156,3	152,6	51,3	373,1
Abril	98,4	36,2	185,2	238,6	112,6	169,9
Maio	259,9	65,9	132,3	85,1	24,1	363,7
Junho	29,1	28,6	7	46,7	21,5	92,6
Julho	75,9	34,5	187,8	9	109,4	87
Agosto	211,9	65,5	21,6	SV	39,9	62
Setembro	221,8	32,3	107	SV	194,5	132,7
Outubro	208,9	72,1	149,3	SV	70,6	77,8
Novembro	89,1	298,3	70,2	SV	121,5	121
Dezembro	159,8	83,5	95,2	SV	90,9	101,9

SV: Sem valor medido